Contents

Chapter 4

Identische Teilchen

4.1 Fermionen & Bosonen

1 Teilchenzustand $|K'\rangle$ K als kollektiver Index
2 Teilchenzustand $|K'\rangle|K''\rangle$ oder $|K''\rangle|K'\rangle$
$|K'\rangle \neq |K''\rangle$ Orthogonal $\Rightarrow |K'\rangle|K''\rangle \perp |K''\rangle|K'\rangle$ beschreiben gleiche Situation $\rightarrow$ Austausch-Entartung
Lösung: Permutationssymmetrie unter Austausch identischer Teilchen. Permutationsoperator P_{ij}
$|K'\rangle|K''\rangle...|K^{(n)}\rangle$ oder $|1\rangle|2\rangle...|n\rangle$

$$P_{ij}|K'\rangle...|K\rangle|K^{(i+1)}\rangle...|K^{(j)}\rangle... = |K'\rangle...|K^{i-1}\rangle|K^{(i)}\rangle|K^{(i+1)}\rangle...|K^{(j)}\rangle... \tag{4.1}$$

$$S_n = \{P_\pi = \pi_{\{ij\}} P_{ij}\}$$

$n!$ Permutationen von n Elementen $\rightarrow dim S_n = n!$
Eigenschaften: $P_{ij}^2 = 1$, S_n nichtkommutativ für $n \geq 3$

$$P_{12}P_{23}|K'\rangle|K''\rangle|K'''\rangle = P_{12}|K'\rangle|K'''\rangle|K''\rangle = |K'''\rangle|K'\rangle|K''\rangle$$

$$P_{23}P_{12}|K'\rangle|K''\rangle|K'''\rangle = P_{23}|K''\rangle|K'\rangle|K'''\rangle = |K''\rangle|K'''\rangle|K'\rangle$$

P_{ij} und Observablen

$$A_1|a'\rangle|a''\rangle = a'|a'\rangle|a''\rangle$$

$$A_2|a'\rangle|a''\rangle = a''|a'\rangle|a''\rangle$$

Was ist $P_{12}A_1P_{12}^{-1}$

$$P_{12}A_1P_{12}^{-1}|a'\rangle|a''\rangle = P_{12}A_1|a''\rangle|a'\rangle = P_{12}a''|a''\rangle|a'\rangle = a''P_{12}|a''\rangle|a'\rangle = a''|a'\rangle|a''\rangle$$

$P_{12}A_1P_{12}^{-1} = A_2$, $P_{ij}A_jP_{ij}^{-1} = A_i$
Hamiltonoperator invariant unter Permutation identischer Teilchen

$$H = \frac{\vec{p}_1^2}{2m} + \frac{\vec{p}_2^2}{2m} + V(\vec{x}_1) + V(\vec{x}_2) + V_{pair}(|\vec{x}_1 - \vec{x}_2|)$$

$$\Rightarrow P_{12}HP_{12}^{-1} = H \Leftrightarrow [H, P_{12}] = 0$$

$\Rightarrow$ Es gibt simultane Eigenzustände zu P_{12}, H
P_{12} hat Eigenwerte ± 1

$$+1 : |K'K''\rangle_+ = \frac{1}{\sqrt{2}}(|K'\rangle|K''\rangle + |K''\rangle|K'\rangle)$$

$$-1 : |K'K''\rangle_- = \frac{1}{\sqrt{2}}(|K'\rangle|K''\rangle - |K''\rangle|K'\rangle)$$

Verallgemeinerung auf n Teilchen: irreduzible Darstellung der S_n. S_n hat 2 1-dimensionale Darstellungen.

a) Symmetrische Darstellung $\pi \to 1$

$$|K'...K'''\rangle_+ = \frac{1}{\sqrt{n!}} \sum_{\pi \in S_n} 1 \cdot P_\pi |K'\rangle |K''\rangle ... |K^{(n)}\rangle$$

Bosonen

b) Antisymmetische Darstellung $\pi \to \delta = \begin{cases} +1 & \pi \text{ gerade,} \\ -1 & \pi \text{ ungerade.} \end{cases}$

$$|K'...K'''\rangle_- = \frac{1}{\sqrt{n!}} \sum_{\pi \in S_n} \delta_\pi \cdot P_\pi |K'\rangle |K''\rangle ... |K^{(n)}\rangle$$

Fermionen

Bose-Einstein Statistik

$$P_{ij} \underbrace{|\text{n identische Teilchen}\rangle}_{|K^{(1)}...K^{(n)}\rangle_+} = +|\text{n id.Teilchen}\rangle$$

Fermi-Dirac Statistik

$$P_{ij} \underbrace{|\text{n identische Teilchen}\rangle}_{|K^{(1)}...K^{(n)}\rangle_-} = -|\text{n id.Teilchen}\rangle$$

Bew.:

$$P_{ij}|K^{(1)}...K^{(n)}\rangle_- = \frac{1}{\sqrt{n!}} \sum_{\pi \in S_n} \delta_\pi \underbrace{P_{ij} P_\pi}_{-P_{\pi_{ij}}} |K^{(1)}\rangle |K^{(2)}\rangle ... |K^{(n)}\rangle \tag{4.2}$$

$$= -\frac{1}{\sqrt{n!}} \sum_{\pi \in S_n} \delta_\pi P_{\pi_{ij}} |K^{(1)}\rangle |K^{(2)}\rangle ... |K^{(n)}\rangle \tag{4.3}$$

$$= -|K^{(1)}...K^{(n)}\rangle_- \tag{4.4}$$

Zusammenhang von Statistik und SpinTeilchen mit

- Spin 0,1,2,... sind Bosonen
- Spin $\frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}$... sind Fermionen

Innerhalb relativistischer quantenfeldtheorie:

- Spin-Statistik Theorem Spin $\frac{1}{2}$... Fermionen und Spin 0,1,... Bosonen.
- keine Para-Statistik, d.h. höhere irreduzible Darstellung der S_n

4.1.1 2 Elektronen Systeme

2 e^- können nicht den gleichen Zustand besetzen.

$$(|K'\rangle |K'\rangle)_- = \frac{1}{\sqrt{2}}(1 - P_{12})|K'\rangle |K'\rangle = 0$$

Pauli-Prinzip Basis Zustand: $|\vec{x}_1\rangle |m_{s1}\rangle \otimes |\vec{x}_2\rangle |m_{s2}\rangle$
Annahme: $[H, \vec{S}_{tot}] = 0$

$$\to |\psi\rangle = \phi(\vec{x}_1, \vec{x}_2)\chi(m_{s1}, m_{s2})$$

$$|\psi\rangle = \int d^3\vec{x}_1 d^3\vec{x}_2 \sum_{m_{s1} m_{s2}} \phi(\vec{x}_1, \vec{x}_2)\chi(m_{s1}, m_{s2})|\vec{x}_1\rangle |m_{s1}\rangle |\vec{x}_2\rangle |m_{s2}\rangle$$

S_{tot}^2 Eigenzustände

$$\chi(m_{s1}, m_{s2}) = \begin{cases} \chi_{++}(=\delta_{m_{s1}+\frac{1}{2}}\delta_{m_{s2}+\frac{1}{2}}) & S=1, \text{Triplett} \\ \frac{1}{\sqrt{2}}(\chi_{+-}+\chi_{-+}) & S=1, \text{Triplett} \\ \chi_{--} & S=1, \text{Triplett} \\ \frac{1}{\sqrt{2}}(\chi_{+-}-\chi_{-+}) & S=0, \text{Singulett} \end{cases}$$

Unter Permutation von $1 \leftrightarrow 2$

$$P_{12}\chi_{\text{triplet}} = +\chi_{\text{triplet}} \Rightarrow \phi(\vec{x}_1, \vec{x}_2) = -\phi(\vec{x}_2, \vec{x}_1)$$

$$P_{12}\chi_{\text{Singulett}} = -\chi_{\text{Signulet}} \Rightarrow \phi(\vec{x}_1, \vec{x}_2) = +\phi(\vec{x}_2, \vec{x}_1)$$

Bsp:

$$H = \underbrace{\frac{\vec{p}_1^2}{2m} + V(\vec{x}_1)}_{H_1} + \underbrace{\frac{\vec{p}_2^2}{2m} + V(\vec{x}_2)}_{H_2}$$

Mit $H_1\omega_A(\vec{x}_1) = E_A\omega_A(\vec{x}_1)$
$H_2\omega_A(\vec{x}_2) = E_A\omega_A(\vec{x}_2)$
folgen Lösungen für $H|\psi\rangle = E|\psi\rangle$

$$\psi\rangle = \omega_A(\vec{x}_1)\omega_B(\vec{x}_2)\chi$$

mit $E = E_A + E_B$. Lösungen die Fermi-Dirac Statistik erfüllen

$$\phi(\vec{x}_1, \vec{x}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\omega_A(\vec{x}_1)\omega_B(\vec{x}_2) \pm \omega_B(\vec{x}_1)\omega_A(\vec{x}_2))$$

$+$ Für Singulett $-$ für Triplett
Wahrscheinlichkeit

- Teilchen 1 bei $\vec{x}_1$ in $d^3\vec{x}_1$ und
- Teilchen 2 bei $\vec{x}_2$ in $d^3\vec{x}_2$ zu finden

$$|\phi(\vec{x}_1, \vec{x}_2)|^2 d^3\vec{x}_1 d^3\vec{x}_2 = \tag{4.5}$$

$$= \frac{1}{2}(|\omega_A(\vec{x}_1)|^2|\omega_B(\vec{x}_1)|^2 + |\omega_B(\vec{x}_1)|^2|\omega_A(\vec{x}_1)|^2 \underbrace{\pm 2Re\{\omega_A(\vec{x}_1)\omega_B(\vec{x}_2)\omega_A^*(\vec{x}_1)\omega_B^*(\vec{x}_2)\}}_{\text{Austausch-Dichte}} d^3\vec{x}_1 d^3\vec{x}_2 \tag{4.6}$$

a) Klassische Situation für A und B ohne Überlapp (Austauschdichte $= 0$)

b) Effekt der Statistik nur für starken Überlapp von A und B

4.1.2 He Atom

Kern mit $Z = 2$, 2 e^-

$$H = \underbrace{\frac{\vec{p}_1^2}{2m} + \frac{\vec{p}_2^2}{2m} - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_1} - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_2}}_{H_0} + \underbrace{\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}}}_{V}$$

$r_{12} = |\vec{x}_1 - \vec{x}_2|$
Eigenzustände von H_0 sind Produkte von 'Wasserstoffzustände für $Z = 2$. z.B:

$$|K'\rangle|K''\rangle \equiv |100\rangle|nlm\rangle$$

$$\Rightarrow \phi(\vec{x}_1, \vec{x}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{100}(\vec{x}_1)\psi_{nlm}(\vec{x}_2) \pm \psi_{nlm}(\vec{x}_1)\psi_{100}(\vec{x}_2))$$

$$E^{(1)} = E_1 + E_n$$

mit $E_n = -Z^2 \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 a_0}\frac{1}{2n^2} = -Z^2 \cdot 13,6eV\frac{1}{n^2}$
Energie Shift

$$\Delta = \langle \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0|\vec{x}_1 - \vec{x}_2|}\rangle = I \pm J$$

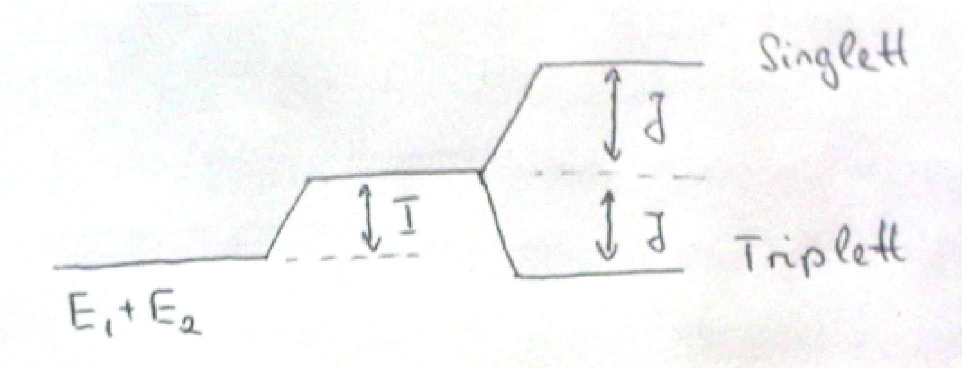
$$I = \int d^3\vec{x}_1 d^3\vec{x}_2 |\psi_{100}(\vec{x}_1)|^2|\psi_{nlm}(\vec{x}_2)|^2 \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0|\vec{x}_1 - \vec{x}_2|} \geq 0$$

$$J = \int d^3\vec{x}_1 d^3x_2 \psi_{100}(\vec{x}_1)\psi_{nlm}(\vec{x}_2)\psi^*_{nlm}(\vec{x}_1)\psi_{100}(\vec{x}_2)\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0|\vec{x}_1 - \vec{x}_2|}$$

Für die Berechnung

$$\frac{1}{|\vec{x}_1 - \vec{x}_2|} \approx \sum_{l,m} \frac{r_<^2}{r_>^{l+1}} Y_{lm}(\theta_1, \phi_1) Y^*_{lm}(\theta_2, \phi_2)$$

Spektrum von He



Ohne $\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2$ Kopplung tritt Spin Aufspaltung auf.
$n = 2, l = 1$: $I \approx 0.06eV$ und $J \approx 0.13eV$