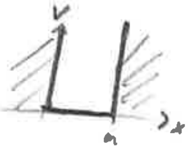
<u>Bsp</u> zwei nicht-wechselwirkende Teilchen im 1dim-Potentialtopf $V(x) = \begin{cases} 0 & \text{für } 0 \le x \le a \\ \infty & \text{sonst} \end{cases}$



$\rightarrow$ kennen die 1-Teilchen Lsn der Schrödinger-Glg (vgl. Ü8)

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

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

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

  $\rightarrow$ der nächsthöhere Zustand ist zweifach entartet:

  $$\psi_{12} = \frac{2}{a}\sin\left(\frac{\pi}{a}x_1\right)\sin\left(\frac{2\pi}{a}x_2\right), \quad E_{12} = 5\hat{E}$$

  $$\psi_{21} = \frac{2}{a}\sin\left(\frac{2\pi}{a}x_1\right)\sin\left(\frac{\pi}{a}x_2\right), \quad E_{21} = 5\hat{E}$$

  $\rightarrow$ usw.

- zwei identische Bosonen:

  $\rightarrow$ Grundzustand wie oben

  $\rightarrow$ erster angeregter Zustand ist nicht entartet:

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

  mit $E = 5\hat{E}$

- zwei identische Fermionen:

  $\rightarrow$ es gibt <u>keinen</u> Zustand mit $E = 2\hat{E}$!

  $\rightarrow$ Grundzustand ist also jetzt

  $$\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\psi_{12} - \psi_{21}\right) = \frac{\sqrt{2}}{a}\Big(\qquad\qquad - \qquad\qquad \Big)$$

  mit $E = 5\hat{E}$

((haben hier einen <u>symm.</u> Spinzustand angenommen))

((als Übung: wie lautet jeweils der nächsthöhere Zustand (ψ und E) in den drei Fällen?))

Austauschwechselwirkung

wollen uns veranschaulichen, was die (Anti-)Symmetrisierung bewirkt.
→ 1D; ein Teilchen im Zustand ψ_a, eins in ψ_b; ψ's orthonormiert.
haben wieder drei Fälle:

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

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

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

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

$= \langle a|x^2|a\rangle$

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

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

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

(b,c) $\langle x_1^2\rangle = \frac{1}{2}\int dx_1\int dx_2\; x_1^2\Big\{|\psi_a(x_1)|^2|\psi_b(x_2)|^2 + |\psi_b(x_1)|^2|\psi_a(x_2)|^2$

$\pm\, \psi_a^*(x_1)\psi_b(x_1)\,\psi_b^*(x_2)\psi_a(x_2) \pm \psi_b^*(x_1)\psi_a(x_1)\,\psi_a^*(x_2)\psi_b(x_2)\Big\}$

$= \frac{1}{2}\left\{\langle a|x^2|a\rangle + \langle b|x^2|b\rangle \pm 0 \pm 0\right\}$

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 ununterscheidbar!))

$\langle x_1 x_2\rangle = \frac{1}{2}\int dx_1\int dx_2\; x_1 x_2 \{\ldots\}$

$= \frac{1}{2}\left\{\langle a|x|a\rangle\langle b|x|b\rangle + \langle b|x|b\rangle\langle a|x|a\rangle \pm 2\langle a|x|b\rangle\underbrace{\langle b|x|a\rangle}_{=\langle a|x|b\rangle^*}\right\}$

$\Rightarrow\; d_{(b,c)}^2 = \langle a|x^2|a\rangle + \langle b|x^2|b\rangle - 2\langle a|x|a\rangle\langle b|x|b\rangle \mp 2|\langle a|x|b\rangle|^2$

$= d_{(a)}^2 \mp 2|\langle a|x|b\rangle|^2$

→ Resultat:

{ Bosonen (oberes Vorz.) sind etwas näher zusammen
Fermionen (unteres Vorz.) sind etwas weiter auseinander }

als unterscheidbare Teilchen in denselben zwei Zuständen ψ_a, ψ_b.

⇝ diesen Effekt nennt man "Austauschkraft" / "Austauschww."

Bem.:

- keine Kraft im üblichen Sinne; rein qm. Effekt aufgrund der Symmetrie der Wellenfkt, geometrische Konsequenz
- $\langle a|x|b\rangle \neq 0$ nur wenn Wellenfkt'n "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^- ≈ im GZ eines Atomkerns

  Gesamt-WF: $\psi_{ort} \cdot \chi_{spin}$ ← $\frac{1}{2}+\frac{1}{2}$, vgl. S. 82, antisy (1x) $\uparrow\downarrow$, symm. (3x) $\uparrow\uparrow$

  - $\psi_{ort,symm} \cdot \chi_{antisy.}$ ← $|00\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(\uparrow\downarrow - \downarrow\uparrow)$, Ges.-Spin = 0

    ↑ Elektronen bevorzugt zwischen den Atomkernen

    → p^+ werden nach innen gezogen

    → Abstand geringer

    ⇒ kovalente chemische Bindung ⇝ ✓ [Chemiker: Singulett; Spin 0]

  - $\psi_{ort,antisy.} \cdot \chi_{symm.}$

    ↑ neg. e^--Ladung bevorzugt außen

    → Abstossung der Kerne

    → keine chemische Bindung