

II. Vielteilchensysteme

bisher: Fokus auf Zweiteilchensysteme (typischerweise: Ein-Elektron-System,

idet: Systeme mit N Teilchen $i = 1, \dots, N$?

Wie beschreibt man solche Vielteilchensysteme (Formalismus)?

Näherungsmethoden ?

(in Abwesenheit von Wechselwirkungen)
→ Kondensation

Wir konzentrieren uns auf den nicht-relativist. Fall !
(Klein-Gordons-Gleichung)

II.1. Unterscheidbare Teilchen

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

(z.B. Proton, Elektron)

⇒ durch eine geordnete Menge ist es möglich, die Teilchen zu identifizieren

Setze die Einfachheit halber voraus, dass die Teilchen nicht wechselwirken

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

Hamilton-Operator des Gesamtsystems

Hamiltonian zu Teilchen i (Hilfsformel $\hat{H}^{(i)}$)

$$\text{z.B. } \hat{H}^{(i)} = \frac{\hat{p}_i^2}{2m_i} + \underbrace{V_i(\mathbf{r}_i)}_{\text{"externes" Potential (Wechselwirkung mit einem externen Feld)}}$$

Einzelteilchen-Schwingungsgleichung: (Zustandsabhängig)

$$\hat{H}^{(i)} |\phi_{\alpha_i}^{(i)}\rangle = \epsilon_{\alpha_i} |\phi_{\alpha_i}^{(i)}\rangle$$

Einzelteilchen-
Zustand zu
Teilchen i

Einzelteilchen-
Energie

Teilchen index

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

(z.B. $\alpha = n, l, m$
 $\alpha = p, \alpha = s, \dots$)
allg.: mögliche Quantenzahlen des Zustands von
Teilchen i

Merke an:
 $|\phi_{\alpha_i}^{(i)}\rangle$ orthonormal

Keine Wechselwirkungen!

$$\Rightarrow \text{Gesamtenergie } E = \sum_{i=1}^N \epsilon_{\alpha_i} \quad (\text{nach zu zeigen, s.u.})$$

Vielteilchenzustand für das System:

„direktes“ Produkt aus Einzelteilchenzuständen! (da keine Wechselwirkungen)
(Ordnung)

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

hängt von allen Quantenzahlen
aller N Teilchen ab!

$$(\text{alternative Schreibweise: } |\phi_{\alpha_1 \dots \alpha_N}\rangle = |\phi_{\alpha_1}^{(1)} \phi_{\alpha_2}^{(2)} \dots \phi_{\alpha_N}^{(N)}\rangle)$$

Bemerkung zum Vielteilchenzustand:

- Die Vielteilchenzustände „leben“ im Produktraum

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

Hilbertraum zum
Gesamtsystem

Einzelteilchen-Hilbertraum

- Orthogonalität und Vollständigkeit

$$\langle \phi_{\alpha_1 \dots \alpha_N} | \phi_{\beta_1 \dots \beta_N} \rangle = \delta_{\alpha_1 \beta_1} \delta_{\alpha_2 \beta_2} \dots \delta_{\alpha_N \beta_N}$$

$$\text{und } \sum_{\alpha_1 \dots \alpha_N} |\phi_{\alpha_1 \dots \alpha_N}\rangle \langle \phi_{\alpha_1 \dots \alpha_N}| = \hat{1}$$

Vielteilchenzustände
bilden eine Basis

• Ortsdarstellung:

$$\langle r_1 r_2 \dots r_N | \phi_{\alpha_1 \dots \alpha_N} \rangle = \phi_{\alpha_1}(r_1) \phi_{\alpha_2}(r_2) \dots \phi_{\alpha_N}(r_N)$$

Projiziert auf Vektoren des Ortsraums
(wie im Einpartikelfall)

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

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

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

$$|\phi_{\alpha_1}^{(1)}\rangle \dots |\phi_{\alpha_N}^{(N)}\rangle$$

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

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

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

} N Terme

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

$$+ \dots + \epsilon_{\alpha_N} |\phi_{\alpha_1}^{(1)}\rangle \dots |\phi_{\alpha_N}^{(N)}\rangle$$

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

$$= (\epsilon_{\alpha_1} + \dots + \epsilon_{\alpha_N}) |\phi_{\alpha_1 \dots \alpha_N}\rangle$$

wie behauptet!

II.2. Nicht-unterscheidbare (identische) Teilchen

Definition:

Nicht-unterscheidbare (identische) Teilchen stimmen in allen Teilcheneigenschaften überein!
(Bsp: viele Elektronen)

Beachte:

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

Beispiel:

(Idealisierte) Elektronen im Festkörper: drei untersch. Energie haben

dabei: 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 ~~die~~ Messung der Koordinaten/Impulse aller Teilchen diese "verfolgen" und dadurch für alle Zeiten unterscheiden.

Dagegen quantenmechan. System: Teilchenzustände haben intrinsisch statistische Charakter
(als Inputs-Ausgabe)

⇒ Unterscheidung identischer Teilchen durch Markierung ist unmöglich!

Folgerungen

- Für quantenmechanische Vielteilchensysteme identischer Teilchen sind Zuordnungen der Art
Teilchen i $\leftrightarrow$ Zustand $|\phi(i)\rangle$

bedeutungslos. Statt dessen pauschale Zuordnung

Teilchen $i=1, \dots, N$ $\leftrightarrow$ Vielteilchenzustand $|\Phi_N\rangle$

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

(Betrachte wieder wechselwirkenden Fall)

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

- Sinnvolle Messgrößen müssen von den Koordinaten (allg.: Quantenzahlen) aller Teilchen abhängen $\rightarrow$ hermitesche Observablen $\hat{A}_N$
- Erwartungswert solcher Observablen muss invariant gegenüber Vertauschung von Teilchenmatrix sein!

$\Rightarrow$ es muß gelten:

(hermitisch)
Operator, der auf alle N Teilchen wirkt

$$\langle \dots \underbrace{\phi_{\alpha_i}^{(i)} \dots \phi_{\alpha_j}^{(j)}}_{\text{Teilchenindex}} \dots | \hat{A}_N | \dots \underbrace{\phi_{\alpha_i}^{(i)} \dots \phi_{\alpha_j}^{(j)}}_{\text{Einzelteilchenzustand}} \dots \rangle$$

(Quantenzahl-Index) N-Teilchenzustand

Kombination (noch festzulegen) aus
Produkten von Einzelteilchenzuständen!

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

⊕

Teilweise sei:

Vertauschung

Permutationsoperator $\hat{P} | \phi_{\alpha_1}^{(1)} \phi_{\alpha_2}^{(2)} \dots \phi_{\alpha_N}^{(N)} \rangle = | \phi_{\alpha_{i_1}}^{(1)} \dots \phi_{\alpha_{i_N}}^{(N)} \rangle$

Allgemeine Permutation, die die Vertauschung der Teilchen über alle möglichen Einzelteilchenzustände ändert

$$1, 2, \dots, N \rightarrow i_1, i_2, \dots, i_N$$

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

Zurückföhren:

Produkt

$$\hat{P} = \prod \hat{P}_{ij}$$

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

(Transpositionsoperator)

es gilt: $\hat{P}_{ij} \hat{P}_{ij} = 1 \iff \hat{P}_{ij} = \hat{P}_{ij}^{-1}$

Zwängiges Vorzeichen soll
weder auf Anfangszustand sein!

$\hat{P}_{ij}$ ist hermitisch:

$$\begin{aligned} \langle \hat{P}_{ij} \phi_N | \hat{P}_{ij} \phi_N \rangle &\stackrel{!}{=} \langle \phi_N | \phi_N \rangle && \text{(also } \bar{A}_N = 1 \text{ in } \circledast) \\ \text{Überprodukt des Permutierten} &&& \text{Erhaltung der Norm!} \\ \text{Zustands mit sich selber} &&& \\ \langle \phi_N | \hat{P}_{ij}^\dagger \hat{P}_{ij} | \phi_N \rangle &\stackrel{!}{=} \langle \phi_N | \phi_N \rangle \\ \Rightarrow \hat{P}_{ij}^\dagger \hat{P}_{ij} &= 1 \\ \Rightarrow \hat{P}_{ij}^\dagger &= \hat{P}_{ij}^{-1} = \hat{P}_{ij} \end{aligned}$$

also ist $\hat{P}_{ij}$ auch unitär!

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

Betrachte noch einmal $\circledast$
Umformulierung mit Hilfe von $\hat{P}_{ij}$:

$$\begin{aligned} \langle \hat{P}_{ij} \phi_N | \hat{A}_N | \hat{P}_{ij} \phi_N \rangle &\stackrel{!}{=} \langle \phi_N | \hat{A}_N | \phi_N \rangle \\ \hline \langle \phi_N | \hat{P}_{ij}^\dagger \hat{A}_N \hat{P}_{ij} | \phi_N \rangle &\stackrel{!}{=} \langle \phi_N | \hat{A}_N | \phi_N \rangle \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \Leftrightarrow \hat{P}_{ij}^\dagger \hat{A}_N \hat{P}_{ij} &\stackrel{!}{=} \hat{A}_N && | \text{werde von links } \hat{P}_{ij} \text{ an} \\ \underbrace{\hat{P}_{ij} \hat{P}_{ij}^\dagger}_{\hat{1}} \hat{A}_N \hat{P}_{ij} &\stackrel{!}{=} \hat{P}_{ij} \hat{A}_N \\ \Rightarrow \hat{A}_N \hat{P}_{ij} &\stackrel{!}{=} \hat{P}_{ij} \hat{A}_N \end{aligned}$$

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

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

Insbesondere folgt hieraus:

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

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

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

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

Eigenwertgleichung:

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

andere Seite:

$$\underbrace{\langle \hat{P}_{ij} \Phi_N | \hat{P}_{ij} \Phi_N \rangle}_{\text{braute Eigenwertgleichung}} = \langle \Phi_N | \overbrace{\hat{P}_{ij}^+ \hat{P}_{ij}}^1 | \Phi_N \rangle = \langle \Phi_N | \Phi_N \rangle \quad \text{Erhaltung der Norm}$$

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

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

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

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

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

Interpretation:

- Die Zustände eines Systems identischer Teilchen sind gegenseitig vertauscht. Teilchenindizes entweder symmetrisch ($\lambda = +1$) oder antisymmetrisch ($\lambda = -1$)
- Diese Eigenschaft ist eine Konsequenz der Bewegung! (Erhaltungsgröße)
 „einfache Charakteristika“

- Symmetrische und antisymmetrische Zustände sind orthogonal:

$$\begin{aligned}
 \langle \phi_N^{(+)} | \varphi_N^{(-)} \rangle &= \langle \phi_N^{(+)} | \hat{P} | \varphi_N^{(-)} \rangle \\
 &= \langle \phi_N^{(+)} | \hat{P}_{ij} \hat{P}_{ij} | \varphi_N^{(-)} \rangle \\
 &= \langle \hat{P}_{ij} \phi_N^{(+)} | \hat{P}_{ij} \varphi_N^{(-)} \rangle \\
 &= \langle \phi_N^{(+)} | (-1) \varphi_N^{(-)} \rangle = -\langle \phi_N^{(+)} | \varphi_N^{(-)} \rangle
 \end{aligned}$$

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