Nachtrag Aufgabe 4

a) zwei identische Spin-0-Teilchen

$\rightarrow$ $\varphi(x_1, x_2)$ symmetrisch!

φ_2 gerade $\rightarrow$ n_2 gerade!

nicht alle E-Werte möglich!

b) 2 unterscheidbare Teilchen

keine Symmetrieforderung

alle E-Werte (unabhängig von Spin) unterscheidbar: insbesondere muss nicht $m_1 = m_2$ gelten!

Klassisches Problem

$$m_1 \ddot{x}_1 = -\frac{\partial V}{\partial x_1} = -2Ax_1 - 2Bx_1 + 2Bx_2 \tag{1}$$

$$m_2 \ddot{x}_2 = -\frac{\partial V}{\partial x_2} = -2Ax_2 - 2Bx_2 + 2Bx_1 \tag{2}$$

Also:

$$m_1 \ddot{x}_1 = -2(A+B)x_1 + 2Bx_2 \qquad m_2 \ddot{x}_2 = -2(A+B)x_2 + 2Bx_1 \tag{3}$$

$$\ddot{x}_i = \sum_{k=1}^{2} M_{ik} x_k \qquad \text{mit } (M_{ik}) = \begin{pmatrix} -\frac{2(A+B)}{m_1} & \frac{2B}{m_1} \\ \frac{2B}{m_2} & \frac{-2(A+B)}{m_2} \end{pmatrix} \tag{4}$$

kurz:

$$\ddot{x} = Mx \qquad \text{mit } x = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} \tag{5}$$

Ziel:

$$\ddot{q}_1 = -\omega_1^2 q_1, \qquad \ddot{q}_2 = -\omega_2^2 q_2 \qquad \Rightarrow \qquad \ddot{q} = -\begin{pmatrix} \omega_1^2 & 0 \\ 0 & \omega_2^2 \end{pmatrix} q \qquad \text{mit } q = \begin{pmatrix} q_1 \\ q_2 \end{pmatrix} \tag{6}$$

Ansatz:

$$x = Cq \qquad \rightarrow \qquad q = C^{-1}x \qquad \ddot{q} = C^{-1}\ddot{x} = C^{-1}Mx = C^{-1}MCq \tag{7}$$

$$\rightarrow \qquad \underbrace{C^{-1}MC = -\begin{pmatrix} \omega_1^2 & 0 \\ 0 & \omega_2^2 \end{pmatrix}}_{\text{Hauptachsentransformation}} \tag{8}$$

$$MC = -C\begin{pmatrix} \omega_1^2 & 0 \\ 0 & \omega_2^2 \end{pmatrix} \qquad MC^{(i)} = -\omega_i^2 C^{(i)} \tag{9}$$

mit $C^{(i)}$ als i-te Spalte von C und somit Eigenwertproblem $i = 1, 2$ für die Matrix M

$$(M + \omega_i^2 \mathbb{1})C^{(1)} = 0 \qquad \rightarrow \qquad \text{EW } \omega_i \tag{10}$$

Für unseren Fall können wir dies nutzen, wenn die Determinante Null wird.

$$\begin{vmatrix} -\frac{2(A+B)}{m_1}+\omega_2 & \frac{2B}{m_1} \\ \frac{2B}{m_2} & \frac{2(A+B)}{m_2}+\omega^2 \end{vmatrix} = 0 \tag{11}$$

$$\omega^4+\omega^2\left[-\frac{2(A+B)}{m_2}\frac{2(A+B)}{m_1}\right]+\frac{4(A+B)^2}{m_1m_2}-\frac{4B^2}{m_1m_2}=0 \tag{12}$$

$$\omega^4-2(A+B)\left(\frac{1}{m_1}+\frac{1}{m_2}\right)\omega^2+\frac{1}{m_1m_2}(4A^2+8AB)=0 \tag{13}$$

$$w_{1/2}^2=(A+B)\frac{m_1+m_2}{m_1m_2}\pm\sqrt{\frac{(A+B)^2(m_1m_2)^2-(4A^2+8AB)m_1m_2}{m_1^2m_2^2}} \tag{14}$$

Für $m_1=m_2$ bedeutet dies

$$\omega_{1/2}^2=2\frac{A+B}{m}\pm\frac{-2B}{m} \tag{15}$$

$$\omega_1^2=\frac{2A}{m},\qquad \omega_2^2=\frac{2A+4B}{m}\qquad \text{vgl. Aufgabe 3} \tag{16}$$

Schrödingergleichung in q_1 und q_2

Potential:

$$V(x_1,x_2)=\sum_{i,k=1}^{2}V_{ik}x_ix_k\qquad \text{quadratische Form} \tag{17}$$

$$\hat{\mathrm{H}}=-\frac{\hbar^2}{2m_1}\frac{\partial^2}{\partial x_1^2}-\frac{\hbar^2}{2m_2}\frac{\partial^2}{\partial x_2^2}+\sum V_{ik}x_ix_k \tag{18}$$

jetzt:

$$x_i=\sum_{k=1}^{2}C_{ik}q_k\qquad i=1,2 \tag{19}$$

Nun ist

$$M_{ik}=-\frac{2}{m_i}V_{ik}\qquad \mathbb{V}=(V_{ik}) \tag{20}$$

$$V(x_1,x_2)=x^\intercal\mathbb{V}x=q^\intercal C^\intercal\mathbb{V}Cq\qquad \text{mit } x=\begin{pmatrix}x_1\\x_2\end{pmatrix},\qquad q=\begin{pmatrix}q_1\\q_2\end{pmatrix},\qquad q^\intercal=(q_1,q_2) \tag{21}$$

Problem: M ist nicht symmetrisch, aber $\tilde{M}=SMS^{-1}$ mit $S=\begin{pmatrix}\sqrt{m_1} & 0\\ 0 & \sqrt{m_2}\end{pmatrix}$ ist symmetrisch.

$$C^{-1}MC=C^{-1}\underbrace{S^{-1}MS^{-1}}SC=(SC)^{-1}\tilde{M}(SC)=-\begin{pmatrix}\omega_1^2 & 0\\ 0 & \omega_2^2\end{pmatrix} \tag{22}$$

Durch Normierung der Eigenvektoren von $\tilde{M}$ (Spalten der Matrix SC) erreicht man:

$$(SC)^\intercal=(SC)^{-1} \tag{23}$$

$$C^\intercal S^\intercal=C^{-1}S^{-1}\qquad \text{Es gilt: } S^\intercal=S, S^{-2}=\begin{pmatrix}\frac{1}{m_1} & 0\\ 0 & \frac{1}{m_2}\end{pmatrix} \tag{24}$$

$$C^\intercal=C^{-1}S^{-2} \tag{25}$$

$$
\begin{aligned}
V(x_1,x_2) &= q^\intercal C^\intercal \mathbb{V} C q && (26)\\
25 \quad \rightarrow \quad &= q^\intercal C^{-1} S^{-2} \mathbb{V} C q \qquad (S^{-2}\mathbb{V} = -\frac{1}{2}M) && (27)\\
&= -\frac{1}{2} q^\intercal \underbrace{C^{-1} M C}\, q && (28)\\
&= -\frac{1}{2}(q_1,q_2)\begin{pmatrix} -\omega_1^2 & 0 \\ 0 & -\omega_2^2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} q_1 \\ q_2 \end{pmatrix} && (29)
\end{aligned}
$$

Also:

$$V(x_1,x_2) = \frac{1}{2}(\omega_1 q_1^2 + \omega_2 q_2^2) \tag{30}$$

$$\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = C \begin{pmatrix} q_1 \\ q_2 \end{pmatrix} \qquad \rightarrow \qquad \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial q_1} \\ \frac{\partial}{\partial q_2} \end{pmatrix} = C^\intercal \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x_1} \\ \frac{\partial}{\partial x_2} \end{pmatrix} \tag{31}$$

$$(\partial_{q_1}, \partial_{q_2} = (\partial_{x_1}, \partial_{x_2})C \tag{32}$$

$$\partial_{q_1}^2 + \partial_{q_2}^2 = (\partial_{q_1}, \partial_{q_2}) \begin{pmatrix} \partial_{q_1} \\ \partial_{q_2} \end{pmatrix} = (\partial_{x_1}, \partial_{x_2}) \underbrace{C C^\intercal}_{S^{-2}} \begin{pmatrix} \partial_{x_1} \\ \partial_{x_2} \end{pmatrix} = \frac{1}{m_1}\partial_{x_1}^2 + \frac{1}{m_2}\partial_{x_2}^2 \tag{33}$$

$$\Rightarrow \qquad \hat{\mathrm{H}} = -\frac{\hbar}{2}\partial_{q_1}^2 - \frac{\hbar}{2}\partial_{q_2}^2 + \frac{1}{2}(\omega_1^2 q_1^2 + \omega_2^2 q_2^2) \tag{34}$$

Aufgabe 5

$$\text{Energieeigenwerte} = \begin{cases} \varepsilon_i = \hbar\omega(n_i + \frac{1}{2}) \\ \varepsilon_n = \hbar\omega(n + \frac{3}{2}) \end{cases}$$

mit $\omega = \sqrt{\frac{2A}{m}}$ und entarteten $n = n_x + n_y + n_z$!
Allgemein können wir schreiben:

$$v = \frac{1}{2}(n+1)(n+2) \qquad \text{für } x,y,z\text{-Entartung sowie } w = 2s+1 \text{ für Spnentartung} \tag{35}$$

$$\Rightarrow \qquad t_n^s = vw = \frac{1}{2}(n+1)(n+2)(2s+1) \tag{36}$$

Bei $N = 10$ können wir nun eine Verteilung auf die Energiewerte für die Grundzustandsenergie mit niedrigsten n vornehmen.
Dabei sind die einzelnen Energieeigenwerte $\varepsilon_0 = \frac{3}{2}\hbar\omega$, $\varepsilon_1 = \frac{5}{2}\hbar\omega$ sowie $\varepsilon_2 = \frac{7}{2}\hbar\omega$. Für Bosonen ($s$ ganzzahlig) ergibt sich:

$$E_0 = N\hbar(n + \frac{3}{2}) \overset{n=0}{=} 15\hbar\omega \tag{37}$$

Für Fermionen ergibt sich in Abhängigkeit des Spins mit den Energieeigenwerten $\varepsilon_0 = \frac{3}{2}\hbar\omega$, $\varepsilon_1 = \frac{5}{2}\hbar\omega$ sowie $\varepsilon_2 = \frac{7}{2}\hbar\omega$

Spin	Belegungsmöglichkeiten E^s	Grundzustandsenergie E_0^s
s_i	$t_0^i\varepsilon_0 + t_1^i\varepsilon_1 + t_2^i\varepsilon_2 + \dots$	
$s = \frac{1}{2}$	$1 \cdot 2\varepsilon_0 + 3 \cdot 2\varepsilon_1 + 2$ von $(6 \cdot 2)\varepsilon_2$	$25\hbar\omega$
$s = \frac{3}{2}$	$1 \cdot 4\varepsilon_0 + 6$ von $(3 \cdot 4)\varepsilon_1$	$21\hbar\omega$
$s = \frac{5}{2}$	$6\varepsilon_0 + 4\varepsilon_1$	$19\hbar\omega$
$s = \frac{7}{2}$	$8\varepsilon_0 + 2\varepsilon_1$	$17\hbar\omega$
$s = \frac{9}{2}$	$10\varepsilon_0$	$15\hbar\omega$

n_x	n_y	Möglichkeiten
n	0	1
$n-1$	$0,1$	2
$n-2$	$0,1,2$	3
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$
1	$0,\ldots,n-1$	n
0	$0,\ldots,n$	$n+1$

Der Übersicht halber noch eine Darstellung des Entartungsgrads der Energieniveaus (für $n_x + n_y \leq n \quad n_x, n_y \in \{0,1,\ldots,n\}$ anstatt der oben behandelten $n_x+n_y+n_z = n \quad n_x, n_y, n_z \in \{0,1,\ldots,n\}$): Formal lässt sich dies summieren als

$$\sum_{j=1}^{n+1} j = \frac{1}{2}(n+1)(n+2) \tag{38}$$

Aufgabe 6

Für Bosonen ergibt sich:

$$\varphi_S = \underset{\text{Wellenfkt. 1-Teil-Syst.}}{\varphi_a} \overset{\text{Teilchennummerierung}}{(1)} \varphi_b(2)\cdots\varphi_n(N) + \varphi_a(2)\varphi_b(1)\cdots\varphi_n(N) + \ldots \tag{39}$$

$$\begin{aligned}\langle\varphi_S|\varphi_S\rangle = \overbrace{\sum_{m_1,\ldots,m_N}}^{\sum_{m_i=-s}^{s}} \int \mathrm{d}^3\vec{x}_1\,\mathrm{d}^3\vec{x}_2\cdots\mathrm{d}^3\vec{x}_N\,&[\varphi_a^*(1)\varphi_b^*(2)\cdots\varphi_n(N) + \varphi_a^*(2)\varphi_b^*(1)\cdots\varphi_n^*(N)+\ldots] \\ \times&[\varphi_a(1)\varphi_b(2)\cdots\varphi_n(N) + \varphi_a(2)\varphi_b(1)\cdots\varphi_n(N)+\ldots]\end{aligned} \tag{40}$$

Zu zeigen war: $\langle\varphi_S|\varphi_S\rangle = N!\prod_i N_i!$
Als Nebenbedingung wissen wir $\sum_i N_i = N$, wobei N_i die Zahl der Teilchen im Einteilchenzustand $|\varphi_i\rangle$ ist.

- Die „quadratischen Terme“ ($[\psi_a^*(1)\cdots]\times[\psi_a(1)\cdots]$) ergeben $N!$ mal 1. (Es gibt $N!$ Permutationen).
- Alle Mischterme verschinden, falls $N_i = 1$.
- Allgemein: Zu jedem Summanden der ersten []-Klammer gibt es genau $\prod_i N_i$ „passende“ Terme der zweiten []-Klammer.

$$\Rightarrow \qquad \langle\psi_S|\psi_S\rangle = (\prod_i N_i!)N! \tag{41}$$

Für Fermionen ist im Folgeschluss $\langle\psi_A|\psi_A\rangle = N!$ klar durch das Pauli-Prinzip, denn jeder Einteilchenzustand darf maximal von einem Teilchen besetzt sein, da ansonsten $\psi_A = 0$.

Kommentar: In der nächsten Übung dieser Formalismus anhand dreier Teilchen noch einmal praktisch nachvollzogen werden.