

English Summary:

1.7 Angular momentum and Spin

Angular momentum commutation relations

$$[L_j, L_k] = i\hbar L_l \quad (\text{jkl}) \text{ cyclic} \Leftrightarrow \boxed{\underline{L} \times \underline{L} = i\hbar \underline{L}}$$

$$[L^2, L_k] = 0 \quad \Rightarrow \exists \text{ common eigenstates for } L^2, L_3$$

$$L^2 |l, m\rangle = \hbar^2 l(l+1) |l, m\rangle$$

$$L_3 |l, m\rangle = \hbar m |l, m\rangle$$

$$l = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \dots$$

$$m = -l, -l+1, \dots, l-1, l$$

$$\text{Spin } \underline{\hat{S}} = \frac{\hbar}{2} \underline{\hat{\sigma}}$$

$$\boxed{s = \frac{1}{2}, m_s = \pm \frac{1}{2}}$$

$$\hat{\sigma}_3 | \uparrow \rangle = | \uparrow \rangle$$

$$\hat{\sigma}_3 | \downarrow \rangle = - | \downarrow \rangle$$

Pauli's spin matrices:

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

spinor:

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

Spin flip op.

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

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

\uparrow Ankerzahlen
 z.B. n, l, m, m_s
 oder r_i, m_{r_i}

\uparrow Teilchen-Nr.
 $\mathcal{H}_N = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_1 \otimes \dots \otimes \mathcal{H}_1$
 $\underbrace{\hspace{10em}}_{N\text{-mal}}$

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

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

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

mit $q_i = (r_i, m_{r_i})$ Ort, Spin

- Mikroskopische Teilchen mit gleichen Ankerzahlen sind ununterscheidbar!

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

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

$\uparrow \quad \uparrow$
 Zustände der Teilchen
 mit Nr. i und j vertauscht

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

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

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

$(\underbrace{|\hat{P}_{(ij)} \psi(q_1 \dots q_N, t)\rangle}_{\lambda_{ij} \psi})^2 = |\psi(q_1 \dots q_N, t)|^2 \Rightarrow |\lambda_{ij}|^2 = 1)$

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

Speziell 2-Teilchensystem :

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

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

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

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

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

N-Teilchensystem

Alle $\hat{P}_{(ij)}$ kommutieren mit \hat{H} , aber is. nicht untereinander

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

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

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

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

\Rightarrow Reduktion des Hilbertraumes $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 \otimes \dots \otimes \mathcal{H}_N$ auf einen symm. (\mathcal{H}_N^+) und einen antisymm. (\mathcal{H}_N^-) Teilraum erlaubter Zustände

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

Bosonen (= Teilchen mit symm. Zustand) sind

alle Teilchen mit ganzzahligen Spin $s = 0, 1, 2, \dots$

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 halbzahligen Spin $s = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \dots$

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

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

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

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

Anwendung auf Orbitalstellung:

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 : $\hat{A} := \frac{1}{N!} \sum_{\rho=1}^{N!} (-1)^P \hat{P}_{(\rho)}$

$\hat{P}_{(\rho)}$ stellt die ρ -te Permutation von $(123..N)$ dar.

Es gibt $N!$ Permutationen (incl. $\rho=1$ Identität)

P ist die Zahl der Vertauschungen von je 2 Teilchen,
d.h. $(-1)^P = \pm 1$ für {gerade / ungerade} Permutationen

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

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

Symmetrisierungs-Operator :

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

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

symm. bei Vertauschung von je 2 Teilchen

\hat{A} und \hat{S} sind hermitisch und idempotent ($\hat{A}^2 = \hat{A}$, $\hat{S}^2 = \hat{S}$)

d.h. orthogonale Projektoren

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

projiziert auf

symm. \mathbb{R}_N^+ antisymm. Unterraum des Hilbertraumes $\mathbb{R}_N^+ \oplus \mathbb{R}_N^-$

$N > 2$: $\hat{S} + \hat{A}$ projizieren auf edler Teilraum $\mathbb{R}_N^+ \oplus \dots \oplus \mathbb{R}_N^-$
N-mal

Wechselwirkungsfrei, identische Teilchen

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

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

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

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

Fermionen: Antisymmetrisierung

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

Slater - Determinante

Determ. verschwindet, wenn 2 Zeilen (d.h. $|a_i\rangle$) gleich sind \Rightarrow Pauli-Prinzip

Normierung (für orthogonale, normierte 1-Teilchen-Zustände):

$$1 \stackrel{!}{=} f_N^2 \langle a_1 \dots a_N | a_1 \dots a_N \rangle_a = f_N^2 (\langle a_1 | \dots \langle a_N |) \underbrace{\hat{A} \hat{A}}_{\text{Slater-Determ.}} (|a_1\rangle_1 \dots |a_N\rangle_N)$$

$$= \frac{f_N^2}{N!} \begin{vmatrix} \langle a_1 | a_1 \rangle_1 & \langle a_1 | a_1 \rangle_2 & \dots & \langle a_1 | a_1 \rangle_N \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \langle a_1 | a_N \rangle_1 & \langle a_1 | a_N \rangle_2 & \dots & \langle a_1 | a_N \rangle_N \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \langle a_N | a_1 \rangle_1 & \langle a_N | a_1 \rangle_2 & \dots & \langle a_N | a_1 \rangle_N \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \langle a_N | a_N \rangle_1 & \langle a_N | a_N \rangle_2 & \dots & \langle a_N | a_N \rangle_N \end{vmatrix}$$

1

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

normierten antisymm. Zustände

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

Ortsdarstellung:

$$\langle r_1 \dots r_N | a_1 \dots a_N \rangle = \psi^-(r_1 \dots r_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \psi_{a_1}(r_1) & \dots & \psi_{a_1}(r_N) \\ \vdots & & \vdots \\ \psi_{a_N}(r_1) & \dots & \psi_{a_N}(r_N) \end{vmatrix}$$