

# Teil II (Quantenmechanik)

Skript Physik-Bibliothek  
(QII 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  $\hat{H}|n\rangle = \epsilon_n|n\rangle$

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

### 1.2. 1 Teilchen, $d \geq 1$ Freiheitsgrad

Beispiel H-Atom

$$|nlm\sigma\rangle \Leftrightarrow$$

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

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

Spin

1-Teilchenzustände sind  
Produktzustände

Hilbertraum  $\mathcal{H}$  als Tensorprodukt

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 \otimes \dots \otimes \mathcal{H}_d$$

mit Basis

$$\{|d_1\rangle \otimes |d_2\rangle \otimes \dots \otimes |d_d\rangle\};$$

$\{|d_i\rangle\}$  Basis  
in  $\mathcal{H}_i$

Beispiel: harm. Oszillator in 2 Dimensionen,

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

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

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

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

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  $\hat{H}|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle$  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 Fundamenteigenschaften.

Produkträume für  $N$  Teilchen

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

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

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

$$\Psi_{n_1 n_2 \dots n_N} \left( \overset{''}{\xi_1}, \xi_2, \dots, \xi_N \right);$$

$$\xi_i = x_i \sigma_i, \quad x_i \text{ Ortsvektor des } i\text{-ten Teilchens}$$

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 Ort  $x_1$  mit Spin  $\sigma_1$

⋮

Teilchen  $N$  am Ort  $x_N$  mit Spin  $\sigma_N$

zu finden.

1.4. Zwei ununterscheidbare Teilchen

2 Teilchen mit identischen Fundamenteigenschaften

$$\text{WF } \Psi(x_1 \sigma_1, x_2 \sigma_2).$$

Vertauschen der Indizes 1 ↔ 2 :

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

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

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

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

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

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

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

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

alle Observables vertauschen mit dem Transpositionoperator

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

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

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

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

• Observable : symmetrisch ggü. Vertauschung 1 ↔ 2

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

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

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

$$\begin{aligned} \bullet \quad |\Psi\rangle\langle\Psi| \hat{\Pi}_{12} |\Psi\rangle &= \hat{P}_\Psi \hat{\Pi}_{12} |\Psi\rangle = \\ &= \hat{\Pi}_{12} \hat{P}_\Psi |\Psi\rangle = \hat{\Pi}_{12} |\Psi\rangle / \langle\Psi|\hat{\Pi}_{12} \end{aligned}$$

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

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

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

"-1":  $\hat{\Pi}_{12}|\Psi\rangle = -|\Psi\rangle$  : anti symmetrisch  
 "fermionischer Zustand"

## 1.5. N ununterscheidbare Teilchen

a)  $N!$  Permutationen  $P = \begin{pmatrix} 1 & 2 & \dots & N \\ p_1 & p_2 & \dots & p_N \end{pmatrix} \in S_N$

Permutationsgruppe (N Objekte)

Zugehöriger Permutationsoperator  $\hat{\Pi}_P$

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

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

Jeder Permutationsoperator lässt sich als Produkt von Transpositionoperatoren schreiben

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

Fall  $N=2$ : Wie oben, Transposition  

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

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

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

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

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

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

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

Definition:

Symmetrisierungsoperator

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

Antisymmetrisierungsoperator

$$\hat{A} \equiv \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{p \in S_N} \text{sgn}(p) \hat{\Pi}_p$$

$n(p) =$  Anzahl der Transpositionen, um die Permutation  $p$  zu erzeugen  
 $(-1)^{n(p)}$

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,  $\mathcal{H} = \text{span}(|\nu\rangle)$

(nur ein Zustand  $|\nu\rangle$ ).

$\Rightarrow$  Symmetrischer  $N$ -Bosonen-Zustand

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

$$\Leftrightarrow \text{WF } N_{\nu}(p_1) N_{\nu}(p_2) \dots N_{\nu}(p_N)$$

Fall 2:  $N=2$  Bosonen, Einteilchenbasen  $\{|v_1\rangle\}, \{|v_2\rangle\}$

$$|v_1 v_2\rangle_S \Leftrightarrow \hat{S} \Psi_{v_1}(\xi_1) \Psi_{v_2}(\xi_2) =$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2!}} \left[ \Psi_{v_1}(\xi_1) \Psi_{v_2}(\xi_2) + \Psi_{v_1}(\xi_2) \Psi_{v_2}(\xi_1) \right]$$

Allg. Fall:  $N$  Bosonen

$N_1$  im Zustand  $|v_1\rangle, \dots, N_r$  im Zustand  $|v_r\rangle$

$$\sum_{i=1}^r N_i = N \quad \swarrow \text{symmetrisch}$$

$$| \underbrace{v_1 \dots v_1}_{N_1 \text{ mal}} \underbrace{v_2 \dots v_2}_{N_2 \text{ mal}} \dots \underbrace{v_r \dots v_r}_{N_r \text{ mal}} \rangle_S \Leftrightarrow$$

$$\frac{1}{\sqrt{N_1! N_2! \dots N_r!}} \hat{S} \Psi_{v_1}(\xi_1) \dots \Psi_{v_1}(\xi_{N_1}) \dots \Psi_{v_r}(\xi_{N-N_r+1}) \dots \Psi_{v_r}(\xi_N)$$

↑ Faktor aus Normierung

Aufgabe

Fall  $N_1 = 1$

$N_2 = 2$

überlegen

Fall  $N$  Fermionen

Antisymmetrischer  $N$ -Fermionen-Zustand

$$|v_1 \dots v_N\rangle_A \Leftrightarrow \text{WF } \hat{A} \Psi_{v_1}(\xi_1) \Psi_{v_2}(\xi_2) \dots \Psi_{v_N}(\xi_N)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{p \in S_N} \text{sgn}(p) \prod_p \Psi_{v_1}(\xi_p) \dots \Psi_{v_N}(\xi_N)$$



$$= \begin{vmatrix} \psi_{\nu_1}(\xi_1) & \psi_{\nu_1}(\xi_N) \\ \psi_{\nu_N}(\xi_1) & \psi_{\nu_N}(\xi_N) \end{vmatrix}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{N!}}$$

"Slater-Determinante"

- "Vertauschen zweier Teilchen  $\Leftrightarrow$  Vertauschen zweier Spalten  $\rightarrow$  gibt Minus-Zeichung wie es sein sollte"
- Zwei oder mehr der  $\nu_i$  identisch  
 $\Rightarrow$  Slater-Det = Null  
 $\Rightarrow$  Pauli-Prinzip