

# 8 Mehrteilchensysteme

## 8.1 Symmetrie

### 8.1.1 Unterscheidbarkeit von Elementarteilchen

Wir diskutieren im Folgenden Systeme von mehreren Teilchen. Diese werden formal in einem Hilbertraum dargestellt, welcher dem direkten Produkt (Tensorprodukt) der Hilberträume der einzelnen Teilchen entspricht,

$$\mathfrak{H} = \mathfrak{H}_1 \otimes \mathfrak{H}_2 \otimes \dots \mathfrak{H}_N.$$

So lange es sich dabei um unterschiedliche Teilchen handelt, also z.B. um ein Proton und ein Elektron, ist dies relativ unproblematisch. Wenn es sich aber z.B. um mehrere gleichartige Teilchen, z.B. um mehrere Elektronen handelt, ergeben sich spezielle Konsequenzen aus der Quantenmechanik. Der entscheidende Punkt dabei ist, dass quantenmechanische identische Teilchen grundsätzlich nicht unterscheidbar sind. Wir können also nur die Anzahl  $N$  der Elektronen in einem Atom oder einem Kondensator bestimmen. Wird ein Elektron davon entfernt, so ist es aber grundsätzlich nicht möglich, zu sagen, welches Elektron entfernt wurde, oder welche  $N - 1$  Elektronen zurückgeblieben sind. Dies ist ein fundamentaler Unterschied im Vergleich zu klassischen Systemen: jedes klassische Objekt kann z.B. so markiert werden, dass wir es später wieder erkennen.

Mathematisch bedeutet dies, dass jede Observable  $A$  mit dem Permutationsoperator  $P$  vertauscht,

$$[A, P] = 0.$$

Die physikalische Konsequenz ist u.a., dass jedes Teilchen einer bestimmten Sorte exakt gleichen Eigenschaften, wie z.B. Ladung, Masse etc. besitzt. Diese werden deshalb zu Recht als Naturkonstanten bezeichnet.

Das System von  $N$  identischen Teilchen sei charakterisiert durch einem Hamiltonoperator

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}(1, 2, \dots, N)$$

und einer Zustandsfunktion

$$\Psi = \Psi(1, 2, \dots, N).$$

Dabei stehen die Zahlen, wie z.B. das 1 an der ersten Stelle, für alle Koordinaten des entsprechenden Teilchens, also z.B. beim Teilchen 1

$$1 \rightarrow \vec{r}_1, \chi_1,$$

wobei  $\vec{r}_1$  einen Ortsvektor und  $\chi_1$  einen Spinzustand bezeichnen.

### 8.1.2 Vertauschung von 2 Teilchen

Da die Teilchen ununterscheidbar sind, bleibt die Energie des Systems, wie auch jede andere Observable, die gleiche, wenn zwei Teilchen den Platz getauscht werden,

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= \mathcal{H}(1, \dots, i, \dots, j, \dots, N) \\ &= \mathcal{H}(1, \dots, j, \dots, i, \dots, N). \end{aligned}$$

Wir betrachten als einfachstes Beispiel zwei Spin-1/2 Teilchen. Wie wir im Kapitel "Drehimpuls" gesehen hatten, können diese zu vier Zweiteilchen-Zuständen kombiniert werden:

$$\begin{aligned} |\Psi_1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow_1 \downarrow_2\rangle - |\downarrow_1 \uparrow_2\rangle) \\ |\Psi_2\rangle &= |\uparrow \uparrow\rangle \\ |\Psi_3\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow \downarrow\rangle + |\downarrow \uparrow\rangle) \\ |\Psi_4\rangle &= |\downarrow \downarrow\rangle. \end{aligned} \tag{8.1}$$

Wir beschreiben die Vertauschung der beiden Teilchen mit dem Operator  $P$ :

$$P\Psi(1, 2) = \Psi(2, 1).$$

Dieser Operator ist hermite'sch und unitär. Da  $P^2 = \mathbf{1}$  kann  $P$  die Eigenwerte  $+1$  oder  $-1$  haben.

Offenbar gilt für die Zustände (8.1)

$$P|\Psi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow_2\downarrow_1\rangle - |\downarrow_2\uparrow_1\rangle) = -|\Psi_1\rangle$$

$$P|\Psi_k\rangle = |\Psi_k\rangle \quad k = \{2, 3, 4\}.$$

Offenbar ist der Singulett Zustand antisymmetrisch (Eigenwert  $-1$ ), die Triplett-Zustände sind symmetrisch (Eigenwert  $+1$ ).

### 8.1.3 Transposition und Permutation

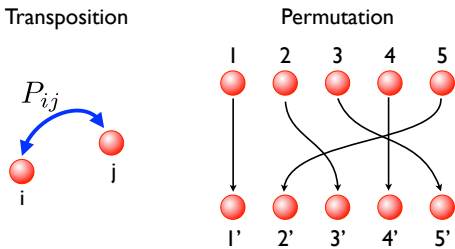


Abbildung 8.1: Transposition zweier Teilchen und Permutation von Koordinaten.

Für ein allgemeines System mit  $N$  identischen Teilchen führen wir den Transpositionsoperator  $P_{ij}$  ein, welcher die beiden Teilchen  $i$  und  $j$  vertauscht:

$$P_{ij}\Psi(1, \dots, i, \dots, j, \dots, N)$$

$$= \Psi(1, \dots, j, \dots, i, \dots, N).$$

Offensichtlich gilt

$$P_{ij}^2\Psi(1, \dots, i, \dots, j, \dots, N)$$

$$= \Psi(1, \dots, i, \dots, j, \dots, N),$$

d.h. wir erhalten wieder den Ausgangszustand. Somit hat der Operator  $P_{ij}^2 = \mathbf{1}$  für jeden beliebigen Zustand den Eigenwert  $1$ . Für den Operator  $P_{ij}$  bleiben damit zwei mögliche Eigenwerte,  $\pm 1$ .

Wir betrachten als nächstes Permutationsoperatoren  $P$ , welche die Koordinaten einer Menge von Teilchen so umordnen,

$$P\Psi(1, \dots, N) = \Psi(P(1), \dots, P(N)),$$

dass alle vorhandenen Koordinaten genau einem Teilchen zugeordnet werden. Die Menge aller  $N!$  Operatoren  $P_i$  bildet eine Gruppe, die symmetrische Gruppe  $S_N$ . Jedes Element dieser Gruppe kann durch ein Produkt von Transpositionsoperatoren dargestellt werden

$$P_i = \prod P_{jk}.$$

Die Eigenwerte dieser Operatoren sind damit durch ein Produkt aus den Eigenwerten der Transpositionsoperatoren gegeben. Wir können die Elemente dieser Gruppe in gerade oder ungerade Permutationen unterteilen, je nachdem ob sie durch eine gerade oder ungerade Zahl von Transpositionen gebildet werden. Als Beispiel betrachten wir die Permutationen von 3 Teilchen. Offenbar gibt es  $3! = 6$  Permutationen. Jeweils die Hälfte sind gerade und ungerade:

gerade	(123)	(231)	(312)
ungerade	(213)	(321)	(132)

Für alle Elemente dieser Gruppe gilt

$$P\mathcal{H} = \mathcal{H}P \quad [P, \mathcal{H}] = 0,$$

was natürlich nur ein anderer Ausdruck dafür ist, dass der Hamiltonoperator symmetrisch ist unter Vertauschung der Koordinaten. Damit können wir den Erwartungswert des Hamiltonoperators (oder jedes beliebigen symmetrischen Operators) für den Zustand  $\langle P\Psi |$  schreiben als

$$\langle P\Psi | \mathcal{H} | P\Psi \rangle = \langle \Psi | P^\dagger \mathcal{H} P | \Psi \rangle$$

$$= \langle \Psi | P^\dagger P \mathcal{H} | \Psi \rangle = \langle \Psi | \mathcal{H} | \Psi \rangle,$$

d.h. die beiden Erwartungswerte sind identisch. Es ist somit möglich und sinnvoll, die Eigenzustände des Hamiltonoperators so zu wählen, dass sie gleichzeitig Eigenzustände des Permutationsoperators sind. Wir werden im folgenden deshalb die Eigenzustände des Hamiltonoperators nach Eigenwerten der Permutationsoperatoren klassifizieren.

### 8.1.4 Bosonen und Fermionen

Die beiden Eigenwerte des Transpositionsoperators,  $\pm 1$ , sind beide in der Natur verwirklicht, d.h. es

gibt Teilchen, deren Zustandsfunktion bezüglich einer Vertauschung von Teilchenindizes symmetrisch ist (d.h. Eigenwert = +1) und andere Teilchen, deren Zustandsfunktion unter Vertauschung antisymmetrisch ist (d.h. Eigenwert = -1). Die erste Klasse von Teilchen, bei denen

$$P_{ij}\Psi(1, \dots, i, \dots, j, \dots, N) = +\Psi(1, \dots, j, \dots, i, \dots, N),$$

wird als Bosonen bezeichnet, die zweite mit

$$P_{ij}\Psi(1, \dots, i, \dots, j, \dots, N) = -\Psi(1, \dots, j, \dots, i, \dots, N),$$

als Fermionen. Die gemeinsame Eigenschaft aller Bosonen ist, dass ihr Spin ganzzahlig ist, während Fermionen halbganzen Spin aufweisen. Diese Beziehung zwischen Spin und Eigenwert des Transpositionsoperators kann in diesem Rahmen nicht hergeleitet werden, sondern muss als Postulat der Quantenmechanik verstanden werden. Eine Begründung lieferte Pauli mit Hilfe der relativistischen Quantenmechanik (Phys. Rev. 58, 716 (1940)). Es besteht ein Zusammenhang mit dem Verhalten eines Spins unter einer Rotation um  $2\pi$ : Dabei wird der Zustand mit einem Phasenfaktor  $e^{i2\pi I}$  multipliziert. Bei einem Fermion ist dies =-1, bei einem Boson +1.

Tabelle 8.1 zeigt, welche Teilchen in welche Kategorien gehören.

Diese Mitglieder des "Teilchenzoos" lernen Sie in der Vorlesung "Einführung in die Kern- und Teilchenphysik" näher kennen. Bei den Teilchen, die wir heute als "elementar" betrachten, d.h. Quarks, Leptonen, und die Träger der Kräfte, d.h. Gluonen, Vektorbosonen und Photonen, sind Träger der Kräfte jeweils Bosonen, während die Bauteile der Materie, nämlich Quarks und Leptonen, Fermionen sind.

Die Unterscheidung der Teilchen in Fermionen und Bosonen anhand des Spins gilt auch für zusammengesetzte Teilchen: Ein Baryon, z.B., ist aus drei Quarks zusammengesetzt, welche jeweils Fermionen sind. Sein Spin ist somit gebrochen und es ist selbst ein Fermion. Mesonen hingegen sind aus jeweils 2 Quarks zusammengesetzt und sind damit Bosonen. Dies geht auch über mehrere Stufen und die

Zusammensetzung unterschiedlicher Teilchen: Ein  ${}^3\text{He}$  Atom besteht aus 2 Protonen, einem Neutron und 2 Elektronen, also aus 5 Fermionen. Es ist damit selber ein Fermion, während ein  ${}^4\text{He}$  ein zusätzliches Neutron enthält und damit ein Boson ist. Allgemein sind zusammengesetzte Teilchen Fermionen wenn sie eine ungerade Zahl von Fermionen enthalten, und Bosonen, wenn sie eine gerade Zahl von Fermionen enthalten.

### 8.1.5 Das Pauli-Prinzip

Eine besonders wichtige Konsequenz der Antisymmetrie beim Vertauschen der Koordinaten von Fermionen erhalten wir, wenn wir einen Zustand betrachten, in dem zwei identische Teilchen im gleichen Zustand sind, d.h.  $\vec{r}_i = \vec{r}_j$  und  $\chi_i = \chi_j$ . Wir schreiben diesen Zustand als  $\Psi(1, \dots, i, \dots, i, \dots, N)$ . Da Systeme von Fermionen unter dem Austausch zweier Teilchen antisymmetrisch sein müssen, muss dieser Zustand sowohl symmetrisch wie auch antisymmetrisch sein

$$\Psi(1, \dots, i, \dots, i, \dots, N) = -\Psi(1, \dots, i, \dots, i, \dots, N) = 0,$$

d.h. er muss verschwinden. Das heißt, dass Fermionen nie in identischen Zuständen auftreten können. Dieses Prinzip wird als Ausschließungsprinzip oder Pauli-Prinzip bezeichnet. Es war 1925 von Pauli zunächst für Elektronen formuliert worden: Elektronen müssen immer durch antisymmetrische (bezüglich des Austausches von zwei Elektronen) Zustandsfunktionen beschrieben werden.

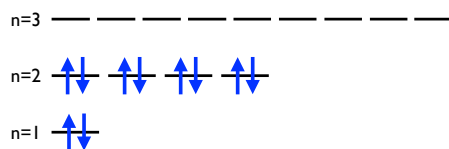


Abbildung 8.2: Besetzung von Orbitalen.

Für Systeme mit diskreten Zuständen, wie z.B. Atome kann man dies auch anders formulieren: Jeder Zustand kann maximal von einem Elektron besetzt werden. Zustand beinhaltet dabei die Raum- und

Bosonen: Spin $S=0,1,2,..$	Fermionen: Spin $S = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}, \dots$
Eigenwert bei Transposition = +1	Eigenwert bei Transposition = -1
Mesonen: $\pi, K(s=0), \rho, \omega(s=1)$	Leptonen: $\nu_e, \nu_\mu, \nu_\tau, e, \mu, \tau$
Photon $\gamma(s=1)$	Baryonen: $p, n, \Lambda, \Sigma, \Omega$
$W^\pm, Z^0(s=1)$	Quarks: $u, c, t(+\frac{2}{3}e); d, s, b(-\frac{1}{3}e)$
Gluonen( $s=1$ )	
$^4\text{He} (s=0)$	$^3\text{He} (s=\frac{1}{2})$

Tabelle 8.1: Vergleich Bosonen / Fermionen

Spinkoordinaten. Da der Spin eines Elektrons zwei mögliche Zustände umfasst, kann jeder räumliche Zustand von maximal zwei Elektronen mit entgegengesetztem Spin besetzt werden.

### 8.1.6 Konsequenzen des Pauli-Prinzips

Obwohl das Pauli-Prinzip nur für identische Elementarteilchen gilt, bedeutet dies keineswegs, dass es für makroskopische Körper keine Auswirkungen hat.

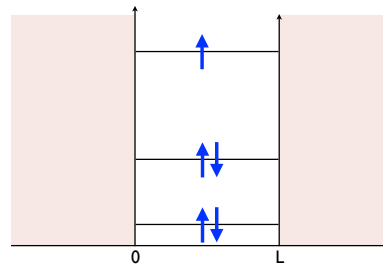


Abbildung 8.4: Besetzung von Zuständen in einem Potenzialtopf.

Group	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	
Period																			
1	H																		He
2	Li	Be								B	C	N	O	F	Ne				
3	Na	Mg								Al	Si	P	S	Cl	Ar				
4	K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr	
5	Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe	
6	Cs	Ba	*Lu	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn	
7	Fr	Ra	**Lr	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Ds	Rg	Cn	Uut	Uuq	Uup	Uuh	Uus		
*Lanthanoids			*La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb			
**Actinoids			**Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No			

Abbildung 8.3: Das periodische System der Elemente.

Er ist im Gegenteil unverzichtbar, wenn wir z.B. das Periodensystem der Elemente oder chemische Bindungen oder den Unterschied zwischen Metallen, Halbleitern und Isolatoren verstehen wollen. Wir betrachten z.B. das Teilchen im Potenzialtopf, das im Kapitel 3.2 über eindimensionale Probleme diskutiert worden war.

Wie wir gesehen hatten gibt es hier eine Reihe von Zuständen, welche sich durch die Anzahl der Kno-

ten unterscheiden. Wenn wir ein einzelnes Elektron in einen solchen Potenzialkasten einfüllen und ihm erlauben, Energie abzugeben - wie soll hier nicht diskutiert werden - so wird es in den Grundzustand dieses Systems fallen. Wenn wir ein zweites Elektron einfüllen, so kann dieses ebenfalls in den Grundzustand gehen, sofern sein Spin antiparallel zum Spin des ersten Elektrons ist.

Das dritte Elektron, das in dieses Potenzial eingefüllt wird, kann nicht mehr in den (Orts-)Grundzustand gehen, da es sonst den gleichen Quantenzustand wie eines der bereits vorhandenen Elektronen aufweisen würde. Es wird stattdessen den ersten angeregten Zustand besetzen. Das vierte wird mit entgegengesetztem Spin in den gleichen Zustand gehen usw.

Die Tatsache, dass Elektronen immer nur maximal paarweise, mit entgegengesetztem Spin einen Zustand besetzen können, führt z.B. dazu, dass in Molekülen immer paare von Elektronen Bindungen zwischen den Atomen erzeugen. Dies wird später, im Kapitel "chemische Bindung" noch ausführlicher diskutiert werden.

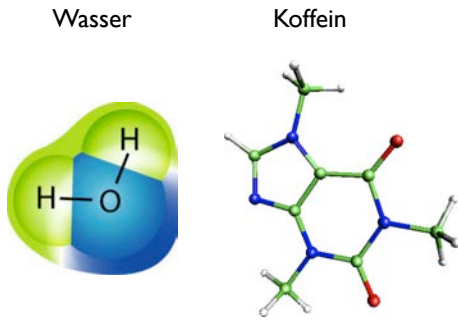


Abbildung 8.5: Moleküle mit chemischen Bindungen zwischen Atomen.

## 8.2 Mehrteilchensysteme ohne Wechselwirkung

### 8.2.1 Produktzustände

Wir betrachten ein System von  $N$  identischen Teilchen ohne Wechselwirkung. Der Hamiltonoperator enthält dann die kinetische Energie der  $N$  Teilchen, sowie die potenzielle Energie dieser Teilchen in einem äußeren Potenzial. Er kann somit geschrieben werden als

$$\mathcal{H} = \sum_i \mathcal{H}_1(i),$$

wobei  $\mathcal{H}_1(i)$  den Einteilchen-Hamiltonoperator des  $i$ ten Teilchens darstellt.

Die Zustandsfunktion des  $n$ -Teilchen Systems hängt somit von  $N$  Koordinaten  $i = (\vec{r}_i, \chi_i)$  ab. Wir machen zunächst einen Produktansatz

$$\Psi_n(1, 2, \dots, N) = \phi_1(1)\phi_2(2) \dots \phi_N(N),$$

wobei  $\phi_i(j)$  eine Einteilchenfunktion darstellt, die von der  $j$ -ten Koordinate abhängt. Die verschiedenen Einteilchenfunktionen werden durch den Index  $i$  unterschieden.

Jeder Einteilchenoperator wirkt auf eine einzelne Einteilchenfunktion,

$$\mathcal{H}_1(i)\phi_i(i) = \mathcal{E}_i\phi_i(i).$$

Die Energie des Produktzustandes ist dann offenbar gegeben durch die Summe der Energien der Einteilchenzustände

$$\mathcal{H}\Psi_n = \mathcal{E}\Psi_n = \sum_i \mathcal{E}_i\Psi_n,$$

wie wir es erwarten.

Allerdings ist dieser Zustand weder symmetrisch noch antisymmetrisch beim Vertauschen von 2 Teilchenkoordinaten. Für den Fall eines Systems von 2 Teilchen haben wir

$$\Psi_2(1, 2) = \phi_1(1)\phi_2(2).$$

Durch Vertauschen geht er über in

$$P_{12}\Psi_2(1, 2) = \phi_2(1)\phi_1(2).$$

Wie wir bereits gezeigt haben hat dieser Zustand die gleiche Energie wie der Ausgangszustand. Er unterscheidet sich aber vom Ausgangszustand nicht nur um einen Phasenfaktor. Damit hätten wir zwei unterscheidbare Zustände mit der gleichen Energie; allgemein kann es bis zu  $N!$  entartete Zustände von  $N$  Teilchen geben. Da sie durch Austausch der Teilchen zustande kommen, bezeichnet man dies als "Austausch-Entartung". Da dies im Widerspruch mit experimentellen Daten ist, schließen wir, dass dies nicht die korrekten Eigenzustände sind.

### 8.2.2 Symmetrieangepasste Zustände

Wir können symmetrieangepasste Zustände bilden, indem wir entsprechende Linearkombinationen der beiden Zustände bilden:

$$\Psi_{2\pm}(1, 2) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_1(1)\phi_2(2) \pm \phi_2(1)\phi_1(2)).$$

Vertauschen der Teilchenkoordinaten führt diese beiden Zustände über in

$$\begin{aligned} P_{12}\Psi_{2\pm}(1, 2) &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_1(2)\phi_2(1) \pm \phi_2(2)\phi_1(1)) \\ &= \pm\Psi_{2\pm}(1, 2). \end{aligned}$$

Die symmetrische Linearkombination hat somit den Eigenwert  $+1$ , die antisymmetrische den Eigenwert  $-1$ .

Für eine größere Zahl von Teilchen kann man analoge Konstruktionen bilden. Es ist dort etwas weniger leicht zu erkennen, welche Linearkombinationen

symmetrisch, resp. antisymmetrisch sind. Eine systematische Prozedur, welche Zustände mit der benötigten Eigenschaft liefert, ist folgende: Man adiiert alle möglichen Permutationen, wobei gerade Permutationen immer mit +1 multipliziert werden, ungerade Permutationen mit -1 für Fermionenzustände, mit +1 für bosonische (d.h. symmetrische) Zustände.

$$\Psi_{Fermi} = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{P_i} \text{sgn}(P_i) \cdot P_i(\phi_1(1)\phi_2(2)\dots\phi_N(N)).$$

Die Summe läuft über alle  $N!$  möglichen Permutationen der Einteilchenfunktionen und der Normierungsfaktor ist gegeben durch die Quadratwurzel aus dieser.  $P_i(\dots)$  ist die  $i$ -te Permutation der Argumente und  $\text{sgn}(P_i)$  ist die Signatur der Permutation: -1 für ungerade Permutationen, +1 für gerade Permutationen. Dieses Verfahren für Fermionen wird als Slater-Determinante bezeichnet: das gleiche Verfahren benutzt man für die Berechnung einer Determinante, welche ebenfalls antisymmetrisch ist bezüglich Vertauschen von zwei Zeilen oder Kolonnen.

$$\frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \phi_1(1) & \phi_1(2) & \dots & \phi_1(N) \\ \phi_2(1) & \phi_2(2) & \dots & \phi_2(N) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \phi_N(1) & \phi_N(2) & \dots & \phi_N(N) \end{vmatrix}.$$

Wie aus der linearen Algebra bekannt, verschwindet die Determinante einer Matrix, wenn zwei Zeilen oder Kolonnen proportional sind zueinander. Dies ist offenbar dann der Fall, wenn zwei Funktionen  $\phi_i$  identisch sind. Für Bosonen gilt entsprechend

$$\Psi_{Bose} = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{P_i} P_i(\phi_1(1)\phi_2(2)\dots\phi_N(N)).$$

Hier haben wir angenommen, dass jede Einteilchenfunktion nur einmal auftritt. Dieser Zustand ist offenbar symmetrisch unter beliebigen Permutationen.

### 8.2.3 Symmetrie von Spinfunktionen

Bis jetzt haben wir nicht unterschieden zwischen räumlichen und Spinkoordinaten. Dies werden wir

im Folgenden explizit machen. Wir schreiben die Gesamt-Zustandsfunktion als Produkt einer Gesamt-Raumfunktion und einer Gesamt-Spinfunktion,

$$\Psi = \Psi_{Raum}(\vec{x}_i)\Psi_{Spin}(\chi_i).$$

Dies ist immer dann möglich, wenn der Hamiltonoperator die Raum- und Spinkoordinaten nicht koppelt.

Wir betrachten zunächst den Fall von zwei unabhängigen Elektronen, d.h. Fermionen mit Spin 1/2. Die Gesamt-Spinfunktion ist gegeben durch die Vektorsumme der beiden einzelnen Spinfunktionen,

$$\vec{S} = \vec{S}_1 + \vec{S}_2.$$

Offenbar haben wir vier Möglichkeiten, die jeweils zwei Spinfunktionen der beiden Elektronen zu kombinieren:

$$|\uparrow\uparrow\rangle, |\uparrow\downarrow\rangle, |\downarrow\uparrow\rangle, |\downarrow\downarrow\rangle.$$

Wir suchen jetzt die Eigenwerte des Gesamtspins und seiner  $z$ -Komponente  $S_z$ . Letztere ist offenbar

$$\begin{aligned} S_z|\uparrow\uparrow\rangle &= \hbar|\uparrow\uparrow\rangle \\ S_z|\uparrow\downarrow\rangle &= S_z|\downarrow\uparrow\rangle = 0 \\ S_z|\downarrow\downarrow\rangle &= -\hbar|\downarrow\downarrow\rangle, \end{aligned}$$

d.h. die Eigenwerte sind  $+\hbar$ , 0 und  $-\hbar$ .

Um den Eigenwert des Gesamtspin-Operators zu finden, schreiben wir diesen als

$$\begin{aligned} \vec{S}^2 &= (\vec{S}_1 + \vec{S}_2)^2 = \vec{S}_1^2 + \vec{S}_2^2 + 2\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 \\ &= \vec{S}_1^2 + \vec{S}_2^2 + 2S_{1z}S_{2z} + S_{1+}S_{2-} + S_{1-}S_{2+}. \end{aligned}$$

Die beiden Operatoren  $\vec{S}_1^2$  und  $\vec{S}_2^2$  haben für Spin-1/2 Teilchen immer den Eigenwert

$$\hbar^2 \frac{1}{2} \frac{3}{2} = \hbar^2 \frac{3}{4}.$$

Damit können wir für die beiden parallelen Spinzustände die Wirkung des Operators ausrechnen:

$$\begin{aligned} \vec{S}^2|\uparrow\uparrow\rangle &= \left( \vec{S}_1^2 + \vec{S}_2^2 + 2S_{1z}S_{2z} + S_{1+}S_{2-} \right. \\ &\quad \left. + S_{1-}S_{2+} \right) |\uparrow\uparrow\rangle = \frac{3}{4} |\uparrow\uparrow\rangle. \\ \vec{S}^2|\downarrow\downarrow\rangle &= \frac{3}{4} |\downarrow\downarrow\rangle. \end{aligned}$$

Somit besitzen diese beiden Zustände den Gesamtspin  $S = 1$  und  $S_z = \pm 1$ .

Wir wenden jetzt den Operator  $S_- = S_{1-} + S_{2-}$  auf den Zustand  $|\uparrow\uparrow\rangle$  an. Wir erhalten

$$\begin{aligned} S_-|\uparrow\uparrow\rangle &= (S_{1-} + S_{2-})|\uparrow\uparrow\rangle \\ &= \hbar(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle). \end{aligned}$$

Somit ist der entsprechende normierte Zustand

$$|1,0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle)$$

ein Eigenzustand von  $\vec{S}$  und  $S_z$  mit den Eigenwerten 1, 0. Wir untersuchen jetzt die Symmetrie dieser Zustände bezüglich Vertauschung der Teilchenkoordinaten. Die drei Zustände

$$\begin{aligned} |S, S_z\rangle = |1, 1\rangle &= |\uparrow\uparrow\rangle \\ |1, 0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle) \\ |1, -1\rangle &= |\downarrow\downarrow\rangle \end{aligned}$$

sind offenbar alle symmetrisch unter Vertauschung der Koordinaten, d.h. sie sind Eigenzustände des Transpositionsoperators mit Eigenwert +1. Gleichzeitig spannen sie zusammen den Hilbertraum für den Gesamtspin  $S = 1$  auf. Sie werden deshalb als Spintriplett bezeichnet.

Der vierte normierte Zustand, der zu diesen drei Zuständen orthogonal ist, ist die antisymmetrische Linearkombination

$$|10,0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle).$$

Hier ist der Eigenwert des Permutationsoperators offenbar -1. Der Gesamtspin ist  $S = 0$  und dieser einzelne Zustand wird als Singulett bezeichnet.

## 8.2.4 Statistik

Eine der wichtigsten Unterschiede zwischen Bosonen, Fermionen und klassischen oder unterscheidbaren Teilchen ist die sich ergebende Statistik. Sind alle möglichen Zustände gleich besetzt, so erhält man

für die drei Fälle unterschiedliche Verteilungen. Wir betrachten den einfachsten Fall: Es seien 2 Teilchen vorhanden, und diese können jeweils zwei mögliche Zustände einnehmen, die wir als  $|\uparrow\rangle$  und  $|\downarrow\rangle$  bezeichnen. Dann gibt es grundsätzlich r mögliche Messresultate für 2 Teilchen:  $\uparrow\uparrow$ ,  $\uparrow\downarrow$ ,  $\downarrow\uparrow$ , und  $\downarrow\downarrow$ . Hier steht  $\uparrow\downarrow$ ,  $\downarrow\uparrow$  dafür, dass die beiden Teilchen sich in unterschiedlichen Zuständen befinden, ohne dass wir eine Aussage über die Zuordnung machen. Dann sind die Wahrscheinlichkeiten für

Teilchen	$\uparrow\uparrow$	$\downarrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow, \downarrow\uparrow$
unterscheidbar	1/4	1/4	1/2
Bosonen	1/3	1/3	1/3
Fermionen	0	0	1

## 8.3 Phänomenologie

Wir betrachten jetzt nochmals einige Konsequenzen der unterschiedlichen Eigenschaften von Fermionen und Bosonen.

### 8.3.1 Fermi-Dirac Statistik

Ein wichtiger Fall von Fermionen sind die Elektronen in einem Metall oder Halbleiter: In guter Näherung kann man diese so beschreiben, dass sie sich im Festkörper frei bewegen, d.h. ihre Energie wird nur durch die kinetische Energie bestimmt. Die Wechselwirkung zwischen den Elektronen wird in dieser Näherung vernachlässigt, resp., durch eine Änderung des Potentials als Mittelwert berücksichtigt. Aufgrund des Pauli-Prinzips kann ein Zustand jeweils nur durch ein Elektron besetzt werden, d.h. von den  $10^{23}$  Elektronen pro Kristall kann sich auch bei  $T = 0$  jeweils nur eines im energetisch niedrigsten Zustand aufhalten. Alle andern müssen in jeweils höherliegende Zustände ausweichen. Die Energie des höchsten besetzten Zustandes wird als Fermi-Energie bezeichnet.

Da diese Zustände gleichzeitig Eigenzustände des Impulsoperators sind, können sie mit Impuls-Quantenzahlen numeriert werden. Jeder dieser Zustände kann maximal doppelt besetzt sein. Wenn die

Elektronen sich in den Zustand mit insgesamt niedrigster Energie begeben, so werden sie die Zustände besetzen, welche nahe beim Ursprung liegen.

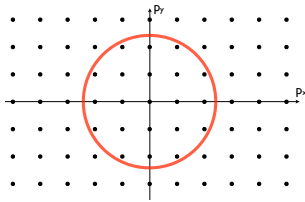


Abbildung 8.6: Zustände im 2D Impulsraum.

In zwei Dimensionen können wir die möglichen Zustände eines freien Teilchens, das sich in einem 2D-Kasten aufhält, durch die Impuls-Quantenzahlen für die beiden Dimensionen klassieren. Die Energie der Zustände ist proportional zum Quadrat des Betrags des Impulses, also zum Quadrat des Abstandes vom Ursprung. Die besetzten Zustände für eine gegebene Anzahl Elektronen bilden somit genau dann den Zustand der niedrigsten Energie, wenn sie sich innerhalb eines Kreises befinden.

In drei Dimensionen wird aus diesem Kreis eine Kugel. Der Radius der Kugel wird bestimmt durch die Anzahl Elektronen und den Abstand zwischen benachbarten Zuständen im Impulsraum. Diese Kugel wird als Fermikugel bezeichnet.

Im Grundzustand sind alle Zustände bis zur Fermienergie besetzt, alle darüber sind leer. Bei endlicher Temperatur werden einzelne Teilchen über die Grenze hinaus angeregt. Die Verteilung wird im thermischen Gleichgewicht durch die Fermi-Dirac Statistik bestimmt:

$$p(E) = \frac{1}{e^{\beta(\mathcal{E}-\mu)} + 1}.$$

Hier stellt  $\beta$  eine inverse Temperatur dar und  $\mu$  das chemische Potenzial, welches bei niedriger Temperatur gleich der Fermi-Energie ist.

Die Herleitung dieser Beziehung findet sich in der Thermodynamik und Statistik. Konsequenzen werden u.a. in der Festkörperphysik diskutiert.

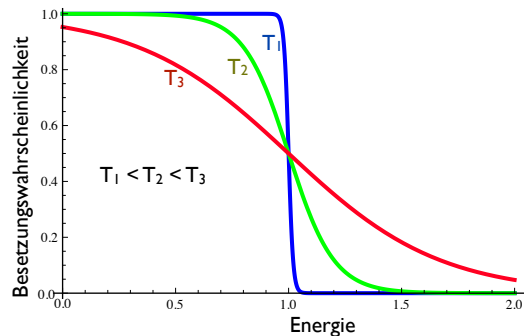


Abbildung 8.7: Fermi-Dirac Verteilung bei unterschiedlichen Temperaturen.



Abbildung 8.8: Sirius B im Größenvergleich mit der Erde.

### 8.3.2 Astronomische Konsequenzen

Die Fermi-Dirac Statistik ist u.a. für das Entstehen von Weißen Zwergen verantwortlich: dabei handelt es sich um kleine aber heiße Sterne. Da sie schon praktisch den gesamten Wasserstoff verbrannt haben, bestehen sie zu 99% aus Sauerstoff und Kohlenstoff, welcher nicht mehr weiter fusioniert. Dadurch können sie dem Gravitationsdruck keinen thermischen Druck mehr entgegensetzen. Erst der "Fermi-Druck", welcher verhindert, dass die Elektronenhüllen sich überlappen, bietet genügend Gegendruck, dass der Kollaps bei einer Dichte von rund  $10^3 - 10^{10} \text{ kg/cm}^3$  zum Stillstand kommt.

Die Tatsache, dass Fermionen sich nicht im gleichen Zustand befinden können, führt z.B. dazu, dass Neutronensterne entstehen können: Wenn mittelgroße Sterne (1,4-3,0 Sonnenmassen) ihren Brennstoff aufgebraucht haben, werden durch das starke Gravitationsfeld die Atome so stark aneinander gepresst, dass eine extrem dichte Materieform entsteht ( $\rho \approx 10^{11} - 2 \cdot 10^{12} \text{ kg/cm}^3$ ), welche am ehesten als kom-



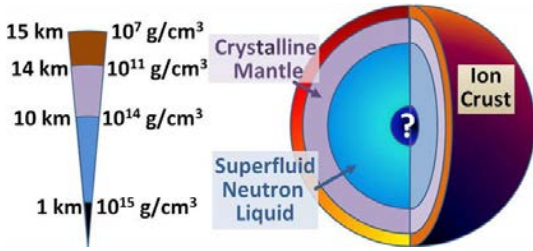


Abbildung 8.9: Schematischer Aufbau eines Neutronensterns.

paakte Ansammlung von Neutronen beschrieben werden kann. Auf Grund der Fermi-Dirac Statistik können sie aber nicht den gleichen Zustand einnehmen. Dies erzeugt einen Druck (den Fermi-Druck), welcher dem Gravitationsdruck entgegen wirkt und so den weiteren Kollaps verhindert.

### 8.3.3 Bose-Einstein Statistik

Während also Fermionen einen bereits besetzten Zustand "vermeiden" gilt dies nicht für Bosonen. Hier ist es im Gegenteil so, dass ein Zustand, der bereits besetzt ist, weitere Bosonen "anzieht".

Für Bosonen im thermischen Gleichgewicht gilt bei endlichen Temperaturen die Bose-Einstein Statistik,

$$p(E) = \frac{1}{e^{\beta(\mathcal{E}-\mu)} - 1}.$$

Diese divergiert offenbar bei  $\mathcal{E} \rightarrow \mu$ .

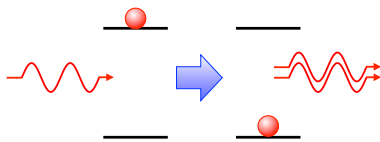


Abbildung 8.10: Stimulierte Emission.

Bei der stimulierten Emission von Photonen, z.B., steigt die Emissionswahrscheinlichkeit proportional zur Wurzel aus der Zahl der bereits vorhandenen Photonen. Dies wird beim Laser verwendet: man versucht dort, eine möglichst große Zahl von Photonen in den gleichen Zustand des elektromagnetischen Feldes zu bringen. Man kann sich das so vorstellen, dass die vorhandenen Photonen ein angeregtes Elektron dazu anregen, die Energie in der Form

eines Photons abzugeben und dabei in den Grundzustand überzugehen.

### 8.3.4 Bose-Einstein Kondensation

Dieser Effekt, dass Bosonen die Tendenz zeigen, alle gemeinsam in den gleichen quantenmechanischen Zustand überzugehen führt zur Bose-Einstein Kondensation, bei der alle Teilchen in den quantenmechanischen Zustand mit der niedrigsten Energie übergehen. Dies wurde z.B. für Atome beobachtet, die in einer elektromagnetischen Falle mit Lasern und elektromagnetischen Feldern auf sehr tiefe Temperaturen gekühlt worden waren.

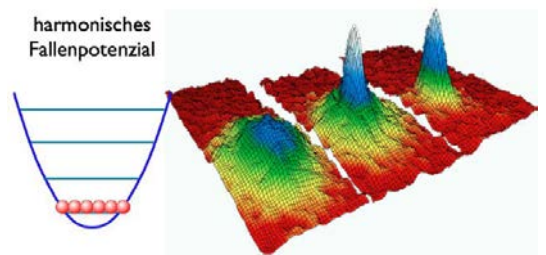


Abbildung 8.11: Kondensation in den Grundzustand des harmonischen Oszillators.

Die Atome werden in dieser Falle näherungsweise von einem harmonischen Potenzial gefangen. Bei hohen Temperaturen können wir die einzelnen Atome als grundsätzlich unterscheidbar betrachten, da sie räumlich getrennt sind. Sie können quantenmechanisch durch Wellenpakete dargestellt werden, welche nicht überlappen. Bei niedriger Temperatur werden die Wellenpakete größer und bei hoher Dichte rücken sie näher zusammen und werden dadurch ununterscheidbar. Dann findet eine Bose-Einstein Kondensation statt und sie gehen in den Grundzustand des harmonischen Oszillators über. Man kann dies zeigen, indem man die Geschwindigkeitsverteilung der gefangenen Atome misst.

Ein ähnlicher Phasenübergang findet in superflüssigen Helium statt: alle Atome kondensieren in den gleichen Quantenzustand. Dadurch verschwindet die Viskosität. Beim Helium erwarten wir, dass nur die  $^4\text{He}$  Atome superflüssig werden können. Sie tun dies am sog.  $\lambda$ -Punkt, bei 2.17 K.  $^3\text{He}$  bleibt auch weit

unterhalb dieser Temperatur eine normale Flüssigkeit. Allerdings wird es bei sehr tiefen Temperaturen ebenfalls suprafluid, indem sich zwei  $^3\text{He}$  Atome zusammenschließen und ein Boson bilden.

Der gleiche Prozess läuft in Supraleitern ab, wo sich Elektronen paarweise zu zusammengesetzten Bosonen zusammenschließen, welche dann in den makroskopischen Quantenzustand kondensieren. In diesem Zustand verschwindet der elektrische Widerstand.