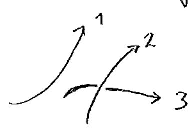
8. Identische Teilchen

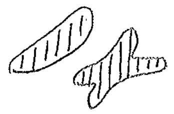
[Fliessbach 46,48; Griffiths 5.1, 5.2]

(bzw. ununterscheidbare Teilchen)

Betrachtet wird ein System mit mehreren identischen Teilchen (dieselbe Masse, Ladung, usw), z.B. ein Atom mit vielen Elektronen. In der klassischen Mechanik sind die Teilchen unterscheidbar, weil jedes seine eigene Bahn hat:



In der Quantenmechanik ist dies nicht der Fall, weil Ortsvektor und Impuls nicht genau bestimmt werden können:



2 oder 3 ?

Diese Tatsache führt zu wichtigen physikalischen Konsequenzen!

Mathematisch: $\hat{H} = \hat{H}(\hat{\vec{p}}_1, \hat{\vec{r}}_1, \hat{\vec{S}}_1; \ldots; \hat{\vec{p}}_N, \hat{\vec{r}}_N, \hat{\vec{S}}_N)$ „N-Teilchen-System"

$|\Psi\rangle = |1; \ldots; N\rangle$

„Paarvertauschungsoperator": $\hat{P}_{ij}\, |\ldots; i; \ldots; j; \ldots\rangle := |\ldots; j; \ldots; i; \ldots\rangle$.

Es gilt $\hat{P}_{ij}^2 = \hat{\mathbb{1}}$, d.h. $\hat{P}_{ij}^{-1} = \hat{P}_{ij}$.

Das System ist symmetrisch, falls $|\Psi\rangle$ & $|\Psi'\rangle = \hat{P}_{ij}|\Psi\rangle$ dieselbe Gleichung erfüllen (vgl. Seite 61):

$$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{P}_{ij} |\Psi\rangle = \hat{H} \hat{P}_{ij} |\Psi\rangle \quad \& \quad i\hbar \frac{d}{dt} |\Psi\rangle = \hat{H} |\Psi\rangle$$

$$\Rightarrow \quad \hat{P}_{ij} \hat{H} = \hat{H} \hat{P}_{ij} \quad \Leftrightarrow \quad [\hat{H}, \hat{P}_{ij}] = \hat{0}.$$

Unter welchen Voraussetzungen ist dies der Fall?

$$* \quad \hat{H}(i;j)\, \hat{P}_{ij}\, |i;j\rangle = \hat{H}(i;j)\, |j;i\rangle$$

$$* \quad \hat{P}_{ij}\, \hat{H}(i;j)\, |i;j\rangle = \hat{H}(j;i)\, |j;i\rangle$$

$\Rightarrow$ falls gilt $\boxed{\hat{H}(i;j) = \hat{H}(j;i)}$. Zum Beispiel:

$$\hat{H} = \ldots + \frac{\hat{\vec{p}}_i^{\,2}}{2m_e} + \frac{\hat{\vec{p}}_j^{\,2}}{2m_e} + \frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|}$$

Bemerkungen:

(i) $[\hat{P}_{ij}, \hat{H}] = \hat{0}$ $\Rightarrow$ die Energie-Eigenzustände können als Eigenzustände von $\hat{P}_{ij}$ gewählt werden. Der Eigenwert von $\hat{P}_{ij}$ ist eine Erhaltungsgrösse.

(ii) Die möglichen Eigenwerte:

$$\hat{P}_{ij}|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle$$
$$|\psi\rangle = \hat{\mathbb{1}}|\psi\rangle = \hat{P}_{ij}^2|\psi\rangle = \lambda^2|\psi\rangle \Rightarrow \lambda = \pm 1.$$

$\lambda = +1$: symmetrische Zustände, $|\ldots; j; \ldots; i; \ldots\rangle = +|\ldots; i; \ldots; j; \ldots\rangle$.

$\lambda = -1$: antisymmetrische Zustände, $|\ldots; j; \ldots; i; \ldots\rangle = -|\ldots; i; \ldots; j; \ldots\rangle$.

(iii) Bis jetzt ging es um eine Wahl, aber eigentlich gibt es in der Natur keine Gelegenheit für eine Wahl! Es gibt einfach zwei Arten von Teilchen:

„Bosonen" (z.B. Photonen): $\lambda = +1$,

„Fermionen" (z.B. Elektronen): $\lambda = -1$.

(iv) Es gibt ein wichtiges Naturgesetz, genannt das Spin-Statistik-Theorem, dessen „Beweis" allerdings erst mit Hilfe relativistischer Quantenfeldtheorie gegeben werden kann [Pauli 1940]:

Spin ganzzahlig $\Leftrightarrow$ Boson,

Spin halbzahlig $\Leftrightarrow$ Fermion.

Beispiel: N unabhängige Fermionen

(Elektronen im Atom bzw. Molekül ?)

$$\hat{H} := \sum_{i=1}^{N} \hat{H}_1(\hat{\vec{p}}_i, \hat{\vec{r}}_i) \quad ; \quad \hat{H}_1(\hat{\vec{p}}, \hat{\vec{r}}) = \frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m} + V(\hat{\vec{r}}) \quad .$$

Also keine direkte Wechselwirkungen wie $\frac{e^2}{|\hat{\vec{r}}_i - \hat{\vec{r}}_j|}$!

(Bzw. diese werden als Störungen behandelt.)

Einteilchenwellenfunktion: $\hat{H}_1 \, \psi_n(\vec{r}, s_z) = E_n \psi_n(\vec{r}, s_z)$.

Eine mögliche Mehrteilchenlösung (symbolisch):

$$\psi(1;\dots;N) \stackrel{?}{=} \psi_{n_1}(1)\,\psi_{n_2}(2) \dots \psi_{n_N}(N)$$

$$\hat{H}\psi = (E_{n_1} + E_{n_2} + \dots + E_{n_N})\,\psi$$

Diese ist aber nicht antisymmetrisch!

Die antisymmetrische Lösung: „Slater-Determinante".

$$\psi(1;\dots;N) := \underbrace{\frac{1}{\sqrt{N!}}}_{\text{Normierung}} \det \begin{pmatrix} \psi_{n_1}(1) & \psi_{n_1}(2) & \dots & \psi_{n_1}(N) \\ \psi_{n_2}(1) & \psi_{n_2}(2) & & \\ \vdots & & \ddots & \\ \psi_{n_N}(1) & & & \psi_{n_N}(N) \end{pmatrix}$$

Bemerkungen:

(i) Falls ein Zustand zweimal auftaucht $(n_i = n_j)$ ist $\psi = 0$, d.h. es gilt das Pauli-Verbot [1925]: alle Fermionen sind in verschiedenen Zuständen!

$\Longrightarrow$ Periodensystem der Elemente.

(ii) Es gilt $\psi = 0$ auch wenn „$1 = 2$",
d.h. $\vec{r}_1 = \vec{r}_2$ und $s_z^{(1)} = s_z^{(2)}$.

So vermeiden zwei Fermionen einander, als gäbe es eine repulsive Wechselwirkung!

Konkret: wie sieht der Heliumgrundzustand in dieser Näherung aus?

Hier muss auch der Spinzustand betrachtet werden, obwohl keine Spins in $\hat{H}$ auftauchen. Addition von zwei Spin-$\frac{1}{2}$-Zuständen:

$$|00\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\,|1+\rangle|2-\rangle - |2+\rangle|1-\rangle\,\right] \qquad \text{antisymmetrisch!}$$

$$\left.\begin{aligned} |1\,1\rangle &= |1+\rangle|2+\rangle \\ |1\,0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\,|1+\rangle|2-\rangle + |2+\rangle|1-\rangle\,\right] \\ |1\,{-1}\rangle &= |1-\rangle|2-\rangle \end{aligned}\right\} \quad \text{symmetrisch!}$$

(vgl. Aufgabe 7.1)

D.h. es gibt zwei Arten von antisymmetrischen Möglichkeiten:

$$\psi_{100}(\vec{r}_1)\,\psi_{100}(\vec{r}_2)\,|0\,0\rangle \qquad \text{„Parahelium"}$$

und z.B.

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\left[\psi_{100}(\vec{r}_1)\psi_{200}(\vec{r}_2) - \psi_{200}(\vec{r}_1)\psi_{100}(\vec{r}_2)\right]|1\,0\rangle \qquad \text{„Orthohelium"}.$$

Die Energie des (Parahelium)-Grundzustandes:

$$E \approx \underbrace{-2\overset{\curvearrowright Z=2}{Z^2} \times 13{,}6\,\text{eV}}_{E_0 \approx -108{,}8\,\text{eV}} + \underbrace{\langle\varphi_0|\,\frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}\,|\varphi_0\rangle}_{gE_0^{(1)} > 0} + \ldots$$

$$\underset{\text{experimentell}}{\approx} -79\,\text{eV}.$$

— ∘ —