Grundzustand im Zweiteilchensystem mit Kontaktterm

Wir betrachten ein System von zwei identischen Teilchen in einer Dimension. Die Teilchen sind in einem unendlich tiefen Potentialtopf der Breite a gefangen und unterliegen einer Wechselwirkung, die durch ein Kontaktpotential κV_{int} beschrieben wird. Im Ortsraum lautet der Hamiltonoperator:

$$\hat{H} = \hat{T} + V(x_1) + V(x_2) + \kappa V_{\text{int}}(x_1, x_2)\,, \qquad \hat{T} = \hat{T}_1 + \hat{T}_2\,, \qquad \hat{T}_i = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial {x_i}^2}\,,$$
$$V(x) = \begin{cases} 0 & 0 < x < a \\ \infty & \text{sonst} \end{cases}\,, \qquad V_{\text{int}}(x_1, x_2) = \delta(x_1 - x_2)\,. \tag{12.1}$$

Im folgenden können wir $\hbar = m = a = 1$ setzen. Wir wollen die Grundzustandswellenfunktion untersuchen. Sie hat die Form

$$\psi(x_1, x_2) = A \begin{cases} \psi_{\text{I}}(x_1, x_2) & 0 \le x_1 \le x_2 \le 1\,, \\ \psi_{\text{II}}(x_1, x_2) = \psi_{\text{I}}(x_2, x_1) & 0 \le x_2 \le x_1 \le 1\,, \end{cases}$$
$$\begin{aligned}\psi_{\text{I}}(x_1, x_2) = \cos\bigl(\alpha(x_1 + x_2 - 1)\bigr)\cos\bigl(\beta(x_1 - x_2 + 1)\bigr) \\ - \cos\bigl(\alpha(x_1 - x_2 + 1)\bigr)\cos\bigl(\beta(x_1 + x_2 - 1)\bigr)\,.\end{aligned} \tag{12.2}$$

Randbedingungen

Wir können verifizieren, dass die Wellenfunktion (12.2) folgende Randbedingungen erfüllt:

- $\psi(x_1, 0) = \psi(0, x_2) = \psi(x_1, 1) = \psi(1, x_2) = 0$,
- Stetigkeit am Übergang von $x_1 < x_2$ zu $x_1 > x_2$,
- Symmetrien des Problems: $\psi(x_1, x_2) = \psi(x_2, x_1) = \psi(1 - x_1, 1 - x_2)$.

Randbedingungen bei $x_1 = 0, 1$ und $x_2 = 0, 1$:

$$\begin{aligned}
\psi(x_1, 0) = \psi_{\text{II}}(x_1, 0) &= \cos\bigl(\alpha(x_1 - 1)\bigr)\cos\bigl(\beta(1 - x_1)\bigr) - \cos\bigl(\alpha(1 - x_1)\bigr)\cos\bigl(\beta(x_1 - 1)\bigr) = 0\,, \\
\psi(0, x_2) = \psi_{\text{I}}(0, x_2) &= \cos\bigl(\alpha(x_2 - 1)\bigr)\cos\bigl(\beta(1 - x_2)\bigr) - \cos\bigl(\alpha(1 - x_2)\bigr)\cos\bigl(\beta(x_2 - 1)\bigr) = 0\,, \\
\psi(x_1, 1) = \psi_{\text{I}}(x_1, 1) &= \cos(\alpha x_1)\cos(\beta x_1) - \cos(\alpha x_1)\cos(\beta x_1) = 0\,, \\
\psi(1, x_2) = \psi_{\text{II}}(1, x_2) &= \cos(\alpha x_2)\cos(\beta x_2) - \cos(\alpha x_2)\cos(\beta x_2) = 0\,.
\end{aligned} \tag{12.3}$$

Stetigkeit am Übergang von $x_1 < x_2$ zu $x_1 > x_2$ ist äquivalent zu $\psi_{\text{I}}(x, x) = \psi_{\text{II}}(x, x)$:

$$\begin{aligned}
\psi_{\text{I}}(x, x) &= \cos\bigl(\alpha(2x - 1)\bigr)\cos(\beta) - \cos(\alpha)\cos\bigl(\beta(2x - 1)\bigr)\,, \\
\psi_{\text{II}}(x, x) &= \cos\bigl(\alpha(2x - 1)\bigr)\cos(\beta) - \cos(\alpha)\cos\bigl(\beta(2x - 1)\bigr) = \psi_{\text{I}}(x, x)\,.
\end{aligned} \tag{12.4}$$

Symmetrien: Die erste Identität ist unmittelbar klar, da $\psi_{\text{II}}(x_2, x_1) = \psi_{\text{I}}(x_1, x_2)$: Nimm o. B. d. A. an, dass $x_1 \le x_2$. Dann:

$$\psi(x_2, x_1) = \psi_{\text{II}}(x_2, x_1) = \psi_{\text{I}}(x_1, x_2) = \psi(x_1, x_2)\,. \tag{12.5}$$

Außerdem:

$$\begin{aligned}
\psi(1 - x_1, 1 - x_2) &= \psi_{\text{II}}(1 - x_1, 1 - x_2) \\
&= \cos\bigl(\alpha(1 - x_2 - x_1)\bigr)\cos\bigl(\beta(x_1 - x_2 + 1)\bigr) - \cos\bigl(\alpha(x_1 - x_2 + 1)\bigr)\cos\bigl(\beta(1 - x_2 - x_1)\bigr) \\
&= \cos\bigl(\alpha(x_1 + x_2 - 1)\bigr)\cos\bigl(\beta(x_1 - x_2 + 1)\bigr) - \cos\bigl(\alpha(x_1 - x_2 + 1)\bigr)\cos\bigl(\beta(x_1 + x_2 - 1)\bigr) \\
&= \psi_{\text{I}}(x_1, x_2) = \psi(x_1, x_2)\,.
\end{aligned} \tag{12.6}$$

Energieeigenwert

Weiter können wir zeigen, dass $\psi(x_1, x_2)$ im Bereich $x_1 \neq x_2$ die zeitunabhängige Schrödingergleichung löst, mit Energieeigenwert $E = \alpha^2 + \beta^2$.
Es ist

$$
\begin{aligned}
\hat{T}_1 \psi_{\mathrm{I}}(x_1, x_2) &= -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial {x_1}^2} \psi_{\mathrm{I}}(x_1, x_2) \\
&= \frac{\alpha^2 + \beta^2}{2} \psi_{\mathrm{I}}(x_1, x_2) - \frac{\alpha\beta}{2} \big[2 \sin\big(\alpha(x_1 + x_2 - 1)\big) \sin\big(\beta(x_1 - x_2 + 1)\big) \qquad (12.7) \\
&\qquad - 2 \sin\big(\alpha(x_1 - x_2 + 1)\big) \sin\big(\beta(x_1 + x_2 - 1)\big) \big] , \\
\hat{T}_2 \psi_{\mathrm{I}}(x_1, x_2) &= -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial {x_2}^2} \psi_{\mathrm{I}}(x_1, x_2) \\
&= \frac{\alpha^2 + \beta^2}{2} \psi_{\mathrm{I}}(x_1, x_2) - \frac{\alpha\beta}{2} \big[-2 \sin\big(\alpha(x_1 + x_2 - 1)\big) \sin\big(\beta(x_1 - x_2 + 1)\big) \qquad (12.8) \\
&\qquad + 2 \sin\big(\alpha(x_1 - x_2 + 1)\big) \sin\big(\beta(x_1 + x_2 - 1)\big) \big] .
\end{aligned}
$$

Also:

$$
\hat{T} \psi_{\mathrm{I}}(x_1, x_2) = E \psi_{\mathrm{I}}(x_1, x_2) , \qquad E = \alpha^2 + \beta^2 . \tag{12.9}
$$

Genauso findet man

$$
\hat{T} \psi_{\mathrm{II}}(x_1, x_2) = E \psi_{\mathrm{II}}(x_1, x_2) , \qquad E = \alpha^2 + \beta^2 . \tag{12.10}
$$

Relativkoordinaten

Jetzt drücken wir den Hamiltonoperator und die Wellenfunktion durch folgende Relativkoordinaten aus:

$$
R = x_1 + x_2 \qquad \text{und} \qquad r = x_1 - x_2 . \tag{12.11}
$$

Es ist

$$
\frac{\partial}{\partial x_1} = \frac{\partial}{\partial R} + \frac{\partial}{\partial r} , \qquad \frac{\partial}{\partial x_2} = \frac{\partial}{\partial R} - \frac{\partial}{\partial r} \qquad \Rightarrow \qquad \frac{\partial^2}{\partial {x_1}^2} + \frac{\partial^2}{\partial {x_2}^2} = 2 \left(\frac{\partial^2}{\partial R^2} + \frac{\partial^2}{\partial r^2} \right) \tag{12.12}
$$

und

$$
\delta(x_1 - x_2) = \delta(r) . \tag{12.13}
$$

Also:

$$
\hat{H} = \hat{T} + \kappa \delta(r) + V(R, r) , \qquad \hat{T} = -\frac{\partial^2}{\partial R^2} - \frac{\partial^2}{\partial r^2} , \tag{12.14}
$$

wobei

$$
V(R, r) = \begin{cases} 0 & 0 \leq R \pm r \leq 2 , \\ \infty & \text{sonst} . \end{cases} \tag{12.15}
$$

Die Wellenfunktion (12.2) ist

$$
\begin{aligned}
\psi(R, r) &= A \begin{cases} \psi_{\mathrm{I}}(R, r) & 0 \leq R + r \leq R - r \leq 2 , \\ \psi_{\mathrm{II}}(R, r) & 0 \leq R - r \leq R + r \leq 2 , \end{cases} \\
\psi_{\mathrm{I}}(R, r) &= \cos\big(\alpha(R - 1)\big) \cos\big(\beta(r + 1)\big) - \cos\big(\alpha(r + 1)\big) \cos\big(\beta(R - 1)\big) , \qquad (12.16) \\
\psi_{\mathrm{II}}(R, r) &= \psi_{\mathrm{I}}(R, -r) .
\end{aligned}
$$

Quantisierungsbedingung

Die Anschlussbedingung für ψ' bei $r = 0$ erhalten wir wie üblich durch Integration der Schrödingergleichung in (R, r)-Koordinaten über $r \in [-\varepsilon, \varepsilon]$ mit $\varepsilon > 0$. Wir werden sehen, dass die sich ergebende Anschlussbedingung im Limes $\varepsilon \to 0$ äquivalent wird zu

$$\alpha \tan\alpha = \beta \tan\beta = \frac{\kappa}{2} \; . \tag{12.17}$$

Die Integration ergibt

$$\begin{aligned} 0 = \lim_{\varepsilon\to 0} \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} \hat{H}\psi(R,r) - E\psi(R,r)\,\mathrm{d}r &= \lim_{\varepsilon\to 0} \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} \hat{H}\psi(R,r)\,\mathrm{d}r \\ &= \lim_{\varepsilon\to 0} \left[\int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} \hat{T}\psi(R,r)\,\mathrm{d}r + \kappa\,\psi(R,0) \right] . \end{aligned} \tag{12.18}$$

Nun ist $\partial^2\psi(R,r)/\partial R^2$ im Bereich $r \in [-\varepsilon, \varepsilon]$ stetig, also ist

$$\lim_{\varepsilon\to 0} \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} \frac{\partial^2}{\partial R^2}\,\psi(R,r)\,\mathrm{d}r = 0 \, . \tag{12.19}$$

Damit erhalten wir

$$0 = \lim_{\varepsilon\to 0} \left[-\int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} \frac{\partial^2}{\partial r^2}\,\psi(R,r)\,\mathrm{d}r \right] + \kappa\,\psi(R,0) = -\lim_{\varepsilon\to 0} \left[\frac{\partial}{\partial r}\,\psi(R,r) \right]_{r=-\varepsilon}^{\varepsilon} + \kappa\,\psi(R,0) \, . \tag{12.20}$$

Es ist

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial r}\,\psi_{\mathrm{I}}(R,r) &= -\beta\cos\big(\alpha(R-1)\big)\sin\big(\beta(r+1)\big) + \alpha\sin\big(\alpha(r+1)\big)\cos\big(\beta(R-1)\big) \\ \frac{\partial}{\partial r}\,\psi_{\mathrm{II}}(R,r) &= \beta\cos\big(\alpha(R-1)\big)\sin\big(\beta(-r+1)\big) - \alpha\sin\big(\alpha(-r+1)\big)\cos\big(\beta(R-1)\big) \, , \end{aligned} \tag{12.21}$$

also

$$\lim_{\varepsilon\to 0} \left[\frac{\partial}{\partial r}\,\psi(R,r) \right]_{r=-\varepsilon}^{\varepsilon} = 2\beta\cos\big(\alpha(R-1)\big)\sin(\beta) - 2\alpha\sin(\alpha)\cos\big(\beta(R-1)\big) \, . \tag{12.22}$$

Mit

$$\psi(R,0) = \cos\big(\alpha(R-1)\big)\cos(\beta) - \cos(\alpha)\cos\big(\beta(R-1)\big) \tag{12.23}$$

wird die Anschlussbedingung zu

$$\begin{aligned} 0 = -2\beta\cos\big(\alpha(R-1)\big)\sin(\beta) &+ 2\alpha\sin(\alpha)\cos\big(\beta(R-1)\big) \\ &+ \kappa\big[\cos\big(\alpha(R-1)\big)\cos(\beta) - \cos(\alpha)\cos\big(\beta(R-1)\big)\big] \, . \end{aligned} \tag{12.24}$$

Dies muss für alle R gelten. Also müssen die Koeffizienten von $\cos(\beta(R-1))$ und $\cos(\alpha(R-1))$ separat verschwinden (es sei denn, $\alpha = \beta$). Wir erhalten also

$$0 = -2\beta\sin(\beta) + \kappa\cos(\beta) \, , \qquad 0 = 2\alpha\sin(\alpha) - \kappa\cos(\alpha) \, . \tag{12.25}$$

Dies ist äquivalent zu (12.17).