English Summary:

1.7 Angular momentum and Spin

Angular momentum commutation relation

$$\boxed{\begin{aligned}[L_j, L_k] &= i\hbar L_\ell \\ [L^2, L_k] &= 0\end{aligned}}$$ $(jk\ell)$ cyclic $\Leftrightarrow$ $\boxed{\underline{L} \times \underline{L} = i\hbar \underline{L}}$

$\Rightarrow$ $\exists$ common eigenstates for L^2, L_3

$$\boxed{\begin{aligned}L^2 |\ell m\rangle &= \hbar^2 \ell(\ell+1) |\ell m\rangle \\ L_3 |\ell m\rangle &= \hbar m |\ell m\rangle\end{aligned}}$$ $$\boxed{\begin{aligned}\ell &= 0, \tfrac{1}{2}, 1, \tfrac{3}{2}, \ldots \\ m &= -\ell, -\ell+1, \ldots, \ell-1, \ell\end{aligned}}$$

Spin $\hat{\underline{S}} = \frac{\hbar}{2} \hat{\underline{\sigma}}$ $\quad \boxed{s = \frac{1}{2},\ m_s = \pm\frac{1}{2}}$ $\quad \hat{\sigma}_3 |\uparrow\rangle = |\uparrow\rangle$, $\hat{\sigma}_3 |\downarrow\rangle = -|\downarrow\rangle$

Pauli's spin matrices:

$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$, $\sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$, $\sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$

spin flip op.

spinor: $|\uparrow\rangle \mathrel{\hat{=}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$, $|\downarrow\rangle \mathrel{\hat{=}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$

2. Vielteilchenquantenmechanik

2.1 Identische Teilchen

Betrachte Systeme identischer Teilchen.

"Identisch" heißt: gleiche Teilcheneigenschaften (Masse, Spin, ...)

Klassisch: Markierung der Teilchen möglich

QM: Identische Teilchen sind grundsätzlich ununterscheidbar

Beispiel: N Elektronen ohne WW

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^{N} \hat{H}_i = \sum_{i=1}^{N} \left(\frac{\hat{p}_i^2}{2m} + V(\hat{r}_i) \right)$$

Ansatz: Produktzustände aus 1-Teilchen-Basis-Zuständen

$$|a_1, a_2, \dots, a_i, \dots, a_N\rangle = |a_1\rangle_1 \, |a_2\rangle_2 \cdots |a_i\rangle_i \cdots |a_N\rangle_N \quad \in \mathcal{H}_N$$

Quantenzahlen z.B. n, l, m, m_s oder $\underline{r}_i, m_{s_i}$

Teilchen-Nr.

$$\mathcal{H}_N = \underbrace{\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_1 \otimes \dots \otimes \mathcal{H}_1}_{N\text{-mal}}$$

$|a_i\rangle$ = Basis in $\mathcal{H}_1$

Schrödingergl. $\hat{H}|a_1 \dots a_N\rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}|a_1 \dots a_N\rangle$

Ortsdarstellung $\hat{H}\psi(q_1 \dots q_N; t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\psi(q_1 \dots q_N; t)$

mit $q_i = (\underline{r}_i, m_{s_i})$ Ort, Spin

- <u>Mikroskopische Teilchen</u> mit gleichen Quantenzahlen sind <u>ununterscheidbar</u>!

Definiere Permutationsoperator $\hat{P}_{(ij)}$ (unitär, hermitesch)

durch $\hat{P}_{(ij)}|a_1, \dots a_i \dots a_j \dots\rangle = |a_1 \dots a_j \dots a_i \dots\rangle$

Zustände der Teilchen mit Nr. i und j vertauscht

Wegen der Ununterscheidbarkeit müssen alle Observablen mit $\hat{P}_{(ij)}$ vertauschen: $[\hat{F}, \hat{P}_{(ij)}] = 0$

insbesondere $[\hat{H}, \hat{P}_{(ij)}] = 0$

$\Rightarrow \hat{P}_{(ij)}$ ist Erhaltungsgröße und es ex. gemeinsame Eigenzustände mit $\hat{H}$

Es gilt $\boxed{\hat{P}_{(ij)}^2 = 1}$ $\quad \hat{P}_{(ij)}\psi = \lambda_{ij}\psi \Longrightarrow$ Eigenwert $\lambda_{ij}^2 = 1$

$$\left(\quad |\underbrace{\hat{P}_{ij}\psi(q_1 \dots q_N; t)}_{\lambda_{ij}\psi}|^2 = |\psi(q_1 \dots q_N; t)|^2 \Rightarrow |\lambda_{ij}|^2 = 1 \quad \right)$$

$\Rightarrow \boxed{\lambda_{ij} = \pm 1}$ Dieser Eigenwert ist ein "ewiges" Charakteristikum des Zustandes!

Speziell <u>2-Teilchensystem</u>:

Sei $|a, b\rangle = |a\rangle_1 |b\rangle_2 \in \mathcal{H} \otimes \mathcal{H}$ ein 2-Teilchenzustand

Dann ist $|a,b\rangle_s := \frac{1}{2}\left(1 + \hat{P}_{(12)}\right)|a,b\rangle$ Eigenzustand von $\hat{P}_{(12)}$ zum Eigenwert $+1$

(<u>Symmetrisch</u>)

denn $\hat{P}_{(12)}|a,b\rangle_s = \frac{1}{2}(\hat{P}_{(12)} + \underbrace{\hat{P}^2_{(12)}}_{1})|a,b\rangle = |a,b\rangle_s$

sowie $|a,b\rangle_a := \frac{1}{2}(1 - \hat{P}_{(12)})|a,b\rangle$ Eigenzustand von $\hat{P}_{(12)}$ zum Eigenwert -1

(<u>antisymmetrisch</u>)

denn $\hat{P}_{(12)}|a,b\rangle_a = \frac{1}{2}(\hat{P}_{(12)} - 1)|a,b\rangle = -|a,b\rangle_a$

<u>N-Teilchensystem</u>

Alle $\hat{P}_{(ij)}$ kommutieren mit $\hat{H}$, aber i.a. <u>nicht</u> untereinander

z.B. $\hat{P}_{(12)}\hat{P}_{(23)}|a,b,c\rangle = \hat{P}_{(12)}|a,c,b\rangle = |c,a,b\rangle$

$\hat{P}_{(23)}\hat{P}_{(12)}|a,b,c\rangle = \hat{P}_{(23)}|b,a,c\rangle = |b,c,a\rangle$

Daher wären komplizierte Symmetrieeigenschaften denkbar (nicht nur symm. oder antisymm.)

<u>Tatsächlich</u> sind in der Natur nur Zustände realisiert, die bei Vertauschung zweier <u>beliebiger</u> ununterscheidbarer Teilchen <u>symmetrisch</u> ($\lambda_{ij} = +1$) oder <u>antisymm.</u> ($\lambda_{ij} = -1$) sind.

$\Rightarrow$ Reduktion des Hilbertraumes $\underbrace{\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_1 \otimes \ldots \otimes \mathcal{H}_1}_{N\text{-mal}}$ auf einen symm. ($\mathcal{H}_N^+$) und einen antisymm. ($\mathcal{H}_N^-$) Teilraum <u>erlaubter</u> Zustände

- Symm./Antisymm. ist ein Charakteristikum der Teilchensorte (bleibt zeitl. erhalten wegen $[H, \hat{P}_{(ij)}] = 0$):

<u>Bosonen</u> (= Teilchen mit symm. Zustand) sind alle Teilchen mit ganzzahligem Spin $s = 0, 1, 2, \ldots$

z.B. Higg-Boson, π-, K-Meson, Gluon, Photon, α-Teilchen, H_2-Molekül, Phonon

"Bose-Einstein-Statistik"

Fermionen (= Teilchen mit antisymm. Zustand) sind alle Teilchen mit halbzahligem Spin $s = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \ldots$

z.B. Elektron, Proton, Neutron, Neutrino, Myon, Quark

"Fermi-Dirac-Statistik"

(Erfahrungstatsache, Beweis folgt aus der relativist. Quantenfeldtheorie: Pauli 1940)

Pauli-Prinzip für Fermionen:

Die Wellenfkt. (bzw. der Vielteilchenzustand) ist total antisymmetrisch

$\Rightarrow$ 2 identische Fermionen können sich nicht in gleichen Einteilchenzuständen $|a\rangle$ befinden (Pauli-Verbot),

denn $$|a,a\rangle_a = \frac{1}{2}\left(1 - \hat{P}_{(12)}\right)|a,a\rangle = \frac{1}{2}\left(|a,a\rangle - |a,a\rangle\right) = 0$$

z.B. $a = (n, l, m, m_s)$ oder $(\underline{r}, m_s)$

Anwendung auf Ortsdarstellung:

Die Wahrscheinl., 2 identische Fermionen am gleichen Ort $\underline{r}$ mit gleichem Spin m_s zu finden, ist Null

- Pauli-Prinzip ist Grundlage für den Aufbau des Periodensystems der Elemente

Gilt nicht für Bosonen!

2.2 (Anti)Symmetrisierungs-Operatoren

Antisymmetrisierungs-Operator:

im 2-Teilchen-Raum: $\hat{A} := \frac{1}{2}(1 - \hat{P}_{(12)})$

im N-Teilchen-Raum: $$\boxed{\hat{A} := \frac{1}{N!} \sum_{\varrho=1}^{N!} (-1)^p \hat{P}_{(\varrho)}}$$

$\hat{P}_{(\varrho)}$ stellt die ϱ-te Permutation von $(1\,2\,3 .. N)$ her.
Es gibt $N!$ Permutationen (incl. $\varrho = 1$ Identität)
p ist die Zahl der Vertauschungen von je 2 Teilchen,
d.h. $(-1)^p = \pm 1$ für $\left\{ \begin{matrix} \text{gerade} \\ \text{ungerade} \end{matrix} \right\}$ Permutationen

$|a_1 a_2 .. a_N\rangle_a = \hat{A}|a_1 \dots a_N\rangle$ antisymm. bei Vertauschung von je 2 Teilchen

z.B. $N=3$: $|a\,b\,c\rangle_a = \frac{1}{6}\{|abc\rangle + |bca\rangle + |cab\rangle - |bac\rangle - |cba\rangle - |acb\rangle\}$

Symmetrisierungs-Operator:

$$\boxed{\hat{S} := \frac{1}{N!} \sum_{\varrho=1}^{N!} \hat{P}_{(\varrho)}}$$

$|a_1 a_2 \dots a_N\rangle_S = \hat{S}|a_1 a_2 .. a_N\rangle$

symm. bei Vertauschung von je 2 Teilchen

$\hat{A}$ und $\hat{S}$ sind hermitesch und idempotent ($\hat{A}^2 = \hat{A}$, $\hat{S}^2 = \hat{S}$)
d.h. orthogonale Projektoren

$\underline{N=2}$: $\hat{S} + \hat{A} = 1 \Rightarrow$ jede 2-Teilchen-Fkt. ist entweder symm. oder antisymm.

projiziert auf $\hat{S}$ ↓ symm. $\mathcal{H}_N^+$, $\hat{A}$ ↓ antisymm. $\mathcal{H}_N^-$ Unterraum des Hilbertraumes $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_1$

$\underline{N>2}$: $\hat{S} + \hat{A}$ projizieren auf echten Teilraum von $\underbrace{\mathcal{H}_1 \otimes \dots \otimes \mathcal{H}_1}_{N\text{-mal}}$

Wechselwirkungsfreie, identische Teilchen

$\hat{H} = \sum_{i=1}^{N} \hat{H}_i$, z.B. $\hat{H}_i = \frac{\hat{p}_i^2}{2m} + V(\underline{r}_i)$

Schrödinger gl. $H|a_1\dots a_N\rangle = E|a_1\dots a_N\rangle$

lässt sich separieren: $|a_1\dots a_N\rangle = |a_1\rangle_1 \dots |a_N\rangle_N$

$\Rightarrow \hat{H}_i |a_i\rangle_i = E_i |a_i\rangle_i \quad$ mit $E = \sum_{i=1}^{N} E_i$

<u>Fermionen</u>: Antisymmetrisierung

$$|a_1\dots a_N\rangle_a = \hat{A}\left(|a_1\rangle_1 \dots |a_N\rangle_N\right) = \frac{1}{N!}\begin{vmatrix} |a_1\rangle_1 & |a_1\rangle_2 & \dots & |a_1\rangle_N \\ |a_2\rangle_1 & |a_2\rangle_2 & \dots & |a_2\rangle_N \\ \vdots & & & \\ |a_N\rangle_1 & |a_N\rangle_2 & \dots & |a_N\rangle_N \end{vmatrix}$$

<u>Slater-Determinante</u>

Determ. verschwindet, wenn 2 Zeilen (d.h. $|a_i\rangle$) gleich sind $\Longrightarrow$ <u>Pauli-Prinzip</u>

<u>Normierung</u> (für orthogonale, normierte 1-Teilchen-Zustände):

$$1 \overset{!}{=} f_N^2 \, {}_a\langle a_1\dots a_N|a_1\dots a_N\rangle_a = f_N^2 \left({}_1\langle a_1|\dots {}_N\langle a_N|\right)\underbrace{\hat{A}\hat{A}}_{\hat{A}}\underbrace{\left(|a_1\rangle_1\dots|a_N\rangle_N\right)}_{\text{Slater-Determ.}}$$

$$= \frac{f_N^2}{N!}\underbrace{\begin{vmatrix} \overbrace{{}_1\langle a_1|a_1\rangle_1}^{1} & \overbrace{{}_2\langle a_2|a_1\rangle_2}^{0} & \dots & {}_N\langle a_N|a_1\rangle_N \\ \vdots & & & \\ \underbrace{{}_1\langle a_1|a_N\rangle_1}_{0} & \underbrace{{}_2\langle a_N|a_N\rangle_2}_{0} & \dots & \underbrace{{}_N\langle a_N|a_N\rangle_N}_{1} \end{vmatrix}}_{1}$$

$\Rightarrow f_N = \sqrt{N!}$

<u>normierten antisymm. Zustände</u>

$$|a_1\dots a_N\rangle^- = \sqrt{N!}\,\hat{A}\left(|a_1\rangle_1\dots|a_N\rangle_N\right) = \frac{1}{\sqrt{N!}}\begin{vmatrix}\text{Slater-} \\ \text{Det.}\end{vmatrix}$$

Ortsdarstellung:

$$\langle \underline{r}_1 \ldots \underline{r}_N | a_1 \ldots a_N \rangle^- = \psi^-(\underline{r}_1 \ldots \underline{r}_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \psi_{a_1}(\underline{r}_1) & \cdots & \psi_{a_1}(\underline{r}_N) \\ \vdots & & \\ \psi_{a_N}(\underline{r}_1) & \cdots & \psi_{a_N}(\underline{r}_N) \end{vmatrix}$$