XIV Identische Teilchen

Postulat: Pauli-Prinzip

Es gibt zwei Klassen von Teilchen:

1) Bosonen mit ganzzahligem Spin (Photonen, Mesonen ...), deren Zustandsvektor ist immer symmetrisch.

2) Fermionen mit halbzahligem Spin (Elektronen, Protonen, Neutronen, ...) deren Zustandsvektor ist immer antisymmetrisch.

Beispiele:

- 2 identische Teilchen mit Spin 0 $\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \psi(\vec{r}_2, \vec{r}_1)$ symmetrisch.

- 2 identische Teilchen mit Spin $s = 1/2$

$$|\psi\rangle = \psi_{00}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)\underbrace{|s=0, m=0\rangle}_{\text{antisymmetrisch}} + \sum_{m=-1,0,1} \psi_{1m}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)\underbrace{|s=1, m\rangle}_{\text{symmetrisch}}$$

wenn $\psi_{00}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \psi_{00}(\vec{r}_2, \vec{r}_1)$ ist symmetrisch

und $\psi_{1m}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = -\psi_{1m}(\vec{r}_2, \vec{r}_1)$ ist antisymmetrisch

$\rightarrow$ $|\psi\rangle$ ist antisymmetrisch

$$\underbrace{\frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle\right)}_{=:|s=0, m=0\rangle} \xrightarrow{1 \leftrightarrow 2} \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\downarrow\uparrow\rangle - |\uparrow\downarrow\rangle\right) = \underset{\uparrow}{-}\frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle\right)$$

antisymmetrisch

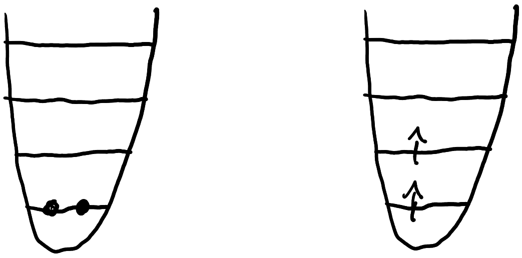
Konsequenzen: zwei identische Fermionen (nicht-wechselwirkend) können nicht im selben Zustand sein. (Exklusionsprinzip)

$\hat{H} = \underset{\text{Teilchen 1}}{\hat{h}^{(1)}} + \underset{\text{Teilchen 2}}{\hat{h}^{(2)}}$, sei $|n\rangle$ die orthonormierte Eigenbasis von $h^{(i)}$

Zustand $|1:n, 2:n\rangle \to |2:n, 1:n\rangle$ ist symmetrisch ↯

Beispiel: harmonischer Oszillator

Grundzustand



Bosonen

$\propto \underbrace{\phi_0(x_1)\phi_0(x_2)}_{\text{symmetrisch}}$

Fermionen

$\frac{1}{\sqrt{2}}\underbrace{\left(\phi_0(x_1)\phi_1(x_2) - \phi_0(x_2)\phi_1(x_1)\right)}_{\text{antisymmetrisch}} \otimes \underbrace{|\uparrow\uparrow\rangle}_{\text{symmetrisch}}$

<u>N- identische Teilchen</u>

Analog zu dem Fall von 2 Teilchen definiert man den Austauschoperator $\hat{P}_{ij}$ der Teilchen i und j. Die Zustände $|\psi\rangle$ und $\hat{P}_{ij}|\psi\rangle$ müssen für alle Paare (i,j) dieselben Resultate für physikalische Messungen geben.

Der Zustand eines Systems von N identischen Bosonen (Fermionen) ist total symmetrisch (antisymmetrisch) unter dem Austausch von einem beliebigen Paar zweier Teilchen.

Bosonen: $|\psi_B\rangle = \frac{C}{\sqrt{N!}} \sum_P |1: n_{P(1)}, 2: n_{P(2)}, \dots, N: n_{P(N)}\rangle$

P sind alle möglichen Permutationen, C ist die Normierung $C = (N_1! \, N_2! \dots)^{-1/2}$, wobei N_i die Besetzungszahl des Zustandes $|n_i\rangle$ ist.

Fermionen: $|\psi_F\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_P \varepsilon_P |1: n_{P(1)}, \dots, N: n_{P(N)}\rangle$

$\varepsilon_P = 1$ wenn P eine gerade Permutation ist

$\varepsilon_P = -1$ wenn P eine ungerade Permutation ist

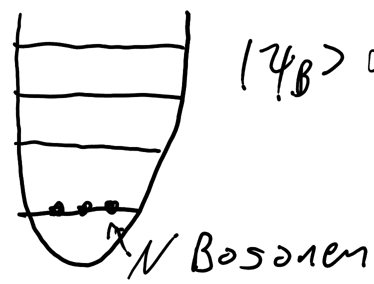
Die Zustände $|n_i\rangle$ müssen paarweise orthogonal sein, sonst ist $|\psi_F\rangle = 0$

weitere Darstellungen $|\psi_F\rangle = \frac{1}{N!} \operatorname{Det} \begin{pmatrix} |1: n_1\rangle & \dots & |1: n_N\rangle \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ |N: n_1\rangle & \dots & |N: n_N\rangle \end{pmatrix}$

(Slaterdeterminante)

Beispiel: harmonisches Potential

Bosonen

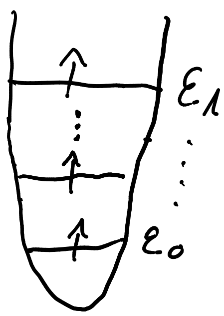


$$|\psi_B\rangle \propto \phi_0(x_1)\,\phi_0(x_2)\,\phi_0(x_3)\ldots\phi_0(x_N)$$

$$E_0 = N\varepsilon_0$$

alle Bosonen sind im niedrigsten Zustand:
Bose-Einstein-Kondensation

Fermionen: N im Spinzustand „$\uparrow$"
$\rightarrow$ Spinzustand $|\uparrow\ldots\uparrow\rangle$ ist symmetrisch

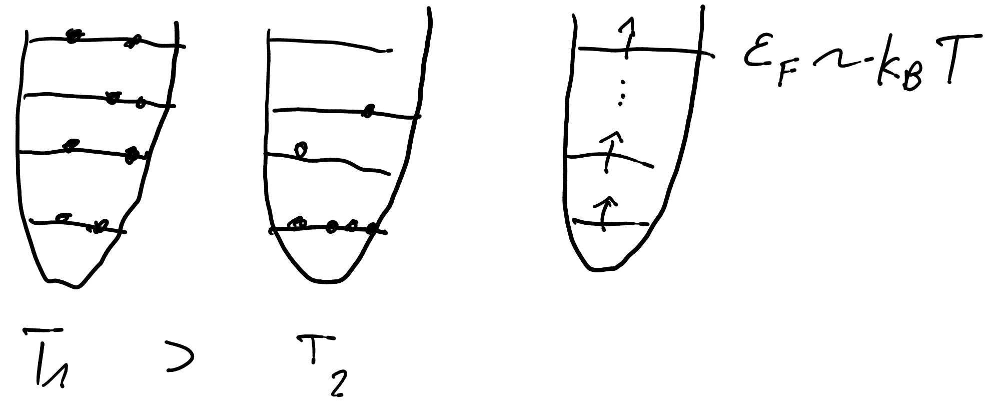


Die höchst besetzte Energie ε_{N-1} heißt die Fermi-Energie.

Grundzustandsenergie ist $E_0 = \sum_{i=0}^{N-1} \varepsilon_i$

Die Ausdehnung der Wellenfunktion der Fermionen hat einen relativ großen Radius, den Fermi-Radius $\gg a_{ho}$

Im Gegensatz haben die Bosonen im Grundzustand ($T \rightarrow 0$) die Ausdehnung $\rightarrow a_{ho}$



Zeitentwicklung: Der Hamiltonoperator $\hat{H}$ von N identischen Teilchen kommutiert mit allen Austauschoperatoren $\hat{P}_{ij}$ (sonst wären die Teilchen nicht ununterscheidbar)

Daher ist die Symmetrie des Zustandes bezgl. $\hat{P}_{ij}$ erhalten.

<u>Komplexe Atome</u>

$$\hat{H} = \underbrace{\sum_{i=1}^{Z} \frac{\hat{p}_i^2}{2m_e}}_{\text{kinetische Energie}} - \underbrace{\sum_{i=1}^{Z} \frac{Ze^2}{\hat{r}_i}}_{\text{Wechselwirkung Kern} \leftrightarrow \text{Elektron}} + \underbrace{\sum_{i=1}^{Z} \sum_{k=i+1}^{Z} \frac{e^2}{|\hat{r}_i - \hat{r}_k|}}_{\text{Wechselwirkung Elektron} \leftrightarrow \text{Elektron}}$$

Wir haben den Kern als ruhend angenommen und magnetische Effekte vernachlässigt. Daher ist keine Abhängigkeit vom Spin ersichtlich in $\hat{H}$. Der Spin wird wichtig durch das Pauli-Prinzip.

Approximative Methode : Hartree - Methode

nimmt nur mittlere Wechselwirkung von Elektronen auf ein ausgezeichnetes Elektron mit.

$$\hat{H} = \underbrace{\sum_{i=1}^{Z} \frac{\hat{p}_i^2}{2m_e} + \underbrace{\sum_{i=1}^{Z} \left(-\frac{Ze^2}{\hat{r}_i} + V(\hat{r}_i) \right)}_{=: \sum_i U(\hat{r}_i)}}_{\text{nicht wechselwirkende Elektronen im effektiven Potential } U} + \underbrace{\sum_i \left(\sum_{k>i} \frac{e^2}{|r_i - r_k|} - V(\hat{r}_i) \right)}_{=: H_c \text{ reduzierte Wechselwirkung}}$$

Die Funktion $V(\vec{r})$ wird 'passend' gewählt, so dass $\hat{H}_c$ vernachlässigbar ist (viele mögliche Arten). Es kann als ein mittleres Potential der Elektronen auf ein Elektron betrachtet werden.

Das nicht wechselwirkende Problem kann für jedes Teilchen einzeln gelöst werden. $H_0 = \sum_{i=1}^{Z} \hat{h}_{(i)}$ mit $\hat{h}_i = \frac{\hat{p}_i^2}{2m_e} + U(\hat{r}_i)$ lösen von $\hat{h}_{(i)}$, um Eigenenergien $E_{n,e}$ und Funktionen Ψ_{nem} zu erhalten. Dann Auffüllen der Zustände mit Elektronen. Hierbei wird der Spin durch das Pauli-Prinzip wichtig.

Grobe Näherung!

XV. Die Dichtematrix

Erinnerung: Stern-Gerlach Experiment

2 Flecken egal in welcher Richtung der Gradient anliegt.

↳ Silberatome verlassen den Ofen mit einer Gleichverteilung der Polarization.

Wie können wir den Spinzustand in dieser Situation beschreiben?

Versuch: $|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle + e^{i\phi}|\downarrow\rangle)$ "reiner Zustand"

Messung von $\hat{\mu}_z$ würde $\pm\mu_0$ mit Wahrscheinlichkeit $1/2$ unabhängig von ϕ, aber Messung entlang $\vec{u} = \cos\phi\,\vec{e}_x + \sin\phi\,\vec{e}_y$ ergibt:

$+\mu_0$ mit Wahrscheinlichkeit 1

→ Wir können keinen 'reinen' Zustand finden, der das Experiment beschreibt. Wir benötigen statistische Mischungen von Zuständen.