0. Übung

Theoretische Physik (NT)
Universität des Saarlandes
Prof. Dr. Heiko Rieger

Die Aufgaben des Übungsblattes werden in Form einer Präsenzübung in den Übungsgruppen in der Woche vom 24. April zum 28. April 2017 besprochen.

1. [*Präsenzaufgabe*] **Symmetrisierte/Antisymmetrisierte Wellenfunktionen**

(a) Betrachten Sie ein System aus N ununterscheidbaren Teilchen mit der Wellenfunktion $\psi(1, 2, ..., N)$. Zeigen Sie, dass der aus der Vorlesung bekannte Permutationsoperator P_{ij} nur die Eigenwerte -1 und 1 annehmen kann.

(b) Nutzen Sie den Permutationsoperator um die symmetrisierte und die antisymmetrisierte Wellenfunktion des Systems anzugeben. Achten Sie dabei auf die Normierung.

(c) Nun zu einem konkreten Beispiel. Nehmen Sie an, dass die Energieniveaus der stationären Zustände des Hamiltonoperators $\hat{H}_i$ eines Einteilchenproblems bekannt sind:

$$\hat{H}_i\psi_r(\mathbf{x}_i) = \epsilon_r\psi_r(\mathbf{x}_i) \text{ mit } r \in \mathbb{N}$$

Betrachten Sie ein System von drei Teilchen mit dem Hamiltonoperator $\hat{H}^{(3)} = \hat{H}_1 + \hat{H}_2 + \hat{H}_3$.

i. Zeigen Sie, dass $\psi_{r_1}(\mathbf{x}_1)\psi_{r_2}(\mathbf{x}_2)\psi_{r_3}(\mathbf{x}_3)$ ein Eigenzustand von $\hat{H}^{(3)}$ ist und berechnen Sie den zugehörigen Eigenwert.

ii. Nutzen Sie folgenden Ansatz für $\Psi_{r,r,r'}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_3)$ $(r \neq r')$, um die Wellenfunktion für $\hat{H}^{(3)}$ zu bestimmen:

$$\Psi_{r,r,r'}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_3) = \lambda_1\psi_{r'}(\mathbf{x}_1)\psi_r(\mathbf{x}_2)\psi_r(\mathbf{x}_3)+\lambda_2\psi_r(\mathbf{x}_1)\psi_{r'}(\mathbf{x}_2)\psi_r(\mathbf{x}_3)+\lambda_3\psi_r(\mathbf{x}_1)\psi_r(\mathbf{x}_2)\psi_{r'}(\mathbf{x}_3)$$

Berechnen Sie $\Psi_{r,r,r'}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_3)$ für Bosonen und zeigen Sie, dass es keine entsprechende Lösung für Fermionen gibt.

(d) Ein Beispiel für ein Zwei-Fermionensystem sind die beiden Elektronen in einem Heliumatom:

$$\hat{H}(12)\varphi(r_1s_1, r_2s_2) = E\varphi(r_1s_1, r_2s_2)$$

Man kann $\hat{H}$ als spinunabhängig ansehen, wenn man die Spin-Bahn-Kopplung vernachlässigt. Dann kann man die Orts- und Spininformationen separieren: $\varphi = \phi(r_1r_2)\chi(s_1s_2)$
Nutzen Sie diesen Ansatz, um die möglichen Zustände zu ermitteln. Verwenden Sie anschließend Störungstheorie, um den Grundzustand zu bestimmen.

(e) Auf ähnliche Weise kann auch die kovalente Bindung in einem H_2-Molekül, welches aus zwei Elektronen (1, 2) und zwei Protonen (a, b) besteht, untersucht werden. Wegen der großen Masse der Protonen nehmen wir deren Positionen als fest an. Der Hamiltonoperator des für uns relevanten Anteil des Systems lautet dann:

$$\hat{H} = \left(\frac{\hat{p}_1^2}{2m} - \frac{e^2}{r_{1a}}\right) + \left(\frac{\hat{p}_2^2}{2m} - \frac{e^2}{r_{2b}}\right) + \left(\frac{e^2}{r_{12}} + \frac{e^2}{r_{ab}} - \frac{e^2}{r_{1b}} - \frac{e^2}{r_{2a}}\right)$$

Auch hier separieren wir die Orts- und Spinwellenfunktionen gemäß $\Psi_{singlett} = \phi_S(r_1r_2)\chi_{singlett}(s_1s_2)$, $\Psi_{triplett} = \phi_A(r_1r_2)\chi_{triplett}(s_1s_2)$ und setzen für die Ortswellenfunktionen $\phi_{S/A} = (\phi_I \pm \phi_{II})$ mit $\phi_I(r_1r_2) = \varphi_a(r_1)\varphi_b(r_2)$ und $\phi_{II}(r_1r_2) = \varphi_a(r_2)\varphi_b(r_1)$ an. Berechnen Sie die Elektronendichte $\rho_S(r)$ und $\rho_A(r)$ und mit Hilfe von Störungstheorie die Energieniveaus.

Benjamin Bogner, E2 6, Zi.4.27 — bbogner@lusi.uni-sb.de
Anne Hafner, E2 6, Zi.4.23 — anne.hafner@lusi.uni-sb.de

2. [*Präsenzaufgabe*] **Bosonische und fermionische Vertauschungsrelationen**

Für bosonische Leiteroperatoren gelten die Kommutator-Vertauschungsrelationen

$$[\hat{b}_i, \hat{b}_j] = 0, \qquad [\hat{b}_i^\dagger, \hat{b}_j^\dagger] = 0, \qquad [\hat{b}_i, \hat{b}_j^\dagger] = \delta_{ij},$$

während fermionische Leiteroperatoren die Antikommutator-Vertauschungsrelationen

$$\{\hat{a}_i, \hat{a}_j\} = 0, \qquad \{\hat{a}_i^\dagger, \hat{a}_j^\dagger\} = 0, \qquad \{\hat{a}_i, \hat{a}_j^\dagger\} = \delta_{ij}$$

erfüllen.

(a) Konstruieren Sie ausgehend vom Vakuumzustand einen 10-Bosonenzustand mit 3 Bosonen im Zustand A, 2 Bosonen im Zustand B und 5 Bosonen im Zustand C.

(b) Berechnen Sie

i. $[(\hat{b}_i)^2, \hat{b}_j]$, ii. $[(\hat{b}_i)^2, \hat{b}_j^\dagger]$, iii. $[(\hat{b}_i^\dagger)^2, \hat{b}_j]$, iv. $[(\hat{b}_i^\dagger)^2, \hat{b}_j^\dagger]$,

v. $[\hat{a}_i, \hat{a}_j]$, vi. $[\hat{a}_i, \hat{a}_j^\dagger]$, vii. $[\hat{a}_i^\dagger, \hat{a}_j^\dagger]$.

(c) Der Operator $\hat{n}_i^b = \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_i$ bzw. $\hat{n}_i^a = \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i$ gibt die Besetzungszahl des Zustandes i an.

i. Berechnen Sie $(\hat{a}_i)^2$, $(\hat{a}_i^\dagger)^2$ und $(\hat{n}_i^a)^2$.

ii. Zeigen Sie, dass der Besetzungszahloperator im fermionischen Fall nur die Eigenwerte 0 und 1 besitzt. Was folgern Sie daraus?

iii. Verifizieren Sie durch explizites Anwenden von Erzeuger und Vernichter, dass $\hat{n}_i|..., n_i, ...\rangle = n_i|..., n_i, ...\rangle$ sowohl für den bosonischen als auch für den fermionischen Fall gilt.

(d) Berechnen Sie

i. $\hat{a}_i \hat{n}_i^a$, ii. $\hat{n}_i^a \hat{a}_i$, iii. $\hat{a}_i^\dagger \hat{n}_i^a$, iv. $\hat{n}_i^a \hat{a}_i^\dagger$.

(e) Berechnen Sie die Kommutatoren

i. $[\hat{n}_i^b, \hat{b}_j]$, ii. $[\hat{n}_i^b, \hat{b}_j^\dagger]$, iii. $[\hat{n}_i^a, \hat{a}_j]$, iv. $[\hat{n}_i^a, \hat{a}_j^\dagger]$.

Gibt es Unterschiede für Bosonen und Fermionen?

(f) i. Der Hamiltonoperator eines N-Teilchensystems habe die Gestalt

$$\hat{H} = \sum_{\alpha=1}^{N} \left(\hat{t}_\alpha + \hat{u}_\alpha\right) + \frac{1}{2} \sum_{\alpha \neq \beta} \hat{f}_{\alpha\beta}^{(2)}$$

mit den Einteilchenoperatoren $\hat{t}_\alpha$ für die kinetische Energie von Teilchen α, $\hat{u}_\alpha$ für die potentielle Energie von Teilchen α und dem Zweiteilchenoperator $\hat{f}_{\alpha\beta}^{(2)}$ für die Wechselwirkung zwischen zwei Teilchen α und β. Leiten Sie für den bosonischen Fall die Darstellung des Hamiltonoperators durch Leiteroperatoren her:

$$\hat{H} = \sum_{i,j} (t_{ij} + u_{ij})\, \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_j + \frac{1}{2} \sum_{i,j,k,m} \langle i, j | \hat{f}^{(2)} | k, m \rangle\, \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_j^\dagger \hat{b}_m \hat{b}_k, \tag{1}$$

wobei $t_{ij} = \langle i|\hat{t}|j\rangle$, $u_{ij} = \langle i|\hat{u}|j\rangle$ und $|i\rangle$ die Einteilchenzustände beschreiben.

ii. Gegeben sei ein System von N nicht wechselwirkenden Bosonen bzw. Fermionen

$$\hat{H} = \sum_{\alpha=1}^{N} \hat{h}^{(\alpha)}.$$

Der Einteilchenoperator $\hat{h}^{(\alpha)}$ habe ein diskretes, nicht entartetes Spektrum

$$\hat{h}^{(\alpha)}|i^{(\alpha)}\rangle = \epsilon_i |i^{(\alpha)}\rangle, \qquad \langle i^{(\alpha)}|j^{(\alpha)}\rangle = \delta_{ij}.$$

Wie lautet der Hamiltonoperator in zweiter Quantisierung?

Benjamin Bogner, E2 6, Zi.4.27 — bbogner@lusi.uni-sb.de
Anne Hafner, E2 6, Zi.4.23 — anne.hafner@lusi.uni-sb.de