Gruppen- und Darstellungstheorie in der Physik – Sommer 2014

Übung 4

Prof. Dr. Andreas Klümper (kluemper@uni-wuppertal.de D.10.07)
Abgabe: 20.05.2014 Besprechung: 20.05.2014

4. Quantenmechanische Systeme
Wir betrachten hier quantenmechanische Mehrteilchensysteme und die Diagonalisierung des Hamiltonoperators. Konkret sind wir an Wellenfunktionen $\psi(x_1, x_2, x_3)$ von drei Teilchen mit

$$H = \underbrace{\sum_{j=1}^{3} \left(\frac{p_j^2}{2m} + v_1(x_j) \right)}_{=:H_0} + \underbrace{\sum_{i \neq j=1}^{3} v_2(x_i, x_j)}_{=:V_2} + \underbrace{v_3(x_1, x_2, x_3)}_{=:V_3}$$

interessiert. Der erste Term enthält alle 1-Teilchenbeiträge: kinetische Energie und 1-Teilchen-Potential. V_2 ist eine symmetrische 2-Teilchen-Wechselwirkung und V_3 eine symmetrische 3-Teilchen-Wechselwirkung wie sie effektiv in Molekülen und Festkörpern auftreten kann.
Eine praktische Basis für Mehrteilchensysteme ergibt sich aus Produkten von 1-Teilchen-Eigenzuständen $\psi^{(1)}(x)$, $\psi^{(2)}(x)$, $\psi^{(3)}(x)$, ... die eine ONB an Eigenzuständen zu H_1 darstellen:

$$\left(\frac{p^2}{2m} + v_1(x) \right) \cdot \psi^{(n)}(x) = E^{(n)} \psi^{(n)}(x), \qquad n \in \mathbb{N}$$

Eine Basis des 3-Teilchen-Hilbertraumes wird durch

$$|abc\rangle := \psi_{abc}(x_1, x_2, x_3) := \psi^{(a)}(x_1) \cdot \psi^{(b)}(x_2) \cdot \psi^{(c)}(x_3) \qquad a, b, c \in \mathbb{N} \text{ beliebig}$$

gegeben. Diese Zustände haben noch keine bestimmte Symmetrie unter Permutation der Argumente, sind aber Eigenzustände zu H_0:

$$H_0 \cdot |abc\rangle = \left[E^{(a)} + E^{(b)} + E^{(c)} \right] |abc\rangle$$

Die Berechnung des vollständigen Spektrums zu $H = H_0 + V_2 + V_3$ ist üblicherweise schwierig. Übungsmäßig wollen wir charakteristische Spezialfälle behandeln.

i) $V_2 = v(P_{12} + P_{23} + P_{31}), V_3 = 0$

   Dies soll heißen: $V_2|abc\rangle = v(|bac\rangle + |acb\rangle + |cba\rangle)$

   Wir betrachten zu drei (verschiedenen) 1-Teilchenzuständen $\psi^{(\alpha)}(x)$, $\psi^{(\beta)}(x)$, $\psi^{(\gamma)}(x)$ oder kurz α, β, γ den 6-dimensionalen Raum, der durch

   $$|\alpha\beta\gamma\rangle,\ |\beta\alpha\gamma\rangle,\ |\alpha\gamma\beta\rangle,\ |\gamma\beta\alpha\rangle,\ |\beta\gamma\alpha\rangle,\ |\gamma\alpha\beta\rangle$$

   aufgespannt wird. In diesem Raum wirkt H ohne hinauszuführen und kann diagonalisiert werden. Führe dies durch!

   Tip: Rechne möglichst wenig bzw. gar nicht.

ii) V_2 und α, β, γ seien wie unter i), aber V_3 sei nicht 0, sondern "zufällig" durch

   $$V_3 = w\left(|\beta\alpha\gamma\rangle\langle\alpha\beta\gamma| + |\alpha\beta\gamma\rangle\langle\beta\alpha\gamma| + |\gamma\alpha\beta\rangle\langle\gamma\beta\alpha| + |\gamma\beta\alpha\rangle\langle\gamma\alpha\beta| + |\beta\gamma\alpha\rangle\langle\alpha\gamma\beta| + |\alpha\gamma\beta\rangle\langle\beta\gamma\alpha|\right)$$

   gegeben. V_3 hält also die Position von γ fest und vertauscht den Rest.

   Frage: Ist V_3 wirklich symmetrisch, d.h. $gV_3 = V_3 g$ mit $g \in S_3$? (In der Gleichung ist hier mit g eigentlich, aber auch offensichtlich, die Darstellung von g als Permutation gemeint.)

   Diagonalisiere H in dem 6-dimensionalen Raum.

   Tip: Hier ist neu im Vergleich zu i) im wesentlichen eine 4×4 Matrix zu diagonalisieren. Diese bzw. das ganze V_3 ist überschaubar, da idempotent: $V_3^2 = ?$

iii) In i) bzw. ii) haben die Eigenzustände unterschiedliche Symmetrie. Welche sind in der Natur erlaubt und für welche "Sorte" von Teilchen?

iv) Wir betrachten nun Teilchen wie oben, aber um einen Spin $s = 1/2$ erweitert. Die Zustände sind um den Spinanteil zu erweitern

$$|\psi\rangle = |abc\rangle \otimes |\sigma\mu\nu\rangle, \qquad \text{wobei } \sigma, \mu, \nu \in \{-1/2, +1/2\}$$

Der Hamiltonoperator wirke aber immer noch nicht-trivial nur auf den Ortsanteil.

Wie lauten die totalantisymmetrischen (fermionischen) Energie-Eigenzustände?

Tip: Multipliziere den antisymmetrischen (Bahn-) Eigenzustand wie oben mit symmetrischen Spinzuständen.

Warum führt hier das Produkt von symmetrischen (Bahn-) Eigenzustand mit antisymmetrischen Spinzuständen zu nichts?

Die größte Herausforderung stellt das Produkt von gemischt-symmetrischen Zuständen vom Bahn-Typ mit solchen vom Spin-Typ. Seien v_1, v_2 und u_1, u_2 ONBs zu zwei gemischten Darstellungen der S_3 mit gleichen darstellenden Matrizen so wie in der ersten Übungsstunde angegeben bzw. in Übung 2 hergeleitet. Dann ist

$$v_1 \otimes u_2 - v_2 \otimes u_1$$

eine 1-dimensionale antisymmetrische Darstellung.

Wenn alle Kombinationen durchgespielt werden, erhält man aus diesen gemischten Zuständen vier 1-dimensionale total-antisymmetrische Energieeigenzustände. Zusammen mit den vier weiter oben konstruierten ("antisymm x symm") Zuständen haben wir dann acht total-antisymmetrische Energieeigenzustände. Dies ist die richtige Gesamtzahl, warum?