8. Mehrteilchensysteme und ununterscheidbare Teilchen [Münster 18.1-18.4 Flipbach VIII 46 u. 48]

Wir behandeln ein System mit 2 oder mehreren identischen Teilchen, also z. B. ein Heliumatom mit 2 Elektronen.

- klass. Mechanik: jedes Teilchen hat seine eigene Bahn und ist damit unterscheidbar

- QM: dies ist nicht mehr der Fall, da Ort & Impuls nicht gleichzeitig bel. genau bestimmbar: $\exists$ Aufenthaltswahrscheinlichkeit

$\Rightarrow$ dies hat wichtige physikalische Konsequenzen!

N-Teilchen Hamilton Operator $\hat{H} = \hat{H}(\vec{p}_1, \vec{r}_1, \vec{S}_1; \dots \vec{p}_N, \vec{r}_N, \vec{S}_N)$

— " — Wellenfunktion $|\Psi\rangle = |1; \dots; N\rangle$ $\in$ N-Teilchen Hilbertraum, mit Basis aus Produktraum der Einteilchen wellenfkt.

Bsp für $\hat{H}$:

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^{N} \frac{1}{2m_i}\left(\hat{\vec{p}}^{(i)}\right)^2 + V(\hat{\vec{r}}_1, \dots \hat{\vec{r}}_N)$$

mit oft nur 2-Teilchen WW $V(\vec{r}_1, \dots \vec{r}_N) = \sum_{i<j} V_{ij}(|\vec{r}_i - \vec{r}_j|)$

Schrödi (Ortsraum) $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}_1, \vec{S}_1; \dots \vec{r}_N, \vec{S}_N) = \left\{ -\sum_{i=1}^{N} \frac{\hbar^2}{2m_i} \Delta_{\vec{r}_i} + V(\vec{r}_1 \dots \vec{r}_N) \right\} \underbrace{\Psi(\vec{r}_1, \vec{S}_1; \dots ; \vec{r}_N, \vec{S}_N)}_{|1; \; ; N\rangle}$

Def Paarvertauschungsoperator $\hat{P}_{ij} |\dots; i; \dots; j; \dots\rangle = |\dots; j; \dots; i; \dots\rangle$

mit $(\hat{P}_{ij})^2 = \mathbb{1}$ d.h. $\hat{P}_{ij}^{-1} = \hat{P}_{ij}$

Ein 2Teilchensystem heißt symmetrisch unter Paarvertauschung $\hat{P}_{ij} \underbrace{|i, j\rangle}_{|\Psi\rangle} = \underbrace{|j, i\rangle}_{|\Psi'\rangle}$ (= invariant unter ...), wenn $|\Psi\rangle$ und $|\Psi'\rangle$ dieselbe Schrödi erfüllen: $i\hbar \frac{d}{dt} \hat{P}_{ij} |\Psi\rangle = \hat{H} \hat{P}_{ij} |\Psi\rangle$ und $i\hbar \frac{d}{dt} |\Psi\rangle = \hat{H} |\Psi\rangle$, P_{ij} $\neq$ zeitabh.

(s.S. 80, 81 Drehungen)

$\Rightarrow$ $\hat{P}_{ij} \hat{H} = \hat{H}, \hat{P}_{ij} \Leftrightarrow \underline{[\hat{P}_{ij}, \hat{H}] = \hat{0}}$ und es transformiert $\hat{H} \rightarrow \hat{P}_{ij} \hat{H} \hat{P}_{ij}$

* Wann gilt dies? $H(i,j) \hat{P}_{ij} |i, j\rangle = \underline{H(i,j) |j, i\rangle} = \hat{P}_{ij} H(i,j) |i, j\rangle = \underline{H(j,i) |j, i\rangle}$ $\forall i,j$

d.h. $H(i;j) = H(j;i)$, wie oben im Bsp der 2-Teilchen WW.

Die Teilchen im N-Teilchensystem oben sind ununterscheidbar, wenn für alle Observablen $\hat{A}$ und $\forall i,j = 1..N$ $[\hat{A}, \hat{P}_{ij}] = \hat{0}$ gilt

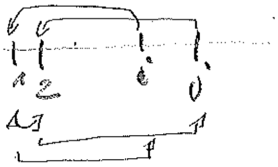
- wegen $[\hat{P}_{ij}, \hat{H}] = \hat{0}$ können alle Energieeigenzustände gleichzeitig als P_{ij}-Eigenzustand gewählt werden, und deren Eigenwerte sind erhalten:

* Welche Eigenwerte gibt es?

$P_{ij}|\psi\rangle = \lambda_{ij}|\psi\rangle$, und $P_{ij}^2|\psi\rangle = \mathbb{1}|\psi\rangle = \lambda_{ij}^2|\psi\rangle \Rightarrow \lambda_{ij} = \pm 1$ (da offensichtlich $\hat{P}_{ij} = \hat{P}_{ij}^\dagger$)

- Sei $|\psi\rangle$ Eigenvektor zu P_{ij} $\forall i,j \Rightarrow$ alle λ_{ij} sind gleich λ_{12}

$$P_{ij} = P_{1i}P_{2j}P_{12}P_{1i}P_{2j}$$



$$\Rightarrow P_{ij}|\psi\rangle = \lambda_{ij}|\psi\rangle = \underset{1}{\underset{\shortparallel}{\lambda_{1i}^2}}\,\underset{1}{\underset{\shortparallel}{\lambda_{2j}^2}}\,\lambda_{12}|\psi\rangle$$

$\Rightarrow \exists$ 2 Möglichkeiten: 1) $\lambda = +1$ total symmetrischer N-Teilchen Zustand

$|..i;..j;..\rangle = +|..j;..i;..\rangle \quad \forall i,j$ (z.B. Photon)

Teilchen, die diese Eigenschaft erfüllen heißen Bosonen.

2) $\lambda = -1$ total anti-symmetrischer N-Teilchen Zustand

$|..i;..j;..\rangle = -|..j;..i;..\rangle \quad \forall i,j$

Teilchen, die dies erfüllen heißen Fermionen (z.B. e^-)

Eine wichtige Eigenschaft dieser Teilchen ist durch das Spin-Statistik Theorem (Pauli 1940) gegeben:
- Teilchen mit ganzzahligem Spin verhalten sich wie Bosonen
- " " halbzahligem " " " " Fermionen

* Wie läßt sich dies explizit realisieren?

z.B. für nicht WW Teilchen mit $\hat{H} = \sum_{i=1}^{N} \hat{H}_1(\hat{\vec{p}}_i, \hat{\vec{r}}_i)$, $\hat{H}_1(\hat{\vec{p}}, \hat{\vec{r}}) = \frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m} + V(\hat{\vec{r}})$

Einteilchen-Hamilton-Op.

Einteilchen Wellenfkt: $\hat{H}_1 \psi_n(\vec{r},\vec{s}) = E_n \psi_n(\vec{r},\vec{s})$, $\langle \psi_n | \psi_{n'} \rangle = \delta_{nn'}$

⇒ Produkt: Mehrteilchen-Wellenfkt: $\tilde{\Psi}(1,\dots,N) = \prod_{i=1}^{N} \psi_{n_i}(\vec{r}_i,\vec{s}_i)$

mit $\hat{H}\tilde{\Psi}(1,\dots,N) = \underbrace{\sum_{i=1}^{N} E_{n_i}}_{E} \tilde{\Psi}(1,\dots,N) = E\Psi(1,\dots,N)$

diese ist aber noch nicht

symmetrisiert / antisymmetrisiert:

Bosonen: $\Psi_b(1,\dots,N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\sigma \in S_n} \prod_{i=1}^{N} \psi_{n_{\sigma(i)}}(\vec{r}_i,\vec{s}_i) \equiv \mathrm{Per}\left[\psi_j(\vec{r}_i,\vec{s}_i)\right] \frac{1}{\sqrt{N!}}$

ohne Vorzeichen,

Permanente (wie det, ohne Vorzeichen)

wobei S_n die Menge aller Permutationen, es gibt $N!$

und $\prod_{i=1}^{N} \int dr_i |\Psi(1,\dots,N)|^2 = 1$ ist normiert. **Bsp** Grundzust. $\Psi(1,\dots,N) = \prod_{i=1}^{N} \psi_0(i,s)$

Fermionen: $\Psi_f(1,\dots,N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\sigma \in S_n} \mathrm{sign}(\sigma) \prod_{i=1}^{N} \psi_{n_{\sigma_i}}(\vec{r}_i,\vec{s}_i) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \det\left[\psi_j(\vec{r}_i,\vec{s}_i)\right]_{i,j=1}^{N}$

diese total anti-symmetrische Lsg heißt Slater determinante,

d.h. $$\Psi_f(1,\dots,N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \psi_{n_1}(\vec{r}_1,\vec{s}_1) & \psi_{n_1}(\vec{r}_2,\vec{s}_2) & \dots & \psi_{n_1}(\vec{r}_N,\vec{s}_N) \\ \psi_{n_2}(\vec{r}_1,\vec{s}_1) & \psi_{n_2}(\vec{r}_2,\vec{s}_2) & & \vdots \\ \vdots & & & \\ \psi_{n_N}(\vec{r}_1,\vec{s}_1) & \dots & & \psi_{n_N}(\vec{r}_N,\vec{s}_N) \end{vmatrix}$$

Konsequenzen für Fermionen (wie z.B. Elektronen):

(i) falls ein Zustand 2x auftaucht, $n_i = n_j$, ist sofort $\Psi_f(1\dots N) \equiv 0$

⇒ Es gilt das Pauli-Verbot [Pauli 1925 → Nobelpreis], d.h. alle Fermionen in einem ununterscheidbaren Vielteilchensystem sind in unterschiedlichen Zuständen!

⇒ Periodensystem der Elemente, wir füllen die quantisierten Energiezustände sukzessive auf (Rydbergatom + weitere e^- auf 1s passen $1e^-$ mit $s_i = +\frac{1}{2}$ und $1e^-$ mit $s = -\frac{1}{2}$ usw.)

(ii) es gilt auch $\Psi(1,\dots,N) \equiv 0$ wenn $\vec r_1 = \vec r_2$ und $\vec S_1 = \vec S_2$

d.h. 2 Fermionen vermeiden einander, wie bei einer repulsiven WW

(aber, wir haben noch keine WW eingeschaltet!)

Anwendungsbeispiel Heliumatom:

He-Kern besteht aus $2p^+$ und $2n$, $m_{Kern} = 8000$ mal $m_e \gg m_e$, wir vernachlässigen die Kernbewegung (Kernladungszahl ist $Z=2$) d.h. reduzieren 3- auf 2-Körperproblem

$$\Rightarrow \hat H = \underbrace{\sum_{i=1,2} \frac{1}{2m}(\hat{\vec p}^{(i)})^2 - \frac{2e^2}{|\vec r^{(i)}|}}_{\uparrow\text{freie Einteilchenbewegung}} + \underset{\uparrow\text{WW („Störung")}}{\frac{e^2}{|\vec r^{(1)} - \vec r^{(2)}|}}$$

* aus reinen Symmetrieüberlegungen und der Tatsache, daß beide e^- Fermionen sind, mit Spin $s_i = \frac{1}{2}$ und Projektion $\pm\frac{1}{2}$ folgt:

Gesamtspin $\vec S = \vec S^{(1)} + \vec S^{(2)}$

$\Rightarrow$ Ü 12.1.

Gesamtspin 1:
$$\left.\begin{aligned} |1,1\rangle &= |+,+\rangle \\ |1,0\rangle &= \frac{1}{\sqrt 2}(|+,-\rangle + |-,+\rangle) \\ |1,-1\rangle &= |-,-\rangle \end{aligned}\right\} \text{symmetrisch unter Paarvertauschung } |1,2\rangle \to |2,1\rangle$$

Gesamtspin 0:
$$\left. |0,0\rangle = \frac{1}{\sqrt 2}(|+,-\rangle - |-,+\rangle) \right\} \text{antisym. —"—}$$

Gesamtwellenfunktion $\Psi(\vec r_1, s_1; \vec r_2, s_2) = \psi(\vec r_1, \vec r_2)\,\chi(s_1, s_2)$

faktorisiert ($\hat H$ hängt nicht explizit von $\vec S^{(i)}$ $i=1,2$ ab) $\Rightarrow$

damit Ψ total antisymmetrisch ist muß gelten:

$\psi(\vec r_1, \vec r_2) = +\psi(\vec r_1, \vec r_2)$ symm. und $\chi(s_1, s_2) = -\chi(s_2, s_1) = |0,0\rangle$ antisym. sein

„Parahelium" = Grundzustand $\psi_{100}(\vec r_1)\psi_{100}(\vec r_2)\,|0,0\rangle$ (keine Knoten im Ortsraum)

$\psi(\vec r_1, \vec r_2) = -\psi(\vec r_1, \vec r_2)$ antisym. und $\chi(s_1, s_2) = +\chi(s_2, s_1)$ symm. sein d.h. Spin 1

„Orthohelium"

d.h. führt dies auf eine Slater det für Orthohelium (1 und 2 verschieden Zuständen):

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\left[\psi_{100}(\vec{r}_1)\psi_{200}(\vec{r}_2)-\psi_{100}(\vec{r}_2)\psi_{200}(\vec{r}_2)\right]\cdot\overset{\chi}{\overset{\downarrow}{|1\,0\rangle}}$$

- Anwendung der Störungstheorie aus Kapitel 7. für Parahelium Grundzustand

$$E_0 = E_{0,0} + \overset{1.\ \text{Ordnung}}{\langle\varphi_0|g\hat{V}|\varphi_0\rangle} + \ldots$$

$$= \underbrace{-2\cdot \overset{4}{Z^2}\,13{,}6\,\text{eV}}_{E_{0,0}\approx -108{,}8\,\text{eV}} + \underbrace{\langle\varphi_0|\frac{e^2}{|\vec{r}_1-\vec{r}_2|}|\varphi_0\rangle}_{>0} + \ldots$$

wobei $\langle\varphi_0|\frac{e^2}{|\hat{\vec{r}}^{(1)}-\hat{\vec{r}}^{(2)}|}|\varphi_0\rangle = \int d^3r_1\int d^3r_2\,|\psi_{100}(\vec{r}_1)|^2|\psi_{100}(\vec{r}_2)|^2\frac{e^2}{|\vec{r}_1-\vec{r}_2|} = 34\,\text{eV}$

und $|\psi_{100}(\vec{r})| = \frac{1}{\sqrt{\pi}}\left(\frac{Z}{a}\right)^{\frac{3}{2}}e^{-\frac{Zr}{a}}$, es ergibt sich

d.h. $E_0 \approx -74{,}8\,\text{eV}$ aus der 1. Ordnung Störungstheorie.

- Experimentell findet man $E_0 = -78{,}975\,\text{eV}$, was erstaunlich gut mit dieser Näherung übereinstimmt!

- für weitere Details und insbesondere die Rechnung für "Orthohelium" siehe [Münster, Kapitel 18.4].