Teil II (Quantenmechanik)

Skript Physik-Bibliothek
(QM II SS 2006, T. Brandes)

Inhalt:
1) Bosonen + Fermionen
2) Zweite Quantisierung

Lit: Scherz. Nolting V/2. Baym. Sakurai etc.

Kapitel 1: Bosonen + Fermionen

1.1. Wiederholung: 1-Teilchen QM

Hilbertraum $\mathcal{H}$, Hamiltonian $\hat{H}|n\rangle = E_n|n\rangle$

$\{|n\rangle\}$ VONS in $\mathcal{H}$, $\langle n|m\rangle = \delta_{nm}$

1.2. 1 Teilchen, $d>1$ Freiheitsgrade

Beispiel H-Atom $|nlm\sigma\rangle \Longleftrightarrow$

Spinor

$$\psi_{nml\sigma}(r,\theta,\varphi) = R_{nl}(r)\, Y_{lm}(\theta,\varphi)\, \chi_\sigma$$

$$\chi_\uparrow = \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix},\quad \chi_\downarrow = \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$$

1-Teilchenzustände sind Produktzustände

Hilbertraum $\mathcal{H}$ als Tensorprodukt

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 \otimes \dots \mathcal{H}_d \qquad \text{mit Basis}$$

$$\{|\alpha_1\rangle \otimes |\alpha_2\rangle \otimes \dots \otimes |\alpha_d\rangle\}\ ; \quad \{|\alpha_i\rangle\} \text{ Basis in } \mathcal{H}_i$$

Beispiel: harm. Oszillator in 2 Dimensionen,

$$\hat{H} = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{p_y^2}{2m} + V(x,y)$$

$$V(x,y) = ax^2 + by^2 + 2cxy = (x,y)\begin{pmatrix} a & c \\ c & b \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$$

Basis im Hilbertraum: $\{|n_x\rangle\}$ in $\mathcal{H}_x$

$\{|n_y\rangle\}$ in $\mathcal{H}_y$

$$\left(\frac{p_x^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2\right)|n_x\rangle = E_n^x |n_x\rangle \quad \text{etc.}$$

Jeder Zustand $|\psi\rangle \in \mathcal{H}_x \otimes \mathcal{H}_y$ läßt sich schreiben als

$$|\psi\rangle = \sum_{n_x n_y} c_{n_x n_y} |n_x\rangle \otimes |n_y\rangle$$

Um $\mathcal{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle$ zu lösen, muß man $V(x,y)$ diagonalisieren (AUFGABE).

1.3 Mehrere Teilchen

Teilchen: Objekt mit abzählbar vielen „Fundamentaleigenschaften"

Masse m

Ladung q
Spin s

a) Unterscheidbare Teilchen: unterscheiden sich in Fundamentaleigenschaften.

Produkträume für N Teilchen

$$\mathcal{H}_N = \mathcal{H}^{(1)} \otimes \mathcal{H}^{(2)} \otimes \dots \otimes \mathcal{H}^{(N)}$$

Basis von $\mathcal{H}_N$: $\{|n_1 n_2 \dots n_N\rangle\}$

$$\Leftrightarrow \{ \psi_{n_1}(x_1\sigma_1) \cdot \psi_{n_2}(x_2\sigma_2) \cdot \dots \cdot \psi_{n_N}(x_N\sigma_N)\}$$

$$\overset{\shortparallel}{\psi_{n_1 n_2 \dots n_N}(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_N)} ;$$

$\xi_i = x_i \sigma_i$, x_i Ortsvektor des i-ten Teilchens

Interpretation:

$$|\langle \xi_1, \dots, \xi_N | n_1 \dots n_N\rangle|^2 = |\psi_{n_1 \dots n_N}(\xi_1 \dots \xi_N)|^2$$

= W-Dichte, das Teilchen 1 am Orte x_1 mit Spin σ_1

⋮

Teilchen N am Orte x_N mit Spin σ_N

zu finden.

1.4. Zwei ununterscheidbare Teilchen

2 Teilchen mit identischen Fundamentaleigenschaften

WF $\psi(x_1\sigma_1 x_2\sigma_2)$.

Vertauschen der Indizes $1 \leftrightarrow 2$:

a) Definiere Transpositionsoperator $\hat{\Pi}_{12}$

$$\hat{\Pi}_{12}\Psi(\xi_1\xi_2) = \Psi(\xi_2\xi_1) \; ; \quad \xi_i = (x_i\sigma_i)$$

- $\hat{\Pi}_{12}^2 = \mathbb{1}$, $\quad \hat{\Pi}_{12}^\dagger = \hat{\Pi}_{12} = \hat{\Pi}_{12}^{-1}$ (Aufgabe)

b) Erlaubte Observablen $\hat{A}$ und Zustände $|\Psi\rangle$

$$\langle\Psi|\hat{A}\Psi\rangle = \langle\hat{\Pi}_{12}\Psi|\hat{A}\hat{\Pi}_{12}\Psi\rangle$$

$$\Rightarrow \langle\Psi|\hat{\Pi}_{12}^\dagger\hat{A}\hat{\Pi}_{12}|\Psi\rangle = \langle\Psi|\hat{\Pi}_{12}^{-1}\hat{A}\hat{\Pi}_{12}|\Psi\rangle$$

$\forall |\Psi\rangle$ zweier ununterscheidbarer Teilchen

$$\Rightarrow \boxed{[\hat{A}, \hat{\Pi}_{12}] = 0}$$

alle Observablen vertauschen mit dem Transpositionsoperator

$$\Big[\quad \langle\Psi|A|\Psi\rangle = \langle\Psi|\Pi^{-1}A\Pi|\Psi\rangle \quad \forall|\Psi\rangle$$

$$\Rightarrow A = \Pi^{-1}A\Pi \Rightarrow \Pi A = A\Pi$$

$$\Rightarrow A\Pi - \Pi A = 0$$

$$\Rightarrow [A, \Pi] = 0 \quad \Big]$$

- Observablen : symmetrisch ggü Vertauschung $1 \leftrightarrow 2$

Bsp: kin. Energie : $\hat{H}_{kin} = \frac{1}{2m}(\hat{p}_1^2 + \hat{p}_2^2)$

• Erlaubte WF $\Psi(x_1\sigma_1 x_2\sigma_2)$ entweder symmetrisch oder antisymmetrisch bzgl. $1 \leftrightarrow 2$:

Beweis: Definiere Projektor $\hat{P}_\Psi \equiv |\Psi\rangle\langle\Psi|$

$|\Psi\rangle$ normiert.

• $$|\Psi\rangle\langle\Psi|\hat{\Pi}_{12}\Psi\rangle = \hat{P}_\Psi\hat{\Pi}_{12}|\Psi\rangle = \hat{\Pi}_{12}\hat{P}_\Psi|\Psi\rangle = \hat{\Pi}_{12}|\Psi\rangle \Big/ \langle\Psi|\hat{\Pi}_{12}$$

$$\langle\Psi|\hat{\Pi}_{12}|\Psi\rangle\langle\Psi|\hat{\Pi}_{12}|\Psi\rangle \equiv \langle\Psi|\hat{\Pi}_{12}\Psi\rangle^2 = \langle\Psi|\hat{\Pi}_{12}^2\Psi\rangle = 1$$

$$\langle\Psi|\hat{\Pi}_{12}|\Psi\rangle = \begin{cases} +1 \\ -1 \end{cases}$$

„+1": $\hat{\Pi}_{12}|\Psi\rangle = |\Psi\rangle$: symmetrisch „bosonischer Zustand"

„−1": $\hat{\Pi}_{12}|\Psi\rangle = -|\Psi\rangle$: antisymmetrisch „fermionischer Zustand".

1.5. N ununterscheidbare Teilchen

a) $N!$ Permutationen $P = \begin{pmatrix} 1 & 2 & N \\ P_1 & P_2 & P_N \end{pmatrix} \in S_N$

Permutationsgruppe (N Objekte)

Zugehöriger Permutationsoperator $\hat{\Pi}_P$

Beispiel $N=3$: $\quad \underbrace{\hat{\Pi}_{P=\begin{pmatrix}1&2&3\\2&3&1\end{pmatrix}}}\Psi(\xi_1,\xi_2,\xi_3)=\Psi(\xi_2,\xi_3,\xi_1)$

$$\hat{\Pi}_{P=\begin{pmatrix}1&2&3\\1&3&2\end{pmatrix}}\cdot\hat{\Pi}_{P=\begin{pmatrix}1&2&3\\2&1&3\end{pmatrix}}$$

Jeder Permutationsoperator läßt sich als Produkt von Transpositionsoperatoren schreiben

$\Rightarrow$ $\hat{\Pi}_P$ sind unitär, $\hat{\Pi}_P^{+}=\hat{\Pi}_P^{-1}$

Fall $N=2$: Wie oben, Transposition

$$[\hat{A},\hat{\Pi}_P]=0$$

Fall $N\geq 2$. Wie bei $N=2$, d.h.

$$\langle\Psi|A\Psi\rangle=\langle\Pi_P\Psi|A\Pi_P\Psi\rangle$$

$$\Rightarrow\quad[\hat{A},\hat{\Pi}_P]=0$$

erlaubte Zustände: $\quad\langle\Psi|\hat{\Pi}_P\Psi\rangle=\pm 1$

bosonische Zustände $\quad\hat{\Pi}_P|\Psi\rangle=|\Psi\rangle$

fermionische " $\quad\hat{\Pi}_P|\Psi\rangle=-|\Psi\rangle$.

__Definition:__

Symmetrisierungsoperator

$$\hat{S} \equiv \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{p \in S_N} \hat{\Pi}_p$$

Antisymmetrisierungsoperator

$$\hat{A} \equiv \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{p \in S_N} \underbrace{\mathrm{sgn}(p)}_{(-1)^{n(p)}} \hat{\Pi}_p$$

$n(p)$ = Anzahl der Transpositionen, um die Permutation p zu erzeugen

Mit Hilfe von $\hat{S}$ und $\hat{A}$ läßt sich eine Basis für die bosonischen und die fermionischen N-Teilchenzustände konstruieren.

1) N Bosonen

__Fall 1:__ Der 1-Teilchen-Hilbertraum $\mathcal{H}$ sei 1-dimensional, $\mathcal{H} = \mathrm{span}(|\nu\rangle)$ (nur ein Zustand $|\nu\rangle$).

$\Rightarrow$ Symmetrischer N-Bosonen-Zustand

$$|\nu\rangle \otimes |\nu\rangle \otimes \dots \otimes |\nu\rangle \equiv |\underbrace{\nu\nu \dots \nu}_{N\text{-mal}}\rangle$$

$$\Leftrightarrow \text{WF} \quad \psi_\nu(\xi_1)\psi_\nu(\xi_2) \cdots \psi_\nu(\xi_N)$$

Fall 2: $N=2$ Bosonen, Einteilchenbasen $\{|\nu_1\rangle\}, \{|\nu_2\rangle\}$

$$|\nu_1 \nu_2\rangle_S \Longleftrightarrow \hat{S}\, \psi_{\nu_1}(\xi_1)\psi_{\nu_2}(\xi_2) =$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2!}}\left[\psi_{\nu_1}(\xi_1)\psi_{\nu_2}(\xi_2) + \psi_{\nu_1}(\xi_2)\psi_{\nu_2}(\xi_1)\right]$$

Allg. Fall: N Bosonen

N_1 im Zustand $|\nu_1\rangle, \dots, N_r$ im Zustand $|\nu_r\rangle$

$$\sum_{i=1}^{r} N_i = N$$

symmetrisch

$$|\underbrace{\nu_1 \nu_1 \dots \nu_1}_{N_1 \text{ mal}}\ \underbrace{\nu_2 \dots \nu_2}_{N_2 \text{ mal}} \dots \underbrace{\nu_r \dots \nu_r}_{N_r \text{ mal}}\rangle_S \Longleftrightarrow$$

$$\frac{1}{\sqrt{N_1! N_2! \cdots N_r!}}\hat{S}\, \psi_{\nu_1}(\xi_1) \cdots \psi_{\nu_1}(\xi_{N_1}) \cdots \psi_{\nu_r}(\xi_{N-N_r+1}) \cdots \psi_{\nu_r}(\xi_N)$$

Vorfaktor aus Normierung

Aufgabe

Skripts

Fall $N_1 = 1$, $N_2 = 2$ überlegen

Fall N Fermionen

Antisymmetrischer N-Fermionen-Zustand

$$|\nu_1 \dots \nu_N\rangle_A \Longleftrightarrow \text{WF} \quad \hat{A}\,\psi_{\nu_1}(\xi_1)\psi_{\nu_2}(\xi_2)\dots\psi_{\nu_N}(\xi_N)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{N!}}\sum_{p\in S_N} \mathrm{sgn}(p)\,\hat{\Pi}_p\, \psi_{\nu_1}(\xi_1)\cdots\psi_{\nu_N}(\xi_N)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \psi_{\nu_1}(\xi_1) & & \psi_{\nu_1}(\xi_N) \\ & & \\ \psi_{\nu_N}(\xi_1) & & \psi_{\nu_N}(\xi_N) \end{vmatrix}$$

„Slater-Determinante"

- Vertauschen zweier Teilchen $\Leftrightarrow$ Vertauschen zweier Spalten $\rightarrow$ gibt Minus-Zeichen wie es sein soll
- Zwei oder mehr der ν_i identisch
  $\Rightarrow$ Slater-Det = Null
  $\Rightarrow$ **Pauli-Prinzip**