Quantenmechanik: Bewegungsgleichung

Klassische Mechanik:	Bewegung eines freien Teilchens (eindimensional)
Bewegungsgleichung:	$mx''(t) \;=\; 0$
Anfangsbedingung:	$x(0) \;=\; x_o \qquad x'(0) \;=\; v_o$
Lösung:	$x(t) \;=\; x_o + v_o t$
Quantenmechanik:	Bewegung eines freien Teilchens (eindimensional)
Schrödingergleichung:	$\boxed{\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2 - i\hbar\partial_t\right)\psi(x,t) \;=\; 0}$
Wellenfunktion:	$\psi(x,t): \mathbb{R}\times\mathbb{R} \longrightarrow \mathbb{C}$
Zustandsfunktion:	$\psi(t): \mathbb{R} \longrightarrow L^2(\mathbb{R})$
Nebenbedingung:	$\boxed{\left\lVert\psi(t)\right\rVert^2 \;=\; \int_{\mathbb{R}} dx\, \psi(x,t)^*\, \psi(x,t) \;=\; 1}$
Stationäre Lösung:	$\boxed{u_p(x,t) \;=\; \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\, \exp\left\{\frac{i}{\hbar}(px - Et)\right\}}$
Eigenwert:	$E \;=\; \frac{p^2}{2m} \;=\; \frac{(\hbar k)^2}{2m}$
Allgemeine Lösung:	$\boxed{\psi(x,t) \;=\; \int_{\mathbb{R}} dp\; f(p)\; u_p(x,t)}$
Nebenbedingung:	$\boxed{\left\lVert f\right\rVert^2 \;=\; \int_{\mathbb{R}} dp\, \lvert f(p)\rvert^2 \;=\; 1}$
Anfangsbedingung:	$\psi(x,0) \;=\;$ vorgegeben mit: $\left\lVert\psi(0)\right\rVert^2 \;=\; 1$
Gesucht:	$\psi(x,t) \qquad \forall t \in \mathbb{R}$
Interpretation:	$\lvert\psi(x,t)\rvert^2 dx \;=\;$ Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Teilchens an der Stelle x zur Zeit t
Vereinfachung:	$\hbar \;=\; \mathbf{1}$
Schrödingergleichung:	$\left(-\frac{1}{2m}\,\partial_x^2 - i\partial_t\right)\psi(x,t) \;=\; 0$
Stationäre Lösung:	$\boxed{u_k(x,t) \;=\; \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\, \exp\left\{ik\left(x - \frac{k}{2m}t\right)\right\}}$
Allgemeine Lösung:	$\psi(x,t) \;=\; \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\, \int_{\mathbb{R}} dk\; f(k)\; \exp\left\{ik(x - \frac{k}{2m}t)\right\}$
Nebenbedingung:	$\left\lVert f\right\rVert^2 \;=\; \int_{\mathbb{R}} dk\, \lvert f(k)\rvert^2 \;=\; 1$
Gesucht:	Zeitabhängige Lösungen

Quantenmechanik:	Bewegung eines Teilchens im Potential $V(x)$
Schrödingergleichung:	$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2 + V(x) - i\hbar\partial_t\right)\psi(x,t) \;=\; 0$
Wellenfunktion:	$\psi(x,t): \mathbb{R}\times\mathbb{R} \longrightarrow \mathbb{C}$
Zustandsfunktion:	$\psi(t): \mathbb{R} \longrightarrow L^2(\mathbb{R})$
Nebenbedingung:	$\left\|\psi(t)\right\|^2 \;=\; \int_{\mathbb{R}} dx\; \psi(x,t)^* \;\psi(x,t) \;=\; 1$
Gebundener Zustand:	falls eine kompakte, nicht notwendigerweise zusammenhängende Teilmenge $\mathbb{B}$ von $\mathbb{R}$ angegeben werden kann, so dass gilt
	$1-\varepsilon \leq \int_{\mathbb{B}} dx\; \psi(x,t)^* \;\psi(x,t) \leq 1 \qquad \forall t \;;\; \varepsilon \ll 1$
Stationäre Lösung:	$u_n(x,t) \;=\; u_n(x)\; \exp\left\{-\frac{i}{\hbar}E_n t\right\}$
Absolutquadrat:	$\vert u_n(x,t)\vert^2 \;=\; \vert u_n(x)\vert^2 \qquad \forall t$
EW-Gleichung:	$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2 + V(x)\right) u_n(x) \;=\; E_n\; u_n(x)$
Allgemeine Lösung:	$\psi(x,t) \;=\; \sum_n \; w_n\; u_n(x,t)$
Nebenbedingung:	$\sum_n \; \vert w_n\vert^2 \;=\; 1$
Anfangsbedingung:	$\psi(x,0) \;=\;$ vorgegeben mit: $\left\|\psi(0)\right\|^2 \;=\; 1$
Gesucht:	$\psi(x,t) \qquad \forall t \in \mathbb{R}$
Interpretation:	$\vert\psi(x,t)\vert^2 dx \;=\;$ Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Teilchens an der Stelle $x \in \mathbb{R}$ zur Zeit t
Vereinfachung:	$\hbar \;=\; \mathbf{1}$
Schrödingergleichung:	$\left(-\frac{1}{2m}\,\partial_x^2 + V(x) - i\partial_t\right)\psi(x,t) \;=\; 0$
Stationäre Lösung:	$u_n(x,t) \;=\; u_n(x)\; \exp\{-iE_n t\}$
Allgemeine Lösung:	$\psi(x,t) \;=\; \sum_n \; w_n\; u_n(x,t)$
Nebenbedingung:	$\sum_n \; \vert w_n\vert^2 \;=\; 1$
Gesucht:	Zeitabhängige Lösungen, gebundene Zustände, stationäre Zustände Streuzustände (zeitabhängig & zeitunabhängig)

Quantenmechanik:	Bewegung eines geladenen Teilchens im elm. Feld $\mathbf{A}(\mathbf{x})$ und Potential $V(\mathbf{x})$
Schrödingergleichung:	$\Big(\frac{1}{2m}\big(-i\hbar\nabla - \frac{e}{c}\mathbf{A}(\mathbf{x})\big)^2 + V(\mathbf{x}) - i\hbar\partial_t\Big)\,\psi(\mathbf{x},t) \;=\; 0$
Wellenfunktion:	$\psi(\mathbf{x},t): \mathbb{R}^3 \times \mathbb{R} \longrightarrow \mathbb{C}$
Zustandsfunktion:	$\psi(t): \mathbb{R} \longrightarrow L^2(\mathbb{R}^3)$
Nebenbedingung:	$\lVert\psi(t)\rVert^2 \;=\; \int_{\mathbb{R}^3} d^3\mathbf{x}\; \psi(\mathbf{x},t)^*\;\psi(\mathbf{x},t) \;=\; 1$
Gebundener Zustand:	falls eine kompakte, nicht notwendigerweise zusammenhängende Teilmenge $\mathbb{B}^3$ von $\mathbb{R}^3$ angegeben werden kann, so dass gilt
	$1-\varepsilon \le \int_{\mathbb{B}^3} d^3\mathbf{x}\;\psi(\mathbf{x},t)^*\;\psi(\mathbf{x},t) \le 1 \qquad \forall t\;;\;\varepsilon \ll 1$
Stationäre Lösung:	$u_n(\mathbf{x},t) \;=\; u_n(\mathbf{x})\;\exp\{-\frac{i}{\hbar}E_n t\}$
Absolutquadrat:	$\lvert u_n(\mathbf{x},t)\rvert^2 \;=\; \lvert u_n(\mathbf{x})\rvert^2 \qquad \forall t$
EW-Gleichung:	$\Big(\frac{1}{2m}\big(-i\hbar\nabla - \frac{e}{c}\mathbf{A}(\mathbf{x})\big)^2 + V(\mathbf{x})\Big)\,u_n(\mathbf{x}) \;=\; E_n\,u_n(\mathbf{x})$
Allgemeine Lösung:	$\psi(\mathbf{x},t) \;=\; \sum_n w_n\,u_n(\mathbf{x},t)$
Nebenbedingung:	$\sum_n \lvert w_n\rvert^2 \;=\; 1$
Anfangsbedingung:	$\psi(\mathbf{x},0) \;=\;$ vorgegeben mit: $\lVert\psi(0)\rVert^2 \;=\; 1$
Gesucht:	$\psi(\mathbf{x},t) \qquad \forall t \in \mathbb{R}$
Interpretation:	$\lvert\psi(\mathbf{x},t)\rvert^2 d^3\mathbf{x} \;=\;$ Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Teilchens an der Stelle $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^3$ zur Zeit t
Vereinfachung:	$\hbar \;=\; \mathbf{1} \;=\; \mathbf{c} \;=\; \mathbf{e}$
Schrödingergleichung:	$\big(\frac{1}{2m}\big(-i\nabla - \mathbf{A}(\mathbf{x})\big)^2 + V(\mathbf{x}) - i\partial_t\big)\psi(\mathbf{x},t) \;=\; 0$
Stationäre Lösung:	$u_n(\mathbf{x},t) \;=\; u_n(\mathbf{x})\;\exp\{-iE_n t\}$
Allgemeine Lösung:	$\psi(\mathbf{x},t) \;=\; \sum_n w_n\,u_n(\mathbf{x},t)$
Nebenbedingung:	$\sum_n \lvert w_n\rvert^2 \;=\; 1$
Gesucht:	Zeitabhängige Lösungen, gebundene Zustände, stationäre Zustände Streuzustände (zeitabhängig & zeitunabhängig)

Quantenmechanik: Bewegung eines geladenen Teilchens mit Spin $\frac{1}{2}$ (Elektron) im Zentralpotential $V(\mathrm{r})$, bzw. im konstanten Magnetfeld $\vec{\mathrm{H}}$ und Potential $W(\mathbf{x})$

Schrödingergleichung:

$$\Big(-\tfrac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\mathrm{r}) + \tfrac{\hbar^2}{2m^2c^2}\tfrac{1}{\mathrm{r}}\tfrac{dV}{d\mathrm{r}}(\mathbf{L}\,.\,\mathbf{S}) - \tfrac{e}{2mc}\vec{\mathrm{H}}\,.\,(\mathbf{L}+2\mathbf{S}) + W(\mathbf{x}) - i\hbar\partial_t\Big)\,\mathbf{\Psi}(\mathbf{x},t) \;=\; 0$$

Wellenfunktion: $\mathbf{\Psi}(\mathbf{x},s,t):\mathbb{R}^3\times\{+1,-1\}\times\mathbb{R}\longrightarrow\mathbb{C}$

$\mathbf{\Psi}(\mathbf{x},s,t) \;=\; \mathbf{\Psi}_s(\mathbf{x},t)$

Spinor:

$$\mathbf{\Psi}(\mathbf{x},t) \;=\; \begin{bmatrix}\mathbf{\Psi}_{+1}(\mathbf{x},t)\\ \mathbf{\Psi}_{-1}(\mathbf{x},t)\end{bmatrix} \;=\; \begin{bmatrix}\mathbf{\Psi}_{+}(\mathbf{x},t)\\ \mathbf{\Psi}_{-}(\mathbf{x},t)\end{bmatrix}$$

Zustandsfunktion: $\mathbf{\Psi}(t):\mathbb{R}\longrightarrow L^2(\mathbb{R}^3)\otimes\mathbb{C}^2$

Nebenbedingung:

$$\big\|\mathbf{\Psi}(t)\big\|^2 \;=\; \sum_{s=\pm\frac{1}{2}}\int_{\mathbb{R}^3} d^3\mathbf{x}\;\mathbf{\Psi}_s(\mathbf{x},t)^*\;\mathbf{\Psi}_s(\mathbf{x},t) \;=\; 1$$

Gebundener Zustand: falls eine kompakte, nicht notwendigerweise zusammenhängende Teilmenge $\mathbb{B}^3$ von $\mathbb{R}^3$ angegeben werden kann, so dass gilt

$$1-\varepsilon \le \sum_{s=\pm\frac{1}{2}}\int_{\mathbb{B}^3} d^3\mathbf{x}\;\mathbf{\Psi}_s(\mathbf{x},t)^*\;\mathbf{\Psi}_s(\mathbf{x},t) \le 1 \qquad \forall t\;;\;\varepsilon\ll 1$$

Stationäre Lösung:

$$\boldsymbol{u}_n(\mathbf{x},t) \;=\; \boldsymbol{u}_n(\mathbf{x})\,\exp\{-\tfrac{i}{\hbar}E_n t\}\;\;;\;\;\boldsymbol{u}_n(\mathbf{x}) \;=\; \begin{bmatrix}u_n^+(\mathbf{x})\\ u_n^-(\mathbf{x})\end{bmatrix}$$

$$\boldsymbol{u}_n(\mathbf{x}) \;=\; \boldsymbol{u}_n^+(\mathbf{x}) + \boldsymbol{u}_n^-(\mathbf{x})\;\;;\;\;\boldsymbol{u}_n^+(\mathbf{x}) \;=\; \begin{bmatrix}u_n^+(\mathbf{x})\\ 0\end{bmatrix}\;\;;\;\;\boldsymbol{u}_n^-(\mathbf{x}) \;=\; \begin{bmatrix}0\\ u_n^-(\mathbf{x})\end{bmatrix}$$

Absolutquadrat:

$$|\boldsymbol{u}_n(\mathbf{x},t)|^2 \;=\; |u_n^+(\mathbf{x})|^2 + |u_n^-(\mathbf{x})|^2 \qquad \forall t$$

EW-Gleichung:

$$\Big(-\tfrac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\mathrm{r}) + \tfrac{\hbar^2}{2m^2c^2}\tfrac{1}{\mathrm{r}}\tfrac{dV}{d\mathrm{r}}(\mathbf{L}\,.\,\mathbf{S}) - \tfrac{e}{2mc}\vec{\mathrm{H}}\,.\,(\mathbf{L}+2\mathbf{S}) + W(\mathbf{x})\Big)\,\boldsymbol{u}_n(\mathbf{x}) \;=\; E_n\,\boldsymbol{u}_n(\mathbf{x})$$

Allgemeine Lösung:

$$\mathbf{\Psi}(\mathbf{x},t) \;=\; \sum_n\big(w_n^+\;\boldsymbol{u}_n^+(\mathbf{x},t) + w_n^-\;\boldsymbol{u}_n^-(\mathbf{x},t)\big)$$

Nebenbedingung:

$$\sum_n\big(|w_n^+|^2 + |w_n^-|^2\big) \;=\; 1$$

Quantenmechanik: **Spin $\frac{1}{2}$–Teilchen**

Zustandsraum (Spin):

$\mathbb{C}^2 \;=\; \{a\mathbf{e}_1 + b\mathbf{e}_2 \mid a,b \in \mathbb{C}\}$

$\mathbf{e}_j \cdot \mathbf{e}_k \;=\; \delta_{jk}$

$\{\mathbf{e}_j \;;\; j=1,2\} \longleftrightarrow \{\mathbf{e}_s = \mid s\rangle \;;\; s \;=\; \pm 1\}$

Spin Matrizen (Vektor):

$\vec{\mathbf{S}} \;=\; (\mathbf{S}_1, \mathbf{S}_2, \mathbf{S}_3) \;=\; (\mathbf{S}_x, \mathbf{S}_y, \mathbf{S}_z)$

$$\boxed{\vec{\mathbf{S}} \;=\; \frac{\hbar}{2}\vec{\boldsymbol{\sigma}}}$$

$\vec{\boldsymbol{\sigma}} \;=\; (\boldsymbol{\sigma}_1, \boldsymbol{\sigma}_2, \boldsymbol{\sigma}_3) \;=\; (\boldsymbol{\sigma}_x, \boldsymbol{\sigma}_y, \boldsymbol{\sigma}_z)$

$\boldsymbol{\sigma}_j \ldots$ **Pauli Matrizen**

$$\boldsymbol{\sigma}_1 \;=\; \begin{bmatrix} 0 & +1 \\ +1 & 0 \end{bmatrix} \;;\; \boldsymbol{\sigma}_2 \;=\; \begin{bmatrix} 0 & -i \\ +i & 0 \end{bmatrix} \;;\; \boldsymbol{\sigma}_3 \;=\; \begin{bmatrix} +1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$$

EW–Gleichung:

$$\boxed{\mathbf{S}_3 \mid s\rangle \;=\; \frac{\hbar}{2} s \mid s\rangle \Longleftrightarrow \boldsymbol{\sigma}_3 \mid s\rangle \;=\; s \mid s\rangle}$$

“Drehoperatoren” im Spinraum:

$\mathbf{V}(\hat{\mathscr{R}}_{\text{Spin}}) \;=\; \mathbf{V}(\hat{\alpha}, \hat{\beta}, \hat{\gamma})$

$$\boxed{\mathbf{V}(\hat{\alpha}, \hat{\beta}, \hat{\gamma}) \;=\; \exp\left\{-\frac{i}{\hbar}\hat{\alpha}\mathbf{S}_3\right\} \exp\left\{-\frac{i}{\hbar}\hat{\beta}\mathbf{S}_2\right\} \exp\left\{-\frac{i}{\hbar}\hat{\gamma}\mathbf{S}_3\right\}}$$

$\hat{\alpha} \in [0, 2\pi) \;;\; \hat{\beta} \in [0, \pi) \;;\; \hat{\gamma} \in [0, 4\pi)$

$$\boxed{\mathbf{V}(\hat{\mathscr{R}}_{\text{Spin}}) \mid s\rangle \;=\; \sum_{s'} \mathbf{D}^{\frac{1}{2}}_{s's}(\hat{\mathscr{R}}_{\text{Spin}}) \mid s'\rangle}$$

$\mathbf{D}^{\frac{1}{2}}(\hat{\mathscr{R}}_{\text{Spin}}) \;=\; \mathbf{D}^{\frac{1}{2}}(\hat{\alpha}, \hat{\beta}, \hat{\gamma})$

$$\boxed{\mathbf{D}^{\frac{1}{2}}(\hat{\alpha}, \hat{\beta}, \hat{\gamma}) \;=\; \begin{bmatrix} e^{-i\frac{\hat{\alpha}}{2}} \cos\frac{\hat{\beta}}{2}\, e^{-i\frac{\hat{\gamma}}{2}} & -e^{-i\frac{\hat{\alpha}}{2}} \sin\frac{\hat{\beta}}{2}\, e^{+i\frac{\hat{\gamma}}{2}} \\ e^{+i\frac{\hat{\alpha}}{2}} \sin\frac{\hat{\beta}}{2}\, e^{-i\frac{\hat{\gamma}}{2}} & e^{+i\frac{\hat{\alpha}}{2}} \cos\frac{\hat{\beta}}{2}\, e^{+i\frac{\hat{\gamma}}{2}} \end{bmatrix}}$$

“Drehoperatoren” im Ortsraum:

$\mathbf{U}(\mathscr{R}_{\text{Ort}}) \;=\; \mathbf{U}(\alpha, \beta, \gamma)$

$$\boxed{\mathbf{U}(\alpha, \beta, \gamma) \;=\; \exp\left\{-\frac{i}{\hbar}\alpha\mathbf{L}_3\right\} \exp\left\{-\frac{i}{\hbar}\beta\mathbf{L}_2\right\} \exp\left\{-\frac{i}{\hbar}\gamma\mathbf{L}_3\right\}}$$

$\alpha \in [0, 2\pi) \;;\; \beta \in [0, \pi) \;;\; \gamma \in [0, 2\pi)$

$$\boxed{\big[\mathbf{U}(\mathscr{R}_{\text{Ort}})\, \psi\big](\mathbf{x}) \;=\; \psi(\mathscr{R}^{-1}_{\text{Ort}}\, \mathbf{x})}$$

“Drehoperatoren” in $L^2(\mathbb{R}^3) \otimes \mathbb{C}^2$:

$\big[\mathbf{U}(\mathscr{R}_{\text{Ort}}) \otimes \mathbf{V}(\hat{\mathscr{R}}_{\text{Spin}})\; \boldsymbol{\Psi}\big](\mathbf{x}, t) \;=\; \mathbf{D}^{\frac{1}{2}}(\hat{\mathscr{R}}_{\text{Spin}})\; \boldsymbol{\Psi}(\mathscr{R}^{-1}_{\text{Ort}}\, \mathbf{x}, t)$

Quantenmechanik: N–Teilchen Systeme ohne Spin (Identische Teilchen)

Zustandsraum:

★ Ortsfreiheitsgrad:

$$\mathscr{H}^{\otimes N}_{\rm Ort} = \mathscr{H}^{(1)}_{\rm Ort} \otimes \mathscr{H}^{(2)}_{\rm Ort} \otimes \mathscr{H}^{(3)}_{\rm Ort} \otimes \ldots \otimes \mathscr{H}^{(N)}_{\rm Ort}$$

$$\mathscr{H}^{(k)}_{\rm Ort} = L^2_{(k)}(\mathbb{R}^n) \quad \text{wobei} \quad n = 1,2,3$$

$$\Phi^{(k)} \in L^2_{(k)}(\mathbb{R}^n) \Longleftrightarrow \Phi^{(k)} : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{C} \; ; \; \Phi^{(k)}(\mathbf{x}^{(k)}) \in \mathbb{C} \; ; \; \mathbf{x}^{(k)} \in \mathbb{R}^n$$

Allgemeine Wellenfunktion $\neq$ Produktfunktion:

$$\Phi(\mathbf{x}^{(1)}, \mathbf{x}^{(2)}, \ldots \mathbf{x}^{(N)})$$

Spezielle Wellenfunktion $=$ Produktfunktion:

$$\Phi^{\otimes N}(\mathbf{x}^{(1)}, \mathbf{x}^{(2)}, \ldots \mathbf{x}^{(N)}) = \Phi^{(1)}(\mathbf{x}^{(1)})\, \Phi^{(2)}(\mathbf{x}^{(2)}) \ldots \Phi^{(N)}(\mathbf{x}^{(N)})$$

Produktzustand:

$$\left| \Phi^{\otimes N} \right\rangle = \left| \Phi^{(1)} \right\rangle^{(1)} \otimes \left| \Phi^{(2)} \right\rangle^{(2)} \otimes \ldots \otimes \left| \Phi^{(N)} \right\rangle^{(N)}$$

$$\left| \mathbf{x}^{\otimes N} \right\rangle = \left| \mathbf{x}^{(1)} \right\rangle^{(1)} \otimes \left| \mathbf{x}^{(2)} \right\rangle^{(2)} \otimes \ldots \otimes \left| \mathbf{x}^{(N)} \right\rangle^{(N)}$$

$$\left\langle \mathbf{x}^{\otimes N} \,\middle|\, \Phi^{\otimes N} \right\rangle = \Phi^{\otimes N}(\mathbf{x}^{(1)}, \mathbf{x}^{(2)}, \ldots \mathbf{x}^{(N)})$$

Hamiltonoperator:

$$\mathbf{H} = \mathbf{H}^{(1)} + \mathbf{H}^{(2)} + \ldots \mathbf{H}^{(N)} + \mathbf{W}(\mathbf{X}^{(1)}, \mathbf{X}^{(2)}, \ldots \mathbf{X}^{(N)})$$

1–Teilchen Hamiltonoperatoren:

$$\mathbf{H}^{(k)} = \frac{1}{2m}(\mathbf{P}^{(k)})^2 + \mathbf{V}(\mathbf{X}^{(k)})$$

N–Teilchen Wechselwirkungsoperator:

$$\mathbf{W}(\mathbf{X}^{(1)}, \mathbf{X}^{(2)}, \ldots \mathbf{X}^{(N)}) = \sum_{k=1}^{N} \mathbf{W}(\mathbf{X}^{(k)}) + \sum_{j<k} \mathbf{W}(\mathbf{X}^{(j)}, \mathbf{X}^{(k)}) + \ldots$$

$\sum_{k=1}^{N} \mathbf{W}(\mathbf{X}^{(k)}) \ldots$ Summe von 1–Teilchen Wechselwirkungsoperatoren

$\sum_{j<k} \mathbf{W}(\mathbf{X}^{(j)}, \mathbf{X}^{(k)}) \ldots$ Summe von 2–Teilchen Wechselwirkungsoperatoren

Bose–Einstein:

★ Symmetrisierungsoperator $\mathscr{S}$:

$$\boxed{\mathscr{S} = \frac{1}{N!} \sum_{\pi \in \mathscr{S}_N} U(\pi)}$$

★ Permutationsoperatoren $U(\pi)$:

$$[U(\pi)\Phi](\mathbf{x}^{(1)}, \mathbf{x}^{(2)}, \ldots \mathbf{x}^{(N)}) = \Phi(\mathbf{x}^{\overline{\pi}(1)}, \mathbf{x}^{\overline{\pi}(2)}, \ldots \mathbf{x}^{\overline{\pi}(N)})$$

Beachte: $U(\pi) \left| \mathbf{x}^{(1)}, \mathbf{x}^{(2)}, \ldots \mathbf{x}^{(N)} \right\rangle = \left| \mathbf{x}^{\pi(1)}, \mathbf{x}^{\pi(2)}, \ldots \mathbf{x}^{\pi(N)} \right\rangle$

$$\left| \mathbf{x}^{\pi(1)}, \mathbf{x}^{\pi(2)}, \ldots \mathbf{x}^{\pi(N)} \right\rangle = \left| \mathbf{x}^{\pi(1)} \right\rangle^{(1)} \otimes \left| \mathbf{x}^{\pi(2)} \right\rangle^{(2)} \otimes \ldots \otimes \left| \mathbf{x}^{\pi(N)} \right\rangle^{(N)}$$

Konsequenz: $\overline{\pi}(k) = \pi^{-1}(k)$

★ Permutationsgruppe $\mathscr{S}_N$:

$$U(\pi)\, U(\pi') = U(\pi\, \pi') \qquad \forall\, \pi, \pi' \in \mathscr{S}_N$$

★ Total symmetrische Wellenfunktionen:

$$[\mathscr{S}\, \Phi](\mathbf{x}^{(1)}, \mathbf{x}^{(2)}, \ldots \mathbf{x}^{(N)}) = \frac{1}{N!} \sum_{\pi \in \mathscr{S}_N} \Phi(\mathbf{x}^{\overline{\pi}(1)}, \mathbf{x}^{\overline{\pi}(2)}, \ldots \mathbf{x}^{\overline{\pi}(N)})$$

Quantenmechanik: **N–Teilchen Systeme mit Spin $S = \frac{1}{2}$ (Identische Teilchen)**

Zustandsraum:

★ Ortsfreiheitsgrad:

$$\mathscr{H}^{\otimes N}_{\text{Ort}} = \mathscr{H}^{(1)}_{\text{Ort}} \otimes \mathscr{H}^{(2)}_{\text{Ort}} \otimes \mathscr{H}^{(3)}_{\text{Ort}} \otimes \ldots \otimes \mathscr{H}^{(N)}_{\text{Ort}}$$
$$\mathscr{H}^{(k)}_{\text{Ort}} = L^2_{(k)}(\mathbb{R}^n) \quad \text{wobei} \quad n = 1,2,3$$

Allgemeine Wellenfunktion $\neq$ Produktfunktion:

$$\langle \mathbf{x}^{(1)}, \mathbf{x}^{(2)}, \ldots \mathbf{x}^{(N)} \mid \Phi_{\text{Ort}} \rangle = \Phi_{\text{Ort}}(\mathbf{x}^{(1)}, \mathbf{x}^{(2)}, \ldots \mathbf{x}^{(N)})$$

Spezielle Wellenfunktion $=$ Produktfunktion:

$$\Phi^{\otimes N}_{\text{Ort}}(\mathbf{x}^{(1)}, \mathbf{x}^{(2)}, \ldots \mathbf{x}^{(N)}) = \Phi^{(1)}_{\text{Ort}}(\mathbf{x}^{(1)})\, \Phi^{(2)}_{\text{Ort}}(\mathbf{x}^{(2)}) \, \ldots \Phi^{(N)}_{\text{Ort}}(\mathbf{x}^{(N)})$$

Produktzustand (Ort):

$$\mid \Phi^{\otimes N}_{\text{Ort}} \rangle = \mid \Phi^{(1)}_{\text{Ort}} \rangle^{(1)} \otimes \mid \Phi^{(2)}_{\text{Ort}} \rangle^{(2)} \otimes \ldots \otimes \mid \Phi^{(N)}_{\text{Ort}} \rangle^{(N)}$$

★ Spinfreiheitsgrad:

$$\mathscr{H}^{\otimes N}_{\text{Spin}} = \mathscr{H}^{(1)}_{\text{Spin}} \otimes \mathscr{H}^{(2)}_{\text{Spin}} \otimes \mathscr{H}^{(3)}_{\text{Spin}} \otimes \ldots \otimes \mathscr{H}^{(N)}_{\text{Spin}}$$
$$\mathscr{H}^{(k)}_{\text{Spin}} = \mathbb{C}^2 \;;\; dim\, \mathscr{H}^{(k)}_{\text{Spin}} = 2 \Longrightarrow dim\, \mathscr{H}^{\otimes N}_{\text{Spin}} = 2^N$$

Allgemeiner Spinzustand $\neq$ Produktzustand:

$$\mid \Psi_{\text{Spin}} \rangle = \sum_{k=1}^{N} \sum_{s^{(k)}=\pm 1} A_{s^{(1)}, s^{(2)}, \ldots s^{(N)}} \mid s^{(1)}, s^{(2)}, \ldots s^{(N)} \rangle$$
$$\mid s^{(1)}, s^{(2)}, \ldots s^{(N)} \rangle = \mid s^{(1)} \rangle^{(1)} \otimes \mid s^{(2)} \rangle^{(2)} \otimes \ldots \otimes \mid s^{(N)} \rangle^{(N)}$$

Spezieller Spinzustand $=$ Produktzustand:

$$\mid \Psi^{\otimes N}_{\text{Spin}} \rangle = \mid \Psi^{(1)}_{\text{Spin}} \rangle^{(1)} \otimes \mid \Psi^{(2)}_{\text{Spin}} \rangle^{(2)} \otimes \ldots \otimes \mid \Psi^{(N)}_{\text{Spin}} \rangle^{(N)}$$
$$\mid \Psi^{(k)}_{\text{Spin}} \rangle^{(k)} = B^{(k)}_{+} \mid + \rangle^{(k)} + B^{(k)}_{-} \mid - \rangle^{(k)} \;;\; B^{(k)}_{\pm} \in \mathbb{C}$$

★ Ortsfreiheitsgrad & Spinfreiheitsgrad:

$$\mathscr{H}^{\otimes N}_{O,S} = \mathscr{H}^{\otimes N}_{\text{Ort}} \otimes \mathscr{H}^{\otimes N}_{\text{Spin}}$$

Allgemeiner Gesamtzustand $\neq$ Produktzustand:

$$\mid \boldsymbol{\Theta}_{O,S} \rangle = \sum_{k=1}^{N} \sum_{s^{(k)}=\pm 1} \mid \Phi^{s^{(1)}, s^{(2)}, \ldots s^{(N)}}_{\text{Ort}} \rangle \otimes \mid s^{(1)}, s^{(2)}, \ldots s^{(N)} \rangle$$

Spezieller Gesamtzustand $=$ Produktzustand:

$$\mid \boldsymbol{\Theta}^{\otimes N}_{O,S} \rangle = \mid \Phi^{\otimes N}_{\text{Ort}} \rangle \otimes \mid \Psi^{\otimes N}_{\text{Spin}} \rangle = \mid \Theta^{(1)}_{O,S} \rangle^{(1)} \otimes \mid \Theta^{(2)}_{O,S} \rangle^{(2)} \otimes \ldots \otimes \mid \Theta^{(N)}_{O,S} \rangle^{(N)}$$
$$\mid \Theta^{(k)}_{O,S} \rangle^{(k)} = \mid \Phi^{(k)}_{\text{Ort}} \rangle^{(k)} \otimes \mid \Psi^{(k)}_{\text{Spin}} \rangle^{(k)}$$

Verallgemeinerte "Koordinaten":

$$\boldsymbol{\xi}^{(k)} = (\mathbf{x}^{(k)}, s^{(k)}) \longrightarrow \mid \boldsymbol{\xi}^{(k)} \rangle^{(k)} = \mid \mathbf{x}^{(k)}, s^{(k)} \rangle^{(k)} = \mid \mathbf{x}^{(k)} \rangle^{(k)} \otimes \mid s^{(k)} \rangle^{(k)}$$
$$\mid \boldsymbol{\xi}^{(1)}, \boldsymbol{\xi}^{(2)}, \ldots \boldsymbol{\xi}^{(N)} \rangle = \mid \boldsymbol{\xi}^{(1)} \rangle^{(1)} \otimes \mid \boldsymbol{\xi}^{(2)} \rangle^{(2)} \otimes \ldots \otimes \mid \boldsymbol{\xi}^{(N)} \rangle^{(N)}$$

Spinorkomponenten:

$$\langle \boldsymbol{\xi}^{(1)}, \boldsymbol{\xi}^{(2)}, \ldots \boldsymbol{\xi}^{(N)} \mid \boldsymbol{\Theta}_{O,S} \rangle = \Phi^{s^{(1)}, s^{(2)}, \ldots s^{(N)}}_{\text{Ort}}(\mathbf{x}^{(1)}, \mathbf{x}^{(2)}, \ldots \mathbf{x}^{(N)})$$
$$\langle \boldsymbol{\xi}^{(1)}, \boldsymbol{\xi}^{(2)}, \ldots \boldsymbol{\xi}^{(N)} \mid \boldsymbol{\Theta}^{\otimes N}_{O,S} \rangle = \prod_{k=1}^{N} \Phi^{(k)}_{\text{Ort}}(\mathbf{x}^{(k)}) \prod_{k=1}^{N} B^{(k)}_{s^{(k)}}$$

Quantenmechanik: **N–Teilchen Systeme mit Spin $S = \frac{1}{2}$ (Identische Teilchen)**

Hamiltonoperator: $\mathbf{H} = \mathbf{H}^{(1)} + \mathbf{H}^{(2)} + \ldots \mathbf{H}^{(N)} + \mathbf{W}(\mathbf{Q}^{(1)}, \mathbf{Q}^{(2)}, \ldots \mathbf{Q}^{(N)})$

1–Teilchen Hamiltonoperatoren:

$\mathbf{H}^{(k)} = \frac{1}{2m} (\mathbf{P}^{(k)})^2 + \mathbf{V}(\mathbf{Q}^{(k)})$

N–Teilchen Wechselwirkungsoperator:

$\mathbf{W}(\mathbf{Q}^{(1)}, \mathbf{Q}^{(2)}, \ldots \mathbf{Q}^{(N)}) = \sum_{k=1}^{N} \mathbf{W}(\mathbf{Q}^{(k)}) + \sum_{j<k} \mathbf{W}(\mathbf{Q}^{(j)}, \mathbf{Q}^{(k)}) + \ldots$

Bezeichnungsweise: $\mathbf{Q}^{(k)} = (\mathbf{X}^{(k)}, \vec{\mathbf{S}}^{(k)})$

Fermi–Dirac:

★ Antisymmetrisierungsoperator $\mathscr{A}$:

$$\boxed{\mathscr{A} = \frac{1}{N!} \sum_{\pi \in \mathscr{S}_N} (-1)^{\delta(\pi)}\, U_{O,S}(\pi)}$$

$$(-1)^{\delta(\pi)} = \begin{cases} +1 & \ldots \quad \pi = \textbf{gerade} \text{ Anzahl von Transpositionen} \\ -1 & \ldots \quad \pi = \textbf{ungerade} \text{ Anzahl von Transpositionen} \end{cases}$$

★ Permutationsoperatoren $U_{O,S}(\pi)$:

$$U_{O,S}(\pi) = U_{Ort}(\pi) \otimes U_{Spin}(\pi)$$

$$U_{Ort}(\pi) \left| \mathbf{x}^{(1)}, \mathbf{x}^{(2)}, \ldots \mathbf{x}^{(N)} \right\rangle = \left| \mathbf{x}^{\pi(1)}, \mathbf{x}^{\pi(2)}, \ldots \mathbf{x}^{\pi(N)} \right\rangle$$

$$\left[U(\pi)\Phi\right](\mathbf{x}^{(1)}, \mathbf{x}^{(2)}, \ldots \mathbf{x}^{(N)}) = \Phi(\mathbf{x}^{\overline{\pi}(1)}, \mathbf{x}^{\overline{\pi}(2)}, \ldots \mathbf{x}^{\overline{\pi}(N)}) \;;\; \overline{\pi}(\mathrm{k}) = \pi^{-1}(\mathrm{k})$$

$$U_{Spin}(\pi) \left| s^{(1)}, s^{(2)}, \ldots s^{(N)} \right\rangle = \left| s^{\pi(1)}, s^{\pi(2)}, \ldots s^{\pi(N)} \right\rangle$$

$$\left| s^{\pi(1)}, s^{\pi(2)}, \ldots s^{\pi(N)} \right\rangle = \left| s^{\pi(1)} \right\rangle^{(1)} \otimes \left| s^{\pi(2)} \right\rangle^{(2)} \otimes \ldots \otimes \left| s^{\pi(N)} \right\rangle^{(N)}$$

★ Permutationsgruppe $\mathscr{S}_N$:

$$U_{O,S}(\pi)\, U_{O,S}(\pi') = U_{O,S}(\pi\,\pi') \qquad \forall\, \pi, \pi' \in \mathscr{S}_N$$

★ Total antisymmetrische Zustände:

$$\left[U_{O,S}(\pi)\, \boldsymbol{\Theta}_{O,S}\right](\boldsymbol{\xi}^{(1)}, \boldsymbol{\xi}^{(2)}, \ldots \boldsymbol{\xi}^{(N)}) = \Phi_{Ort}^{s^{\pi(1)}, s^{\pi(2)}, \ldots s^{\pi(N)}}(\mathbf{x}^{\overline{\pi}(1)}, \mathbf{x}^{\overline{\pi}(2)}, \ldots \mathbf{x}^{\overline{\pi}(N)})$$

$$\left[\mathscr{A}\, \boldsymbol{\Theta}_{O,S}\right](\boldsymbol{\xi}^{(1)}, \boldsymbol{\xi}^{(2)}, \ldots \boldsymbol{\xi}^{(N)}) = \sum_{\pi \in \mathscr{S}_N} (-1)^{\delta(\pi)}\, \Phi_{Ort}^{s^{\pi(1)}, s^{\pi(2)}, \ldots s^{\pi(N)}}(\mathbf{x}^{\overline{\pi}(1)}, \mathbf{x}^{\overline{\pi}(2)}, \ldots \mathbf{x}^{\overline{\pi}(N)})$$

$$\left[\mathscr{A}\, \boldsymbol{\Theta}_{O,S}^{\otimes N}\right](\boldsymbol{\xi}^{(1)}, \boldsymbol{\xi}^{(2)}, \ldots \boldsymbol{\xi}^{(N)}) = \sum_{\pi \in \mathscr{S}_N} (-1)^{\delta(\pi)} \prod_{k=1}^{N} \Phi_{Ort}^{(k)}(\mathbf{x}^{\overline{\pi}(k)}) \prod_{k=1}^{N} B_{s^{\pi(k)}}^{(k)}$$

Beachte: $\prod_{k=1}^{N} \Phi_{Ort}^{(k)}(\mathbf{x}^{\overline{\pi}(k)}) = \prod_{k=1}^{N} \Phi_{Ort}^{\pi(k)}(\mathbf{x}^{(k)})$

$$\boxed{\mathscr{A}\, \boldsymbol{\Theta}_{O,S}^{\otimes N} = \textbf{Slaterdeterminante}}$$