Wh: In einem quantenmechanischen Vielteilchensystem aus identischen Teilchen sind die einzelnen Teilchen nicht "markierbar"!

$\Rightarrow$ Jede Meßgröße (Erwartungswert) muß ~~...~~ invariant gegenüber der Vertauschung zweier Teilchen i, j sein! $(i, j = 1, \ldots, N)$

Teilchenindex

$$\underbrace{\langle \ldots \phi^{(i)}_{\alpha_i} \ldots \phi^{(j)}_{\alpha_j}}_{\langle \phi_N |} | \hat{A}_N | \ldots \phi^{(i)}_{\alpha_i} \ldots \phi^{(j)}_{\alpha_j} \ldots \rangle$$

Quantenzahl

$$\overset{!}{=} \langle \ldots \phi^{(j)}_{\alpha_i} \ldots \phi^{(i)}_{\alpha_j} \ldots | \hat{A}_N | \underbrace{\ldots \phi^{(j)}_{\alpha_i} \ldots \phi^{(i)}_{\alpha_j} \ldots \rangle}_{\hat{P}_{ij} | \phi_N \rangle}$$

bzw: $\langle \hat{P}_{ij} \phi_N | \hat{A}_N | \hat{P}_{ij} \phi_N \rangle = \langle \phi_N | \hat{A}_N | \phi_N \rangle$

mit $\hat{P}_{ij}$: Permutation zweier Teilchen (Transpositionsoperator)

es gilt: $[\hat{A}_N, \hat{P}_{ij}] = 0$

$\Rightarrow$ auch $[\hat{H}, \hat{P}_{ij}] = 0 \Rightarrow \hat{P}_{ij}$ ist Erhaltungsgröße

Vielteilchenhamiltonian!

außerdem:

$\hat{P}_{ij} | \phi_N \rangle \doteq \lambda_{ij} | \phi_N \rangle$, mit $\lambda_{ij} = \pm 1$ Eigenwerte

- Die Zustände identischer Teilchen sind gegenüber Vertauschung zweier Teilchenindizes entweder symmetrisch ($\lambda=+1$) oder antisymmetrisch ($\lambda=-1$)
- Diese Eigenschaft ist Konstante der Bewegung!

also $\hat{P}_{ij}|\Phi_N^{(\pm)}\rangle = \pm|\Phi_N^{(\pm)}\rangle$

- Symmetrische und antisymmetrische Zustände sind „orthogonal"

denn $\langle \Phi_N^{(+)} | \Phi_N^{(-)} \rangle$

$= \langle \Phi_N^{(+)} | 1 | \Phi_N^{(-)} \rangle$ benutze $\hat{P}_{ij}^{-1} = \hat{P}_{ij}$

$= \langle \Phi_N^{(+)} | \hat{P}_{ij} \hat{P}_{ij} | \Phi_N^{(-)} \rangle$ " $\hat{P}_{ij}$ hermitesch

$= \langle \hat{P}_{ij} \Phi_N^{(+)} | \hat{P}_{ij} \Phi_N^{(-)} \rangle =$

$= -\langle \Phi_N^{(+)} | \Phi_N^{(-)} \rangle \Longrightarrow \langle \Phi_N^{(+)} | \Phi_N^{(-)} \rangle = 0$!

Der Hilbertraum $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 \otimes \cdots \otimes \mathcal{H}_N$ zerfällt in $\mathcal{H}^{(+)}$: Raum der symmetrischen Zustände
$\mathcal{H}^{(-)}$: " " antisymmetrischen "

Es gilt:

Bosonen (Teilchen mit ganzzahligem Spin) werden durch symmetrische Zustände charakterisiert

z.B. Photon ($s=1$), Phonon ($s=1$), π-Meson ($s=0$), α-Teilchen ($s=0$)

Fermionen (Teilchen mit halbzahligem Spin) werden durch antisymmetrische Zustände charakterisiert

(z.B. Elektronen, Protonen, Neutronen ($s=\frac{1}{2}$)

Entscheidend ist hier also der Zusammenhang zwischen Spin und Statistik ("Spin-Statistik-Theorem")

aufgestellt von W. Pauli 1925, zunächst empirisch zur Deutung von Atomspektren. Später (1940) erfolgt strenger Beweis im Rahmen der Quantenfeldtheorie

(Bemerkung: es gibt die sog. Fermi-Dirac-Statistik für Fermionen sowie die Bose-Einstein-Statistik für Bosonen
$\Rightarrow$ fundamental unterschiedliche Tieftemperatureigenschaften!)

Speziell für Fermionen (antisymmetr. Zustände) gilt das Pauli-Prinzip:

$$\boxed{\text{Zwei Fermionen können nicht in denselben Einteilchenzuständen vorkommen} \Leftrightarrow \text{können nicht in allen Quantenzahlen übereinstimmen!}}$$

Betrachte z.B. zwei Fermionen in der Ortsdarstellung:
Falls diese denselben Spin haben, dann können sie sich nicht am selben Ort aufhalten!

$\Rightarrow$ Grundlage für den Aufbau des Periodensystems der Elemente

Frage nun:
Was sind die erlaubten Zustände in $\mathcal{H}^{(+)}$ bzw. $\mathcal{H}^{(-)}$?

Idee: Aufbau aus Produkten von Einteilchenzuständen

Führe ein:

(Anti-)Symmetrisierungsoperator

$$\hat{S}_N^{(\pm)} = \frac{1}{N!} \sum_P (\pm 1)^p \hat{P}$$

+ : Symmetrisierung

− : Antisymmetrisierung

- Summe läuft über alle denkbaren Permutationen des N-Tupels $(1, 2, \ldots, N)$

  $\hat{P}$ der Permutationsoperator (Erinnerung:

  $$\hat{P} = \underbrace{\prod}_{\text{Produkt}} \hat{P}_{ij}$$

- p ist die Zahl der Transpositionen (d.h. der Zweiteilchen-permutationen) aus denen $\hat{P}$ aufgebaut ist

  speziell bei Antisymmetrisierung: $(-1)^p = \begin{cases} 1 & \text{für gerade Zahl von Perm.} \\ -1 & \text{" ungerade " " "} \end{cases}$

- Zum Vorfaktor:

  Es gibt insgesamt (für N Teilchen) N! Permutationen incl. Identität

- Wirkung:

  $$\hat{S}_N^{(\pm)} \,|\, \phi_{\alpha_1}^{(1)} \phi_{\alpha_2}^{(2)} \ldots \phi_{\alpha_N}^{(N)} \rangle = |\, \phi_N^{(\pm)} \rangle$$

  gesuchte Zustände!

Betrachte zunächst Fermionen

Beispiel: $N=2$, $N!=2$

$\hat{P}=\hat{P}_{12}$, $p=0,1$

$$\hat{S}_2^{(-)}=\frac{1}{2}(\hat{1}-\hat{P}_{12})$$

Ausgangszustand: $|\phi_{\alpha_1}^{(1)}\rangle|\phi_{\alpha_2}^{(2)}\rangle$

$$\hat{S}_2^{(-)}\left(|\phi_{\alpha_1}^{(1)}\rangle|\phi_{\alpha_2}^{(2)}\rangle\right)=\underbrace{\frac{1}{2}\left(|\phi_{\alpha_1}^{(1)}\rangle|\phi_{\alpha_2}^{(2)}\rangle-|\phi_{\alpha_1}^{(2)}\rangle|\phi_{\alpha_2}^{(1)}\rangle\right)}_{|\phi_2^{(-)}\rangle}$$

$N=2$

Ortsdarstellung, zunächst ohne Spin:

$$|\phi_2^{(-)}\rangle=\frac{1}{2}\left(\phi^{(1)}(\underline{r}_1)\phi^{(2)}(\underline{r}_2)-\phi^{(2)}(\underline{r}_1)\phi^{(1)}(\underline{r}_2)\right)$$

betrachte zugehörige Wahrsch.-Dichte im Ortsraum

$$|\langle\underline{r}_1\underline{r}_2|\phi_2^{(-)}\rangle|^2=\frac{1}{4}\Big(|\phi^{(1)}(\underline{r}_1)\phi^{(2)}(\underline{r}_2)|^2+|\phi^{(2)}(\underline{r}_1)\phi^{(1)}(\underline{r}_2)|^2-\phi^{(1)*}(\underline{r}_1)\phi^{(2)*}(\underline{r}_2)\phi^{(2)}(\underline{r}_1)\phi^{(1)}(\underline{r}_2)-\phi^{(1)}(\underline{r}_1)\phi^{(2)}(\underline{r}_2)\phi^{(2)*}(\underline{r}_1)\phi^{(1)*}(\underline{r}_2)\Big)$$

Sei nun $\underline{r}_1=\underline{r}_2$

$$\Rightarrow|\langle\underline{r}_1\underline{r}_2|\phi_2^{(-)}\rangle|^2=0$$

Für zwei identische Fermionen ohne weitere Quantenzahl ist die Wahrsch., am selben Ort zu sein, gleich Null!

Einbeziehung des Spins

geschieht typischerweise über einen Produktansatz der Form

Zweiteilchenwellenfunktion

$$|\phi_2^{(-)}\rangle = \phi(r_1, r_2)\, \chi(s_1, s_2)$$

Ortsdarstellung

Einstellmögl. des Spins

(Bemerkung: Dieser Produktansatz impliziert, dass keine Spin-Bahn-Kopplung vorliegt)

Für zwei Fermionen muß dann entweder die Orts-Wellenfkt. oder die Spinwellenfunktion antisymmetrisch sein, die andere jeweils symmetrisch:

Beispiel für antisymmetr. Spin-Wellenfunktion

$$\chi^{(-)}(s_1, s_2) = \left(\uparrow^{(1)} \downarrow^{(2)} - \downarrow^{(1)} \uparrow^{(2)} \right)$$

symbolische Schreibweise

Jetzt:

N Fermionen

$$|\phi_N^{(-)}\rangle = \hat{S}_N^{(-)} \left(|\phi_{\alpha_1}^{(1)}\rangle \dots |\phi_{\alpha_N}^{(N)}\rangle \right)$$

$$= \frac{1}{N!} \begin{vmatrix} |\phi_{\alpha_1}^{(1)}\rangle & |\phi_{\alpha_1}^{(2)}\rangle & \dots & |\phi_{\alpha_1}^{(N)}\rangle \\ |\phi_{\alpha_2}^{(1)}\rangle & \dots & \dots & |\phi_{\alpha_2}^{(N)}\rangle \\ \vdots & & & \vdots \\ |\phi_{\alpha_N}^{(1)}\rangle & \dots & \dots & |\phi_{\alpha_N}^{(N)}\rangle \end{vmatrix}$$

wie ohne Berücks.

„Slater – Determinante"

– Zeilen sind charakterisiert durch gleiche Quantenzahlen
– Spalten " " " gleiche Teilchenindex

Beachte:

Sind in dem antisymmetr. N-Teilchen-Zustand zwei Quantenzahlen gleich (also $\alpha_i = \alpha_j$ für $i \neq j$), dann impliziert das die Gleichheit zweier Zeilen

$$\Rightarrow \text{Determinante ist Null} \Rightarrow |\phi_2^{(-)}\rangle = 0 \,!$$

$\boxed{\text{Pauli – Prinzip !}}$

$\Leftrightarrow$ Jeder Quantenzustand darf nur einmal vorkommen

insbesondere: Zwei identische Teilchen können nicht in allen Quantenzahlen übereinstimmen !!

---

noch zu tun: Normierung

$$\langle \phi_N^{(-)} | \phi_N^{(-)} \rangle \overset{!}{=} 1$$

$$\Leftrightarrow f_N^2 \langle \hat{S}_N^{(-)} \phi_{\alpha_1}^{(1)} \cdots \phi_{\alpha_N}^{(N)} | \hat{S}_N^{(-)} \phi_{\alpha_1}^{(1)} \cdots \phi_{\alpha_N}^{(N)} \rangle \overset{!}{=} 1$$

f_N: Normierungsfaktor

$$\Leftrightarrow f_N^2 \langle \phi_{\alpha_1}^{(1)} \cdots \phi_{\alpha_N}^{(N)} | (\hat{S}_N^{(-)})^{+} \hat{S}_N^{(-)} | \phi_{\alpha_1}^{(1)} \cdots \phi_{\alpha_N}^{(N)} \rangle$$

benutze: $\underbrace{\left(\hat{S}_N^{(\pm)}\right)^+}_{\hat{=}1} = \hat{S}_N^{(\pm)}$ hermitesch

und $\left(\hat{S}_N^{(\pm)}\right)^2 = \hat{S}_N^{(\pm)}$ Projektionseigenschaft

$$\Rightarrow f_N^2 \underbrace{\langle \phi_{\alpha_1}^{(1)} \ldots \phi_{\alpha_N}^{(N)} |}_{\substack{\text{direktes Produkt,} \\ \text{nicht antisymmetrisiert}}} \underbrace{\hat{S}_N^{(-)} | \phi_{\alpha_1}^{(1)} \ldots \phi_{\alpha_N}^{(N)} \rangle}_{\text{Slaterdeterminante}} \overset{!}{=} 1$$

$$\Leftrightarrow f_N^2 \frac{1}{N!} \begin{vmatrix} \underbrace{\langle \phi_{\alpha_1}^{(1)} | \phi_{\alpha_1}^{(1)} \rangle}_{1} & \ldots & \underbrace{\langle \phi_{\alpha_N}^{(N)} | \phi_{\alpha_1}^{(N)} \rangle}_{0} \\ \vdots & & \vdots \\ \underbrace{\langle \phi_{\alpha_1}^{(1)} | \phi_{\alpha_N}^{(1)} \rangle}_{0} & \ldots & \underbrace{\langle \phi_{\alpha_N}^{(N)} | \phi_{\alpha_N}^{(N)} \rangle}_{1} \end{vmatrix}$$

$$\overset{!}{=} 1$$

$$\Leftrightarrow f_N^2 \frac{1}{N!} \cdot 1 \overset{!}{=} 1 \quad \Longrightarrow f_N = \sqrt{N!}$$

Endergebnis für die antisymmetrisierten Zustände

$$|\phi_N^{(-)}\rangle = \sqrt{N!}\,\underbrace{\hat{S}_N^{(-)}|\phi_{\alpha_1}^{(1)}\dots\phi_{\alpha_N}^{(N)}\rangle}_{\text{Slaterdeterminante}}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{N!}}\begin{vmatrix} |\phi_{\alpha_1}^{(1)}\rangle & \dots & |\phi_{\alpha_1}^{(N)}\rangle \\ \vdots & & \\ & \dots & \end{vmatrix}$$

Betrachte nun Bosonen

Normierung läuft analog zu Fermionen

$$|\phi_N^{(+)}\rangle = \sqrt{N!}\,\hat{S}_N^{(+)}|\phi_{\alpha_1}^{(1)}\dots\phi_{\alpha_N}^{(N)}\rangle$$

$$\text{mit } \hat{S}_N^{(+)} = \frac{1}{N!}\sum_P \hat{P}$$

$\Rightarrow$ symmetr. Zustände, jeder Quantenzustand kann mehrfach besetzt werden!

Bemerkung zum 5. Übungszettel:

Eine gute Näherung für den Grundzustand eines Mehrteilchensystems (speziell auch $N=2$) geht wie folgt:

Zustand, nicht normiert, nicht Eigenzustand

$$\text{betrachte } \frac{\langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle} = \langle H\rangle_\psi$$

Idee: Variiere $\langle H \rangle_\psi$ bezüglich eines oder mehrerer Parameter, die den Zustand $|\psi\rangle$ charakterisieren

$$\delta \langle H \rangle_\psi = 0 \quad \Longrightarrow$$ ~~Näherung~~ „Optimaler" Ansatz für ψ

suche Extremum

$$\langle H \rangle_\psi \geq E_0$$

Wert am Extremum

„Variationsverfahren"