Wdh.

$$P_{ij} |\phi_N^{(\pm)}\rangle = \pm |\phi_N^{(\pm)}\rangle$$

und $\langle \phi_N^{(+)} | \phi_N^{(-)} \rangle = 0$

Insgesamt gilt:

zeitunabhängiger Symmetriecharakter, Orthogonalität der Zustände

$\Rightarrow \mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \ldots \otimes \mathcal{H}_N$

zerfällt in: $\mathcal{H}^{(+)}$ Raum der Symmetrischen Zustände

$\mathcal{H}^{(-)}$ Raum der antisymmetrischen Zustände

Es gilt:

Bosonen werden durch symmetr. Zustände charakterisiert

Teilchen mit ganzzahligem Spin

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

α_2^4-Teilchen ($s=0$)

Fermionen werden durch antisymmetrische Zustände charakterisiert

Teilchen mit halbzahligem Spin ($s=\frac{1}{2}, \frac{3}{2}$)

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

Entscheidend ist hier also der Spin-Statistik-Zusammenhang

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

Pauli Prinzip für Fermionen (nicht für Bosonen)

Zwei Fermionen können sich nicht in den gleichen Einteilchen-zuständen befinden

$\Longrightarrow$ können also nicht in allen Quantenzahlen identisch sein.

z.B. zwei Fermionen in Ortsdarstellung

Falls diese den gleichen Spin haben, können sie sich nicht am gleichen Raumpunkt aufhalten.

Grundlage für den Aufbau des Periodensystems der Elemente.

Frage nun:

Was sind die erlaubten Zustände in $\mathcal{H}^{(+)}$ und $\mathcal{H}^{(-)}$?

Führe ein

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

- Summe läuft über alle denkbaren Permutationen des N-Tupels $(1 \dots N)$
- p ist die Zahl der Transpositionen aus der $\hat{P}$ aufgebaut ist ($\hat{P} = \prod \hat{P}_{ij}$)

(Bei Antisymmetrisierung) $\Rightarrow (-1)^p = \begin{cases} 1 & \text{für gerade Permutationen} \\ -1 & \text{für ungerade Permutationen} \end{cases}$

– Vorfaktor: Es gibt $N!$ Permutationen (incl. der Identität)

$$\Rightarrow |\phi_N^{(\pm)}\rangle = \hat{S}_N^{\pm} \left(|\phi_{\alpha_1}^{(1)}\rangle |\phi_{\alpha_2}^{(2)}\rangle \dots |\phi_{\alpha_N}^{(N)}\rangle \right)$$

Betrachte zunächst Fermionen

Beispiel:

$$N = 2 \quad \Rightarrow \quad \hat{P} = \hat{P}_{12} \quad , \; p = 0, 1$$

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

$$|\phi\rangle = |\phi_{\alpha_1}^{(1)}\rangle |\phi_{\alpha_2}^{(2)}\rangle$$

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

Beispiel

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

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

Setze

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

$\Rightarrow$ Für 2 identische Teilchen (ohne weitere Quantenzahlen, z.B. Spin) ist die Wahrscheinlichkeit am gleichen Ort zu sein null.

Einbeziehung des Spins

geschieht typischerweise über einen Produktansatz der Form

$$|\Psi^{(-)}\rangle = \phi(\underline{r}_1, \underline{r}_2)\,\chi(\underline{s}_1, \underline{s}_2)$$

- Für 2 Fermionen muss dann entweder die Ortswellenfunktion oder die Spinwellenfunktion antisymmetrisch sein, die jeweils andere ist symmetrisch.
- Implizit haben wir angenommen, dass kein Spin-Bahn-Kopplung vorliegt.
  Beispiel für antisymmetrische Spin-WF: $\frac{1}{2}\left(\uparrow^{(1)}\downarrow^{(2)} - \uparrow^{(2)}\downarrow^{(1)}\right)$

N Fermionen

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

$$= \underbrace{\frac{1}{N!}\det\begin{pmatrix} |\phi_{\alpha_1}^{(1)}\rangle & \cdots & |\phi_{\alpha_1}^{(N)}\rangle \\ |\phi_{\alpha_2}^{(1)}\rangle & & |\phi_{\alpha_2}^{(N)}\rangle \\ \vdots & & \vdots \\ |\phi_{\alpha_N}^{(1)}\rangle & & |\phi_{\alpha_N}^{(N)}\rangle \end{pmatrix}}_{\text{Slater Determinante}}$$

- Zeilen haben gleiche Quantenzahl
- Spalten haben dasselbe Teilchen

Beachte:

Sind in dem N-Teilchenzustand 2 Sätze von Quantenzahlen identisch (also $\alpha_i = \alpha_j$ für $i \neq j$), dann impliziert das die Gleichheit zweier Zeilen.

$\Rightarrow$ Determinante verschwindet.

Zwei Teilchen können nicht in allen Quantenzahlen übereinstimmen.

$\Rightarrow$ entspricht dem <u>Pauliprinzip.</u>

Noch zu tun: Normierung

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

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

Es gilt ohne Beweis

$$(\hat{S}_N^{(-)})^\dagger = \hat{S}_N^{(-)}$$

und

$$(\hat{S}_N^{(-)})^2 = \hat{S}_N^{(-)} \quad \text{Idempotent („Projektionsoperator")}$$

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

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

$$\Rightarrow \frac{|f_N|^2}{N!} = 1 \Rightarrow f_N = \sqrt{N!}$$

$\Rightarrow$ Endergebnis für antisymmetrisierten Zustände

$$|\phi_N^{(-)}\rangle = \sqrt{N!}\, S_N^{(-)} |\phi_{\alpha_1}^{(1)} \cdots \phi_{\alpha_N}^{(N)}\rangle$$

$$= \frac{1}{\sqrt{N!}} \left| \quad \right|$$

Slaterdeterminante

Betrachte nun Bosonen

$$|\phi_N^{(+)}\rangle = C_+ \, \hat{S}_N^{(+)} \left(|\phi_{\alpha_1}^{(1)}\rangle \cdots \phi_{\alpha_N}^{(N)}\rangle\right.$$

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

- Vorfaktor C_+ nicht trivial, da Zustände mehrfach besetzbar
- Die Zustände sind symmetrisch unter Austausch zweier Teilchen

  Die Wahrscheinlichkeitsdichte verschwindet also nicht, wenn zwei Bosonen den gleichen Zustand besetzen. (Kein Pauli-Prinzip!)

Bsp. $S_2^{(+)} = \frac{1}{2}\left(\hat{1} + \hat{P}_{12}\right)$

Beachte noch

$S_N^{(+)}$ und $S_N^{(-)}$ projezieren auf unterschiedliche Unterräume von H_N!