Quantenmechanik II
FSU Jena - WS 2009/2010
Übungsserie 03 - Lösungen

Stilianos Louca

February 13, 2010

Aufgabe 05

Hilfsaussage 01

Gegeben sei eine Folge $E_1 \leq E_2 \leq \dots$ reeller Zahlen, dazu die *konvexe Hülle*

$$\mathcal{E} := \left\{ \sum_{i=1}^{\infty} \lambda_i E_i : \lambda_i \geq 0,\ \sum_{i=1}^{\infty} \lambda_i = 1 \right\}$$

Dann gilt: $\inf \mathcal{E} = \min \mathcal{E} = E_1$.

Beweis: Offensichtlich ist $E_1 \in \mathcal{E}$. Anderseits gilt für $E := \sum_i \lambda_i E_i \in \mathcal{E}$ die Abschätzung

$$E = \sum_i \lambda_i \underbrace{E_i}_{\geq E_1} \geq E_1 \cdot \underbrace{\sum_i \lambda_i}_{1} = E_1$$

das heißt E_1 ist eine untere Schranke von $\mathcal{E}$.
□

Hamiltonian & Eigenvektoren

Der Hamiltonian eines Systems von n nicht-wechselwirkenden Spin-s-Teilchen im Potential V ist gegeben durch

$$H_{\text{sys}} = \sum_{i=1}^{n} \overbrace{1 \otimes \dots \otimes \underset{\substack{\uparrow \\ i}}{H} \otimes \dots \otimes 1}^{=:H_i} \quad : \quad \mathcal{H}^n \to \mathcal{H}^n$$

wobei

$$H := \frac{\mathbf{P}^2}{2m} + V \quad : \quad \mathcal{H} \to \mathcal{H}$$

der Hamiltonian für ein einzelnes Teilchen sei. Sind $(\varphi_a)_{a\in\mathbb{N}}$ ein VONS aus H-Eigenvektoren in $\mathcal{H}$ zu den Eigenwerten[1] $(E_a)_{a\in\mathbb{N}}$, $E_1 \leq E_2 \leq \dots$, so bilden bekanntlich

$$\Phi_{a_1..a_n} := \sum_{\sigma\in\mathrm{Sym}(n)} \mathrm{sgn}(\sigma) \cdot \varphi_{a_{\sigma(1)}} \otimes \dots \otimes \varphi_{a_{\sigma(n)}} \quad , \quad a_1 < \dots < a_n \in \mathbb{N}$$

bzw.

$$\Psi_{a_1..a_n} := \sum_{\sigma\in\mathrm{Sym}(n)} \varphi_{a_{\sigma(1)}} \otimes \dots \otimes \varphi_{a_{\sigma(n)}} \quad , \quad a_1 \leq \dots \leq a_n \in \mathbb{N}$$

[1] Da im folgenden Kontext sowieso nur abzählbarer VONS betrachtet werden, also insbesondere die Menge aller Eigenwerte $(E_a)_{a\in A}$ abzählbar ist, sei deren Indexmenge A o.B.d.A. identifiziert mit $\mathbb{N}$.

jeweils ein vollständiges System des $\mathcal{H}^n$-Unterraums der total antisymmetrischen bzw. total symmetrischen Wellenfunktionen. Da $\varphi_{a_1} \otimes \cdots \otimes \varphi_{a_n}$ Eigenvektor von H_{sys} zum Energieeigenwert

$$E_{a_1..a_n} := \sum_{i=1}^{n} E_{a_i}$$

ist (bemerke Unabhängigkeit von der Permutation der a_i), sind auch $\Phi_{a_1..a_n}$ bzw. $\Psi_{a_1..a_n}$ Eigenvektoren von H_{sys} zum Eigenwert $E_{a_1..a_n}$.

Energieerwartungswerte in $\mathcal{H}^n$

Sind nun

$$\Phi := \sum_{a_1<..<a_n} C_{a_1..a_n} \cdot \frac{\Phi_{a_1..a_n}}{\|\Phi_{a_1..a_n}\|} \quad \in \mathcal{H}^n$$

bzw.

$$\Psi := \sum_{a_1\leq..\leq a_n} C_{a_1..a_n} \cdot \frac{\Psi_{a_1..a_n}}{\|\Psi_{a_1..a_n}\|} \quad \in \mathcal{H}^n$$

beliebige total antisymmetrische bzw. total symmetrische (normierte) Zustände in $\mathcal{H}^n$, so besitzen diese bekanntlich jeweils den Energieerwartungswert

$$\langle H_{\text{sys}} \rangle_{\Phi} = \sum_{a_1<..<a_n} |C_{a_1..a_n}|^2 \cdot E_{a_1..a_n}$$

bzw.

$$\langle H_{\text{sys}} \rangle_{\Psi} = \sum_{a_1\leq..\leq a_n} |C_{a_1..a_n}|^2 \cdot E_{a_1..a_n}$$

Nach Hilfsaussage (01) ist daher der kleinstmögliche, erreichbare Energieerwartungswert (und somit Eigenwert) nach unten beschränkt durch[2]

$$\langle H_{\text{sys}} \rangle_{\Phi} \geq \min\left\{E_{a_1..a_n} : a_1 < \cdots < a_n\right\} = E_{1,2,..,n} = E_1 + \cdots + E_n$$

bzw.

$$\langle H_{\text{sys}} \rangle_{\Psi} \geq \min\left\{E_{a_1..a_n} : a_1 \leq \cdots \leq a_n\right\} = E_{1,..,1} = n \cdot E_1$$

im antisymmetrischen bzw. symmetrischen Fall.

Grundzustand in $\mathcal{H}^n$

Tatsächlich werden diese Minimalwerte durch die Zustände

$$\Phi_0 := \Phi_{1,..,n} \quad \in \mathcal{H}^n$$

bzw.

$$\Psi_0 := \Psi_{1,..,1} \quad \in \mathcal{H}^n$$

im antisymmetrischen bzw. symmetrischen Fall erreicht, die sogar Eigenzustände des Hamiltonian H_{sys} sind. Die Grundzustandsenergien im halbzahligen-s Fall (Fermionen) und ganzzahligen-s Fall (Bosonen) sind somit jeweils gegeben durch

$$\boxed{E_0^{n\ \text{Fermi}} = E_1 + \cdots + E_n}$$

und

$$\boxed{E_0^{n\ \text{Bos}} = n \cdot E_1}$$

Beachte dass $E_1, E_2, ..$ nicht unbedingt paarweise verschieden sein müssen (H-Entartung + Spin-Einstellungsvielfachheit).

[2] Beachte dass $\sum \underbrace{|C_{a_1..a_n}|^2}_{\geq 0} = 1$.

Spezialfall: Harmonische Oszillatoren

Im Spezialfall Spin-s harmonischer Oszillatoren mit Potential

$$V(\mathbf{x}) = A\mathbf{x}^2$$

ergeben sich die 1-Teilchen Energie- & S_z-Eigenzustände $\varphi_{\mathbf{a},m}$ mit Energieeigenwerten

$$E_{\mathbf{a},m} = \hbar\omega\left[(a_1 + a_2 + a_3) + \frac{3}{2}\right] \quad , \quad \mathbf{a} \in \mathbb{N}_0 \times \mathbb{N}_0 \times \mathbb{N}_0 \quad , \quad m = -s, .., s$$

wobei

$$\omega := \sqrt{\frac{2A}{m}}$$

Beachte: Mit $a := |\mathbf{a}| := a_1 + a_2 + a_3$ ergibt sich für jedes Energieniveau $\widetilde{E}_a := \hbar\omega(a + 3/2)$ eine

$$g_a := \underbrace{\frac{(a+1)(a+2)}{2}}_{H\text{-Entartung}} \cdot \underbrace{(2s+1)}_{\mathbf{S}\text{-Entartung}} \tag{0.1}$$

-fache Entartung.

Spezialfall: 10 **harmonische Oszillatoren**

Im Fall $n = 10$ ergibt sich:

- Für Ganzzahlige-Spin Teilchen ($s \in \mathbb{N}_0$) eine Grundzustandsenergie von

$$E_0^{n\ \text{Bos}} = n \cdot E_{\mathbf{a}=0} = 15\hbar\omega$$

- Für Halbzahlige-Spin Teilchen ($s = 1/2, 3/2, ..$):

  $s = 1/2$**:**

$$\begin{aligned} E_0^{n\ s=1/2} = & E_{(0,0,0),-1} + E_{(0,0,0),1} \\ & + E_{(1,0,0),-1} + E_{(1,0,0),1} \\ & + E_{(0,1,0),-1} + E_{(0,1,0),1} \\ & + E_{(0,0,1),-1} + E_{(0,0,1),1} \\ & + E_{(2,0,0),-1} + E_{(2,0,0),1} \\ = & 25\hbar\omega \end{aligned}$$

  $s = 3/2$**:** Analog, unter Verwendung von Beziehung (0.1):

$$E_0^{n\ s=3/2} = 1 \cdot 4 \cdot \widetilde{E}_0 + 6 \cdot \widetilde{E}_1 = 21\hbar\omega$$

  (beachte $3 \cdot 4$-fache Entartung von $\widetilde{E}_1 = \hbar\omega(1 + 3/2)$).

  $s = 5/2$**:** Ähnlich

$$E_0^{n\ s=5/2} = 1 \cdot 6 \cdot \widetilde{E}_0 + 4 \cdot \widetilde{E}_1 = 19\hbar\omega$$

  $s = 7/2$**:**

$$E_0^{n\ s=7/2} = 1 \cdot 8 \cdot \widetilde{E}_0 + 2 \cdot \widetilde{E}_1 = 17\hbar\omega$$

  $s \geq 9/2$**:**

$$E_0^{n\ s\geq 9/2} = 10 \cdot \widetilde{E}_0 = 15\hbar\omega$$

  (beachte $(2s+1) \geq 10$ -fache Entartung von $\widetilde{E}_0 = 3\hbar\omega/2$).

Aufgabe 06

Sei

$$\varphi_S := \sum_{\sigma \in \mathrm{Sym}(n)} \bigotimes_{i=1}^{n} \varphi_{a_{\sigma(i)}}$$

die Symmetrisierung von n 1-Teilchen-Zuständen $\varphi_{a_1}, .., \varphi_{a_n} \in (\varphi_a)_{a\in A}$ ($(\varphi_a)_{a\in A} \subseteq \mathcal{H}$ Orthonormalsystem), mit

$$N_a := \#\{1 \leq i \leq n : a_i = a\}$$

Dann ist

$$\langle \varphi_S, \varphi_S \rangle = \sum_{\sigma,\rho \in \mathrm{Sym}(n)} \left\langle \bigotimes_{i=1}^{n} \varphi_{a_{\sigma(i)}}, \bigotimes_{i=1}^{n} \varphi_{a_{\rho(i)}} \right\rangle = \sum_{\sigma,\rho \in \mathrm{Sym}(n)} \underbrace{\prod_{i=1}^{n} \left\langle \varphi_{a_{\sigma(i)}}, \varphi_{a_{\rho(i)}} \right\rangle}_{\prod_{i=1}^{n} \left\langle \varphi_{a_i}, \varphi_{a_{\rho(\sigma^{-1}(i))}} \right\rangle}$$

$$= \sum_{\sigma,\rho \in \mathrm{Sym}(n)} \prod_{i=1}^{n} \left\langle \varphi_{a_i}, \varphi_{a_{\rho(\sigma^{-1}(i))}} \right\rangle \overset{\varkappa := \rho(\sigma^{-1})}{=} n! \sum_{\varkappa \in \mathrm{Sym}(n)} \prod_{i=1}^{n} \underbrace{\left\langle \varphi_{a_i}, \varphi_{a_{\varkappa(i)}} \right\rangle}_{\substack{0 \text{ falls} \\ a_i \neq a_{\varkappa(i)}}}$$

$$= n! \underbrace{\sum_{\substack{n \in \mathrm{Sym}(n) \\ a_i = a_{\varkappa(i)} \ \forall\ i}} 1}_{\prod_{a\in A} N_a!} = n! \prod_{a \in A} N_a!$$

Sei anderseits

$$\varphi_A := \sum_{\sigma \in \mathrm{Sym}(n)} \mathrm{sgn}(\sigma) \bigotimes_{i=1}^{n} \varphi_{a_{\sigma(i)}}$$

die Antisymmetrisierung der 1-Teilchen-Zuständen $\varphi_{a_1}, .., \varphi_{a_n} \in (\varphi_a)_{a\in A}$. Beachte dass $\varphi_A \neq 0$ nur dann, falls alle a_i paarweise verschieden sind, denn wäre $a_k = a_l$ für irgendwelche $k \neq l$ (dazu Transposition $\tau_{kl} \in \mathrm{Sym}(n)$), so folgt

$$2\varphi_A \overset{\mathrm{Sym}(n)\circ\tau_{kl} = \mathrm{Sym}(n)}{=} \sum_{\sigma \in \mathrm{Sym}(n)} \left[\mathrm{sgn}(\sigma) \bigotimes_{i=1}^{n} \varphi_{a_{\sigma(i)}} + \underbrace{\mathrm{sgn}(\sigma\tau_{kl})}_{-\mathrm{sgn}(\sigma)} \bigotimes_{i=1}^{n} \underbrace{\varphi_{a_{\sigma(\tau_{kl}(i))}}}_{\varphi_{a_{\sigma(i)}}} \right]$$

$$= \sum_{\sigma \in \mathrm{Sym}(n)} \mathrm{sgn}(\sigma) \underbrace{\left[\bigotimes_{i=1}^{n} \varphi_{a_{\sigma(i)}} - \bigotimes_{i=1}^{n} \varphi_{a_{\sigma(i)}} \right]}_{0} = 0$$

Behandeln daher nur den Fall dass $(a_i)_{i=1}^n$ paarweise verschieden sind und schreiben

$$\langle \varphi_A, \varphi_A \rangle = \sum_{\sigma,\rho \in \mathrm{Sym}(n)} \mathrm{sgn}(\sigma)\,\mathrm{sgn}(\rho) \left\langle \bigotimes_{i=1}^{n} \varphi_{a_{\sigma(i)}}, \bigotimes_{i=1}^{n} \varphi_{a_{\rho(i)}} \right\rangle = \sum_{\sigma,\rho \in \mathrm{Sym}(n)} \mathrm{sgn}(\sigma)\,\mathrm{sgn}(\rho) \underbrace{\prod_{i=1}^{n} \left\langle \varphi_{a_{\sigma(i)}}, \varphi_{a_{\rho(i)}} \right\rangle}_{\substack{0 \text{ falls} \\ \sigma(i) \neq \rho(i)}}$$

$$= \sum_{\sigma \in \mathrm{Sym}(n)} \underbrace{\mathrm{sgn}(\sigma)^2}_{1} \prod_{i=1}^{n} \underbrace{\left\langle \varphi_{\sigma(i)}, \varphi_{\sigma(i)} \right\rangle}_{1} = |\mathrm{Sym}(n)| = n!$$

□