

Aufgabe 3

Stationäre Schrödingergleichung mit Separationsansatz für zusätzliche Spinfunktion:

$$\overbrace{\left[\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + V(x_1, x_2) \right]}^{\hat{H}} \Psi(x_1, x_2, S_z^{(1)}, S_z^{(2)}) = E \Psi(x_1, x_2, S_z^{(1)}, S_z^{(2)})$$

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

Offensichtlich beeinflusst der Hamiltonoperator die Spinfunktion nicht, wodurch sich die zu lösende Gleichung auf:

$$\hat{H}\Phi = E\Phi$$

Betrachte Ausgangspotential und nutze Koordinatentransformation: $y_1 = x_1 + x_2$, $y_2 = x_1 - x_2 \rightarrow x_1 = \frac{1}{2}(y_1 + y_2)$, $x_2 = \frac{1}{2}(y_1 - y_2)$, setze außerdem $C = \frac{A}{2}$, $D = \frac{A}{2} + B$.

$$\begin{aligned} V(x_1, x_2) &= A(x_1^2 + x_2^2) + B(x_1 - x_2)^2 \\ &= \frac{A}{4} ((y_1 + y_2)^2 + (y_1 - y_2)^2) + B y_2^2 \\ &= \frac{A}{2} (y_1^2 + y_2^2) + B y_2^2 \\ &= C y_1^2 + D y_2^2 \end{aligned}$$

Für die Differentiale ergibt sich:

$$\begin{aligned} \partial_{x_1} &= \frac{\partial x_1}{\partial y_1} \partial_{y_1} + \frac{\partial x_1}{\partial y_2} \partial_{y_2} = \partial_{y_1} + \partial_{y_2} \\ \partial_{x_2} &= \frac{\partial x_2}{\partial y_1} \partial_{y_1} + \frac{\partial x_2}{\partial y_2} \partial_{y_2} = \partial_{y_1} - \partial_{y_2} \end{aligned}$$

Daraus folgt: $\partial_{x_1}^2 + \partial_{x_2}^2 = 2\partial_{y_1}^2 + 2\partial_{y_2}^2$.

Es ergibt sich die resultierende Schrödingergleichung inklusive weiterem Separationsansatz: $\Phi(y_1, y_2) = \Phi_1(y_1)\Phi_2(y_2)$

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial y_1^2} + \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial y_2^2} + \frac{C}{2} y_1^2 + \frac{D}{2} y_2^2 \right] \Phi_1(y_1)\Phi_2(y_2) = \frac{1}{2} (E'_1 + E'_2) \Phi_1(y_1)\Phi_2(y_2) = (E_1 + E_2) \Phi_1(y_1)\Phi_2(y_2)$$

Ihre bekannte Lösungen¹ und Eigenwerte sind:

$$\begin{aligned} \Phi_{n_1}(y_1) &= \left(\frac{m\omega_1}{\pi\hbar} \right)^{\frac{1}{4}} \frac{1}{\sqrt{2^{n_1} n_1!}} H_{n_1} \left(\sqrt{\frac{m\omega_1}{\hbar}} y_1 \right) e^{-\frac{1}{2} \frac{m\omega_1}{\hbar} y_1^2}, \quad E_{1,n_1} = \hbar\omega_1 \left(n_1 + \frac{1}{2} \right), \quad \omega_1^2 = \frac{C}{m} \\ \Phi_{n_2}(y_2) &= \left(\frac{m\omega_2}{\pi\hbar} \right)^{\frac{1}{4}} \frac{1}{\sqrt{2^{n_2} n_2!}} H_{n_2} \left(\sqrt{\frac{m\omega_2}{\hbar}} y_2 \right) e^{-\frac{1}{2} \frac{m\omega_2}{\hbar} y_2^2}, \quad E_{2,n_2} = \hbar\omega_2 \left(n_2 + \frac{1}{2} \right), \quad \omega_2^2 = \frac{D}{m} \end{aligned}$$

Führt man eine Normierung aus, erhält man den Vorfaktor $\frac{1}{2}$ welche aus der Koordinatentransformation folgt, dieser Faktor soll jedoch in der Betrachtung vernachlässigt werden, da er für die Aufgabenstellung nicht wesentlich ist.

¹Siehe QM I Vorlesung

Die Gesamtwellenfunktion ergibt sich nun durch Multiplikation der Einzellösungen, durch Rücksubstitution in die alten Koordinaten erhält man:

$$\begin{aligned} \Psi(x_1, x_2) = & \left(\frac{m}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{2}} (\omega_1\omega_2)^{\frac{1}{4}} \frac{1}{\sqrt{2^{n_1+n_2}n_1!n_2!}} \\ & \cdot H_{n_1}\left(\sqrt{\frac{m\omega_1}{\hbar}}(x_1+x_2)\right) H_{n_2}\left(\sqrt{\frac{m\omega_2}{\hbar}}(x_1-x_2)\right) \\ & \cdot e^{-\frac{1}{2}\frac{m\omega_1}{\hbar}(x_1+x_2)^2} e^{-\frac{1}{2}\frac{m\omega_2}{\hbar}(x_1-x_2)^2} \end{aligned}$$

Für die Hermite Polynome gelten:

$$H_n(-x) = (-1)^n \cdot H_n(x)$$

Durch Vergleich mit $\Psi(x_1, x_2)$ stellt man fest, dass sich H_{n_1} bei Teilchenvertauschung keine Veränderung ergibt, jedoch das Argument von H_{n_2} negativ wird. Entsprechend wird diese Wellenfunktion für ungerade n_2 eine antisymmetrische Wellenfunktion. $\chi_{0,0}$ ist antisymmetrisch, $\chi_{1,m}$, $m = -1, 0, 1$ symmetrisch. Da die Gesamtwellenfunktion antisymmetrisch sein muss, wird letzteres χ mit ungeraden n_2 kombiniert und entsprechend $\chi_{0,0}$ für gerade n_2 .

Aufgabe 4

a)

Im Vergleich zur obigen Lösung muss die Gesamtlösung symmetrisch sein, daher wird hier $\chi_{0,0}$ mit ungeraden n_2 kombiniert und entsprechend die verbleibenden.

b)

Für unterscheidbare Teilchen gibt es keine Gesamtwellenfunktion sondern jedes Teilchen hat seine eigene, sich nicht mit dem anderen Teilchen überschneidende, Wellenfunktion. Folglich sind die entstehenden Lösungen nicht zwangsläufig Eigenfunktionen des Hamiltonoperators (z.B. Elektron bei $-x$, Proton bei $+x$, durch Austausch der Teilchen lässt sich die alte Wellenfunktion nicht 'weiterverwenden').