Technische Universität Wien

Prof. A. Toschi, Prof. K. Held, Dr. J. Tomczak, Dr. F. Krien

6. Übung zur Quantentheorie II

Wintersemester 2022/2023

<u>TUTORIUM</u>: Freitag, 13.1.2022.

13. Hartree-Fock Approximation

2+1+2+1+1=7 Punkte

Wir betrachten zwei wechselwirkende Spin-1/2 Teilchen in einer Dimension beschrieben durch den Hamiltonian,

$$H = \frac{1}{2}(-\Delta_{r_1} + r_1^2) + \frac{1}{2}(-\Delta_{r_1} + r_1^2) + \frac{U}{2}(r_1 - r_2)^2.$$

Durch Zerlegung in Relativ- und Schwerpunktkoordinaten läßt sich das Problem exakt lösen mit Grundzustandsenergie $E = \frac{3}{2}(1 + \sqrt{1 + 2U})$.

a) Bilden Sie den Hartree-Fock-Ansatz $\Psi(r_1, r_2) = \sqrt{2}\mathcal{A}[\phi(r_1)|\uparrow\rangle_1\phi(r_2)|\downarrow\rangle_2]$ und erläutern Sie seine Form.

b) Wie lautet für dieses Problem die Hartree-Fock Gleichung?

c) Lösen Sie die Hartree-Fock-Gleichung mit einem geeigneten Ansatz für $\phi(r)$.

d) Berechnen Sie die Hartree-Fock-Energie.

e) Vergleichen Sie die Hartree-Fock-Energie und die exakte Energie bis zur 2. Ordnung in U.

14. Normierungsfaktor für identische Bosonen

1+1=2 Punkte

Betrachten Sie ein System von N nichtwechselwirkenden, identischen Bosonen, beschrieben durch die symmetrisierte Wellenfunktion,

$$|\Psi_N\rangle = c\,\mathcal{S}[|\phi_{\alpha_1}\rangle|\phi_{\alpha_2}\rangle \cdots |\phi_{\alpha_N}\rangle].$$

a) Bestimmen Sie die Normierungskonstante c unter der Annahme, dass alle Quantenzahlen paarweise verschieden sind, $\alpha_i \neq \alpha_j \,\forall\, i, j$.

b) Nehmen Sie nun an, dass Quantenzahlen α_i mehrfach auftreten können, und bestimmen Sie erneut die Normierungskonstante c.

15. Eigenschaften des (Anti-)Symmetrisierungsoperators

3+1+2=6 Punkte

a) Zeigen Sie für die in der Vorlesung definierten Operatoren $\mathcal{A}$ und $\mathcal{S}$ die Projektionseigenschaft $\mathcal{A}^2 = \mathcal{A}$, $\mathcal{S}^2 = \mathcal{S}$, sowie $\mathcal{A}\mathcal{S} = 0$.

b) Zeigen Sie für den Permutationsoperator $\mathcal{P}$, dass $\mathcal{P} = \mathcal{P}^\dagger$ und $[\mathcal{P}, O] = 0$, wobei O eine beliebige Observable für ununterscheidbare Teilchen ist.

c) Sei $|\Psi_N\rangle = |\phi_{\alpha_1}\rangle|\phi_{\alpha_2}\rangle \cdots |\phi_{\alpha_N}\rangle$ ein nicht symmetrisierter Produktzustand und $|\Psi_N^+\rangle = \mathcal{S}|\Psi_N\rangle$ sowie $|\Psi_N^-\rangle = \mathcal{A}|\Psi_N\rangle$ die entsprechend (anti-)symmetrisierten Zustände. Zeigen Sie für eine beliebige Observable O für ununterscheidbare Teilchen, dass $\langle\Psi_N^\pm|O|\Psi_N^\pm\rangle = \langle\Psi_N|O|\Psi_N^\pm\rangle$, d.h. die (Anti-)Symmetrisierung kann auf einer Seite weggelassen werden. Nutzen Sie dafür die Resultate aus Aufgabenteil b).