Frage: Vielteilchenzustand $|\phi_N\rangle$ für ein System $\underline{\text{ununterscheidbarer}}$ (identischer) Teilchen?

(N: Zahl der Teilchen)

Idee: Konstruiere $|\phi_N\rangle$ aus direkten Produkten von Einteilchenzuständen $\phi^{(i)}_{\alpha_i}$

Zentrale Forderung: Erwartungswerte von Vielteilchenobservablen $\hat{A}_N$ müssen $\underline{\text{invariant}}$ gegenüber Vertauschung von Teilchenindizes sein

(für System ununterscheidbarer Teilchen)

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

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

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

Formulierung mit Transpositionsoperator $\hat{P}_{ij}$

Vertauscht Teilchenindizes

Eigenschaften: $\hat{P}_{ij}\hat{P}_{ij} = \hat{1}$ — Zweimaliges Vertauschen von i und j führt auf Anfangszustand

$$\Rightarrow \hat{P}_{ij} = \hat{P}_{ij}^{-1}$$

außerdem: $\hat{P}_{ij}^+ = \hat{P}_{ij}$ denn man fordert:

$$\langle \hat{P}_{ij}\phi_N | \hat{P}_{ij}\phi_N \rangle \stackrel{!}{=} \langle \phi_N | \phi_N \rangle$$

Erhaltung der Norm unter Vertauschung der Teilchenindizes

$$\Leftrightarrow \langle \phi_N | \hat{P}_{ij}^+ \hat{P}_{ij} | \phi_N \rangle \stackrel{!}{=} \langle \phi_N | \phi_N \rangle$$

$$\Rightarrow \hat{P}_{ij}^+ \hat{P}_{ij} \stackrel{!}{=} \hat{1} \quad \Rightarrow \hat{P}_{ij}^+ = \hat{P}_{ij}^{-1} = \hat{P}_{ij}$$

(Allgemeine Permutation: $\hat{P} = \underbrace{\prod}_{\text{Produkt}} \hat{P}_{ij}$)

Zurück zur Forderung

$$\langle \hat{P}_{ij}\phi_N | \hat{A}_N | \hat{P}_{ij}\phi_N \rangle \stackrel{!}{=} \langle \phi_N | \hat{A}_N | \phi_N \rangle$$

$$\Rightarrow \hat{P}_{ij}^+ \hat{A}_N \hat{P}_{ij} \stackrel{!}{=} \hat{A}_N \qquad \Big| \text{ multiplizieren von rechts mit } \hat{P}_{ij}$$

$$\underbrace{\hat{P}_{ij}^+}_{\hat{P}_{ij}} \hat{A}_N \underbrace{\hat{P}_{ij}\hat{P}_{ij}}_{\hat{1}} \stackrel{!}{=} \hat{A}_N \hat{P}_{ij}$$

$$\hat{P}_{ij}\hat{A}_N \stackrel{!}{=} \hat{A}_N \hat{P}_{ij}$$

$$\Rightarrow [\hat{A}_N, \hat{P}_{ij}] = 0 \quad !$$

(und es gilt auch $[\hat{A}_N, \hat{P}] = 0$)

$\Rightarrow$ Alle Observable $\hat{A}_N$ (die alle N Teilchen einbeziehen) kommutieren mit allen Permutationsoperatoren!

Das gilt natürlich auch für den N-Teilchen Hamiltonoperator!

insbesondere $\Rightarrow [\hat{H}_N, \hat{P}_{ij}] = 0$

$\Rightarrow$ Damit (und weil $\hat{P}_{ij}$ nicht explizit zeitabhängig ist) folgt:

$\hat{P}_{ij}$ ist eine Erhaltungsgröße !

Ehrenfest-Theorem

Aus der Vertauschung von $\hat{H}$ und $\hat{P}_{ij}$ folgt auch:

Zustand $|\phi_N\rangle$, der Eigenzustand von $\hat{H}_N$ ist, ist auch Eigenzustand von $\hat{P}_{ij}$!

also: $\hat{P}_{ij}|\phi_N\rangle \stackrel{!}{=} \lambda_{ij}|\phi_N\rangle$

andererseits:

$$\underbrace{\langle \hat{P}_{ij}\phi_N | \hat{P}_{ij}\phi_N \rangle}_{} = \langle \phi_N | \hat{P}_{ij}^+ \hat{P}_{ij} | \phi_N \rangle = \langle \phi_N | \overbrace{\hat{P}_{ij}\hat{P}_{ij}}^{\hat{1}} | \phi_N \rangle$$

$$\Rightarrow |\lambda_{ij}|^2 \langle \phi_N | \phi_N \rangle \qquad \stackrel{!}{=} \langle \phi_N | \phi_N \rangle$$

$\Rightarrow |\lambda_{ij}|^2 \stackrel{!}{=} 1$

Da $\hat{P}_{ij}$ hermitesch, sind die Eigenwerte λ_{ij} reell

$\Rightarrow \lambda_{ij} = \pm 1$

Damit: $\boxed{\hat{P}_{ij} |\phi_N^{(\pm)}\rangle = \pm |\phi_N^{(\pm)}\rangle}$ $\forall i,j$

Die (Eigen-)Zustände eines Systems identischer Teilchen (zum Hamiltonian H_N) sind gegenüber Vertauschung zweier Teilchenindizes entweder "symmetrisch" ($\lambda = +1$) oder "antisymmetrisch ($\lambda = -1$)

Da $\hat{P}_{ij}$ einer Erhaltungsgröße entspricht, folgt:

Die Eigenschaft, ob ein System symmetrische oder antisymmetrische Zustände hat, ist „Konstante der Bewegung"

Insgesamt folgt:

Ein Vielteilchensystem hat einen zeitunabhängigen Symmetriecharakter

Der Hilbertraum $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 \otimes \dots \otimes \mathcal{H}_N$ zerfällt in $\mathcal{H}^{(+)}$: Raum der symmetrische Zustände
$\mathcal{H}^{(-)}$: Raum der antisymmetr. "

$\Leftarrow$

Symmetrische und Antisymmetr. Zustände sind orthogonal

$$\langle \phi_N^{(+)} | \varphi_N^{(-)} \rangle = \langle \phi_N^{(+)} | 1 | \varphi_N^{(-)} \rangle$$

Skalarprodukt aus symmetr. und antisymmetr. Zustand

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

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

$$\Longrightarrow \langle \phi_N^{(+)} | \varphi_N^{(-)} \rangle = 0 \qquad \text{orthogonal}$$

Es gilt:

- Sogenannte „Bosonen"-Systeme werden durch symmetr. Zustände charakterisiert

  Die zugehörigen Teilchen (Bosonen) haben ganzzahligen Spin

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

- „Fermionen"-Systeme werden durch antisymmetr. Zustände charakterisiert

  Die zugehörigen Teilchen (Fermion) werden durch halbzahligen Spin charakterisiert

  z.B. Elektron ($s=\frac{1}{2}$), Proton ($s=\frac{1}{2}$), ...

Entscheidend ist also der Zusammenhang mit dem Spin

Spin-Statistik-Theorem

Aufgestellt von Pauli 1925, zunächst empirisch zur Deutung von Atomspektren

Strenger Beweis (1940) im Rahmen der Quantenfeldtheorie!

Für Fermionen gilt das
Pauli-Prinzip (gilt nicht für Bosonen!)

Zwei Fermionen können sich nicht in den selben Einteilchenzuständen befinden. Sie können nicht in allen Quantenzahlen übereinstimmen!

$\Leftrightarrow$ Grundlage für den Aufbau von Atomspektren, Periodensystem der Elemente

Frage nun:

Was sind die erlaubten Zustände $|\Phi_N^{(+)}\rangle$ bzw. $|\Phi_N^{(-)}\rangle$
(in $\mathcal{H}^{(+)}$) (in $\mathcal{H}^{(-)}$)

Führe ~~dazu~~ ein:

(Anti-) Symmetrisierungsoperator

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

Permutationsoperator
Erinnerung: $\hat{P} = \prod_{\text{Produkt}} \hat{P}_{ij}$

- Summe läuft über alle denkbaren Permutationen des N-Tupels $i = 1, 2, \ldots, N$
- p (Exponent im Faktor $(\pm 1)^p$) ist die Zahl der Transpositionen, aus denen $\hat{P}$ aufgebaut ist
- Faktor $(\pm 1)^p$ ist relevant für antisymmetr. Zustände (Fermionen)
- Zum Vorfaktor: Es gibt $N!$ Permutationen incl. Identität
- Wirkung: $\hat{S}_N^{(\pm)}\Big(\underbrace{|\phi_{\alpha_1}^{(1)}\rangle|\phi_{\alpha_2}^{(2)}\rangle\ldots|\phi_{\alpha_N}^{(N)}\rangle}_{\text{direktes Produkt}}\Big) = |\phi_N^{(\pm)}\rangle$

Betrachte zunächst Fermionensysteme

Beispiel $N=2$

einzige nichttriviale Permutation: $\hat{P} = \hat{P}_{12}$, $p = 0, 1$

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

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

Zur Illustration: Ortsdarstellung, ohne Spin

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

Zugehörige Wahrscheinl.-dichte: $\langle\phi_2^{(-)}|\phi_2^{(-)}\rangle = \dots$

Man findet: $\langle\phi_2^{(-)}|\phi_2^{(-)}\rangle = 0$ für $\underline{r}_1 = \underline{r}_2$!!

Für zwei identische Fermionen (ohne weitere Quantenzahlen, z.B. Spin) ist die Wahrsch., am selben Ort zu sein, gleich Null !!

$\hat{=}$ Pauli-Prinzip

Bemerkung zum Beispiel $N=2$
Einbeziehung des Spins?

geschieht typischerweise durch Produktansatz der Form $|\psi_2^{(-)}\rangle \to \overset{\text{Orts-Wellenfunktion}}{\phi(\underline{r}_1,\underline{r}_2)}\underbrace{\chi(s_1,s_2)}_{\text{Spin-Wellenfunktion}}$

vernachlässigt also Spin-Bahn-Kopplung

Für 2 Fermionen muss dann entweder die Orts-Wellenfunktion <u>oder</u> die Spin-Wellenfunktion antisymmetrisch sein, die andere jeweils symmetrisch!

$\Rightarrow$ führt insgesamt auf antisymmetr. Zustand

N Fermionen

$$|\phi_N^{(-)}\rangle = \hat{S}_N^{(-)} \overbrace{\left(|\phi_{\alpha_1}^{(1)}\rangle \ldots |\phi_{\alpha_N}^{(N)}\rangle\right)}^{\text{direktes Produkt}}$$

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

„Slater-Determinante"

- Zeilen gehören zu derselben Quantenzahlen
- Spalten " " " Teilchenindizes

Beachte:

- Sind in dem N-Teilchen-Zustand 2 Sätze von Quantenzahlen gleich also z.B. $\alpha_i = \alpha_j$ für $i \neq j$, dann impliziert dies die Gleichheit zweier Zeilen
  $\Rightarrow$ Determinante wird Null!

$\Leftarrow$ Pauli-Prinzip: Identische Teilchen können nicht in allen Quantenzahl übereinstimmen!

- Vertauschung zweier Teilchenindizes entspricht Vertauschung zweier Spalten
  $\Rightarrow$ Vorzeichenwechsel!

  ($\hat{=}$ antisymmetr. Zustand)

Noch zu tun: Normierung:

Normierungsfaktor zum Quadrat

$$\langle \phi_N^{(-)} | \phi_N^{(-)} \rangle = f_N^2 \langle \hat{S}_N^{(-)} \overbrace{(\phi_{\alpha_1}^{(1)} \ldots \phi_{\alpha_N}^{(N)})}^{\text{direktes Produkt}} | \hat{S}_N^{-} \phi_{\alpha_1}^{(1)} \ldots \phi_{\alpha_N}^{(N)} \rangle$$

$$(*) \quad = f_N^2 \langle \phi_{\alpha_1}^{(1)} \ldots \phi_{\alpha_N}^{(N)} | (\hat{S}_N^{(-)})^+ \hat{S}_N^{(-)} | \phi_{\alpha_1}^{(1)} \ldots \phi_{\alpha_N}^{(N)} \rangle$$

$$\stackrel{!}{=} 1$$

es gilt (hier ohne Beweis)

$$\left(\hat{S}_N^{(-)}\right)^+ = \hat{S}_N^{(-)} \quad \text{hermitesch}$$

$$\left(\hat{S}_N^{(-)}\right)^2 = \hat{S}_N^{(-)} \quad \text{Idempotenz} \quad (\text{„Projektionsoperator“})$$

$$\text{also} \quad \left(\hat{S}_N^{(-)}\right)^+ \hat{S}_N^{(-)} = \left(\hat{S}_N^{(-)}\right)^2 = \hat{S}_N^{(-)}$$

Einsetzen in (*)

$$1 = f_N^2 \, \langle \underbrace{\phi_{\alpha_1}^{(1)} \dots \phi_{\alpha_N}^{(N)}}_{\substack{\text{direktes Produkt aus} \\ \text{Einteilchenzustand,} \\ \text{nicht anti-symmetrisiert!}}} | \underbrace{\hat{S}_N^{(-)} \phi_{\alpha_1}^{(1)} \dots \phi_{\alpha_N}^{(N)}}_{\text{Slater-Determinante}} \rangle$$

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

Annahme: Alle Einteilchenzustände bereits ortho-normiert!

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

$$= f_N^2 \frac{1}{N!} \begin{vmatrix} 1 & 0 & \dots \\ & \ddots & \\ 0 & & 1 \end{vmatrix} = f_N^2 \frac{1}{N!} 1 \stackrel{!}{=} 1$$

$$\boxed{f_N = \sqrt{N!}}$$

Endergebnis für anti-symmetr. Zustand.

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