Bsp.: zwei nicht-wechselwirkende Teilchen im 1dim-Potential

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{für } 0 \leq x \leq a \\ \infty & \text{sonst} \end{cases} \qquad \text{[Abb: Pot.]}$$

$\rightarrow$ kennen die 1-Teilchen Lsn der Schrödinger-Glg (vgl Ü 8)

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{n}} \sin\left(\frac{n\pi}{a}\, x\right)$$

$$E_n = n^2 \hat{E} \quad \text{mit} \quad \hat{E} \equiv \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}$$

- unterscheidbare Teilchen:

  Wellenfkt. des 2-Teilchen Systems ist das Produkt

  $$\psi_{n_1 n_2}(x_1, x_2) = \psi_{n_1}(x_1)\psi_{n_2}(x_2)$$
  $$E_{n_1 n_2} = (n_1^2 + n_2^2)\hat{E}$$

  $\rightarrow$ Grundzustand: $\psi_{11} = \frac{2}{a}\sin(\frac{\pi}{a}x_1)\sin(\frac{\pi}{a}x_2)$, $\quad E_{11} = 2\hat{E}$

  $\rightarrow$ der nächsthöhere Zustand ist zweifach entartet:

  $$\begin{aligned} \psi_{12} &= \frac{2}{a}\sin(\frac{\pi}{a}x_1)\sin(\frac{2\pi}{a}x_2) \;, \quad E_{12} = 5\hat{E} \\ \psi_{21} &= \frac{2}{a}\sin(\frac{2\pi}{a}x_1)\sin(\frac{\pi}{a}x_2) \;, \quad E_{21} = 5\hat{E} \end{aligned}$$

  $\rightarrow$ usw.

- zwei identische Bosonen:

  $\rightarrow$ Grundzustand wie oben

  $\rightarrow$ erster angeregter Zustand ist nicht entartet:

  $$\frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{12} + \psi_{21}) = \frac{\sqrt{2}}{a}\left(\sin(\frac{\pi}{a}x_1)\sin(\frac{2\pi}{a}x_2) + \sin(\frac{2\pi}{a}x_1)\sin(\frac{\pi}{a}x_2)\right)$$

  mit $E = 5\hat{E}$

- zwei identische Fermionen:

  $\rightarrow$ es gibt **keinen** Zustand mit $E = 2\hat{E}$!

  $\rightarrow$ Grundzustand ist also jetzt

  $$\frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{12} - \psi_{21}) = \frac{\sqrt{2}}{a}\left(\sin(\frac{\pi}{a}x_1)\sin(\frac{2\pi}{a}x_2) - \sin(\frac{2\pi}{a}x_1)\sin(\frac{\pi}{a}x_2)\right)$$

  mit $E = 5\hat{E}$

(haben hier einen <u>symm.</u> Spinzustand angenommen)
(als Übung: wie lautet der nächsthöhere Zustand (ψ und E) in den drei Fällen?)

Austauschwechselwirkung

wollen uns veranschaulichen, was die (Anti-) Symmetrisierung bewirkt
$\rightarrow$ 1D, ein Teilchen im Zustand ψ_a, eins in ψ_b; $\psi's$ orthormiert.
haben wieder drei Fälle:

(a) unterscheidbare Teilchen: $\psi(x_1, x_2) = \psi_a(x_1)\psi_b(x_2)$

(b) Bosonen: $\psi(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_a(x_1)\psi_b(x_2) + \psi_b(x_1)\psi_a(x_2))$

(c) Fermionen: $\psi(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_a(x_1)\psi_b(x_2) - \psi_b(x_1)\psi_a(x_2))$

wie groß ist das mittlere Abstandsquadrat

$$d^2 \equiv \langle (x_1 - x_2)^2 \rangle = \langle x_1^2 \rangle + \langle x_2^2 \rangle - 2\langle x_1 x_2 \rangle$$

der beiden Teilchen?

(a)
$$\begin{aligned} \langle x_1^2 \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} dx_1 \int_{-\infty}^{\infty} dx_2 \; x_1^2 |\psi(x_1, x_2)|^2 = \int dx_1 \; x_1^2 |\psi_a(x_1)|^2 \underbrace{\int dx_2 |\psi_b(x_2)|^2}_{=1} \\ &= \langle a|x^2|a\rangle \end{aligned}$$

genauso $\langle x_2^2 \rangle = \langle b|x^2|b\rangle$

$\langle x_1 x_2 \rangle = \int dx_1 \int dx_2 x_1 x_2 |\psi_a(x_1)|^2 |\psi_b(x_2)|^2 = \langle a|x|a\rangle\langle b|x|b\rangle$

$\Rightarrow \; d^2_{(a)} = \langle a|x^2|a\rangle + \langle b|x^2|b\rangle - 2\langle a|x|a\rangle\langle b|x|b\rangle$

(b,c)
$$\begin{aligned} \langle x_1^2 \rangle &= \frac{1}{2} \int dx_1 \int dx_2 x_1^2 \Big\{ |\psi_a(x_1)|^2 |\psi_b(x_2)|^2 + |\psi_b(x_1)|^2 |\psi_a(x_2)|^2 \\ &\quad \pm \psi_a^*(x_1)\psi_b(x_1)\psi_b^*(x_2)\psi_a(x_2) \pm \psi_b^*(x_1)\psi_a(x_1)\psi_a^*(x_2)\psi_b(x_2) \Big\} \\ &= \frac{1}{2} \left\{ \langle a|x^2|a\rangle + \langle b|x^2|b\rangle \pm 0 \pm 0 \right\} \end{aligned}$$

genauso $\langle x_2^2 \rangle = \frac{1}{2}\left\{ \langle b|x^2|b\rangle + \langle a|x^2|a\rangle \right\}$

(natürlich ist $\langle x_1^2 \rangle = \langle x_2^2 \rangle$, weil Teilchen <u>un</u>unterscheidbar!)

$$\begin{aligned} \langle x_1 x_2 \rangle &= \frac{1}{2} \int dx_1 \int dx_2 \; x_1 x_2 \Big\{ \dots \Big\} \\ &= \frac{1}{2} \Big\{ \langle a|x|\; a\rangle\langle b|x|b\rangle + \langle b|x|b\rangle\langle a|x|a\rangle \pm 2\langle a|x|b\rangle \underbrace{\langle b|x|a\rangle}_{=\langle a|x|b\rangle^*} \Big\} \\ \Rightarrow d^2_{(b,c)} &= \underbrace{\langle a|x^2|a\rangle + \langle b|x^2|b\rangle - 2\langle a|x|a\rangle\langle b|x|b\rangle}_{=d^2_{(a)}} \mp 2|\langle a|x|b\rangle|^2 \end{aligned}$$

→ **Resultat**:
Bosonen (oberes Vorz.) sind etwas näher zusammen ...
Fermionen (unteres Vorz.) sind etwas weiter auseinander ...
...als unterscheidbare Teilchen in denselben Zuständen ψ_a, ψ_b
→ diesen Effekt nennt man "**Austauschkraft**" / "**Austauschww.**"

Bem.:

- keine Kraft im üblichen Sinne; rein qm. Effekt aufgrund der Symmetrie der Wellenfunktion, geometrische Konsequenz
- $\langle a|x|b\rangle \neq 0$ nur wenn Wellenfunktionen "überlappen"
  → $\psi_{a/b} \equiv e^-$ eines Atoms in Aachen/Bielefeld
  ⇒ kein Unterschied, ob wir WF antisymmetrisieren oder nicht!
  → in der Praxis können wir also diese e^- mit nicht-überlappenden WF'n als **unterscheidbar** betrachten.
  ⇒ nur deshalb können wir überhaupt Physik (+Chemie) betreiben:
  im Prinzip sind alle e^- des Universums in **einer** antisymm. WF (!!)
- wichtige Konsequenz: **chemische Bindung**
  z.B. H_2-Molekül: $2e^-$ im Coulombfeld zweier p^+
  → Grundzustand des $2e^-$-Systems?
  heuristisch: jedes $e^- \approx$ im GZ eines Atomkerns
  Gesamt-WF: $\psi_{Ort} \cdot \chi_{Spin}$
  ($\chi_{Spin} \sim \frac{1}{2} + \frac{1}{2}$, vgl. S.82, antisy $(1x)$ ↑↓, symm. $(3x)$ ↑↑)
  - $\psi_{Ort,symm} \cdot \chi_{antisy.}$
    Spin: $|00\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(\uparrow\downarrow - \downarrow\uparrow)$, Ges.-Spin $= 0$
    Ort: Elektronen bevorzugt zwischen den Atomkernen
    ⇒ p^+ werden nach innen gezogen
    → Abstand geringer [Abb: p-ee-p]
    ⇒ **kovalente chemische Bindung**
  - $\psi_{Ort,antisy} \cdot \chi_{symm.}$
    Ort: neg. e^--Ladung bevorzugt außen
    → Abstossung der Kerne
    → keine chemische Bindung