Quantenmechanik II
FSU Jena - WS 2009/2010
Übungsserie 02 - Lösungen

Stilianos Louca

November 11, 2009

Aufgabe 03

Beginnend mit der stationären Schrödingergleichung

$$\underbrace{\left[\frac{-\hbar^2}{2m}\partial_{x_1}^2 + \frac{-\hbar^2}{2m}\partial_{x_2}^2 + V(x_1,x_2)\right]}_{\hat{H}} \Psi\big(x_1,x_2,S_z^{(1)},S_z^{(2)}\big) \stackrel{!}{=} E\Psi\big(x_1,x_2,S_z^{(1)},S_z^{(2)}\big) \tag{0.1}$$

machen wir den Separationsansatz $|\Psi\rangle = |\Phi\rangle \otimes |\chi\rangle$, sprich

$$\Psi\big(x_1,x_2,S_z^{(1)},S_z^{(2)}\big) = \Phi(x_1,x_2)\cdot\chi\big(S_z^{(1)},S_z^{(2)}\big)$$

so dass sich Gl. (0.1) reduziert auf

$$\hat{H}\,|\Phi\rangle = E\,|\Phi\rangle \tag{0.2}$$

Wir führen nun die Normalkoordinaten $\xi_1 := x_1 - x_2,\ \xi_2 := x_1 + x_2$ ein, so dass

$$V(\xi_1,\xi_2) = \underbrace{\left(\frac{A}{2}+B\right)}_{k_1}\xi_1^2 + \underbrace{\frac{A}{2}}_{k_2}\xi_2^2$$

und ferner

$$\begin{aligned}\partial_{x_1}^2 &= \partial_{\xi_1}^2 + \partial_{\xi_2}^2 + 2\partial_{\xi_1\xi_2}^2\\ \partial_{x_2}^2 &= \partial_{\xi_1}^2 + \partial_{\xi_2}^2 - 2\partial_{\xi_1\xi_2}^2\end{aligned}$$

Zu lösen wäre also

$$\left[-\frac{\hbar^2}{m}\partial_{\xi_1}^2 - \frac{\hbar^2}{m}\partial_{\xi_2}^2 + k_1\xi_1^2 + k_2\xi_2^2\right]\Phi = E\Phi \tag{0.3}$$

Machen den Separationsansatz $\Phi(\xi_1,\xi_2) = \Phi_1(\xi_1)\Phi_2(\xi_2)$ und erhalten

$$-\frac{\hbar^2}{m}\frac{d^2\Phi_1}{d\xi_1^2}\Phi_2 - \frac{\hbar^2}{m}\frac{d^2\Phi_2}{d\xi_2^2}\Phi_1 + \left[k\xi_1^2 + k_2\xi_2^2\right]\Phi_1\Phi_2 = E\Phi_1\Phi_2$$

$$\Leftrightarrow\ \underbrace{-\frac{\hbar^2}{m\Phi_1}\frac{d^2\Phi_1}{d\xi_1^2} + k_1\xi_1^2 - \frac{E}{2}}_{\text{nur von } \xi_1 \text{ abhängig}} = \underbrace{\frac{\hbar^2}{m\Phi_2}\frac{d^2\Phi_2}{d\xi_2^2} - k_2\xi_2^2 + \frac{E}{2}}_{\text{nur von } \xi_2 \text{ abhängig}}$$

Da beide Seiten von unabhängigen Variablen abhängen, müssen sie konstant sein, sprich

$$-\frac{\hbar^2}{2m\Phi_1}\frac{d^2\Phi_1}{d\xi_1^2} + \frac{k_1}{2}\xi_1^2 - \frac{E}{4} =: \lambda : \text{const}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m\Phi_2}\frac{d^2\Phi_2}{d\xi_2^2} + \frac{k_2}{2}\xi_2^2 - \frac{E}{4} = -\lambda$$

Bekanntlich besitzt die DGL

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_n}{dx^2}+\frac{k}{2}x^2\psi=\mathcal{E}\psi$$

(eindimensionaler harmonischer Oszillator) die (normierten) Hermite-Funktionen

$${}^k\psi_n(x)=\left(\frac{\sqrt{km}}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}}\frac{1}{\sqrt{2^n n!}}\cdot H_n\left(\sqrt{\frac{\sqrt{km}}{\hbar}}x\right)\cdot\exp\left[-\frac{x^2}{2}\frac{\sqrt{km}}{\hbar}\right]\quad,\quad n\in\mathbb{N}$$

als Eigenlösungen, mit den Hermite-Polynomen

$$H_n(x):=(-1)^n e^{x^2}\frac{d^n}{dx^n}e^{-x^2}$$

und den *Eigenwerten*

$${}^k\mathcal{E}={}^k\mathcal{E}_n=\hbar\sqrt{\frac{k}{m}}\left(n+\frac{1}{2}\right)\tag{0.4}$$

Daher muss gelten

$$\frac{E}{4}+\lambda={}^{k_1}\mathcal{E}_{n_1}\quad\wedge\quad\frac{E}{4}-\lambda={}^{k_2}\mathcal{E}_{n_2}\quad,\quad n_1,n_2\in\mathbb{N}_0$$

sprich

$$\lambda=\lambda_{n_1n_2}=\frac{1}{2}\left({}^{k_1}\mathcal{E}_{n_1}-{}^{k_2}\mathcal{E}_{n_2}\right)\quad,\quad E=E_{n_1,n_2}=2({}^{k_1}\mathcal{E}_{n_1}+{}^{k_2}\mathcal{E}_{n_2})$$

Somit ergeben sich die Energieeigenwerte von Gl. (0.1) mit Gl. (0.4) als

$$\boxed{E_{n_1,n_2}=2\hbar\left[\sqrt{\frac{A+2B}{2m}}\left(n_1+\frac{1}{2}\right)+\sqrt{\frac{A}{2m}}\left(n_2+\frac{1}{2}\right)\right]\quad,\quad n_1,n_2\in\mathbb{N}_0}\tag{0.5}$$

Entsprechend ergeben sich die (unnormierten) Eigenzustände als

$$\widetilde{\Phi}_{n_1,n_2}(\xi_1,\xi_2)={}^{k_1}\psi_n(\xi_1)\cdot{}^{k_2}\psi_{n_2}(\xi_2)$$

Wegen

$$\int\limits_{\mathbb{R}^2}\left|\widetilde{\Phi}_{n_1,n_2}(x_1,x_2)\right|^2\,d\mathbf{x}=\int\limits_{\mathbb{R}^2}\left|\widetilde{\Phi}_{n_1,n_2}(\xi_1,\xi_2)\right|^2\underbrace{\left|\det\left(\frac{d\mathbf{x}}{d\boldsymbol{\xi}}\right)\right|}_{\frac{1}{2}}\,d\boldsymbol{\xi}=\frac{1}{2}\underbrace{\int\limits_{\mathbb{R}}\left|{}^{k_1}\psi_{n_1}(\xi_1)\right|^2\,d\xi_1}_{1}\underbrace{\int\limits_{\mathbb{R}}\left|{}^{k_2}\psi_{n_2}(\xi_2)\right|\,d\xi_2}_{1}=\frac{1}{2}$$

ergeben sich die normierten Eigenlösungen der Schrödinger-Gleichung (0.2) gemäß

$$\Phi_{n_1,n_2}(x_1,x_2):=N_{n_1,n_2}\cdot H_{n_1}\left(\sqrt{\frac{\sqrt{k_1m}}{\hbar}}(x_1-x_2)\right)\cdot H_{n_2}\left(\sqrt{\frac{\sqrt{k_2m}}{\hbar}}(x_1+x_2)\right)\cdot e^{-\frac{(x_1-x_2)^2}{2}\frac{\sqrt{k_1m}}{\hbar}-\frac{(x_1+x_2)^2}{2}\frac{\sqrt{k_2m}}{\hbar}}$$

$$N_{n_1,n_2}:=\frac{\sqrt{2}\left(\frac{m\sqrt{k_1k_2}}{\pi^2\hbar^2}\right)^{\frac{1}{4}}}{\sqrt{2^{n_1}2^{n_2}n_1!n_2!}}\quad,\quad k_1:=\frac{A}{2}+B\ ,\ k_2:=\frac{A}{2}\quad,\quad n_1,n_2\in\mathbb{N}_0\tag{0.6}$$

wobei Φ_{n_1,n_2} für gerade n_1 symmetrisch, für ungerade n_1 antisymmetrisch[1] sind bei Teilchenvertauschung. Die Spin-Wellenfunktion $|\chi\rangle$ der beiden Teilchen wird aufgespannt durch die S_z- bzw. $\mathbf{S}^2$- Eigenvektoren

$$|s,m\rangle\ ,\ s\in\{0,1\}\ ,\ m=-s,..,s$$

des Gesamtspinoperators. Bekanntlich ist hierbei $|0,0\rangle$ antisymmetrisch bei Vertauschung der beiden Teilchen, $|1,m\rangle$ dagegen symmetrisch. Daher muss $|\Phi\rangle$ im ersten Fall symmetrisch, im zweiten Fall antisymmetrisch bei Teilchenvertauschung sein, so dass sich die Eigenlösungen von (0.1)

$$|n_1,n_2,s=0,m=0\rangle=|\Phi_{n_1,n_2}\rangle\otimes|s=0,m=0\rangle\quad,\quad n_1\in\mathbb{N}_0\text{ gerade},\ n_2\in\mathbb{N}_0$$

$$|n_1,n_2,s=1,m\rangle=|\Phi_{n_1,n_2}\rangle\otimes|s=1,m\rangle\quad,\quad m=-1,0,1,\quad n_1\in\mathbb{N}_0\text{ ungerade},\ n_2\in\mathbb{N}_0$$

[1] Beachte: $H_n(-x)=(-1)^nH_n(x)$.

Spezialfall: Im Grenzfall ungekoppelter Teilchen (2 unabhängige harmonische Oszillatoren, $B = 0$) mit jeweils Federkonstante $k = 2A$, ergeben sich die Energieeigenwerte des Systems

$$E_{n_1,n_2} = \hbar\left[\sqrt{\frac{k}{m}}\left(n_1 + \frac{1}{2}\right) + \sqrt{\frac{k}{m}}\left(n_2 + \frac{1}{2}\right)\right] \quad , \quad n_1, n_2 \in \mathbb{N}_0$$

was genau der Summe zweier Energieeigenwerte 1-dimensionaler harmonischen Oszillatoren entspricht!

Aufgabe 04

(a) Im Falle zweier identischer Spin-0 Teilchen müsse die Wellenfunktion $|\Psi\rangle$ symmetrisch bei Teilchenvertauschung sein, so dass sich die Lösungen

$$|n_1, n_2, s = 0, m = 0\rangle = |\Phi_{n_1,n_2}\rangle \otimes \underbrace{|s = 0, m = 0\rangle}_{\substack{\text{gerade bei}\\ \text{Teilchenvertauschung}}} \quad , \quad n_1 \in \mathbb{N}_0 \text{ gerade}, \; n_2 \in \mathbb{N}_0$$

ergeben würden.

(b) **Fall: Gleiche Masse** Bei unterscheidbaren Spin-$\frac{1}{2}$ Teilchen mit gleicher Masse m erweitert sich der Lösungsraum gemäß

$$|n_1, n_2, s = 0, m = 0\rangle = |\Phi_{n_1,n_2}\rangle \otimes |s = 0, m = 0\rangle \quad , \quad n_1, \; n_2 \in \mathbb{N}_0$$

$$|n_1, n_2, s = 1, m\rangle = |\Phi_{n_1,n_2}\rangle \otimes |s = 1, m\rangle \quad , \quad m = -1, 0, 1, \quad n_1, \; n_2 \in \mathbb{N}_0$$

Fall: Unterschiedliche Massen Im allgemeinen Fall beliebiger Massen m_1, m_2, müssen neue Normalkoordinaten q_1, q_2 gesucht werden. Machen den Ansatz

$$\mathbf{q} = C\mathbf{x} \quad , \quad C \in \mathbb{C}^{2\times 2} \tag{0.7}$$

so dass

$$V(\mathbf{x}) = \mathbf{x}^T \hat{V} \mathbf{x} = \mathbf{q}^T (C^{-1})^T \hat{V} C^{-1} \mathbf{q} =: V(\mathbf{q}) \tag{0.8}$$

wobei

$$\hat{V} = \begin{pmatrix} 2A & -B \\ -B & 2B \end{pmatrix} \tag{0.9}$$

die der quadratischen Form $V : \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}$ entsprechende Matrix ist. Aus Beziehung (0.7) liest man außerdem ab

$$\begin{pmatrix} \partial_{q_1} \\ \partial_{q_2} \end{pmatrix} = C^{-1} \begin{pmatrix} \partial_{x_1} \\ \partial_{x_2} \end{pmatrix} \quad \Rightarrow \quad \partial_{q_1}^2 + \partial_{q_2}^2 = \begin{pmatrix} \partial_{q_1} & \partial_{q_2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \partial_{q_1} \\ \partial_{q_2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \partial_{x_1} & \partial_{x_2} \end{pmatrix} (C^{-1})^T C^{-1} \begin{pmatrix} \partial_{x_1} \\ \partial_{x_2} \end{pmatrix} \tag{0.10}$$

Da $\hat{V}$ symmetrisch ist, ist sie diagonalisierbar, sprich es existiert $(C^{-1}S) \in \mathrm{GL}(\mathbb{C}^2)$ so dass

$$(C^{-1}S)^{-1} \hat{V} (C^{-1}S) =: \hat{V}_\mathrm{D}$$

diagonalgestalt hat, wobei

$$S := \begin{pmatrix} \sqrt{m_1} & 0 \\ 0 & \sqrt{m_2} \end{pmatrix} \in \mathrm{GL}(\mathbb{C}^2)$$

sei. Da V positiv semidefinit ist $(A, B \geq 0)$, müssen die Eigenwerte von $\hat{V}$ bzw. die Einträge von $\hat{V}_\mathrm{D}$ nicht-negativ sein, also

$$\hat{V}_\mathrm{D} = \begin{pmatrix} \omega_1^2 & 0 \\ 0 & \omega_2^2 \end{pmatrix}$$

für irgendwelche $\omega_1, \omega_2 \in \mathbb{R}$. Insbesondere kann $(C^{-1}S)$ orthogonal konstruiert werden (spalten sind orthonormierte Eigenvektoren von $\hat{V}$), so dass

$$(C^{-1}S)^{-1} = (C^{-1}S)^T \tag{0.11}$$

sprich

$$V(\mathbf{q}) \overset{(0.8)}{=} \mathbf{q}^T (C^{-1}SS^{-1})^T \hat{V} C^{-1}SS^{-1}\mathbf{q} = \mathbf{q}^T \underbrace{(S^{-1})^T}_{S^{-1}} \underbrace{(C^{-1}S)^T \hat{V} C^{-1}S}_{\hat{V}_\mathrm{D}} S^{-1}\mathbf{q} = \frac{\omega_1^2}{m_1} q_1^2 + \frac{\omega_2^2}{m_2} q_2^2 \tag{0.12}$$

und ferner

$$\partial_{q_1}^2 + \partial_{q_2}^2 \overset{(0.10)}{=} \begin{pmatrix} \partial_{x_1} & \partial_{x_2} \end{pmatrix} \underbrace{(C^{-1})^T C^{-1}}_{\substack{(S^T)^{-1}S^{-1} \\ \text{nach (0.11)}}} \begin{pmatrix} \partial_{x_1} \\ \partial_{x_2} \end{pmatrix} = \frac{\partial_{x_1}^2}{m_1} + \frac{\partial_{x_2}^2}{m_2}$$

Dementsprechend ergibt sich der (nun in q_1, q_2 separierbare) Hamiltonian

$$\boxed{\hat{H} = \frac{-\hbar^2}{2}\partial_{q_2}^2 + \frac{-\hbar^2}{2}\partial_{q_2}^2 + \frac{\omega_1^2}{m_1} q_1^2 + \frac{\omega_2^2}{m_2} q_2^2} \tag{0.13}$$

wobei ω_1^2, ω_2^2 die Eigenwerte von $\hat{V}$ in (0.9) sind.