

# Gruppen- und Darstellungstheorie in der Physik – Sommer 2017

## Übung 4

Prof. Dr. Andreas Klümper (kluemper@uni-wuppertal.de D.10.07)  
Abgabe: 01.06.2017

Besprechung: 01.06.2017

### 5. 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:

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

Eine Basis des 3-Teilchen-Hilbertraumes wird durch

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

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

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

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  $\alpha, \beta, \gamma$  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  $\alpha, \beta, \gamma$  seien wie unter i), aber  $V_3$  sei nicht 0, sondern "zufällig" durch

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

gegeben.  $V_3$  hält also die Position von  $\gamma$  fest und vertauscht den Rest.

Frage: Ist  $V_3$  wirklich symmetrisch, d.h.  $gV_3 = V_3g$  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  $4 \times 4$  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 (ii), aber um einen Spin  $s = 1/2$  erweitert. Die Zustände sind um den Spinanteil zu erweitern

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

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 symmetrischem (Bahn-) Eigenzustand mit antisymmetrischen Spin-zuständen 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. Zeige dies.

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?