

3 Identische Teilchen

Bisher haben wir uns meist mit quantenmechanischen Systemen beschäftigt, die nur aus einem Teilchen oder aus unterscheidbaren Teilchen bestehen. In der Natur gibt es jedoch Systeme mit vielen Teilchen. Falls es sich um identische Teilchen handelt, treten interessante neue Probleme auf, die wir in der klassischen Mechanik nicht kennen. Zwei Teilchen heissen identisch, wenn sie keine messbar unterschiedlichen Eigenschaften haben. Während in der klassischen Physik identische Teilchen immer unterscheidbar bleiben, da wir im Prinzip die Trajektorie jedes Teilchens verfolgen können, ist ein solches Verfahren in der Quantenmechanik nicht möglich. Wenn die Wellenfunktion zweier identischer quantenmechanischer Teilchen (Wellenpakete) überlappen, dann ist es nicht möglich, ihre ‘Trajektorien’ zu unterscheiden. Dies hat weitreichende Folgen, wie wir bald sehen werden.

3.1 Zustände und Observable von identischen Teilchen

Wir betrachten N identische Teilchen (z.B. N Elektronen, oder N π -Mesonen). Der Hamiltonoperator

$$H = H(1, 2, \dots, N) \quad (3.1.1)$$

ist symmetrisch in den Variablen $1, 2, \dots, N$. Hier bezeichnet $1 \equiv \mathbf{x}_1, \sigma_1$ Orts- und Spinfreiheitsgrad für Teilchen 1 und entsprechend für die übrigen Teilchen. Ebenso schreiben wir die Wellenfunktion in der Form

$$\psi = \psi(1, 2, \dots, N) . \quad (3.1.2)$$

Der **Permutationsoperator** P_{ij} welcher $i \leftrightarrow j$ miteinander vertauscht, hat auf eine beliebige N -Teilchen-Wellenfunktion die Wirkung

$$P_{ij}\psi(1, \dots, i, \dots, j, \dots, N) = \psi(1, \dots, j, \dots, i, \dots, N) . \quad (3.1.3)$$

Da $P_{ij}^2 = 1$ hat P_{ij} die Eigenwerte ± 1 . Wegen der Symmetrie des Hamilton-Operators gilt für jedes Element P der Permutationsgruppe S_N

$$P H = H P . \quad (3.1.4)$$

Die Permutationsgruppe S_N hat $N!$ Elemente; jede Permutation kann als Produkt von Transpositionen P_{ij} dargestellt werden. Tatsächlich wird die gesamte Permutationsgruppe von den Transpositionen $\sigma_i \equiv P_{i,i+1}$ erzeugt. In der Tat ist S_N die durch die σ_i , $i = 1, \dots, N - 1$ erzeugte Gruppe modulo der Relationen

$$\sigma_i \sigma_{i+1} \sigma_i = \sigma_{i+1} \sigma_i \sigma_{i+1} , \quad i = 1, \dots, N - 2 \quad (3.1.5)$$

$$\sigma_i \sigma_j = \sigma_j \sigma_i , \quad |i - j| \geq 2 \quad (3.1.6)$$

$$\sigma_i \sigma_i = 1 \quad (3.1.7)$$

Wir nennen ein Element von S_N **gerade**, falls es sich als Produkt einer geraden Zahl von Transpositionen schreiben lässt; andernfalls heisst es **ungerade**. [Die einzige Relation, die die Anzahl der Transpositionen verändert, ist (3.1.7); da sie die Anzahl der Transpositionen um zwei verändert, macht die Definition von ‘gerade’ und ‘ungerade’ Sinn.]

Auf dem Hilbertraum der Wellenfunktionen ist jede Permutation durch einen unitären Operator dargestellt. Dies folgt einfach daraus, dass

$$\langle \phi | \psi \rangle = \langle P\phi | P\psi \rangle , \quad (3.1.8)$$

da das Skalarprodukt (Integral im \mathbb{R}^{3N}) unabhängig von der Reihenfolge der Integrale ist. Daher folgt dann, dass

$$\begin{aligned} \langle \phi | P\psi \rangle &= \langle P^{-1}\phi | P^{-1}P\psi \rangle \\ &= \langle P^{-1}\phi | \psi \rangle = \langle P^\dagger \phi | \psi \rangle , \end{aligned} \quad (3.1.9)$$

was daher impliziert, dass

$$P^\dagger = P^{-1} , \quad (3.1.10)$$

also, dass P unitär ist.

Identische Teilchen werden durch jeden physikalischen Prozess gleichartig beeinflusst. Daher müssen die zugehörigen Operatoren S symmetrisch sein, d.h. sie erfüllen für jedes $P \in S_N$

$$[P, S] = 0 . \quad (3.1.11)$$

Der Erwartungswert eines symmetrischen Operators S in einem Zustand ψ erfüllt immer

$$\langle \psi | S | \psi \rangle = \langle P\psi | S | P\psi \rangle , \quad (3.1.12)$$

wobei P eine beliebige Permutation ist, da wir die linke Seite als

$$\langle P\psi | S | P\psi \rangle = \langle \psi | P^\dagger S P | \psi \rangle = \langle \psi | P^\dagger P S | \psi \rangle = \langle \psi | S | \psi \rangle \quad (3.1.13)$$

schreiben können. Sei ψ ein Eigenvektor von S mit Eigenwert s . Dann ist auch $P\psi$ ein Eigenvektor von S mit Eigenwert s , denn

$$SP\psi = PS\psi = Ps\psi = sP\psi . \quad (3.1.14)$$

Es folgt daher, dass ψ und $P\psi$ äquivalente Zustände des Zustandsraums beschreiben. Es ist dann natürlich zu verlangen, dass sich diese Zustände nur um eine Phase unterscheiden (da ja Zustände, die sich um eine Phase unterscheiden in demselben ‘Strahl’ liegen, und daher äquivalent sind); wir verlangen also

$$P\psi = U(P)\psi , \quad |U(P)| = 1 . \quad (3.1.15)$$

Da die Permutationen eine Gruppe bilden, gilt dann weiterhin

$$\begin{aligned} P_1 P_2 \psi &= P_1 U(P_2) \psi = U(P_2) U(P_1) \psi \\ &= U(P_1 P_2) \psi \end{aligned}$$

woraus folgt, dass

$$U(P_1)U(P_2) = U(P_1P_2) . \quad (3.1.16)$$

Dies bedeutet, dass die Phasen $U(P)$ eine 1-dimensionale Darstellung der Permutationsgruppe bilden. Die Permutationsgruppe hat genau zwei 1-dimensionale Darstellungen: die triviale Darstellung

$$U_+(P) = 1 , \quad \text{für alle } P \quad (3.1.17)$$

und die Darstellung

$$U_-(P) = \begin{cases} +1 & \text{falls } P \text{ gerade ist} \\ -1 & \text{falls } P \text{ ungerade ist.} \end{cases} \quad (3.1.18)$$

Die zugehörigen Wellenfunktionen sind dann entweder total symmetrisch, also erfüllen

$$P\psi = \psi , \quad \text{Bosonen} \quad (U_+) \quad (3.1.19)$$

oder sind anti-symmetrisch, d.h. erfüllen

$$P_{ij}\psi = -\psi , \quad \text{Fermionen}(U_-) . \quad (3.1.20)$$

Die Teilchen, deren Wellenfunktionen (3.1.19) erfüllen nennt man **Bosonen**; jene die (3.1.20) erfüllen **Fermionen**. Im Rahmen der lokalen Quantenfeldtheorie kann man zeigen, dass Bosonen ganz-zahligen Spin haben, Fermionen hingegen halb-zahligen Spin (Spin-Statistik Theorem).

Da der Hamiltonoperator, der die Zeitentwicklung beschreibt, ein physikalische Operator ist und daher mit den Permutationen vertauscht, sind diese Symmetrieeigenschaften zeitlich konstant.

Im obigen haben wir angenommen, dass die Wirkung von P durch eine Phase dargestellt ist, also dass wir eine 1-dimensionale Darstellung der Permutationsgruppe haben. Man könnte sich auch vorstellen, dass es Teilchen gibt, deren Wellenfunktionen sich in einer höher-dimensionalen Darstellung der Permutationsgruppe transformieren. Solche Teilchen nennt man ‘Parateilchen’, und die zugehörige Statistik wird ‘Parastatistik’ genannt. Es gibt bis anhin keine experimentelle Evidenz für solche Teilchen. Weiter unten werden wir jedoch sehen, dass es in zwei Dimensionen Teilchen mit ‘exotischer Statistik’ gibt — siehe Kapitel 3.5.

3.1.1 Zusammengesetzte Systeme

Quantenmechanische Systeme wie Atome, die aus mehreren elementareren Teilchen zusammengesetzt sind, verhalten sich als ganzes genommen auch entweder wie Fermionen oder wie Bosonen. Dabei gilt die Regel, dass ein solches zusammengesetztes Teilchen ein Fermion ist, falls es eine ungerade Zahl von Fermionen enthält; sonst ist es ein Boson. Die Zahl der enthaltenen Bosonen spielt dabei keine Rolle. Dies folgt zum Beispiel aus dem Spin-Statistik Theorem: gemäss der Clebsch-Gordon Reihe transformiert sich das Tensorprodukt einer geraden Anzahl von halb-ganzen Spins und einer beliebigen Anzahl

ganz-zahliger Spins, in einer Darstellung, deren Gesamtspin ganz-zahlig ist. Falls eine ungerade Anzahl halb-ganzer Spins im Tensorprodukt auftauchen so ist auch der Gesamtspin halb-ganz.

Zum Beispiel ist das Wasserstoff-Atom, aus einem Elektron und einem Proton (also zwei Fermionen) bestehend, ein Boson. Das Deuteron, das noch ein zusätzliches (fermionisches) Neutron enthält, ist hingegen ein Fermion. Genauso lassen sich fermionische und bosonische Helium-Atome unterscheiden, wobei die ersteren einen Kern aus zwei Protonen und einem Neutron besitzen (^3He), währenddem die letzteren noch ein zusätzliches Neutron enthalten (^4He). Zusammen mit den beiden Elektronen ergibt dies ein Fermion beziehungsweise Boson. Dies hat weitreichende Folgen für die Quanteneigenschaften der beiden Helium-Isotope: wenn sie in grosser Zahl vorkommen, bilden sie sehr unterschiedliche Quantenflüssigkeiten.

Als Beispiel dafür betrachten wir das System zweier Wasserstoff-Atome, deren gemeinsame Wellenfunktion $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{R}_1; \mathbf{r}_2, \mathbf{R}_2)$, wobei \mathbf{r}_i und \mathbf{R}_i die Koordinate des Elektrons beziehungsweise Protons des i -ten Atoms ist (inkl. Spins). Nun gilt für die Vertauschung der Teilchen (beachte, dass es nur Sinn macht, identische Teilchen zu vertauschen):

$$\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{R}_1; \mathbf{r}_2, \mathbf{R}_2) = -\psi(\mathbf{r}_2, \mathbf{R}_1; \mathbf{r}_1, \mathbf{R}_2) = -\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{R}_2; \mathbf{r}_2, \mathbf{R}_1) = +\psi(\mathbf{r}_2, \mathbf{R}_2; \mathbf{r}_1, \mathbf{R}_1) , \quad (3.1.21)$$

d.h. wenn wir die beiden Atome als ganzes vertauschen, dann verhalten sie sich wie Bosonen. Jedoch bleibt der fermionische Charakter der Elektronen und Protonen erhalten.

3.2 Symmetrisierung und Anti-Symmetrisierung

Sei ψ eine nicht notwendigerweise symmetrische oder anti-symmetrische Wellenfunktion. Dann kann man die Wellenfunktion immer symmetrisieren, bzw. anti-symmetrisieren. Dazu definieren wir

$$\psi_s = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{P \in S_N} P\psi , \quad \psi_a = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{P \in S_N} (-1)^{|P|} P\psi , \quad (3.2.1)$$

wobei $|P| = 0$ für gerade Permutationen, und $|P| = 1$ für ungerade Permutationen. Man kann dann leicht sehen, dass ψ_s symmetrisch ist,

$$Q\psi_s = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{P \in S_N} QP\psi = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{P' \in S_N} P'\psi = \psi_s , \quad (3.2.2)$$

wobei Q eine beliebige Permutation ist. Entsprechend gilt

$$Q\psi_a = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{P \in S_N} (-1)^{|P|} QP\psi = (-1)^{|Q|} \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{P' \in S_N} (-1)^{|P'|} \psi = (-1)^{|Q|} \psi_a \quad (3.2.3)$$

und ψ_a ist daher total anti-symmetrisch. Zum Beispiel gilt im Fall zweier Teilchen ($N = 2$)

$$\begin{aligned} \psi_s &= \frac{1}{2} \left(\psi(1, 2) + \psi(2, 1) \right) \\ \psi_a &= \frac{1}{2} \left(\psi(1, 2) - \psi(2, 1) \right) . \end{aligned}$$

Die Anti-Symmetrisierung betrifft die gesamte Wellenfunktion von Fermionen, also sowohl die räumliche Wellenfunktion als auch den Spinanteil. Um dies zu illustrieren betrachten wir zwei Fermionen mit Spin $1/2$, zum Beispiel zwei Elektronen. Wir schreiben die gesamte Wellenfunktion als $\psi(1, 2) = \psi(\mathbf{r}_1, s_1; \mathbf{r}_2, s_2) = f(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \chi(s_1, s_2)$, wobei s_1 und s_2 die Spin-Vektoren sind, die die Werte $|\uparrow\rangle$ oder $|\downarrow\rangle$ annehmen können. Bezüglich des Gesamtspins transformiert sich das Gesamtsystem dann entweder in der Singulett ($S = 0$) oder der Triplett ($S = 1$) Darstellung. Die entsprechenden Zustände sind:

Singulett:

$$\chi_0(s_1, s_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}[(\uparrow\downarrow) - (\downarrow\uparrow)] \quad \text{mit} \quad \underbrace{\chi_0(s_2, s_1) = -\chi_0(s_1, s_2)}_{\text{antisymmetrisch}} \quad (3.2.4)$$

Triplett:

$$\chi_1(s_1, s_2) = \left\{ \begin{array}{l} (\uparrow\uparrow) \\ \frac{1}{\sqrt{2}}[(\uparrow\downarrow) + (\downarrow\uparrow)] \\ (\downarrow\downarrow) \end{array} \right\} \quad \text{mit} \quad \underbrace{\chi_1(s_2, s_1) = +\chi_1(s_1, s_2)}_{\text{symmetrisch}} . \quad (3.2.5)$$

Die Gesamtwellenfunktion muss natürlich antisymmetrisch unter der Vertauschung der beiden Elektronen sein. Daraus folgt, dass

$$f(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = +f(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1) \quad \text{Spin-Singulett} \quad (3.2.6)$$

$$f(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = -f(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1) \quad \text{Spin-Triplett.}$$

Diese Eigenschaft hat eine wichtige Konsequenz für Fermionen. Wenn die beiden Elektronen den ‘gleichen’ Spin besitzen, sind sie zwangsläufig im Spin-Triplettzustand und sind folglich völlig identisch (selbst durch ihren Spin nicht unterscheidbar). Daher besitzen sie eine antisymmetrische orbitale Wellenfunktion mit

$$\psi(\mathbf{r}, s; \mathbf{r}, s) = 0 . \quad (3.2.7)$$

Dies impliziert insbesondere, dass sich zwei identische Fermionen (Elektronen) nicht am gleichen Ort befinden können. (Bosonen haben in dieser Beziehung kein Problem.) Dies ist das *Pauli-Ausschliessungsprinzip*, welches allgemein formuliert aussagt, dass keine zwei (identischen) Fermionen sich im gleichen Zustand befinden können. Dieses fundamentale Prinzip bildet die Grundlage für das Verständnis der elektronischen Struktur der Atome sowie der kondensierten Materie.

3.3 Wellenfunktion nicht-wechselwirkender identischer Teilchen

Wir betrachten nun ein System von N identischen Teilchen in einem Potential V , die nicht untereinander wechselwirken. Der Hamiltonoperator ist dann von der Form

$$H = \sum_{j=1}^N H_j, \quad H_j = \frac{\hat{\mathbf{p}}_j^2}{2m} + V(\hat{\mathbf{x}}_j). \quad (3.3.1)$$

Die Zustände jedes Teilchens bilden einen separaten Hilbertraum, und der Zustandsraum des Gesamtsystems ist das Tensorprodukt der einzelnen Hilberträume. Jeder Zustand des N -Teilchensystems lässt sich daher als Linearkombination von Produktzuständen schreiben. Insbesondere ist dies für die stationären Zustände (die Lösungen der zeitunabhängigen Schrödingergleichung) der Fall. Sei $\psi_\mu \in \mathcal{H}_j$ ein Eigenzustand von H_j ,

$$H_j \psi_\mu = E_\mu \psi_\mu \quad (3.3.2)$$

dann ist die Produktwellenfunktion

$$\Psi(1, \dots, N) = \psi_{\mu_1}(\mathbf{r}_1, s_1) \cdots \psi_{\mu_N}(\mathbf{r}_N, s_N) \quad (3.3.3)$$

eine Eigenfunktion von H ist mit der Energie

$$H\Psi = \left(\sum_{j=1}^N E_{\mu_j} \right) \Psi. \quad (3.3.4)$$

Diese Wellenfunktion $\Psi(1, \dots, N)$ hat im allgemeinen weder für bosonische noch für fermionische Teilchen die erforderlichen Symmetrie-Eigenschaften. Wie in Kapitel 3.2 können wir sie aber symmetrisieren oder anti-symmetrisieren. Im gegenwärtigen Fall führt das zu

$$\Psi_B(1, \dots, N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{P \in S_N} \psi_{\mu_1}(\mathbf{r}_{P(1)}, s_{P(1)}) \cdots \psi_{\mu_N}(\mathbf{r}_{P(N)}, s_{P(N)}) \quad (3.3.5)$$

im bosonischen Fall. Für Fermionen findet man

$$\Psi_F(1, \dots, N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{P \in S_N} (-1)^{|P|} \psi_{\mu_1}(\mathbf{r}_{P(1)}, s_{P(1)}) \cdots \psi_{\mu_N}(\mathbf{r}_{P(N)}, s_{P(N)}) . \quad (3.3.6)$$

Diese Funktion kann auch als Determinante (**Slater-Determinante**) geschrieben werden:

$$\Psi_F(1, \dots, N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \text{Det} \begin{bmatrix} \psi_{\mu_1}(1) & \cdots & \psi_{\mu_1}(N) \\ \vdots & & \vdots \\ \psi_{\mu_N}(1) & \cdots & \psi_{\mu_N}(N) \end{bmatrix}. \quad (3.3.7)$$

Die Struktur der fermionischen Produktfunktion Ψ_F bedingt, dass $\Psi_F = 0$ falls sich mehr als ein Teilchen im selben Zustand befindet, also falls $\mu_j = \mu_k$ für $j \neq k$. [In diesem Fall sind zwei Zeilen der Slater-Determinante gleich, und daher verschwindet Ψ_F . Der Zustandsindex μ_j beinhaltet hier natürlich auch den Spin-Freiheitsgrad.] Falls $\Psi_F \neq 0$ dann gilt

$$\langle \Psi_F | \Psi_F \rangle = 1 \quad (3.3.8)$$

vorausgesetzt, dass die ψ_μ orthonormiert sind. Im bosonischen Fall ist die Normierung von Ψ_B hingegen

$$\langle \Psi_B | \Psi_B \rangle = n_{\mu_1}! \cdots n_{\mu_r}! , \quad (3.3.9)$$

wobei n_{μ_j} die Anzahl der Teilchen im Zustand μ_j bezeichnet.

3.3.1 Grundzustand für Bosonen und Fermionen

Im Falle der Bosonen kann ein Zustand mit beliebig vielen Teilchen besetzt sein. Infolgedessen erhalten wir den Grundzustand, wenn alle Teilchen den Einteilchenzustand niedrigster Energie annehmen

$$\Psi_{B0}(1, \dots, N) = \psi_0(1) \cdots \psi_0(N) , \quad E = NE_0 . \quad (3.3.10)$$

Dies ist unabhängig vom Spin der Bosonen ($S = 0, 1, 2, \dots$).

Im Fall von Fermionen ist die Situation anders, da nicht alle Teilchen denselben Zustand annehmen können. Betrachte zum Beispiel den Fall von Spin 1/2 Teilchen, wobei wir annehmen wollen, dass der Hamiltonoperator nicht explizit vom Spin abhängt, so dass die beiden Zustände $|\uparrow\rangle$ und $|\downarrow\rangle$ dieselbe Energie besitzen. Im Grundzustand des Systems werden nun sukzessive die Zustände von der kleinsten Energie an mit je zwei Fermionen ($|\uparrow\rangle$ und $|\downarrow\rangle$) gefüllt. Dies ergibt die Energie

$$E = \begin{cases} 2 \sum_{j=1}^{N/2} E_j & N \text{ gerade} \\ 2 \sum_{j=1}^{(N-1)/2} E_j + E_{\frac{N+1}{2}} & N \text{ ungerade.} \end{cases} \quad (3.3.11)$$

Während für gerade N der Grundzustand nicht entartet ist, ist die Entartung zweifach für ungerade N , da das letzte Fermion beide Spins annehmen kann. Wir sprechen von einem Singulett beziehungsweise Duplett. Ein bekanntes Beispiel, das wir später eingehender betrachten werden, ist das Gas freier Elektronen, das sogenannte Fermigas, das ein gutes Modell für einfache Metalle darstellt.

3.4 Streuung identischer Teilchen

Wir betrachten zwei wechselwirkende Teilchen mit unterschiedlichem Impuls, die durch gegenseitige Streuung um einen gewissen Winkel θ aus ihren Bahnen abgelenkt werden.

Da ihre Wellenfunktionen während des Streuprozesses überlappen, können wir ihre Trajektorien nicht mehr unterscheiden. Wir können uns daher zwei mögliche ‘Trajektorien’ vorstellen.

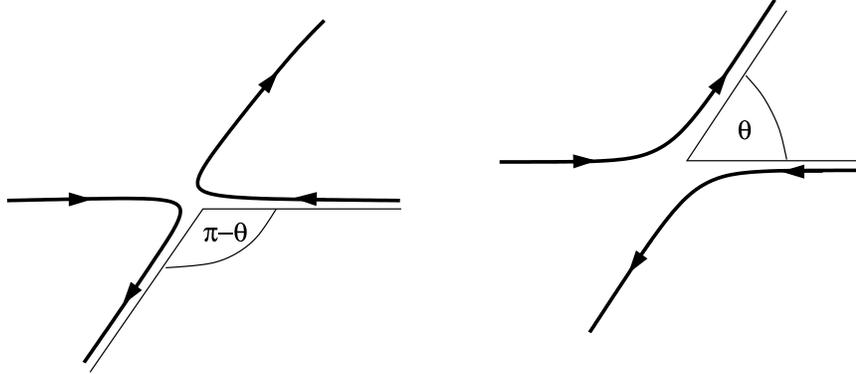


Abbildung 6: Zwei mögliche ‘Trajektorien’ ununterscheidbarer Teilchen.

3.4.1 Identische Bosonen ohne Spin

Im Fall von zwei Bosonen können wir die Wellenfunktion als

$$\phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = e^{i\mathbf{p} \cdot (\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2)/\hbar} \psi(\mathbf{r}) \quad (3.4.1)$$

schreiben, wobei \mathbf{p} den Schwerpunktsimpuls und $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$ die Relativkoordinate bezeichnet. Für Bosonen muss die Gesamtwellenfunktion ϕ gerade unter der Vertauschung der beiden Teilchen sein, und daher gilt $\psi(\mathbf{r}) = +\psi(-\mathbf{r})$.

Die Wellenfunktion $\psi(\mathbf{r})$ beschreibt den Streuvorgang im Schwerpunktsystem. Die einlaufende Welle ist daher (für ein geeignetes \mathbf{k}) von der Form

$$\psi_{\text{ein}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} + e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \quad , \quad (3.4.2)$$

und die auslaufende Welle ist von der Form

$$\psi_{\text{aus}}(\mathbf{r}) = \frac{e^{ikr}}{r} [f_k(\theta) + f_k(\pi - \theta)] \quad . \quad (3.4.3)$$

Hierbei bezeichnet θ den Winkel relativ zur Einlaufrichtung; wegen der Rotationssymmetrie des Problems hängt die Streuamplitude $f(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ in diesem Fall nur von $k = |\mathbf{k}|$ und θ ab. Die relative Phase der beiden Terme (proportional zu \mathbf{r} und $-\mathbf{r}$) wurde hierbei durch Bedingung $\psi(\mathbf{r}) = +\psi(-\mathbf{r})$ festgelegt!

Der differentielle Wirkungsquerschnitt (die Wahrscheinlichkeit, dass ein Teilchen um den Winkel θ aus seiner Bahn abgelenkt wird) ist gegeben durch

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f_k(\theta) + f_k(\pi - \theta)|^2 = |f_k(\theta)|^2 + |f_k(\pi - \theta)|^2 + 2\text{Re} \left[f_k^*(\theta) f_k(\pi - \theta) \right] \quad , \quad (3.4.4)$$

d.h. wir erhalten einen Interferenzterm zwischen den beiden möglichen Trajektorien. Beachte, dass für den Winkel $\theta = \pi/2$,

$$\left. \frac{d\sigma}{d\Omega} \right|_{\pi/2} = 4|f_k(\pi/2)|^2, \quad (3.4.5)$$

der Interferenzeffekt zu einem Faktor 4 führt; wären die Teilchen unterscheidbar gewesen, hätte man lediglich einen Faktor 2 erwartet!

Wir können die Streuamplitude auch in der Partialwellenzerlegung darstellen:

$$f_k(\theta) = \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) P_l(\cos \theta) f_l. \quad (3.4.6)$$

Aus der Eigenschaft $P_l(\cos(\pi - \theta)) = P_l(-\cos \theta) = (-1)^l P_l(\cos \theta)$ ergibt sich, dass nur gerade l zu der Summe

$$f_{ks}(\theta) \equiv f_k(\theta) + f_k(\pi - \theta) = 2 \sum_{l \text{ gerade}} i^l (2l+1) P_l(\cos \theta) f_l \quad (3.4.7)$$

beitragen.

3.4.2 Identische Spin 1/2 Fermionen

Für den Fall von zwei Spin 1/2 Fermionen können wir analog zu (3.4.1) die Gesamtwellenfunktion als

$$\phi(1, 2) = e^{i\mathbf{p} \cdot (\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2)/\hbar} \psi(\mathbf{r}) \chi(s_1, s_2) \quad (3.4.8)$$

schreiben, wobei $\chi(s_1, s_2)$ die Spinkonfiguration angibt. Wir wollen annehmen, dass der Spin der beiden Elektronen keinen Einfluss auf das Streuverhalten hat.

Für den Fall der Spinsingulett-Konfiguration muss (wie wir oben gesehen haben) $\psi(\mathbf{r}) = +\psi(-\mathbf{r})$ gerade sein und das Interferenzverhalten ist wie im Fall der spin-losen Bosonen. Für den Fall der Triplett-Konfiguration, ist die Situation jedoch anders, da dann $\psi(\mathbf{r}) = -\psi(-\mathbf{r})$ ungerade sein muss. Dann ergibt sich für das asymptotische Verhalten

$$\psi(\mathbf{r}) \simeq e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} - e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} + \underbrace{[f_k(\theta) - f_k(\pi - \theta)]}_{= f_{ka}(\theta)} \frac{e^{ikr}}{r} \quad (3.4.9)$$

und folglich

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f_{ka}(\theta)|^2 = |f_k(\theta)|^2 + |f_k(\pi - \theta)|^2 - 2\text{Re} \left[f_k^*(\theta) f_k(\pi - \theta) \right]. \quad (3.4.10)$$

Im Gegensatz zum symmetrischen Fall erhalten wir hier für 90°-Streuung nun

$$\left. \frac{d\sigma}{d\Omega} \right|_{\pi/2} = 0. \quad (3.4.11)$$

Für die Partialwellenzerlegung finden wir aus der obigen Diskussion sofort, dass nur die ungeraden l zu $f_{ka}(\theta)$ beitragen

$$f_{ka}(\theta) = 2 \sum_{l \text{ ungerade}} i^l (2l+1) P_l(\cos \theta) f_l . \quad (3.4.12)$$

Falls wir unpolarisierte Fermionen aneinander streuen, dann sind die (gestreuten) Teilchen mit der Wahrscheinlichkeit $3/4$ im Triplet- und mit der Wahrscheinlichkeit $1/4$ im Singulett-Zustand. Der gesamte differentielle Wirkungsquerschnitt ist dann also

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} \Big|_{\text{unpolarisiert}} = \frac{3}{4} \frac{d\sigma}{d\Omega} \Big|_{\text{Triplet}} + \frac{1}{4} \frac{d\sigma}{d\Omega} \Big|_{\text{Singulett}} = |f_k(\theta)|^2 + |f_k(\pi-\theta)|^2 - \text{Re} \left[f_k^*(\theta) f_k(\pi-\theta) \right] . \quad (3.4.13)$$

Andererseits können wir auch die Situation analysieren, wo die beiden Fermionen durch ihren Spin unterscheidbar sind. Betrachten wir zum Beispiel die Situation, wo das eine Fermion den klar bestimmten Spin $|\uparrow\rangle$ besitzt, das andere hingegen den klar bestimmten Spin $|\downarrow\rangle$ hat. Da wir annehmen, dass die Streuung keinen Einfluss auf die Spins hat (und auch von ihnen auch nicht beeinflusst wird) können wir dann zwischen den beiden Konfigurationen in Figure 6 unterscheiden — siehe Figure 7

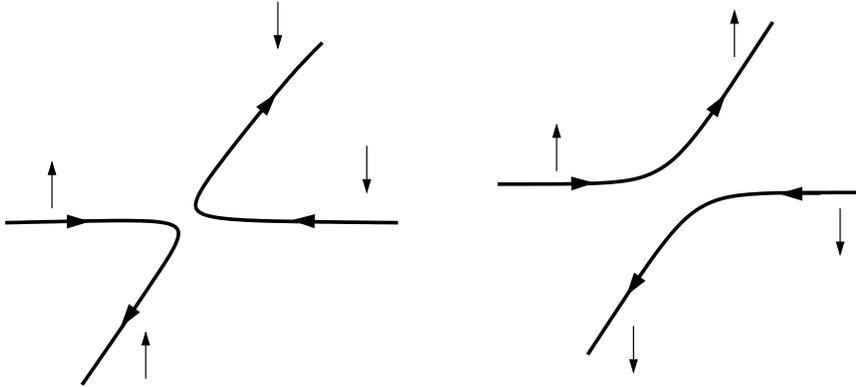


Abbildung 7: Zwei mögliche ‘Trajektorien’ durch ihren Spin unterscheidbarer Teilchen.

Wir würden daher erwarten, dass keine quantenmechanischen Interferenzeffekte auftreten sollen. Der Ausgangszustand ist eine Überlagerung des Singulett- und Triplet-Zustandes

$$|\uparrow\downarrow\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\underbrace{\frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle)}_{\chi_s(S=0, S_z=0)} + \underbrace{\frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle)}_{\chi_t(S=1, S_z=0)} \right] . \quad (3.4.14)$$

Der differentielle Wirkungsquerschnitt, ein Teilchen (unabhängig von seinem Spin) beim Winkel θ zu beobachten, ist daher

$$\frac{1}{2} \frac{d\sigma}{d\Omega} \Big|_{\text{Triplet}} + \frac{1}{2} \frac{d\sigma}{d\Omega} \Big|_{\text{Singulett}} = |f_k(\theta)|^2 + |f_k(\pi-\theta)|^2 , \quad (3.4.15)$$

was in der Tat dem differentiellen Wirkungsquerschnitt unterscheidbarer Teilchen entspricht!

3.5 Zopfgruppenstatistik und Anyonen

In niedrigeren Raumdimensionen gibt es auch noch andere Arten von ‘Statistik’. Der Grund dafür ist topologische Natur und kann relativ einfach verstanden werden.

Die obige Behandlung eines Systems ununterscheidbarer Teilchen bestand darin, dass wir die Teilchen zunächst durchnumerierten (und damit unterschieden!), und dass wir dann in einem zweiten Schritt verlangt haben, dass die Resultate unter der Umbenennung der Teilchen invariant sein müssen. Konzeptionell ist das ein wenig unbefriedigend, da der Raum der numerierten Teilchen keine physikalische Bedeutung besitzt. Es ist daher natürlicher, sofort mit dem ‘richtigen’ (klassischen) Konfigurationsraum zu arbeiten.

Betrachten wir also N ununterscheidbare Teilchen, die sich im \mathbb{R}^D bewegen. Wir nehmen an, dass die Teilchen punktförmig sind und nicht zwei Teilchen am selben Ort sein können; dann werden die möglichen Konfigurationen durch N disjunkte Punkte im \mathbb{R}^D beschrieben. Mathematisch ist dieser Konfigurationsraum daher der Quotientenraum

$$\mathcal{M}_{D,N} = (\mathbb{R}^{DN} - \Delta) / S_N, \quad (3.5.1)$$

wobei Δ die Menge

$$\Delta = \{(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N) \in (\mathbb{R}^D)^N : \mathbf{x}_i = \mathbf{x}_j \text{ für mindestens ein Paar } i \neq j\} \quad (3.5.2)$$

der Koinzidenzen beschreibt. Die Permutationsgruppe S_N wirkt in der offensichtlichen Weise auf den N -Tupeln von Vektoren im \mathbb{R}^D . Da diese Wirkung keine Fixpunkte besitzt (die Fixpunkte liegen gerade in Δ) ist \mathcal{M} eine (glatte) Mannigfaltigkeit. Sie beschreibt den klassischen Konfigurationsraum, auf dem nun die quantenmechanischen Wellenfunktionen definiert werden.

Wir betrachten eine quantenmechanische Wellenfunktion $\Psi(z)$, die eine stationäre Lösung der Schrödingergleichung zu vorgegebener Energie E beschreibt. Die quantenmechanische Wellenfunktion $\Psi(z)$ für $z \in \mathcal{M}$ beschreibt die Wahrscheinlichkeit $|\Psi(z)|^2$ mit der die klassische Konfiguration z auftritt. Wie wir schon in der QMI gesehen haben, beschreibt daher die Wellenfunktion $\Psi(z)$ und $e^{i\alpha}\Psi(z)$, wobei $\alpha \in \mathbb{R}$ nicht von z abhängt, denselben physikalischen Zustand. Wenn wir die Phase von $\Psi(z)$ an einem Punkt $z_0 \in \mathcal{M}$ fest gewählt haben, legt die Bedingung, die zeit-unabhängige Schrödingergleichung zu vorgegebener Energie E zu lösen, die Phase von $\Psi(z)$ an jedem anderen Punkt $z' \in \mathcal{M}$ in einer kleinen (sternförmigen) Umgebung von $z \in \mathcal{M}$ eindeutig fest. Zum Beispiel legt im Fall, dass der Konfigurationsraum einfach $\mathcal{M} = \mathbb{R}^f$ ist, die Wahl der Phase von $\Psi(z_0)$ jene von $\Psi(z)$ für alle $z \in \mathbb{R}^f$ eindeutig fest.

Im allgemeinen Fall tritt jedoch eine Subtilität auf, falls der Konfigurationsraum **nicht einfach zusammenhängend** ist. [Eine Mannigfaltigkeit \mathcal{M} heisst einfach zusammenhängend, falls jede geschlossene Kurve in \mathcal{M} sich in \mathcal{M} zu einem Punkt zusammenziehen lässt. Zum Beispiel ist der Raum \mathbb{R}^f einfach zusammenhängend.] Dann kann

es nämlich passieren, dass die Phase von $\Psi(z_0)$ nicht eindeutig bestimmt werden kann: die Wahl von $\Psi(z_0)$ legt die Phasenwahl für $\Psi(z)$ in einer kleinen (sternförmigen) Umgebung um z_0 eindeutig fest. Sukzessive können wir daher die Phase von $\Psi(z)$ in eindeutiger Weise für alle $z \in \mathcal{M}$ definieren, aber es ist nicht garantiert, dass wir nach Durchlaufen eines geschlossenen (nicht zusammenziehbaren) Weges wieder zu dem Ausgangswert $\Psi(z_0)$ zurückkommen.

Man kann das wie folgt formalisieren. Wir definieren die (erste) Homotopiegruppe von \mathcal{M} als die Menge der geschlossenen orientierten Kurven in \mathcal{M} , die bei z_0 beginnen und enden. Wir identifizieren zwei solche Kurven, wenn wir sie innerhalb von \mathcal{M} ineinander deformieren können (man sagt dazu, dass sie ‘homotop’ zu einander sind). Äquivalenzklassen von Kurven können kombiniert werden, und diese Operation definiert die Gruppenoperation. [Das Einselement ist die triviale Kurve; die inverse einer Kurve ist die Kurve mit der entgegengesetzten Orientierung.] Die resultierende Gruppe wird üblicherweise mit $\pi_1(\mathcal{M})$ bezeichnet.

Jedes (nicht-triviale) Element γ in $\pi_1(\mathcal{M})$ beschreibt also einen nicht-zusammenziehbaren Weg in \mathcal{M} . Entlang jedes solchen Weges können wir die Phase von $\Psi(z)$ eindeutig bestimmen; nach Durchlaufen von γ ist dann die Phase im allgemeinen

$$\Psi(z_0) \xrightarrow{\gamma} U(\gamma)\Psi(z_0) , \quad (3.5.3)$$

wobei $U(\gamma)$ eine Phase ist. Da homotope Wege notwendigerweise zu derselben Phase führen, definiert $U(\gamma)$ in der Tat eine Darstellung der Homotopiegruppe,

$$U : \pi_1(\mathcal{M}) \rightarrow U(1) . \quad (3.5.4)$$

Diese Darstellung charakterisiert die ‘Statistik’ der Wellenfunktion.

Mit diesen Vorbemerkungen sind wir nun in der Lage, die verschiedenen Möglichkeiten der ‘Statistik’ zu verstehen. In $D \geq 3$ ist die Homotopiegruppe des obigen Konfigurationsraums

$$\pi_1(\mathcal{M}_{D,N}) = S_N \quad (3.5.5)$$

gerade die Permutationsgruppe. Die Statistik des Vielteilchensystems wird also durch eine 1-dimensionale Darstellung der Permutationsgruppe S_N bestimmt. Wie wir schon oben erwähnt haben, gibt es genau zwei inäquivalente 1-dimensionale Darstellungen von S_N , nämlich die triviale und die anti-symmetrische Darstellung. Erstere tritt für Bosonen und letztere für Fermionen auf.

In $D = 2$ ist die Situation jedoch interessanter: dort findet man

$$\pi_1(\mathcal{M}_{D=2,N}) = B_N , \quad (3.5.6)$$

wobei B_N die **Zopfgruppe** ist. Das Auftreten der Zopfgruppe kann man sich leicht veranschaulichen, wenn man das Durchlaufen der Wege in der Zeit auf der z -Achse aufträgt. Algebraisch wird die Zopfgruppe B_N durch die Generatoren τ_i , $i = 1, \dots, N - 1$ erzeugt, wobei die Relationen durch

$$\tau_i \tau_{i+1} \tau_i = \tau_{i+1} \tau_i \tau_{i+1} , \quad i = 1, \dots, N - 2 \quad (3.5.7)$$

$$\tau_i \tau_j = \tau_j \tau_i , \quad |i - j| \geq 2 \quad (3.5.8)$$

gegeben sind. Diese Relationen stimmen genau mit jenen der Permutationsgruppe (3.1.5) und (3.1.6) überein, es fehlt jedoch das Analogon von (3.1.7). Diese Relation war verantwortlich dafür, dass die Permutationsgruppe nur zwei 1-dimensionale Darstellungen besitzt, die dadurch ausgezeichnet sind, dass

$$\sigma_i \mapsto \pm 1 . \quad (3.5.9)$$

Da diese Relation für die Zopfgruppe B_N nicht existiert, gibt es in der Tat allgemeinere 1-dimensionale Darstellungen: es ist offensichtlich, dass

$$\tau_i \mapsto e^{i\alpha} \quad (3.5.10)$$

für jedes α eine Darstellung der Zopfgruppe B_N definiert. In zwei Dimensionen gibt es also nicht nur Bosonen ($\alpha = 0$) und Fermionen ($\alpha = \pi$), sondern auch Teilchen mit ‘fraktioneller Statistik’, ($\alpha \in (0, \pi)$). Diese Teilchen werden ‘Anyonen’ genannt. Anyonen sind im fraktionellen Quanten-Halleffekt, in dem die relevante Physik in einer 2-dimensionalen Ebene stattfindet, tatsächlich beobachtet worden (Tsui, Störmer, Laughlin Nobelpreis 1998).