week5: ONBs und Besetzungszahl-Darstellung für die Räume der symmetrischen und antisymmetrischen Wellenfunktionen

Wir betrachten zunächst einmal den einfachsten Fall eines quantenmechanischen Vielteilchensystems und setzen die Wechselwirkungsenergie gleich null, $V(x_i - x_j) = 0$. Der Hamilton-Operator ist dann gegeben durch

$$H_n \;:\; L^2_s(\Gamma_x^n) \;\to\; L^2_s(\Gamma_x^n) \qquad \text{(Bosonen)} \tag{1}$$

$$H_n \;:\; L^2_a\big(\,[\Gamma_x \times \{\uparrow,\downarrow\}]^n\,\big) \;\to\; L^2_a\big(\,[\Gamma_x \times \{\uparrow,\downarrow\}]^n\,\big) \qquad \text{(Fermionen)} \tag{2}$$

mit

$$H_n \;=\; -\tfrac{\hbar^2}{2m} \sum_{i=1}^n \Delta^\Gamma_{x_i} \tag{3}$$

wobei Δ^Γ der diskrete Laplace-Operator auf Γ_x ist. Die Systeme beschrieben durch (1) und (2) werden dann auch als das ideale Bose-Gas und das ideale Fermi-Gas bezeichnet. Die Ein-Teilchen Eigenfunktionen und Eigenwerte von

$$h \;:=\; H_1 \;=\; -\tfrac{\hbar^2}{2m}\,\Delta^\Gamma_x \tag{4}$$

hatten wir in dem Theorem 2.2 im week3 angegeben, es war

$$h\,e_k \;=\; \varepsilon_k\,e_k \tag{5}$$

mit

$$\varepsilon_k \;=\; \tfrac{\hbar^2}{2m}\,\mu_k \;=\; \tfrac{\hbar^2}{2m}\sum_{i=1}^d \big(\tfrac{\sin(k_i\Delta x)}{\Delta x}\big)^2 \;\stackrel{\Delta x\to 0}{\to}\; \tfrac{\hbar^2}{2m}\sum_{i=1}^d k_i^2 \;=\; \tfrac{\hbar^2k^2}{2m} \tag{6}$$

$k \,=\, (k_1,\cdots,k_d) \in \Gamma_k$ und den Ebene-Wellen-Eigenfunktionen

$$e_k(x) \;=\; \tfrac{1}{(2ML+1)^{\frac{d}{2}}}\; e^{i\,k\cdot x} \;=\; \tfrac{1}{\sqrt{|\Gamma|}}\; e^{i\,k\cdot x} \tag{7}$$

mit dem Normierungsfaktor

$$\frac{1}{|\Gamma|} \;:=\; \frac{1}{|\Gamma_x|} \;=\; \frac{1}{|\Gamma_k|} \;=\; \frac{1}{(2ML+1)^d} \;=\; \frac{(\Delta x\Delta k)^d}{(2\pi)^d} \tag{8}$$

und $k\cdot x = k_1x_1 + \cdots + k_dx_d$. Die so normierten ebenen Wellen waren dann eine Orthonormalbasis, eine ONB von $L^2(\Gamma_x)$, der Menge aller Ein-Teilchen Wellenfunktionen:

$$(e_k, e_q) \;:=\; \sum_{x\in\Gamma_x} \bar e_k(x)\,e_q(x) \;=\; \delta_{k,q} \qquad \forall\, k,q\in\Gamma_k \tag{9}$$

Das Skalarprodukt in $L^2(\Gamma_x) = \mathbb{C}^{|\Gamma_x|}$ ist also wieder das Standardskalarprodukt in $\mathbb{C}^{|\Gamma_x|}$. Aus den $\{e_k\}_{k\in\Gamma_k}$ lassen sich dann folgendermassen Orthonormalbasen für die Räume der symmetrischen und antisymmetrischen Wellenfunktionen konstruieren:

Theorem 5.1: a) Es sei $\{e_i\}_{i=1}^{|\Gamma|}$ eine Orthonormalbasis von $L^2(\Gamma)$. Dann gilt:

$$\Big\{\; e_{i_1}\otimes\cdots\otimes e_{i_n} \;\Big|\; 1\le i_1,\cdots,i_n\le|\Gamma| \;\Big\} \qquad \text{ist eine ONB von } L^2(\Gamma^n)$$

$$\Big\{\; \sqrt{c_{i_1\cdots i_n}}\, e_{i_1}\otimes_s\cdots\otimes_s e_{i_n} \;\Big|\; 1\le i_1\le\cdots\le i_n\le|\Gamma| \;\Big\} \qquad \text{ist eine ONB von } L^2_s(\Gamma^n)$$

$$\Big\{\; \sqrt{n!}\, e_{i_1}\otimes_a\cdots\otimes_a e_{i_n} \;\Big|\; 1\le i_1<\cdots< i_n\le|\Gamma| \;\Big\} \qquad \text{ist eine ONB von } L^2_a(\Gamma^n)$$

mit dem Normierungsfaktor (der letzte Ausdruck ist ein Multinomialkoeffizient, $\sum_i n_i = n$)

$$c_{i_1\cdots i_n} \;:=\; \frac{n!}{n_1!\cdots n_{|\Gamma|}!} \;=\; \begin{pmatrix} & n & \\ n_1 & \cdots & n_{|\Gamma|}\end{pmatrix}$$

und den **Besetzungszahlen**

$$\begin{aligned} n_i \;&:=\; \text{Anzahl von } e_{i_r} \text{ in } e_{i_1}\otimes_s\cdots\otimes_s e_{i_n} \;\text{ mit }\; i_r = i \\ &=\; \text{Anzahl von } i_r \text{ in } \{i_1,\cdots,i_n\} \;\text{ mit }\; i_r = i \end{aligned} \tag{10}$$

b) Die Räume haben die folgenden Dimensionen:

$$\begin{aligned} \dim L^2(\Gamma^n) \;&=\; |\Gamma|^n \\ \dim L^2_s(\Gamma^n) \;&=\; \binom{|\Gamma|+n-1}{n} \\ \dim L^2_a(\Gamma^n) \;&=\; \binom{|\Gamma|}{n}\;. \end{aligned}$$

Beweis: a) Wir zeigen die Orthogonalitätsrelationen: Mit dem Lemma 4.2 von letzter Woche bekommen wir

$$\begin{aligned} \big(\, e_{i_1}\otimes\cdots\otimes e_{i_n}\,,\, e_{j_1}\otimes\cdots\otimes e_{j_n}\big) \;&=\; (e_{i_1},e_{j_1})\cdots(e_{i_n},e_{j_n}) \\ &=\; \delta_{i_1,j_1}\cdots\delta_{i_n,j_n} \end{aligned}$$

Weiterhin, mit Teil (b) von Lemma 4.2,

$$n!\,\big(\, e_{i_1}\otimes_s\cdots\otimes_s e_{i_n}\,,\, e_{j_1}\otimes_s\cdots\otimes_s e_{j_n}\big) \;=\; \mathrm{per}\big[\,(e_{i_r},e_{j_s})_{1\le r,s\le n}\,\big]$$

Wenn die Matrix der $(e_{i_r},e_{j_s})_{1\le r,s\le n}$ eine Zeile oder Spalte mit lauter Nullen besizt, ist die Permanente 0. Es muss also

$$\{i_1,\cdots,i_n\} \;=\; \{j_1,\cdots,j_n\}$$

gelten. Es müssen aber nicht alle i_r untereinander verschieden sein, sondern wir könnten etwa haben

$$\{i_1, \cdots, i_6\} \quad = \quad \{j_1, \cdots, j_6\} \quad = \quad \{1, 1, 1, 5, 8, 8\}$$

und wir müssen die Permanente der Matrix

$$(e_{i_r}, e_{j_s})_{1 \leq r,s \leq 6} \quad = \quad \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 \end{pmatrix}$$

berechnen. Eine Permanente von Block-Matrizen ist das Produkt der Permanenten der einzelnen Blöcke, hier in dem konkreten Beispiel würden wir dann

$$3! \;\times\; 1! \;\times\; 2!$$

bekommen, da eine Permanente einer $m \times m$ Matrix mit lauter Einsen gerade $m!$ ist, das folgt unmittelbar aus der Definition von Permanente. Im allgemeinen Fall bekommen wir dann also

$$\mathrm{per}\big[\, (e_{i_r}, e_{j_s})_{1 \leq r,s \leq n} \,\big] \quad = \quad \prod_{i=1}^{|\Gamma|} n_i!$$

mit den Besetzungszahlen

$$n_i \quad := \quad \text{Anzahl von } e_{i_r} \text{ in } e_{i_1} \otimes_s \cdots \otimes_s e_{i_n} \text{ mit } i_r = i$$

Also lautet der korrekte Normierungsfaktor

$$c_{i_1 \cdots i_n} \quad = \quad \frac{n!}{n_1! \cdots n_{|\Gamma|}!}$$

Wegen

$$n_1 \;+\; \cdots \;+\; n_{|\Gamma|} \quad = \quad n$$

ist das ein Multinomialkoeffizient,

$$c_{i_1 \cdots i_n} \quad = \quad \frac{n!}{n_1! \cdots n_{|\Gamma|}!} \quad = \quad \binom{n}{n_1 \;\cdots\; n_{|\Gamma|}}$$

Schliesslich, mit Teil (c) vom Lemma 4.2,

$$n!\,\big(\, e_{i_1} \otimes_a \cdots \otimes_a e_{i_n} \,,\, e_{j_1} \otimes_a \cdots \otimes_a e_{j_n} \,\big) \quad = \quad \det\big[\, (e_{i_r}, e_{j_s})_{1 \leq r,s \leq n} \,\big]$$

Wenn die Matrix der $(e_{i_r}, e_{j_s})_{1 \leq r,s \leq n}$ eine Zeile oder Spalte mit lauter Nullen besizt, ist die Determinante 0. Es muss also

$$\{i_1, \cdots, i_n\} \quad = \quad \{j_1, \cdots, j_n\}$$

gelten und wegen $i_1 < \cdots < i_n$ ist dann

$$(e_{i_r}, e_{j_s})_{1\le r,s\le n} \;=\; (e_{i_r}, e_{i_s})_{1\le r,s\le n} \;=\; Id$$

gleich der Einheitsmatrix und die Determinante davon ist gleich 1.

b) Die Formel für $\dim L^2(\Gamma^n)$ ist klar, die i_r können unabhängig voneinander die Werte $1, \cdots, |\Gamma|$ annehmen, das sind dann insgesamt

$$|\Gamma| \cdot |\Gamma| \cdot \cdots \cdot |\Gamma| \;=\; |\Gamma|^n$$

Möglichkeiten. Um eine Basis für $L^2_a(\Gamma^n)$ zu bekommen, müssen alle e_{i_r} verschieden sein, wegen $e_i \otimes_a e_i = 0$. Wir müssen uns also überlegen, wie viele Teilmengen $\{i_1, \cdots, i_n\} \subset \{1, \cdots, |\Gamma|\}$ es gibt mit

$$1 \;\le\; i_1 \;<\; i_2 \;<\; \cdots \;<\; i_{n-1} \;<\; i_n \;\le\; |\Gamma|$$

Das ist wie Ziehung der Lottozahlen, aus $|\Gamma|$ Elementen müssen wir n Elemente herausgreifen, und dafür gibt es

$$\binom{|\Gamma|}{n}$$

Möglichkeiten. Wenn wir schliesslich eine Basis für $L^2_s(\Gamma^n)$ bekommen wollen, brauchen die e_{i_r} nicht mehr alle verschieden sein, sondern wir müssen die Anzahl der Teilmengen $\{i_1, \cdots, i_n\} \subset \{1, \cdots, |\Gamma|\}$ bestimmen mit

$$1 \;\le\; i_1 \;\le\; i_2 \;\le\; \cdots \;\le\; i_{n-1} \;\le\; i_n \;\le\; |\Gamma| \tag{11}$$

Um diese Anzahl zu finden, ist es jetzt günstig, die Besetzungszahlen (10) einzuführen. Dann können wir sagen: Die Anzahl der Teilmengen $\{i_1, \cdots, i_n\} \subset \{1, \cdots, |\Gamma|\}$ mit (11) ist gleich der Anzahl der $|\Gamma|$-Tupel

$$(n_1, n_2, \cdots, n_{|\Gamma|}) \;\in\; \{0, 1, 2, \cdots\}^{|\Gamma|} \tag{12}$$

mit

$$n_1 + n_2 + \cdots + n_{|\Gamma|} \;=\; n \;, \tag{13}$$

das n_i gibt also an, wie oft der Basisvektor e_i in dem $e_{i_1} \otimes_s \cdots \otimes_s e_{i_n}$ vorkommt. Im antisymmetrischen Fall kann das nur eine 0 oder 1 sein, aber jetzt im symmetrischen Fall kann das eine beliebige Anzahl zwischen 0 und n sein. In (12) hätten wir auch schreiben können $\{0, 1, 2, \cdots, n\}^{|\Gamma|}$, aber durch die Bedingung (13) wird das automatisch erzwungen. Wir substituieren

$$m_i \;:=\; n_i + 1$$

so dass (12,13) äquivalent sind zu

$$(m_1, m_2, \cdots, m_{|\Gamma|}) \;\in\; \{1, 2, \cdots\}^{|\Gamma|} \tag{14}$$

mit

$$m_1 + m_2 + \cdots + m_{|\Gamma|} \;=\; n + |\Gamma| \tag{15}$$

Eine Zerlegung (15) können wir nun folgendermassen erzeugen: Wir schreiben uns $n + |\Gamma|$ Einsen hin:

$$1 \;\; 1 \;\; 1 \;\; \cdots \;\; 1 \;\; 1$$

Dann gibt es genau $n + |\Gamma| - 1$ Zwischenräume zwischen diesen Einsen, in denen in der nächsten Zeile überall ein senkrechter Strich steht,

$$1 \,|\, 1 \,|\, 1 \,|\, \cdots \,|\, 1 \,|\, 1$$

Eine Zerlegung (15) können wir nun dadurch generieren, dass wir genau $|\Gamma| - 1$ Trennstriche auf die $n + |\Gamma| - 1$ Zwischenräume verteilen. Die Anzahl der Einsen innerhalb zweier Trennstriche definiert dann ein m_i in (15). Offensichtlich gibt es nun genau

$$\binom{|\Gamma| + n - 1}{|\Gamma| - 1} \;=\; \binom{|\Gamma| + n - 1}{n}$$

Möglichkeiten, $|\Gamma| - 1$ Trennstriche auf $n + |\Gamma| - 1$ Zwischenräume zu verteilen. Das ist dann also die Anzahl der verschiedenen symmetrischen n-Teilchen Basisvektoren $e_{i_1} \otimes_s \cdots \otimes_s e_{i_n}$ und damit die Dimension von $L^2_s(\Gamma^n)$. ■

Definition und Notation Besetzungszahldarstellung:

Wir wollen die folgende Notation vereinbaren:

$$e_{k_1} \otimes_s \cdots \otimes_s e_{k_n} \;=\; \bigotimes_{s \atop k \in \Gamma_k} e_k^{\otimes_s n_k} \;=:\; |\, \{n_k\} \,\rangle_s \tag{16}$$

$$e_{k_1} \otimes_a \cdots \otimes_a e_{k_n} \;=\; \bigotimes_{a \atop k \in \Gamma_k} e_k^{\otimes_a n_k} \;=:\; |\, \{n_k\} \,\rangle_a \tag{17}$$

mit den Besetzungszahlen

$$n_k \;:=\; \text{Anzahl von } k_r \text{ in } \{k_1, \cdots, k_n\} \text{ mit } k_r = k \tag{18}$$

Die Basisvektoren von $L^2_s(\Gamma^n)$ oder $L^2_a(\Gamma^n)$ stehen also in einer 1-zu-1 Relation zu einer Angabe von Besetzungszahlen $\{n_k\} = \{n_k\}_{k \in \Gamma_k}$. Dabei gilt

$$n_k \;\in\; \begin{cases} \{\,0\,,\,1\,\} & \text{für antisymmetrische Wellenfunktionen} \\ \{\,0\,,\,1\,,\,\cdots\,,\,n\,\} & \text{für symmetrische Wellenfunktionen} \end{cases} \tag{19}$$

Für die komplex konjugierten Basisvektoren schreibt man dann auch

$$\bar{e}_{k_1} \otimes_s \cdots \otimes_s \bar{e}_{k_n} \;=\; \bigotimes_{s \atop k \in \Gamma_k} \bar{e}_k^{\otimes_s n_k} \;=:\; {}_s\langle\, \{n_k\} \,| \tag{20}$$

$$\bar{e}_{k_1} \otimes_a \cdots \otimes_a \bar{e}_{k_n} \;=\; \bigotimes_{a \atop k \in \Gamma_k} \bar{e}_k^{\otimes_a n_k} \;=:\; {}_a\langle\, \{n_k\} \,| \tag{21}$$

In den Physik-Büchern läuft das dann auch unter dem Begriff Bra-Ket-Notation. Der Nutzen davon ist, dass die e's, also der Buchstabe e in den Basisvektoren, keine Information trägt (naja, nicht ganz..), und da das Setup für N-Teilchen Systeme sowieso schon etwas mehr Buchstaben benötigt, möchte man dann nur die Sachen hinschreiben, die man dann für die Rechnungen auch wirklich braucht, und das sind die Teilchenzahlen oder Besetzungszahlen $\{n_k\} = \{n_k\}_{k \in \Gamma_k}$.

Die Skalarprodukte in $L^2_s(\Gamma^n_x)$ und $L^2_a(\Gamma^n_x)$ lesen sich dann etwa folgendermassen:

$$ {}_s\langle\, \{n_k\} \,|\, \{\tilde{n}_k\} \,\rangle_s \;=\; \big(e_{k_1} \otimes_s \cdots \otimes_s e_{k_n} \,,\, e_{\tilde{k}_1} \otimes_s \cdots \otimes_s e_{\tilde{k}_n} \big) \;=\; \prod_k \delta_{n_k,\tilde{n}_k} \, \frac{\Pi_k\, n_k!}{n!} \tag{22} $$

$$ {}_a\langle\, \{n_k\} \,|\, \{\tilde{n}_k\} \,\rangle_a \;=\; \big(e_{k_1} \otimes_a \cdots \otimes_a e_{k_n} \,,\, e_{\tilde{k}_1} \otimes_a \cdots \otimes_a e_{\tilde{k}_n} \big) \;=\; \prod_k \delta_{n_k,\tilde{n}_k} \, \frac{1}{n!} \tag{23} $$

Dabei hätten wir auf der rechten Seite von (23) auch

$$ \prod_k \delta_{n_k,\tilde{n}_k} \, \frac{\Pi_k\, n_k!}{n!} $$

schreiben können, also denselben Ausdruck wie in (22), aber da im antisymmetrischen Fall notwendig $n_k \in \{0,1\}$ gelten muss, sind die $n_k!$ im Zähler immer gleich 1 (mit der Konvention $0! := 1$). Für den Hamilton-Operator ohne Wechselwirkung,

$$ H_n \;=\; -\tfrac{\hbar^2}{2m} \sum_{i=1}^{n} \Delta^{\Gamma}_{x_i} \tag{24} $$

also mit $V(x_i - x_j) = 0$, ergibt sich dann

$$ H_n \,|\, \{n_k\} \,\rangle_s \;=\; E_{\{n_k\}} \,|\, \{n_k\} \,\rangle_s \tag{25} $$

$$ H_n \,|\, \{n_k\} \,\rangle_a \;=\; E_{\{n_k\}} \,|\, \{n_k\} \,\rangle_a \tag{26} $$

mit den n-Teilchen Eigenenergien

$$ E_{\{n_k\}} \;=\; \textstyle\sum_k n_k\, \varepsilon_k \tag{27} $$

Das ist dann in beiden Fällen, symmetrisch oder antisymmetrisch, derselbe analytische Ausdruck, allerdings ist im bosonischen Fall etwa der Basisvektor

$$ |\, \{n_k\} \,\rangle_s \;=\; \big|\, n_0 = 10^{23} \text{ und } n_k = 0 \;\; \forall\, k \neq 0 \,\big\rangle \tag{28} $$

ein zugelassener Basisvektor mit Eigenenergie

$$ E_{\{n_k\}} \;=\; 10^{23} \cdot \varepsilon_{k=0} \;=\; 10^{23} \cdot 0 \;=\; 0 \tag{29} $$

wohingegen im fermionischen Fall der $k = 0$ Zustand nur mit maximal $n_{k=0} = 1$ Elektron (oder 2, wenn wir später noch den Spin mit dazu nehmen) besetzt werden darf, die 'restlichen' $10^{23} - 1$ Elektronen müssen dann also höhere Niveaus mit $\varepsilon_k > 0$ besetzen. Das werden wir uns dann in den nächsten 2 Wochen noch etwas genauer anschauen, und das läuft dann unter den Begriffen ideales Bose-Gas und ideales Fermi-Gas.