7) Quantentheorie identischer Teilchen

Burgd. 10

Identische Teilchen: ununterscheidbar (gleiche m, S, q ...)

Klassische Mechanik: Trajektorien zweier Teilchen

$$
\begin{aligned}
r_1(t) &= r(t)\,, \qquad r_2(t) = r'(t) \\
p_1(t) &= p(t)\,, \qquad p_2(t) = p'(t)
\end{aligned} \tag{1}
$$

Newtonsche Bewegungsglg. invariant unter $1 \leftrightarrow 2$

$$
\begin{aligned}
r_1(t) &= r'(t)\,, \qquad r_2(t) = r(t) \\
p_1(t) &= p'(t)\,, \qquad p_2(t) = p(t)
\end{aligned} \tag{2}
$$

Teilchen durch Anfangsbedingungen (r, p) unterscheidbar

Diese Möglichkeit haben wir in der QM nicht!

Ziel

Quantenmechanische Beschreibung identischer Teilchen

7.1) Fermionen und Bosonen

Vertauschungs-Symmetrie:

$$H = \sum_i \frac{-\hbar^2 \Delta_i}{2m} + \sum_i V(\vec{r}_i) + \frac{1}{2}\sum_{i \neq j} U(|\vec{r}_i - \vec{r}_j|) \qquad (3)$$

Vertauschungs(Transpositions)-Operator für Teilchen i und j:

$$\mathcal{P}_{ij}\Psi(\vec{r}_1, ..., \vec{r}_i, ...\vec{r}_j, ...\vec{r}_N) = \Psi(\vec{r}_1, ..., \vec{r}_j, ...\vec{r}_i, ...\vec{r}_N) \qquad (4)$$

Symmetrie:

$$[\mathcal{P}_{ij}, H] = 0 \quad \Rightarrow \text{gemeinsames System von EF} \qquad (5)$$

$$\mathcal{P}_{ij}{}^2 = 1 \quad \Rightarrow \text{EW}\pm 1 \qquad (6)$$

Allgemeine Permutationssymmetrie

Betrachten Permutation P_p z.B. $123 \rightarrow 312$: $P_{312} = P_{213}P_{132}$
Jede Permutation P_p schreibbar als n_p Vertauschungen

Idee

Der Eigenwert sollte gleich für alle Vertauschungen sein.
Zwei Möglichkeiten (EW ± 1):

a) Total symmetrischer Fall: $P_p|\Psi_S\rangle = (+1)^{n_p}|\Psi_S\rangle$
genannt: Bosonen

b) Total antisymmetrischer Fall: $P_p|\Psi_A\rangle = \underbrace{(-1)^{n_p}}_{+1:gerade;-1:ungerade}|\Psi_A\rangle$
genannt: Fermionen

Spin-Statistik-Theorem

(Lokale) relativistische Quantenfeldtheorie (4 Dimensionen):
ganzzahliger Spin: total symmetrisch (Bosonen)
halbzahliger Spin: total antisymmetrisch (Fermionen)

7.2) Hartree-Fock-Approximation

Zusammenfassung

Ansatz:

$$\Psi(\vec{r}_1, ...\vec{r}_N) = \sqrt{N!}\, A \prod_{i=1}^{N} \varphi_{\alpha_i}(\vec{r}_i) \tag{7}$$

Energie-Minimierung nach Ritzschen Variationsverfahren
$\Rightarrow$ *Hartree-Fock-Glg.*

$$\left[\frac{-\hbar^2 \Delta}{2m} + V(\vec{r})\right] \varphi_{\alpha_i}(\vec{r}) + \sum_j \int \mathrm{d}^3 r'\, U\left(|\vec{r} - \vec{r}'|\right) |\varphi_{\alpha_j}(\vec{r}')|^2\, \varphi_{\alpha_i}(\vec{r})$$
$$\underbrace{- \sum_j \int \mathrm{d}^3 r'\, U\left(|\vec{r} - \vec{r}'|\right) \varphi_{\alpha_j}(\vec{r})\, \varphi^*_{\alpha_j}(\vec{r}')\, \varphi_{\alpha_i}(\vec{r}')}_{\text{Austausch-Term}} = \epsilon_i\, \varphi_{\alpha_i}(\vec{r}) \tag{8}$$

7.3) Besetzungszahlformalismus und 2. Quantisierung

Gegeben: Basis $B_1 = \{\, |\varphi_i\rangle \,\}$ für 1-Teilchen Hilbertraum $\mathcal{H}_1$

Gesucht: Basis B_N für N-Teilchen Hilbertraum $\mathcal{H}_N$

Idee

$$B_N = \left\{ \underbrace{\overset{S}{A} \frac{\sqrt{N!}}{\sqrt{n_1!n_2!\ldots}} |\varphi_{\alpha_1}\rangle|\varphi_{\alpha_2}\rangle \cdots |\varphi_{\alpha_N}\rangle}_{\equiv |n_1, n_2 \cdots n_i \cdots\rangle} \text{ Besetzungszahldarst.} \right\} \tag{9}$$

Da Teilchen ununterscheidbar, ist Zustand eindeitig durch Besetzungen festgelegt!
Natürliche Darstellung, da es jetzt nicht mehr um Teilchen 1 in Zustand α_1 etc. geht.
Bei Fermionen muss auf die Reihenfolge geachteten werden, da $A|\varphi_1\rangle|\varphi_2\rangle = -A|\varphi_2\rangle|\varphi_1\rangle$

2. Quantisierung

Zusammenfassung

Definition (Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren):

$$a_i^\dagger |n_1, n_2 \cdots n_i \cdots\rangle = \sqrt{n_i + 1}\, |n_1, n_2 \cdots (n_i + 1) \cdots\rangle \quad (10)$$

$$a_i |n_1, n_2 \cdots n_i \cdots\rangle = \sqrt{n_i}\, |n_1, n_2 \cdots (n_i - 1) \cdots\rangle \quad (11)$$

$\Rightarrow$ *(für Bosonen)*

$$[a_i, a_j^\dagger] = \delta_{i,j} \;; \qquad [a_i, a_j] = [a_i^\dagger, a_j^\dagger] = 0 \quad (12)$$

$\Rightarrow$ *(Fermionen)*

$$\{a_i, a_j^\dagger\} = \delta_{i,j} \;; \qquad \{a_i, a_j\} = \{a_i^\dagger, a_j^\dagger\} = 0 \quad (13)$$

Hamiltonian:

$$H = \sum_{\alpha'\alpha} f^{(1)}_{\alpha'\alpha} a^\dagger_{\alpha'} a_\alpha + \sum_{\alpha_1\alpha_2\alpha_3\alpha_4} f^{(2)}_{\alpha_1\alpha_2\alpha_3\alpha_4} a^\dagger_{\alpha_1} a^\dagger_{\alpha_2} a_{\alpha_3} a_{\alpha_4} \quad (14)$$