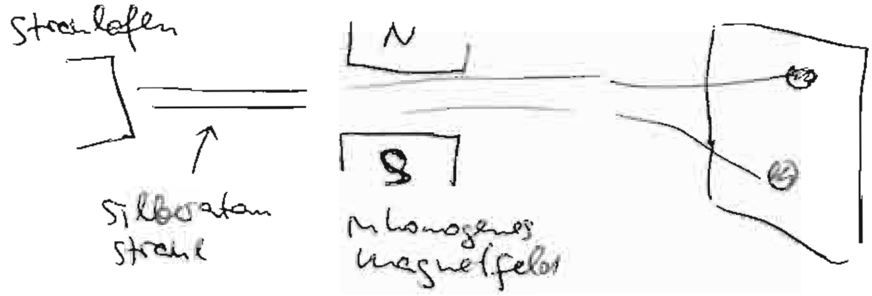
VL 25, 01.02.2011

(14) Spin

Versuch von Stern-Gerlach (1922):



Schirm: klassisch erwartete kontinuierliche Verteilung

man sieht aber zwei voneinander getrennte Silberflecken

Das wurde in einigen Jahren (ca 1925) interpretiert als das Vorhandensein eines internen Drehimpulses ~~beim~~ Elektron, der von dem Bahndrehimpuls verschieden ist. (Im Grundzustand ist die Erwartung von L_3 gleich $m=0$)

Dieser eigene Drehimpuls vom Elektron trägt den Namen „Spin". Es ist wichtig, dass für eine theoretische Erklärung keine Änderung der Grundprinzipien der Quantenmechanik notwendig war, lediglich eine Anpassung der Beschreibung bestimmter Sorten von Teilchen.

Es wurde nämlich eine „Verdopplung der Zustände" notwendig. $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^3)$ wird ersetzt durch

$$\mathcal{H}_S = \mathcal{H} \otimes \mathbb{C}^2 = \left\{ \Psi = \begin{pmatrix} \psi_1(x) \\ \psi_2(x) \end{pmatrix} \text{ mit} \right.$$

$$\left. (\Psi, \Phi) = \int_{\mathbb{R}^3} \psi_1(x)\overline{\varphi_1(x)}\,dx + \int_{\mathbb{R}^3} \psi_2(x)\overline{\varphi_2(x)}\,dx < \infty \right\}$$

Zu jeder Observablen A in $\mathcal{H}$ entspricht eine Observable $A \otimes I_2$ in $\mathcal{H}_S$, gegeben durch die Block-2x2-Matrix $\begin{pmatrix} A & 0 \\ 0 & A \end{pmatrix}$. z. B. $(Q_1 \times I)\Psi = \begin{pmatrix} x_1\psi_1(x) \\ x_1\psi_2(x) \end{pmatrix}$

$(P_1 \times I)\psi = \begin{pmatrix} \frac{\hbar}{i}\frac{\partial\psi_1(x)}{\partial x_1} \\ \frac{\hbar}{i}\frac{\partial\psi_2(x)}{\partial x_1} \end{pmatrix}$. Jedem reinen Zustand $\psi(x) \in \mathcal{H}$ entsprechen zwei orthogonale Zustände

$$\Psi_1 = \begin{pmatrix} \psi(x) \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad \Psi_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ \psi(x) \end{pmatrix},$$

sowie ihre Linearkombinationen (Verdopplung).

Es gibt aber auch Observablen einer anderen Sorte, z.B. von der Form $I \otimes S$, wobei S ein s.a. Operator auf $\mathbb{C}^2$ ist. Solche S können ~~als~~ s.a. 2x2 Matrizen dargestellt werden,

$$S = \begin{pmatrix} a & b \\ -\bar{b} & \bar{a} \end{pmatrix},$$

also als (reelle) Linearkombinationen von

$$I_2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad i\sigma_1 = i\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad i\sigma_2 = i\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad i\sigma_3 = i\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Man hat

$$[\sigma_1, \sigma_2] = 2i\sigma_3, \quad [\sigma_2, \sigma_3] = 2i\sigma_1, \quad [\sigma_3, \sigma_1] = 2i\sigma_2$$

$$\Rightarrow \left[-\tfrac{i}{2}\sigma_1, -\tfrac{i}{2}\sigma_2\right] = -\tfrac{i}{2}\sigma_3, \quad \left[-\tfrac{i}{2}\sigma_2, -\tfrac{i}{2}\sigma_3\right] = -\tfrac{i}{2}\sigma_1, \quad \left[-\tfrac{i}{2}\sigma_3, -\tfrac{i}{2}\sigma_1\right] = -\tfrac{i}{2}\sigma_2,$$

d.h. die Kommutationsrelationen für infinitesimale Erzeugenden der Drehgruppe. Die Abbildung

$$g \mapsto \bar{U}(g) = \exp\left(-\tfrac{i}{2}(\sigma_1 a_1 + \sigma_2 a_2 + \sigma_3 a_3)\right)$$

is eine projektive Darstellung von $SO(3)$, da statt $\bar{U}(g_1)\bar{U}(g_2) = \bar{U}(g_1 g_2)$ man hat $\bar{U}(g_1)\bar{U}(g_2) = \pm\bar{U}(g_1 g_2)$

(z.B., der Drehung um π um die x_3-Achse entspricht

$$\bar{U}(g) = e^{-\frac{i}{2}\sigma_3 \pi} = \begin{pmatrix} e^{-i\pi/2} & 0 \\ 0 & e^{i\pi/2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -i & 0 \\ 0 & i \end{pmatrix} \text{ mit}$$

$$\bar{U}(g)\bar{U}(g) = \begin{pmatrix} -i & 0 \\ 0 & i \end{pmatrix}^2 = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = -I.$$

Wie Drehimpulskomponenten verhalten sich

$$S_j = \frac{\hbar}{2}\sigma_j, \quad j = 1,2,3.$$

$$[S_1, S_2] = i\hbar S_3 \;, \quad [S_2, S_3] = i\hbar S_1, \quad [S_3, S_1] = i\hbar S_2$$

Also

$$S_3 \begin{pmatrix} \psi_1(x) \\ \psi_2(x) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\hbar}{2} \psi_1(x) \\ -\frac{\hbar}{2} \psi_2(x) \end{pmatrix},$$

$$S_1 \begin{pmatrix} \psi_1(x) \\ \psi_2(x) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\hbar}{2} \psi_2(x) \\ \frac{\hbar}{2} \psi_1(x) \end{pmatrix} \;, \quad S_2 \begin{pmatrix} \psi_1(x) \\ \psi_2(x) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\frac{i\hbar}{2} \psi_2(x) \\ \frac{i\hbar}{2} \psi_1(x) \end{pmatrix}$$

merke, dass

$$S_1^2 + S_2^2 + S_3^2 = \frac{\hbar^2}{4} (\sigma_1^2 + \sigma_2^2 + \sigma_3^2) = \frac{3}{4} \hbar^2 I_2 = \hbar^2 s(s+1) I_2 \Rightarrow$$

$$\boxed{s = \frac{1}{2}} \;, \text{ „Elektron hat Spin} = \frac{1}{2}\text{"}.$$

Oft schreibt man $\psi \in \mathcal{H}_S$ als Funktionen von zwei Variablen $x \in \mathbb{R}^3$ und $\sigma \in \{\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\}$:

$$\psi(x, \tfrac{1}{2}) = \psi_1(x) \quad \text{und} \quad \psi(x, -\tfrac{1}{2}) = \psi_2(x)$$

Jede Funktion $\psi(x,\sigma)$ läßt sich als endliche Linearkombination von zerfallenden Elementen von $L^2(\mathbb{R}^3) \otimes \mathbb{C}^2$ schreiben, also als $\sum \psi(x) \chi(\sigma)$. Dabei identifiziert man $\mathbb{C}^2$ mit dem Raum komplexwertigen Funktionen $\chi : \{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\} \to \mathbb{C}$, mit der Standardbasis

$$\begin{cases} \chi_1(\frac{1}{2}) = 1 \\ \chi_1(-\frac{1}{2}) = 0 \end{cases} , \quad \begin{cases} \chi_2(\frac{1}{2}) = 0 \\ \chi_2(-\frac{1}{2}) = 1 \end{cases}$$

In dieser Schreibweise gilt:

$$S_3 \psi(x,\sigma) = \hbar\sigma\, \psi(x,\sigma),$$

also ist S_3, wie Q_1, Q_2, Q_3, der Multiplikationsoperator mit der Variablen.

Verallgemeinerung: es sei für jedes $s \in \frac{1}{2}\mathbb{Z}_{\geq 0}$ die ρ_s eine irreduzible Darstellung von $SU(2)$ auf einem Vektorraum der Dimension $2s+1$, und

$$S_j = i\hbar \rho_s(A_j), \quad j = 1,2,3$$

(in der Fundamentaldarstellung $\rho_{1/2}$ auf $\mathbb{C}^2$ haben wir für

$$A_1 = -\tfrac{i}{2}\sigma_1, \quad A_2 = -\tfrac{i}{2}\sigma_2, \quad A_3 = -\tfrac{i}{2}\sigma_3$$

konstruiert

$$S_1 = i\hbar A_1 = \tfrac{\hbar}{2}\sigma_1, \quad S_2 = i\hbar A_2 = \tfrac{\hbar}{2}\sigma_2, \quad S_3 = i\hbar A_3 = \tfrac{\hbar}{2}\sigma_3)$$

$\boxed{\text{A10}}$ Der Zustandsraum für ein Teilchen von Spin $s \in \frac{1}{2}\mathbb{Z}_{\geq 0}$ ist $\mathcal{H}_s = L^2(\mathbb{R}^3) \times V_s$, wobei V_s der $(2s+1)$-dimensionaler Vektorraum einer irreduziblen Darstellung R_s von $SU(2)$ ist. ~~Die~~ Spinoperatoren S_j für $j = 1,2,3$ sind durch

$$I \otimes (i\hbar \rho_s(A_j))$$

gegeben. Teilchen mit $s \in \mathbb{Z}_{\geq 0}$ sind Bosonen genannt, Teilchen mit $s \in \frac{1}{2}\{1,3,5,\dots\}$ - Fermionen.

Wie im Falle $s = \frac{1}{2}$, ist es bequem, $\psi \in \mathcal{H}_s$ als $\psi(x,\sigma)$ darzustellen, mit $x \in \mathbb{R}^3$ und $\sigma \in \{+s, +(s-1), \dots, -(s-1), -s\}$, wobei

$$\psi(x) = \begin{pmatrix} \psi(x,s) \\ \psi(x,s-1) \\ \vdots \\ \psi(x,-s) \end{pmatrix} = \sum \psi(\sigma)\chi(\sigma),$$

und $\mathbb{C}^{2s+1}$ ist identifiziert mit dem Raum komplexwertiger Funktionen $\chi : \{s, s-1, \dots, -(s-1), -s\} \to \mathbb{C}$,

$$\begin{cases} \chi_k(s+1-k) = 1, \\ \chi_k(i) = 0, \quad i \neq k-s-1 \end{cases}, \quad k \in \{1, 2, \dots, 2s+1\}$$

Addition von Spins (von Drehimpulsen im Allgemeinen)

Wir betrachten jetzt ein System von zwei Elektronen (zwei Spin-$\frac{1}{2}$-Teilchen). Sein Spinraum ist $\mathbb{C}^2 \otimes \mathbb{C}^2$, mit einer Basis

$$e_1 \otimes e_1\,, \quad e_1 \otimes e_2\,, \quad e_2 \otimes e_1\,, \quad e_2 \otimes e_2\,.$$

Es stellt sich als bequemer heraus, zu einer anderen orthonormalen Basis zu übergehen:

$$W_1 = e_1 \otimes e_1\,, \qquad W_2 = e_2 \otimes e_2\,,$$

$$W_3 = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(e_1 \otimes e_2 + e_2 \otimes e_1\right)$$

$$W_4 = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(e_1 \otimes e_2 - e_2 \otimes e_1\right).$$

Die sind nämlich Eigenvektoren von

$$S_3 = S_3^{(1)} + S_3^{(2)} \quad \text{und} \quad S^2 = S_1^2 + S_2^2 + S_3^2$$

$$= \frac{\hbar}{2}\sigma_3 \otimes I + \frac{1}{2} I \otimes \sigma_3\,.$$

In der Tat,

$$\begin{cases} \sigma_1 e_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = e_2 \\ \sigma_1 e_2 = \qquad\qquad\qquad\qquad = e_1 \end{cases}$$

$$\begin{cases} \sigma_2 e_1 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ i \end{pmatrix} = i e_2 \\ \sigma_2 e_2 = \qquad\qquad\qquad\qquad = -i e_1 \end{cases}$$

$$\begin{cases} \sigma_3 e_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = e_1 \\ \sigma_3 e_2 = \qquad\qquad\qquad\qquad = -e_2 \end{cases}$$

$$\Longrightarrow \quad S_3 W_1 = \left(\frac{\hbar}{2}\sigma_3 \otimes I + \frac{\hbar}{2} I \otimes \sigma_3\right) e_1 \otimes e_1 = \frac{\hbar}{2} e_1 \otimes e_1 + \frac{\hbar}{2} e_1 \otimes e_1 = \hbar W_1$$

$$S_3 W_2 = \left(\frac{\hbar}{2}\sigma_3 \otimes I + \frac{\hbar}{2} I \otimes \sigma_3\right)(e_2 \otimes e_2) = -\frac{\hbar}{2} e_2 \otimes e_2 - \frac{\hbar}{2} e_2 \otimes e_2 = -\hbar W_2$$

$$S_3 W_3 = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{h}{2}\sigma_3 \otimes I + \frac{h}{2} I \otimes \sigma_3\right)(e_1 \otimes e_2 + e_2 \otimes e_1)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{h}{2} e_1 \otimes e_2 - \frac{h}{2} e_2 \otimes e_1 - \frac{h}{2} e_1 \otimes e_2 + \frac{h}{2} e_2 \otimes e_1\right) = 0 \cdot W_3$$

$$S_3 W_4 \qquad\qquad = 0 \cdot W_4$$

Desweiteren haben wir

$$S^2 W_j = \begin{cases} 2h^2 W_j & , j = 1, 2, 3 \\ 0 \cdot W_j & , j = 4 \end{cases}$$

z. B., für $j = 3$:

$$S_3 W_3 = 0 \Rightarrow S_3^2 W_3 = 0 ;$$

$$S_2 W_3 = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{h}{2}\sigma_2 \otimes I + I \otimes \frac{h}{2}\sigma_2\right)(e_1 \otimes e_2 + e_2 \otimes e_1)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{ih}{2} e_2 \otimes e_2 - \frac{ih}{2} e_1 \otimes e_1 - \frac{ih}{2} e_1 \otimes e_1 + \frac{ih}{2} e_2 \otimes e_2\right)$$

$$= \frac{ih}{\sqrt{2}} (e_2 \otimes e_2 - e_1 \otimes e_1) ;$$

$$S_2^2 W_3 = \frac{ih}{\sqrt{2}}\left(\frac{h}{2}\sigma_2 \otimes I + I \otimes \frac{h}{2}\sigma_2\right)(e_2 \otimes e_2 - e_1 \otimes e_1)$$

$$= \frac{ih}{\sqrt{2}}\left(-\frac{ih}{2} e_1 \otimes e_2 - \frac{ih}{2} e_2 \otimes e_1 - \frac{ih}{2} e_2 \otimes e_1 - \frac{ih}{2} e_1 \otimes e_2\right)$$

$$= \frac{h^2}{\sqrt{2}} (e_1 \otimes e_2 + e_2 \otimes e_1) = h^2 W_3 ;$$

$$S_1 W_3 = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{h}{2}\sigma_1 \otimes I + I \otimes \frac{h}{2}\sigma_1\right)(e_1 \otimes e_2 + e_2 \otimes e_1)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{h}{2} e_2 \otimes e_2 + \frac{h}{2} e_1 \otimes e_1 + \frac{h}{2} e_1 \otimes e_1 + \frac{h}{2} e_2 \otimes e_2\right)$$

$$= \frac{h}{\sqrt{2}} (e_1 \otimes e_1 + e_2 \otimes e_2) ;$$

$$S_1^2 W_3 = \frac{h}{\sqrt{2}}\left(\frac{h}{2}\sigma_1 \otimes I + I \otimes \frac{h}{2}\sigma_1\right)(e_1 \otimes e_1 + e_2 \otimes e_2)$$

$$= \frac{h}{\sqrt{2}}\left(\frac{h}{2} e_2 \otimes e_1 + \frac{h}{2} e_1 \otimes e_2 + \frac{h}{2} e_1 \otimes e_2 + \frac{h}{2} e_2 \otimes e_1\right) = h^2 W_3 .$$

Also w_1, w_2, w_3 beschreiben Zustände mit $S_1^2+S_2^2+S_3^2=2$, w_4 – den Zustand mit $S_1^2+S_2^2+S_3^2=0$. Dabei $2=S(S+1) \Rightarrow$
$\Rightarrow S=1$ und $0=S(S+1) \Leftrightarrow S=0$.

Vom Standpunkt der Darstellungstheorie, sehen wir, daß das Tensorquadrat der Standarddarstellung

$$U(g)=\exp\left(-\frac{i}{2}(a_1\sigma_1+a_2\sigma_2+a_3\sigma_3)\right) \text{ ist}$$

$U(g)\otimes U(g)$ nicht mehr irreduzibel, sondern darstellbar als die direkte Summe zweier irreduziblen Darstellungen: $\mathbb{C}^4=\mathrm{span}(w_1,w_2,w_3)\oplus \mathbb{C}(w_4)$ beide sind invariant unter $U(g)\otimes U(g)$:

$$V_{\frac{1}{2}}\otimes V_{\frac{1}{2}} = V_0 \oplus V_1 .$$

Das ist ein partikulärer Fall der sogenannten Clebsch-Gordan-Zerlegung

$$V_{s_1}\otimes V_{s_2} = \bigoplus_{j=|s_1-s_2|}^{s_1+s_2} V_j \quad , \quad s_1, s_2 \in \frac{1}{2}\mathbb{Z}_{\geq 0}$$

Diese Zerlegung wird erreicht durch den Übergang von $e_{s_1m_1}\otimes e_{s_2m_2}$, $m_k\in\{-s_k,\dots,s_k\}$, $k=1,2$

wobei $e_{s_km_k}$ die Eigenvektoren von $(S^{(k)})^2$ und $S_3^{(k)}$ zu den Eigenwerten $\hbar^2 s_k(s_k+1)$ bzw. m_k sind, zu einer anderen Basis

$$e_{s_1s_2SM} \quad , \quad \begin{array}{l} S\in\{|s_1-s_2|,\dots,s_1+s_2\} \\ M\in\{-S,\dots,S\} \end{array}$$

von Eigenvektoren von Operatoren $(S^{(1)})^2$, $(S^{(2)})^2$, $(S^{(1)}+S^{(2)})^2$, $S_3^{(1)}+S_3^{(2)}$. Die Koeffizienten in

$$e_{s_1s_2SM}=\sum_{m_1,m_2} C_{s_1s_2SM;\,s_1m_1;\,s_2m_2}\, e_{s_1m_1}\otimes e_{s_2m_2}$$

sind die sogenannten Clebsch-Gordan-Koeff.

Systeme aus mehreren Teilchen mit Spin

Ein System aus N Teilchen mit entspr. Spins $s_1, \dots, s_N$ würde mit Hilfe von folgenden Zustandsraum beschrieb

$$\mathcal{H}_N = \mathcal{H}_{s_1} \otimes \dots \otimes \mathcal{H}_{s_N} =$$
$$= L^2(\mathbb{R}^3) \otimes V_{s_1} \otimes L^2(\mathbb{R}^3) \otimes V_{s_2} \otimes \dots \otimes L^2(\mathbb{R}^3) \otimes V_{s_N}.$$

Bezeichnet man $\xi_i = (x_i, \sigma_i)$, $x_i \in \mathbb{R}^3$, $\sigma_i \in \{-s_i, \dots, s_i\}$, so schreibt man die totale Wellenfunktion als

$$\Phi(\xi_1, \dots, \xi_N).$$

Die läßt sich als endliche Linearkombination von

$$\sum \psi(x_1, \dots, x_N)\, \chi(\sigma_1, \dots, \sigma_N)$$

schreiben, wobei $\psi(x_1, \dots, x_N) \in L^2(\mathbb{R}^{3N})$ die Koordinaten- (Orts-) Wellenfunktionen sind, und $\chi(\sigma_1, \dots, \sigma_N)$ ist der Spinteil der totalen Wellenfunktion. Letzterer läßt sich als eine endliche Linearkombination von $\chi_{k_1}(\sigma_1) \dots \chi_{k_N}(\sigma_N)$ schreiben, wobei $\chi_{k_i}(\sigma_i)$ die Funktionen sind, die den Einheitskoordinatenvektoren entsprechen.

~~Der~~ Hamiltonoperator ist

$$H_N = -\sum_{i=1}^{N} \frac{\hbar^2}{2m_i} \Delta_i + \underbrace{\sum_{i=1}^{N} V_i(x_i)}_{\text{Wechselwirkung mit externem Feld}} + \underbrace{\sum_{1 \le i < j \le N} V_{ij}(x_i - x_j)}_{\text{Paarwechselwirkung}}$$

Wir werden sehen, daß, obwohl dieser Operator lediglich auf den Koordinatenteil $\psi(x_1, \dots, x_N)$ wirkt, hängen die physikalischen Eigenschaften vom System auch vom Spins ab.

Wir werden uns hier für den Fall von N identischen Teilchen interessieren, wobei alle $m_i = m$, alle $s_i = s$ sind. Dabei ist die Wirkung der Symmetrischen Gruppe S_N von Interesse. Sie besteht aus allen Permutationen

$$\pi = \begin{pmatrix} 1 & 2 & \dots & N \\ i_1 & i_2 & & i_N \end{pmatrix} \sim (i_1\, i_2 \dots i_N)$$

Jeder Permutation kann ihre Parität zugeordnet werden (also der Wert mod 2)) (die Parität der Anzahl der elementaren Flips $\begin{pmatrix} i & j \\ j & i \end{pmatrix}$, in die π zerlegt werden kann:

$$\varepsilon\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 3 & 1 \end{pmatrix} = \varepsilon(2\,3\,1) = 0 \qquad (2\;3\;1) \to (2\;1\;3) \to (1\;2\;3)$$

$$\varepsilon\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 3 & 2 & 1 \end{pmatrix} = \varepsilon(3\,2\,1) = 1 \qquad (3\;2\;1) \to (3\;1\;2) \to (1\;3\;2) \to (1\dots)$$

Eine natürliche Darstellung von S_N auf $\mathcal{H}_N$:

$$P_\pi \Psi(\xi_1, \dots, \xi_N) = \Psi(\xi_{i_1}, \dots, \xi_{i_N}).$$

H_N ist mit P_π vertauschbar: $[H, P_\pi] = 0 \quad \forall \pi \in S_N$.
Daher kann H_N auf jeden S_N-invarianten Unterraum von $\mathcal{H}_N$ eingeschränkt werden. Zwei solche Unterräume sind offensichtlich:

$$\mathcal{H}_N^S = \{\Psi(\xi_1, \dots, \xi_N) : P_\pi \Psi = \Psi \quad \forall \pi\}$$

$$\mathcal{H}_N^A = \{\Psi(\xi_1, \dots, \xi_N) : P_\pi \Psi = (-1)^{\varepsilon(\pi)} \Psi \quad \forall \pi\}$$

Für $N=2$ gibt es nicht mehr, da

$$\Psi(\xi_1, \xi_2) = \frac{1}{2}\left(\Psi(\xi_1, \xi_2) + \Psi(\xi_2, \xi_1)\right) + \qquad \in \mathcal{H}_2^S$$
$$+ \frac{1}{2}\left(\Psi(\xi_1, \xi_2) - \Psi(\xi_2, \xi_1)\right), \qquad \in \mathcal{H}_2^A$$

sodaß $\mathcal{H}_2 = \mathcal{H}_2^S \oplus \mathcal{H}_2^A$; beide sind sogar orthogonal zueinander. Für $N > 2$ gibt es weitere invariante Unterräume, die sind aber nach dem folgenden Pauli-(Ausschluss)Prinzip irrelevant für Physik:

A11 Der Zustandsraum für N identische Teilchen von Spin s ist

$$\begin{cases} \mathcal{H}_N^S, & \text{falls } s \in \mathbb{Z}_{\geq 0} \quad (\text{Bosonen}) \\ \mathcal{H}_N^A, & \text{falls } s \in \frac{1}{2}\{1,3,5,\dots\} \quad (\text{Fermionen}). \end{cases}$$

Es ist klar, daß $\mathcal{H}_N$ zu groß ist: er enthält zu viele Zustände, da nach den Heisenbergschen Unschärferelationen kann man die Zeitevolution jeder einzelnen der identischen Teilchen nicht individuell verfolgen. Welcher Teil von $\mathcal{H}_N$ auf die korrekte Weise das physikalische Verhalten wiederspiegelt (modelliert), muß postuliert (und experimentell verifiziert) werden.

Also muß man die Schrödinger-Gl.

$$H_N \Psi = E\Psi$$

nur auf $\mathcal{H}_N^S$, bzw. auf $\mathcal{H}_N^A$ betrachten, was zu verschiedenen Spektren führt.

Der Fall von Fermionen ist mathematisch interessanter. Betrachten wir wieder $N=2$, $s=\frac{1}{2}$ (zwei Elektronen).

$$\frac{1}{2}\left(\Phi(\xi_1,\xi_2) - \Phi(\xi_2,\xi_1)\right)$$
$$= \frac{1}{2}\left(\psi(x_1,x_2)\chi(\sigma_1,\sigma_2) - \psi(x_2,x_1)\chi(\sigma_2,\sigma_1)\right)$$
$$= \frac{1}{4}\left(\psi(x_1,x_2)+\psi(x_2,x_1)\right)\left(\chi(\sigma_1,\sigma_2) - \chi(\sigma_2,\sigma_1)\right)$$
$$+\frac{1}{4}\left(\psi(x_1,x_2)-\psi(x_2,x_1)\right)\left(\chi(\sigma_1,\sigma_2) + \chi(\sigma_2,\sigma_1)\right)$$

Also

$$\mathcal{H}_2^A = \Sigma_0 \oplus \Sigma_1,$$

wobei

$$\Sigma_0 = \left(L^2(\mathbb{R}^3)\otimes L^2(\mathbb{R}^3)\right)^S \otimes \Lambda^2\mathbb{C}^2$$

$$\Sigma_1 = \left(L^2(\mathbb{R}^3)\otimes L^2(\mathbb{R}^3)^A\right) \otimes \mathrm{Sym}^2\,\mathbb{C}^2$$

Also ist der Koordinatenteil von totalen Wellenfkten in Σ_0 <u>symmetrisch</u>, während

$$\Lambda^2\mathbb{C}^2 = \mathrm{Span}\,(e_1\otimes e_2 - e_2\otimes e_1) \subset \mathbb{C}^2\otimes\mathbb{C}^2$$

eindimensional ist,

der Koordinatenteil von totalen Wellenfunktionen in Σ_1 ist schiefsymmetrisch, während

$$\mathrm{Sym}^2\,\mathbb{C}^2 = \mathrm{Span}(e_1\otimes e_1,\ e_2\otimes e_2,\ e_1\otimes e_2 + e_2\otimes e_1) \subset \mathbb{C}^2\otimes\mathbb{C}^2$$

dreidimensional ist.

Dabei gilt

$\Lambda^2\mathbb{C}^2 = V_0 =$ Darstellungsraum der Spin-0-irreduziblen Darstellung von $SU(2)$

$\mathrm{Sym}^2\,\mathbb{C}^2 = V_1 =$ Darstellungsraum der Spin-1-irreduziblen Darstellung von $SU(2)$

So, z.B. fürs Helium

$$H_2 = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_1 - \frac{\hbar^2}{2m}\Delta_2 - \frac{2}{r_1} - \frac{2}{r_2} + \frac{1}{r_{12}}\ ;$$

man muß nach Eigenfunktionen suchen, deren Koordinatenteil entweder symmetrisch bez. $x_1 \leftrightarrow x_2$ oder schiefsymmetrisch ist:

$$H_2\Psi(x_1,x_2) = E\Psi(x_1,x_2)\ , \qquad \Psi(x_1,x_2) = \Psi(x_2,x_1) \text{ oder } = -\Psi(x_2,x_1)$$

je nachdem, ob der totale Spin 0 oder 1 ist.

Also hängen die Energieniveaus vom totalen Spin, sogar wenn wir die Spinwechselwirkung in Schrödingergleichung (also im Hamilton-Operator) vernachlässigen!

Insbesondere kann man zeigen, daß der Grundzustand (mit der niedrigsten Energie) symmetrisch bez. x_1, x_2 ist, also Spin 0 hat.
Es gibt zwei Sorten von Helium, mit verschiedenen optischen Spektra: $S=0$ (Parahelium) und $S=1$ (Orthohelium). ~~Zu~~ Jedem Energiewert von Parahelium entspricht ein Spinzustand $W_4 = \frac{1}{\sqrt{2}}(e_1 \otimes e_2 - e_2 \otimes e_1)$, (Singlett), jedem Energiewert von Orthohelium entsprechen drei Spinzustände $W_1 = e_1 \otimes e_1$, $W_2 = e_2 \otimes e_2$ und $W_3 = \frac{1}{\sqrt{2}}(e_1 \otimes e_2 + e_2 \otimes e_1)$ (Triplett). Eigentlich (nach Berücksichtigung von Spinwechselwirkungen) zerfallen die Tripletenergiewerte in drei benachbarten Niveaus.

Allgemeiner Satz. Koordinatenteil der Wellenfunktion von N Spin-$\frac{1}{2}$-Teilchen zur totalen Wellenfunktion vom Spin S hat folgende Eigenschaften (und ist dadurch charakterisiert): sei $k = \frac{N}{2} + S$. Dann

- $\psi(x_1, \dots, x_N)$ ist schiefsymmetrisch bezüglich $x_1, \dots, x_k$
- und bezüglich $x_{k+1}, \dots, x_N$
- $\psi(x_1, \dots, x_N) = \sum_{i=1}^{k} \psi_0(x_1, \dots, x_N)\Big|_{x_i \leftrightarrow x_{k+1}}$

Beispiel.

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i=1}^{N} \Delta_i + \sum_{i=1}^{N} U(r_i),$$

Ansatz:

$$\psi(\xi_1, \dots, \xi_n) = \psi_1(\xi_1) \cdot \ldots \cdot \psi_n(\xi_n)$$

Sind $\psi_i(\xi_i)$ Eigenfunktionen für

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi_i + U(r)\psi_i = E_i\psi_i \,,$$

so ist ψ eine Eigenfunktion für H_N zum EW $E = E_1 + \dots + E_n$. Allerdings genügt diese Funktion nicht dem Pauli-Prinzip. Das kann man aber reparieren, da die schiefsymmetrische Kombination von allen $P_\pi \psi$ ist

$$\psi^A(\xi_1, \dots, \xi_N) = \text{konst.} \begin{vmatrix} \psi_1(\xi_1) & \dots & \psi_1(\xi_N) \\ - & - & - \\ \psi_n(\xi_1) & \dots & \psi_n(\xi_N) \end{vmatrix}$$

~~Der~~ Jetzt

Sei $k \geq \frac{N}{2}$, und seien $\psi_1, \dots, \psi_k$ ein-Elektronwellenfunktionen. Dann erfüllt

$$\psi(x_1, \dots, x_N) = \begin{vmatrix} \psi_1(x_1) & \dots & \psi_1(x_k) \\ - & - & \\ \psi_k(x_1) & \dots & \psi_k(x_k) \end{vmatrix} \cdot \begin{vmatrix} \psi_1(x_{k+1}) & \dots & \psi_1(x_N) \\ - & - & - \\ \psi_{N-k}(x_{k+1}) & \dots & \psi_{N-k}(x_N) \end{vmatrix}$$

die Bedingungen des letzten Satzes.

$N=4 \quad k=2, \quad s=0$

$$\psi(x_1,x_2,x_3,x_4) = \begin{vmatrix} \psi_1(x_1) & \psi_1(x_2) \\ \psi_2(x_1) & \psi_2(x_2) \end{vmatrix} \begin{vmatrix} \psi_1(x_3) & \psi_1(x_4) \\ \psi_2(x_3) & \psi_2(x_4) \end{vmatrix} \overset{?}{=} \psi(x_3,x_2,x_1,x_4) + \psi(x_1,x_3,x_2,x_4)$$

$$\overset{?}{=} \begin{vmatrix} \psi_1(x_3) & \psi_1(x_2) \\ \psi_2(x_3) & \psi_2(x_2) \end{vmatrix} \begin{vmatrix} \psi_1(x_1) & \psi_1(x_4) \\ \psi_2(x_1) & \psi_2(x_4) \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} \psi_1(x_1) & \psi_1(x_3) \\ \psi_2(x_1) & \psi_2(x_3) \end{vmatrix} \begin{vmatrix} \psi_1(x_2) & \psi_1(x_4) \\ \psi_2(x_1) & \psi_2(x_4) \end{vmatrix}$$

$$(\psi_1(x_1)\psi_2(x_2) - \psi_1(x_2)\psi_2(x_1))(\psi_1(x_3)\psi_2(x_4) - \psi_1(x_4)\psi_2(x_3)) =$$

$$\overset{?}{=} (\psi_1(x_3)\psi_2(x_2) - \psi_1(x_2)\psi_2(x_3))(\psi_1(x_1)\psi_2(x_4) - \psi_1(x_4)\psi_2(x_1))$$

$$+ (\psi_1(x_1)\psi_2(x_3) - \psi_1(x_3)\psi_2(x_1))(\psi_1(x_2)\psi_2(x_4) - \psi_1(x_4)\psi_2(x_2))$$

$$\psi_1(x_1)\psi_2(x_2)\psi_1(x_3)\psi_2(x_4) - \psi_1(x_1)\psi_2(x_2)\psi_2(x_3)\psi_1(x_4)$$
$$- \psi_2(x_1)\psi_1(x_2)\psi_1(x_3)\psi_2(x_4) + \psi_2(x_1)\psi_1(x_2)\psi_2(x_3)\psi_1(x_4)$$

$$\overset{?}{=} \psi_1(x_1)\psi_2(x_2)\psi_1(x_3)\psi_2(x_4) - \psi_2(x_1)\psi_2(x_2)\psi_1(x_3)\psi_1(x_4)$$
$$- \psi_1(x_1)\cancel{\psi_1(x_2)}\psi_2(x_3)\psi_2(x_4) + \psi_2(x_1)\psi_1(x_2)\psi_2(x_3)\psi_1(x_4)$$

$$+ \psi_1(x_1)\cancel{\psi_1(x_2)\psi_2(x_3)}\psi_2(x_4) - \psi_1(x_1)\psi_2(x_2)\psi_2(x_3)\psi_1(x_4)$$
$$- \psi_2(x_1)\psi_1(x_2)\psi_1(x_3)\psi_2(x_4) + \psi_2(x_1)\cancel{\psi_2(x_2)\psi_1(x_3)}\psi_1(x_4)$$