VIII. Grundlagen der QM von Vielteilchensysteme

VIII.1. N-T-Sgl

bisher $N = 1\,e$, 1T-SGl

jetzt: N Elektronen: SGl gültig

$$\hat{H}_N = \sum_{i=1}^{N} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 + U(\underline{r}_i) \right) + \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j=1 \\ j \neq i}}^{N} V_{ij}$$

$$V_{ij} = V(|r_i - r_j|)$$

NT-SGl: $i\hbar\, \partial_t |\Psi_N(t)\rangle = \hat{H}_N |\Psi_N(t)\rangle$

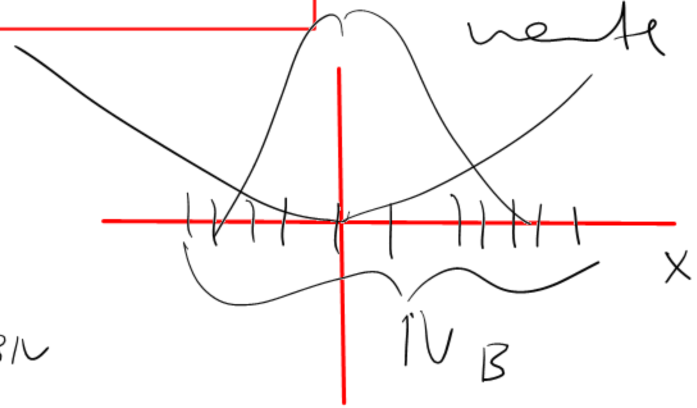
$$\Big\downarrow \langle \underline{r}_1 \ldots \underline{r}_N|$$

Ortsdarstellung: WF $\boxed{\Psi_N(\underline{r}_1, \underline{r}_2 \ldots \underline{r}_N, t)}$: 3N Argumente

$$\langle \underline{r}_1 \ldots \underline{r}_N| = \langle \underline{r}_1|\langle \underline{r}_2| \ldots \langle \underline{r}_N|$$

Ψ_N: Vektor der dim N_B^{3N}

$\hat{A} \to A_{mn}$: Matrix dim $N_B^{3N} \times N_B^{3N}$



expon. Skalierung der Systemgröße mit N

$\Longrightarrow$ Näherungen erforderlich

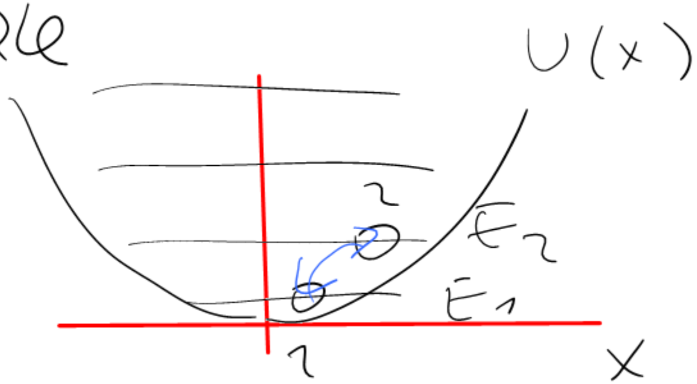
Einfluss der WW: Korrelationen, Abweichung von Faktoris.

Ohne WW: $\Psi(r_1 t) \cdot \Psi(r_2 t) \cdot \ldots\ldots$

Produkt

VIII.2 - Symmetrie der Wellenfunktion

- Unterschiede in Ψ_N für Fermionen / Bosonen
- Symmetrie-Eigenschaften der Wahrscheinlichkeit



$N = 2$ $\quad \underline{r}_1, \underline{r}_2$

(ohne WW)

? Austausch der Teilchen

$$\Psi(r_1, r_2) \xrightarrow{\hat{P}_{12}} \Psi(r_2, r_1)$$

? Einfluss auf

$\hat{H}$ invariant $\rightarrow$ $\hat{H}_N$ Observable

$\hat{P}_{12}$ beeinflusst Physik nicht

$[\hat{P}_{12}, \hat{H}_N] = 0 \rightarrow \hat{P}_{12}, \hat{H}_N$ haben gemeinsame Eigenzustände

Eigenschaften von $\hat{P}_{12}$: $\hat{P}_{12}^2 = 1$

$\hat{P}_{12}^+ = \hat{P}_{12} \longrightarrow$ EW reell (λ_{12})

gem. EW-Problem: $\hat{H}_{12} |\psi(12)\rangle = E_{12} |\psi(12)\rangle$

$$\hat{P}_{12} |\psi(12)\rangle = \lambda_{12} |\psi(12)\rangle$$

$$\hat{P}_{12}^2 |\psi(12)\rangle = \lambda_{12}^2 |\psi(12)\rangle$$

$$= |\psi(12)\rangle$$

$$\Rightarrow \lambda_{12} = \begin{cases} 1 \\ -1 \end{cases}$$

(anti-)symm Wellenfunktion $\Psi^{S/A}$

Linearkomb. aller äquivalenten Darstellungen desselben Zustandes

(1) $|\Psi^S(r_1,r_2)\rangle = C\,\{|\Psi(r_1 r_2)\rangle + |\Psi(r_2 r_1)\rangle\}$

$\rightsquigarrow \hat{P}_{12}|\Psi^S(r_1,r_2)\rangle = |\Psi^S(r_1,r_2)\rangle$

$1 = \langle\Psi^S(r_1 r_2)|\Psi^S(r_1 r_2)\rangle \Longrightarrow C = \frac{1}{\sqrt{2}}$

(2) $|\Psi^A(r_1,r_2)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\{|\Psi(r_1 r_2)\rangle - |\Psi(r_2 r_1)\rangle\}$

$\rightsquigarrow \hat{P}_{12}|\Psi^A_{12}(r_1,r_2)\rangle = -|\Psi^A_{12}(r_1,r_2)\rangle$

Verallgemeinerung: N=3 (QZ: Aufgabe)

$\Psi(123)$: 3! Permutationen (i.a. N!)

T.1 T.2 T.3

$\pm\Psi(213) \pm \Psi(321) \pm \Psi(132)$
$+ \Psi(231) + \Psi(\quad)$

2 Paar-Perm.

N Teilchen: $N!$ Permut. darstellbar durch

N_p Paarpermut.

$+$ N_p gerade $\quad$ $-$, N_p ungerade

Symmetriepostulat: N identische Teilchen werden nur durch vollständig symm. o. antisymm. WF beschrieben

Spinstatistik-Theorem (W. Pauli 1939)

Antisymm.-WF $\Longleftrightarrow$ Fermionen (s halbzahlig)

Symm. WF $\Longleftrightarrow$ Bosonen (ganzzahlig)

3. Fall von composite (zusammengesetzt) Teilchen

komplex von stark gebundenen Elementarteilchen verhält sich wie ein einzelnes Teilchen mit Gesamt-

Spin $= \sum_i s_i$

Bsp.: ∘ Nukleone = Fermione   p, n } je 3 Quarks (= Fermione)

∘ Kerne: gerade Zahl Nukleone → Boson

ungerade " " → Fermion

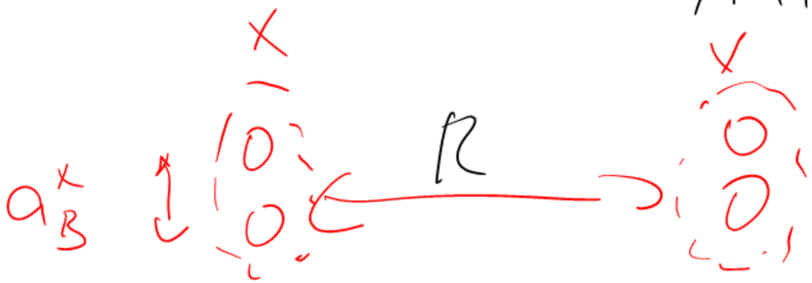
∘ Halbleiter

Anregung äquivalent zu Erzeugung Paares Elektron + Loch (+e)

Attraktive Coulomb-WW $e^- - h^+$

Möglich: Bindg. Zustand (H-ähnlich) = Exziton ≙ Boson

gilt bei großem Abstand



bei Abstand $R \lesssim a_B^x$
Fermionische (innere) Struktur wichtig

4. Struktur der Wellenfkt. für nicht WW-Teilchen

Slater-Determinante / -Permanente

vor (A-ti)Symmetrisierung: $|\psi(12)\rangle = |\psi(1)\rangle \cdot |\psi(2)\rangle$

Bsp. Ortsdarst.: $\psi_{n_i s_i}(\underline{r}_1) \hat{=}$ T 1 am Ort $\underline{r}_1$ in $|n_i s_i\rangle$

$\psi_{n_i s_i}(\underline{r}_2) \hat{=}$ T 2 " " $\underline{r}_2$

Bsp. $N=2$, $$\psi^S_{n_1 s_1, n_2 s_2}(\underline{r}_1, \underline{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \psi_{n_1 s_1}(\underline{r}_1)\psi_{n_2 s_2}(\underline{r}_2) + \psi_{n_1 s_1}(\underline{r}_2)\psi_{n_2 s_2}(\underline{r}_1) \right\}$$

$$\psi^A_{n_1 s_1, n_2 s_2}(\underline{r}_1, \underline{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \qquad\qquad - \qquad\qquad \right\}$$

sei $\boxed{n_2 = n_1, \quad s_2 = s_1}$ beide Produkte identisch

$$\psi^A_{n_1 s_1 n_1 s_1}(r_1, r_2) \equiv 0$$

nicht realisierbar

"Pauli-Prinzip": 2 Fermionen nicht im selben Zustand für Fermionen identisch $= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} \psi_{n_1 s_1}(r_1) & \psi_{n_1 s_1}(r_2) \\ \psi_{n_2 s_2}(r_1) & \psi_{n_2 s_2}(r_2) \end{vmatrix}$

"Slater-Det."

- selbe Struktur für $N \geq 2$ $\quad N \times N$ Matrix
- für Bosonen: ψ^S "Slater-Permanente"

5. Wellenfkt. bei WW.

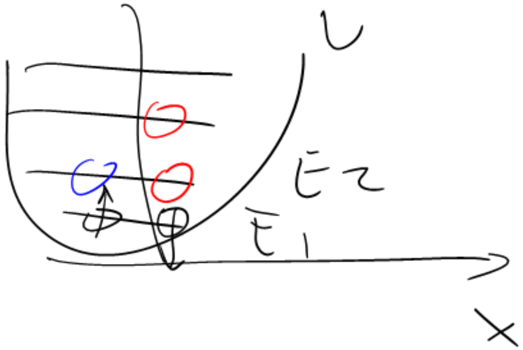
$$|\psi^A(r_1 r_2 \ldots r_N)\rangle = \underbrace{|\psi^{A\,id}(r_1 \ldots r_N)\rangle}_{\text{Sl.-Det}} + \underbrace{\delta|\psi^A(\ldots)\rangle}_{\text{Korrektur}}$$

verwende Slater-Det als Basis in $\mathcal{H}^-$ (Fock-Raum)

enthält ant-symm Zustände

analog $\exists\ \mathcal{H}^+$ (symm Zst.)

? Welche Slaterdet bilden Basis ?



$N=2$

mit WW: zusätzl. Energie-Beiträge

Basis: ψ^A des nicht-WW-Systems (alle Slater-det)

$$|\Psi^A(r_1, r_2 \ldots r_N)\rangle = \sum_I C_I \, |\Psi_I^{id}(r_1, r_2 \ldots r_N)\rangle$$

alle möglichen Kombinationen

mit Stärke der WW wächst Zahl der Summanden

- Verfahren: exakte Diagonalisierung (Configuration Interaction, CI)
  exponentielles Skaling mit Basisgröße N_B

- andere Verfahren optimieren C_I sowie Orbitale (Funktionen) mit WW neu
  dadurch: weniger Summanden

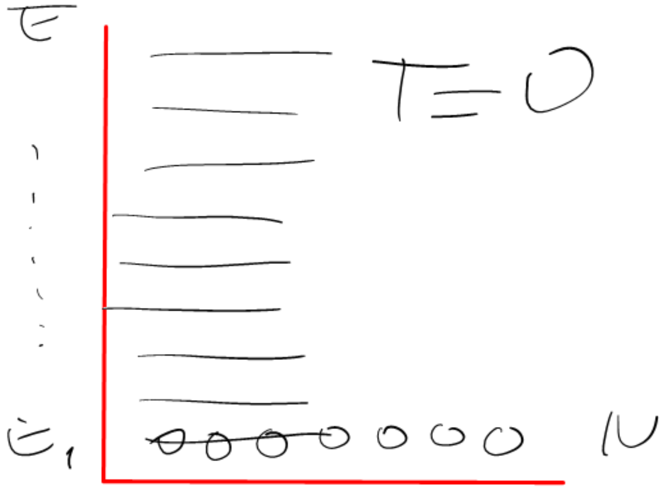
Multiconfiguration Hartree-Fock

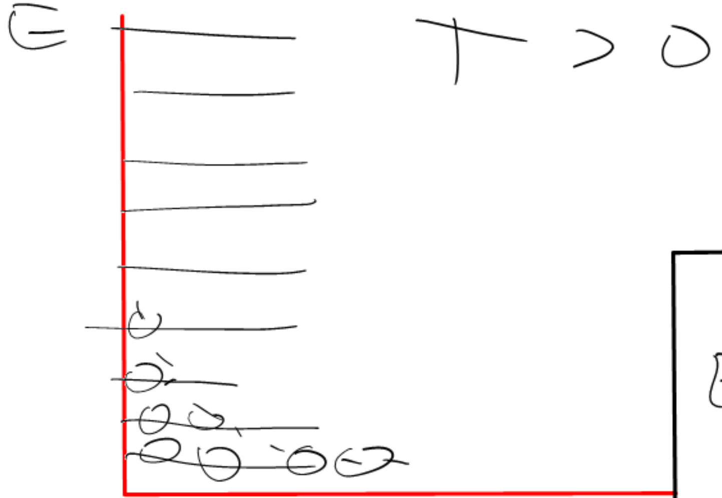
6. Konsequenzen der (A-ti) für makroskop. Systeme

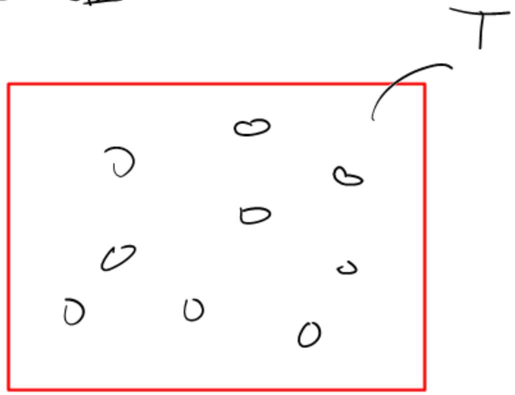
Spinstatistik auch in Makro-System beobachtbar

behandle Fall endliche Temp. T

Bosonen ohne WW

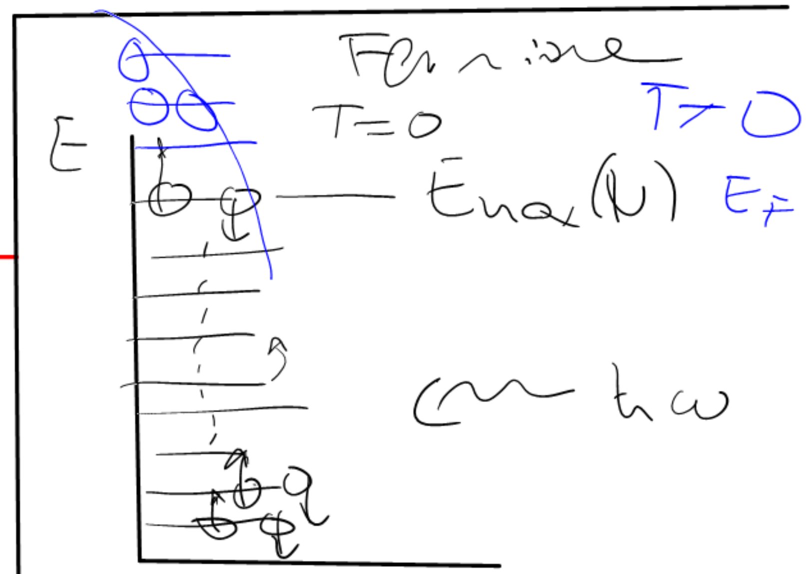






? welche Niveaus nehmen N Teilchen ein?

⇒ sich selbst überlassenes System (isoliert) strebt zum Min. Energie



„Pauli blocking" nur Anregung in unbesetzte Zustände

Bosone: alle in GZ "Bose-kondensat"
(T = 0) mit WW: einige Teilchen
in angeregte Zustände

$E^{Ges} = N \cdot \underbrace{\varepsilon}_{E_1}$

$E_{Ges} \sim N^{\alpha}$

$E_{max}(N) = \underbrace{E^F}_{\text{Fermi-Energie}} \sim \left(\frac{N}{V}\right)^{2/3}$

Astrophysik: kompakte Sterne

$n \sim 10^{30} cm^{-3}$ (Festkörper: $\sim 10^{23} cm^{-3}$)

Gravitation: bevorzugt Konzentration im Zentrum, $R \to 0$

$\rightarrow$ Kollaps, ? was wirkt dagegen?