II. Vielteilchensysteme

bisher: Fokus auf Einteilchensysteme (typischerweise: Ein-Elektron-System)

jetzt: Systeme mit N Teilchen $i = 1, \ldots, N$?

Wie beschreibt man solche Vielteilchensysteme (Formalismus)?

Näherungsmethoden ?

(in Anwesenheit von Wechselwirkungen)
$\rightarrow$ Korrelationen

Wir konzentrieren uns auf den nicht-relativist. Fall !

(kleine Geschwindigkeiten)

II.1. Unterscheidbare Teilchen

"unterscheidbar": Teilchen, die sich durch irgendeine physikalische Eigenschaft (Masse, Ladung, Spin) voneinander unterscheiden

(z.B. Proton, Elektron)

$\Rightarrow$ durch eine geeignete Messung ist es möglich, die Teilchen zu identifizieren

Setze der Einfachheit halber voraus, dass die Teilchen nicht wechselwirken

$$\Rightarrow \hat{H} = \sum_{i=1}^{N} \hat{H}^{(i)}$$

$\hat{H}$: Hamilton-Operator des Gesamtsystems

$\hat{H}^{(i)}$: Hamiltonian zu Teilchen i (Hilbertraum $\mathcal{H}^{(i)}$)

$$\text{z.B. } \hat{H}^{(i)} = \frac{\hat{p}_i^2}{2m_i} + \underbrace{V_i(\underline{r}_i)}$$

$V_i(\underline{r}_i)$: "externes" Potential (Wechselwirkung mit einem externen Feld)

Einteilchen-Schrödingergleichung: (zeitunabhängig)

Nehme an: $|\phi^{(i)}_{\alpha_i}>$ orthonormiert

$$\underbrace{\hat{H}^{(i)}}\, |\phi^{(i)}_{\alpha_i}> = \overset{\text{Einteilchen-Energie}}{\varepsilon_{\alpha_i}}\, |\phi^{(i)}_{\alpha_i}>$$

Teilchenindex

Einteilchen-Zustand zu Teilchen i

Quantenzahl, "die zu Teilchen i gehört" (oder Satz von Quantenzahlen)

(z.B. $\alpha = n, l, m$, $\alpha = p$, $\alpha = s$ ...)

allg: mögliche Quantenzahl des Zustands von Teilchen i

Keine Wechselwirkungen!

$\Rightarrow$ Gesamtenergie $E = \sum_{i=1}^{N} \varepsilon_{\alpha_i}$ (noch zu zeigen, s.u.)

Vielteilchenzustand für das System:

„direktes" Produkt aus Einteilchenzuständen! (da keine Wechselwirkung):

(orthonormiert)

$$|\phi_{\alpha_1\alpha_2\ldots\alpha_N}> = |\phi^{(1)}_{\alpha_1}>|\phi^{(2)}_{\alpha_2}> \ldots |\phi^{(N)}_{\alpha_N}>$$

hängt von allen Quantenzahlen aller N Teilchen ab!

(alternative Schreibweise: $|\phi_{\alpha_1\ldots\alpha_N}> = |\phi^{(1)}_{\alpha_1}\, \phi^{(2)}_{\alpha_2} \ldots \phi^{(N)}_{\alpha_N}>$)

Bemerkungen zum Vielteilchenzustand:

- Die Vielteilchenzustände "leben" im Produktraum

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}^{(1)} \otimes \mathcal{H}^{(2)} \otimes \ldots \otimes \mathcal{H}^{(N)}$$

Hilbertraum zum Gesamtsystem

Einteilchen-Hilbertraum

- Orthogonalität und Vollständigkeit

$$<\phi_{\alpha_1\ldots\alpha_N}|\phi_{\beta_1\ldots\beta_N}> = \delta_{\alpha_1\beta_1}\,\delta_{\alpha_2\beta_2}\ldots\delta_{\alpha_N\beta_N}$$

und $$\sum_{\alpha_1\ldots\alpha_N} |\phi_{\alpha_1\ldots\alpha_N}><\phi_{\alpha_1\ldots\alpha_N}| = \hat{1}$$

Vielteilchenzustände bilden eine Basis

- Ortsdarstellung:

$$\langle \underline{r}_1 \underline{r}_2 \dots \underline{r}_N | \phi_{\alpha_1 \dots \alpha_N} \rangle = \phi_{\alpha_1}(\underline{r}_1)\, \phi_{\alpha_2}(\underline{r}_2) \dots \phi_{\alpha_N}(\underline{r}_N)$$

Projektion ~~..~~ auf Vektoren der Ortsbasis
(wie im Einteilchenfall)

Wir setzen den Vielteilchenzustand in die zeitunabh. N-Teilchen Schrödingergleichung ein.

$$\underbrace{\hat{H}|\phi_{\alpha_1 \dots \alpha_N}\rangle} \overset{!}{=} E|\phi_{\alpha_1 \dots \alpha_N}\rangle$$

$$= \sum_{i=1}^{N} \hat{H}^{(i)} \underbrace{|\phi_{\alpha_1 \dots \alpha_N}\rangle}_{|\phi_{\alpha_1}^{(1)}\rangle \dots |\phi_{\alpha_N}^{(N)}\rangle}$$

$\hat{H}^{(i)}$ wirkt nur auf Zustand von Teilchen i!

$$= \left(\hat{H}^{(1)}|\phi_{\alpha_1}^{(1)}\rangle\right)|\phi_{\alpha_2}^{(2)}\rangle \dots |\phi_{\alpha_N}^{(N)}\rangle$$
$$+ \dots + |\phi_{\alpha_1}^{(1)}\rangle|\phi_{\alpha_2}^{(2)}\rangle \dots \left(\hat{H}^{(N)}|\phi_{\alpha_N}^{(N)}\rangle\right)$$

N Terme

$$= \varepsilon_{\alpha_1}|\phi_{\alpha_1}^{(1)}\rangle|\phi_{\alpha_2}^{(2)}\rangle \dots |\phi_{\alpha_N}^{(N)}\rangle$$
$$+ \dots + \varepsilon_{\alpha_N}|\phi_{\alpha_1}^{(1)}\rangle \dots |\phi_{\alpha_N}^{(N)}\rangle$$
$$= (\varepsilon_{\alpha_1} + \dots + \varepsilon_{\alpha_N})|\phi_{\alpha_1 \dots \alpha_N}\rangle$$

also $E = \sum_{i=1}^{N} \varepsilon_{\alpha_i}$

wie behauptet!

II.2. Nicht-unterscheidbare (identische) Teilchen

Definition:

nicht-unterscheidbare (identische) Teilchen stimmen in <u>allen</u> Teilcheneigenschaften überein!

(Bsp: viele Elektronen)

<u>Beachte</u>:

Auch in einem System identischer Teilchen können die Meßwerte physikalischer Observablen unterschiedlich sein!

Beispiel:

(Idealisierte) Elektronen im Festkörper: drei unterschiedl. Energien haben

aber: jedes Elektron kommt prinzipiell für jeden Energiezustand in Frage!

und: man weiss nicht, welches Elektron welchen Energiezustand besetzt!

⟵ typisch quantenmechanische Eigenschaft.

Die einzelnen Elektronen können nicht markiert werden!

Das ist ein fundamentaler Unterschied zu einem System klassischer Teilchen: Dort kann man durch ~~das~~ Messung der Koordinaten/Impulse aller Teilchen diese "verfolgen" und dadurch für alle Zeiten unterscheiden.

Dagegen quantenmechan. System: Teilchenzustände haben intrinsisch statistischen Charakter (Orts-Impuls-Unschärfe)

$\Rightarrow$ Unterscheidung identischer Teilchen durch Markierung ist unmöglich!

Folgerungen

- Für quantenmechanische Vielteilchensysteme identischer Teilchen sind Zuordnungen der Art

$$\text{Teilchen } i \longleftrightarrow \text{Zustand } |\phi^{(i)}\rangle$$

bedeutungslos. Statt dessen pauschale Zuordnung

$$\text{Teilchen } i=1,\ldots,N \longleftrightarrow \text{Vielteilchenzustand } |\Phi_N\rangle$$

Frage: Was sind die zulässigen Zustände für N identische (qm.) Teilchen?

(Betrachte wieder wechselwirkungsfreien Fall)

Idee: Die Zustände sind Kombinationen von direkten Produkten aus Einteilchen-Zuständen

(Observable)

- Sinnvolle Meßgrößen müssen von den Koordinaten (allg.: Quantenzahlen) aller Teilchen abhängig → betrachte Observable $\hat{A}_N$

- Erwartungswerte solcher Observablen müssen invariant gegenüber Vertauschung von Teilchenindizes sein!

⇒ es muß gelten:

(hermitescher) Operator, der auf alle N Teilchen wirkt

Teilchenindex

Einteilchenzustand

$$\langle \ldots \phi_{\alpha_i}^{(i)} \ldots \phi_{\alpha_j}^{(j)} \ldots | \hat{A}_N | \underbrace{\ldots \phi_{\alpha_i}^{(i)} \ldots \phi_{\alpha_j}^{(j)} \ldots \rangle}_{N\text{-Teilchenzustand}}$$

Quantenzahl-Index

(*)

Kombination (noch festzulegen) aus Produkten von Einteilchenzuständen!

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

Führe ein:

Permutationsoperator $\hat{P} | \overbrace{\phi_{\alpha_1}^{(1)} \phi_{\alpha_2}^{(2)} \ldots \phi_{\alpha_N}^{(N)}}^{\text{Vielteilchenzustand}} \rangle = | \phi_{\alpha_1}^{(i_1)} \ldots \phi_{\alpha_N}^{(i_N)} \rangle$

Allgemeine Permutation, die die Verteilung der Teilchen über die möglichen Einteilchenzustände ändert

$$1, 2, \ldots, N \longrightarrow i_1, i_2, \ldots, i_N$$

Jede allg. Permutation läßt sich auf Produkt von Permutation zweier Teilchen zurückführen:

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

mit $\hat{P}_{ij} | \ldots \phi_{\alpha_i}^{(i)} \ldots \phi_{\alpha_j}^{(j)} \ldots \rangle = | \ldots \phi_{\alpha_i}^{(j)} \ldots \phi_{\alpha_j}^{(i)} \ldots \rangle$

(Transpositionsoperator)

es gilt: • $\hat{P}_{ij}\hat{P}_{ij} = \hat{1} \quad \Longleftrightarrow \quad \hat{P}_{ij} = \hat{P}_{ij}^{-1}$

Zweimalige Vertauschung soll wieder auf Anfangszustand führen!

• $\hat{P}_{ij}$ ist hermitesch:

$$\langle \hat{P}_{ij}\Phi_N | \hat{P}_{ij}\Phi_N \rangle \overset{!}{=} \langle \Phi_N | \Phi_N \rangle$$

(also $\hat{A}_N = \hat{1}$ in ⊛)

Skalarprodukt des permutierten Zustands mit sich selbst

Erhaltung der Norm!

$$\langle \Phi_N | \hat{P}_{ij}^{+} \hat{P}_{ij} | \Phi_N \rangle \overset{!}{=} \langle \Phi_N | \Phi_N \rangle$$

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

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

also ist $\hat{P}_{ij}$ auch unitär!

Dies alles gilt auch für $\hat{P}$ (hier ohne Beweis)

Betrachte noch einmal ⊛

Umformulierung mit Hilfe von $\hat{P}_{ij}$:

$$\langle \hat{P}_{ij}\Phi_N | \hat{A}_N | \hat{P}_{ij}\Phi_N \rangle \overset{!}{=} \langle \Phi_N | \hat{A}_N | \Phi_N \rangle$$

$$\langle \Phi_N | \hat{P}_{ij}^{+} \hat{A}_N \hat{P}_{ij} | \Phi_N \rangle \overset{!}{=} \langle \Phi_N | \hat{A}_N | \Phi_N \rangle$$

$$\Longleftrightarrow \quad \hat{P}_{ij}^{+} \hat{A}_N \hat{P}_{ij} \overset{!}{=} \hat{A}_N$$

| wende von links $\hat{P}_{ij}$ an

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

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

$$\overset{\text{Folgerung}}{\Longrightarrow} [\hat{A}_N, \hat{P}_{ij}] = 0$$

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

Alle erlaubten Observablen $\hat{A}_N$ kommutieren mit allen Permutationen!

Insbesondere folgt hieraus:

$$[\hat{H}, \hat{P}_{ij}] = 0 \qquad \text{mit } \hat{H} \; (= \hat{H}_N) \text{ Gesamt-Hamiltonoperator!}$$

$\Rightarrow \hat{P}_{ij}$ ist Erhaltungsgröße ! (folgt z.B. aus dem Ehrenfest-Theorem)

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

Vielteilchenzustand $|\Phi_N\rangle$ ist nicht nur Eigenzustand von $\hat{H}$ sondern auch von $\hat{P}_{ij}$ ($\hat{H}|\Phi_N\rangle = E|\Phi_N\rangle$)

Eigenwertgleichung:

$$\hat{P}_{ij}|\Phi_N\rangle \stackrel{!}{=} \lambda_{ij}|\Phi_N\rangle$$

andererseits:

$$\underbrace{\langle \hat{P}_{ij}\Phi_N | \hat{P}_{ij}\Phi_N\rangle}_{\text{benutze Eigenwertgleich.}} = \langle \Phi_N | \overbrace{\hat{P}_{ij}^{+}\hat{P}_{ij}}^{\hat{1}} |\Phi_N\rangle = \langle \Phi_N|\Phi_N\rangle \qquad \text{Erhaltung der Norm}$$

$$|\lambda_{ij}|^2 \langle \Phi_N|\Phi_N\rangle$$

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

bzw $(\lambda_{ij})^2 = 1$ (da $\hat{P}_{ij}$ hermitesch, sind die Eigenwerte reell!)

$$\Rightarrow \lambda_{ij} = \pm 1 \qquad \Rightarrow \boxed{\hat{P}_{ij}|\Phi_N^{(\pm)}\rangle = \pm |\Phi_N^{(\pm)}\rangle}$$

Interpretation:

- Die Zustände eines Systems identischer Teilchen sind gegenüber Vertauschung zweier Teilchenindizes entweder symmetrisch ($\lambda = +1$) oder antisymmetrisch ($\lambda = -1$)
- Diese Eigenschaft ist eine Konstante der Bewegung! (Erhaltungsgröße) „ewiges Charakteristikum"

- Symmetrische und antisymmetr. Zustände sind orthogonal:

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

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

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

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

$$\Rightarrow \underline{\underline{\langle \phi_N^{(+)} | \varphi_N^{(-)} \rangle = 0}}$$