Løsning til øving 21 for FY1004, våren 2008

Hamiltonoperatoren for en partikkel i et endimensjonalt harmonisk oscillatorpotensial er

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + \frac{1}{2}\,m\omega^2 x^2 \ .$$

m er massen til partikkelen, x er posisjonen, og ω er vinkelfrekvensen. Energinivåene er

$$E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right) ,$$

for $n = 0, 1, 2, \ldots$, og de tilsvarende energiegentilstandene er

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2^n\, n!\,\ell\,\sqrt[4]{\pi}}}\; H_n\!\left(\frac{x}{\ell}\right) \mathrm{e}^{-\frac{x^2}{2\ell^2}} \ .$$

Den karakteristiske lengden for oscillatoren er

$$\ell = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \ .$$

H_n er det n-te Hermite-polynomet, definert ved at $H_0(u) = 1$ og

$$H_{n+1}(u) = 2u\, H_n(u) - H_n'(u) \ .$$

Denne rekursjonsformelen for Hermite-polynomene gir at

$$H_1(u) = 2u \ , \qquad H_2(u) = 4u^2 - 2 \ , \qquad H_3(u) = 8u^3 - 12u \ .$$

I denne oppgaven tar vi for oss to identiske partikler i det samme oscillatorpotensialet. Vi antar at partiklene ikke vekselvirker med hverandre. Topartikkelbølgefunksjonen er en funksjon av posisjonene x_1 og x_2 til begge de to partiklene, og Hamiltonoperatoren for topartikkelsystemet er

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial {x_1}^2} + \frac{\partial^2}{\partial {x_2}^2}\right) + \frac{1}{2}\,m\omega^2\left({x_1}^2 + {x_2}^2\right) .$$

a) Vis at topartikkelbølgefunksjonen

$$\phi(x_1, x_2) = \psi_j(x_1)\,\psi_k(x_2) \ ,$$

som er et produkt av to enpartikkelbølgefunksjoner, er en energiegenfunksjon for topartikkelsystemet med energi $E_j + E_k$, når enpartikkelbølgefunksjonene ψ_j og ψ_k er energiegenfunksjoner for enpartikkelsystemet med energier E_j og E_k.

Vis at denne topartikkelbølgefunksjonen er normert, slik at

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x_1 \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x_2\ |\phi(x_1, x_2)|^2 = 1 \ ,$$

når enpartikkelbølgefunksjonene ψ_n er normerte,

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\ |\psi_n(x)|^2 = 1 \ .$$

Vi skal vise at ϕ er en løsning av den tidsuavhengige Scrödinger-ligningen, så da setter vi inn:

$$\begin{aligned}
H\phi(x_1, x_2) &= \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial {x_1}^2} + \frac{\partial^2}{\partial {x_2}^2}\right) + \frac{1}{2}\,m\omega^2\left({x_1}^2 + {x_2}^2\right)\right]\psi_j(x_1)\,\psi_k(x_2) \\
&= \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\,\psi_j''(x_1) + \frac{1}{2}\,m\omega^2 {x_1}^2\psi_j(x_1)\right]\psi_k(x_2) \\
&\quad + \psi_j(x_1)\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\,\psi_k''(x_2) + \frac{1}{2}\,m\omega^2 {x_2}^2\psi_k(x_2)\right] \\
&= (E_j + E_k)\,\psi_j(x_1)\,\psi_k(x_2) = (E_j + E_k)\,\phi(x_1, x_2) \ .
\end{aligned}$$

Det viser ganske riktig at ϕ er en løsning med energi $E_j + E_k$.

At ϕ er normert, skyldes at normeringsintegralet kan faktoriseres:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x_1 \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x_2 \ |\phi(x_1,x_2)|^2 = \left(\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x_1 \ |\psi_j(x_1)|^2\right)\left(\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x_2 \ |\psi_k(x_2)|^2\right) = 1 \cdot 1 = 1 \ .$$

b) Hvis $j = k$ ovenfor, så er topartikkelbølgefunksjonen ϕ symmetrisk,

$$\phi(x_1,x_2) = \psi_j(x_1)\,\psi_j(x_2) = \psi_j(x_2)\,\psi_j(x_1) = \phi(x_2,x_1) \ .$$

Dette er derfor en mulig bølgefunksjon dersom de to partiklene er bosoner.

Hvis $j \neq k$, så er topartikkelbølgefunksjonen ϕ hverken symmetrisk eller antisymmetrisk, men vi kan symmetrisere den og få en mulig bølgefunksjon for to bosoner,

$$\phi_s(x_1,x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\psi_j(x_1)\,\psi_k(x_2) + \psi_j(x_2)\,\psi_k(x_1)\right) \ .$$

eller vi kan antisymmetrisere den og få en mulig bølgefunksjon for to fermioner,

$$\phi_a(x_1,x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\psi_j(x_1)\,\psi_k(x_2) - \psi_j(x_2)\,\psi_k(x_1)\right) \ .$$

Vis at både ϕ_s og ϕ_a er energiegenfunksjoner med energi $E_j + E_k$.

Vis også at de er normerte når ψ_j og ψ_k er ortonormale, dvs. når

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x \ (\psi_j(x))^* \,\psi_k(x) = \delta_{jk} = \begin{cases} 1 & \text{for} \quad j = k \ , \\ 0 & \text{for} \quad j \neq k \ . \end{cases}$$

Bevis for at ϕ_s er en energiegenfunksjon med energi $E_j + E_k$:

$$\begin{aligned} H\,\phi_s &= H\left(\psi_j(x_1)\,\psi_k(x_2) + \psi_j(x_2)\,\psi_k(x_1)\right) = H\,\psi_j(x_1)\,\psi_k(x_2) + H\,\psi_k(x_1)\,\psi_j(x_2) \\ &= (E_j + E_k)\left(\psi_j(x_1)\,\psi_k(x_2) + \psi_j(x_2)\,\psi_k(x_1)\right) = (E_j + E_k)\,\phi_s(x_1,x_2) \ , \end{aligned}$$

og er normert (vi antar at $j \neq k$):

$$\begin{aligned} ||\phi_s||^2 &= \langle \phi_s, \phi_s \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x_1 \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x_2 \ |\phi_s(x_1,x_2)|^2 \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x_1 \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x_2 \ \left(\phi_s(x_1,x_2)\right)^* \phi_s(x_1,x_2) \\ &= \frac{1}{2}\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x_1 \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x_2 \ \left[\psi_j(x_1)^*\,\psi_k(x_2)^*\,\psi_j(x_1)\,\psi_k(x_2)\right. \\ &\qquad +\psi_j(x_1)^*\,\psi_k(x_2)^*\,\psi_j(x_2)\,\psi_k(x_1) + \psi_j(x_2)^*\,\psi_k(x_1)^*\,\psi_j(x_1)\,\psi_k(x_2) \\ &\qquad \left.+\psi_j(x_2)^*\,\psi_k(x_1)^*\,\psi_j(x_2)\,\psi_k(x_1)\right] \\ &= \frac{1}{2}\left[\left(\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x_1 \ \psi_j(x_1)^*\,\psi_j(x_1)\right)\left(\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x_2 \ \psi_k(x_2)^*\,\psi_k(x_2)\right)\right. \\ &\qquad + \left(\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x_1 \ \psi_j(x_1)^*\,\psi_k(x_1)\right)\left(\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x_2 \ \psi_k(x_2)^*\,\psi_j(x_2)\right) \\ &\qquad + \left(\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x_1 \ \psi_k(x_1)^*\,\psi_j(x_1)\right)\left(\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x_2 \ \psi_j(x_2)^*\,\psi_k(x_2)\right) \\ &\qquad \left.+ \left(\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x_1 \ \psi_k(x_1)^*\,\psi_k(x_1)\right)\left(\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x_2 \ \psi_j(x_2)^*\,\psi_j(x_2)\right)\right] \\ &= \frac{1}{2}\left(1 \cdot 1 + 0 \cdot 0 + 0 \cdot 0 + 1 \cdot 1\right) = 1 \ . \end{aligned}$$

Bevisene for ϕ_a går likedan (når $j \neq k$).

En hvilken som helst symmetrisk tilstand er forresten ortogonal til en hvilken som helst antisymmetrisk tilstand. Bevis: skalarproduktet mellom ϕ_s og ϕ_a er

$$\begin{aligned}
\langle \phi_s, \phi_a \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x_1 \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x_2 \ \left(\phi_s(x_1, x_2)\right)^* \phi_a(x_1, x_2) \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x_1 \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x_2 \ \left(+\phi_s(x_2, x_1)\right)^* \left(-\phi_a(x_2, x_1)\right) \\
&= -\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x_1 \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x_2 \ \left(\phi_s(x_2, x_1)\right)^* \phi_a(x_2, x_1) \\
&= -\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x_2 \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x_1 \ \left(\phi_s(x_1, x_2)\right)^* \phi_a(x_1, x_2) \\
&= -\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x_1 \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x_2 \ \left(\phi_s(x_1, x_2)\right)^* \phi_a(x_1, x_2) \\
&= -\langle \phi_s, \phi_a \rangle \ .
\end{aligned}$$

Underveis i dette regnestykket bruker vi flere knep. Først bytter vi om argumentene x_1 og x_2 både i den symmetriske funksjonen ϕ_s, det gir fortegn $+$, og i den antisymmetriske funksjonen ϕ_a, det gir fortegn $-$. Dernest bytter vi navn på integrasjonsvariablene: x_1 kaller vi x_2 og x_2 kaller vi x_1. Til slutt bytter vi om integrasjonsrekkefølgen.

Ligningen $\langle \phi_s, \phi_a \rangle = -\langle \phi_s, \phi_a \rangle$ betyr at $2\langle \phi_s, \phi_a \rangle = 0$ og dermed $\langle \phi_s, \phi_a \rangle = 0$.

c) Hvilke energinivå finnes det med energi $E \leq 4\hbar\omega$ dersom de to partiklene er bosoner?
Hva er degenerasjonen (antallet tilstander) for hvert nivå?
Hvilke energinivå finnes det med energi $E \leq 4\hbar\omega$ dersom de to partiklene er fermioner?
Hva er degenerasjonen for hvert nivå?

Energiegenverdiene er

$$E_j + E_k = \hbar\omega \left(j + \frac{1}{2} + k + \frac{1}{2} \right) = \hbar\omega \left(j + k + 1 \right) .$$

Energiegenverdiene opp til og med $E = 4\hbar\omega$ er da:

$E = \hbar\omega$: $j = k = 0$, bølgefunksjonen $\psi_0(x_1)\psi_0(x_2)$ er symmetrisk, den er mulig for bosoner, men ikke for fermioner.

$E = 2\hbar\omega$: $j = 0$, $k = 1$, da kan vi lage en bosonbølgefunksjon $\psi_0(x_1)\psi_1(x_2)+\psi_0(x_2)\psi_1(x_1)$ og en fermionbølgefunksjon $\psi_0(x_1)\psi_1(x_2) - \psi_0(x_2)\psi_1(x_1)$.
Vi kunne prøve med $j = 1$, $k = 0$, men det gir om igjen de samme tilstandene.

$E = 3\hbar\omega$: $(j,k) = (0,2)$ gir en bosontilstand og en fermiontilstand, mens $(j,k) = (1,1)$ gir en bosontilstand.

$E = 4\hbar\omega$: kombinasjonene $(j,k) = (0,3)$ og $(j,k) = (1,2)$ gir en bosontilstand og en fermiontilstand hver.

	Antall tilstander		
Energi	Bosoner	Fermioner	Totalt
$\hbar\omega$	1	0	1
$2\hbar\omega$	1	1	2
$3\hbar\omega$	2	1	3
$4\hbar\omega$	2	2	4

d) En annen måte å løse det samme problemet på, er å innføre massesenterposisjonen $X = (x_1 + x_2)/2$ og relativposisjonen $x = x_1 - x_2$. I følge kjerneregelen er da

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x_1} &= \frac{\partial X}{\partial x_1}\frac{\partial}{\partial X} + \frac{\partial x}{\partial x_1}\frac{\partial}{\partial x} = \frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial X} + \frac{\partial}{\partial x} \,, \\ \frac{\partial}{\partial x_2} &= \frac{\partial X}{\partial x_2}\frac{\partial}{\partial X} + \frac{\partial x}{\partial x_2}\frac{\partial}{\partial x} = \frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial X} - \frac{\partial}{\partial x} \,. \end{aligned}$$

Vis at Hamiltonoperatoren uttrykt ved X og x er

$$H = -\frac{\hbar^2}{4m}\frac{\partial^2}{\partial X^2} + m\omega^2 X^2 - \frac{\hbar^2}{m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{4}\,m\omega^2 x^2 \,.$$

Vi ser at massesenteret beveger seg som en harmonisk oscillator med vinkelfrekvens ω og masse $2m$, mens relativkoordinaten oppfører seg som en harmonisk oscillator med vinkelfrekvens ω og masse $m/2$ (den reduserte massen). Det impliserer at den karakteristiske lengden for massesenterbevegelsen er

$$\ell' = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} = \frac{\ell}{\sqrt{2}} \,,$$

mens den karakteristiske lengden for relativbevegelsen er

$$\ell'' = \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}} = \ell\sqrt{2} \,.$$

For å uttrykke Hamilton-operatoren ved koordinatene X og x må vi gjøre et lite regnestykke som er ganske rett fram. Vi har at

$$\begin{aligned} H &= -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_2^2}\right) + \frac{1}{2}\,m\omega^2\left(x_1^2 + x_2^2\right) \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m}\left[\left(\frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial X} + \frac{\partial}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial X} - \frac{\partial}{\partial x}\right)^2\right] + \frac{1}{2}\,m\omega^2\left[\left(X + \frac{x}{2}\right)^2 + \left(X - \frac{x}{2}\right)^2\right] \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial X^2} + 2\,\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right] + \frac{1}{2}\,m\omega^2\left[2X^2 + \frac{x^2}{2}\right] \\ &= -\frac{\hbar^2}{4m}\frac{\partial^2}{\partial X^2} + m\omega^2 X^2 - \frac{\hbar^2}{m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{4}\,m\omega^2 x^2 \,. \end{aligned}$$

e) Massesenterbevegelsen bidrar til den totale energien med

$$E' = \hbar\omega\left(n' + \frac{1}{2}\right),$$

der $n' = 0, 1, 2, \ldots$. Mens relativbevegelsen bidrar med

$$E'' = \hbar\omega\left(n'' + \frac{1}{2}\right),$$

der $n'' = 0, 1, 2, \ldots$.

Vis at $n'' = 0, 2, 4, \ldots$ for bosoner, og $n'' = 1, 3, 5, \ldots$ for fermioner.

Bølgefunksjonen med energi E_n for den harmoniske oscillatoren i en dimensjon ble oppgitt ovenfor til å være

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2^n\, n!\,\ell\,\sqrt[4]{\pi}}}\, H_n\!\left(\frac{x}{\ell}\right) \mathrm{e}^{-\frac{x^2}{2\ell^2}} \,.$$

Det betyr at topartikkelbølgefunksjonen som svarer til kvantetallene n' for massesenterbevegelsen og n'' for relativbevegelsen er

$$\begin{aligned}\Psi_{n',n''} &= \Psi_{n',n''}(x_1,x_2) = \Psi_{n',n''}(X,x) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2^{n'}\,(n')!\,\ell'\,\sqrt[4]{\pi}}}\;H_{n'}\!\left(\frac{X}{\ell'}\right)\mathrm{e}^{-\frac{X^2}{2(\ell')^2}}\;\frac{1}{\sqrt{2^{n''}\,(n'')!\,\ell''\,\sqrt[4]{\pi}}}\;H_{n''}\!\left(\frac{x}{\ell''}\right)\mathrm{e}^{-\frac{x^2}{2(\ell'')^2}}\;. \\ &= \frac{1}{\sqrt{2^{n'+n''}\,(n')!\,(n'')!\;\ell\,\sqrt{\pi}}}\;H_{n'}\!\left(\frac{\sqrt{2}\,X}{\ell}\right)\;H_{n''}\!\left(\frac{x}{\sqrt{2}\,\ell}\right)\mathrm{e}^{-\frac{X^2}{\ell^2}-\frac{x^2}{4\ell^2}}\;.\end{aligned}$$

Når vi bytter om x_1 og x_2, så forandrer ikke det massesenterposisjonen $X = (x_1+x_2)/2$, men det forandrer fortegnet til relativkoordinaten $x = x_1 - x_2$.

Av rekursjonsformelen for Hermite-polynomene, nemlig $H_0(u) = 1$ og

$$H_{n+1}(u) = 2u\,H_n(u) - H_n'(u)\;,$$

følger det (ved et induksjonsbevis) at $H_n(-u) = (-1)^n\,H_n(u)$. Derfor er

$$\Psi_{n',n''}(X,-x) = (-1)^{n''}\,\Psi_{n',n''}(X,x)\;.$$

Det viser at $n'' = 0,2,4,\ldots$ gir bosonbølgefunksjoner, mens $n'' = 1,3,5,\ldots$ gir fermionbølgefunksjoner.

f) I følge punkt e) kan energien til topartikkelsystemet skrives som

$$E = \hbar\omega\,(n' + n'' + 1)\;,$$

der n' kommer fra massesenterbevegelsen og n'' kommer fra relativbevegelsen.

Bruk dette resultatet til å telle opp om igjen energiegentilstandene for to bosoner og for to fermioner, opp til $E = 4\hbar\omega$, som under punkt c) ovenfor.

Energiegenverdiene opp til og med $E = 4\hbar\omega$ er:

$E = \hbar\omega$: $n' = n'' = 0$, det er en bosontilstand.

$E = 2\hbar\omega$: $n' = 0$, $n'' = 1$, det er en fermiontilstand, og $n' = 1$, $n'' = 0$, det er en bosontilstand.

$E = 3\hbar\omega$: $n' = 0$, $n'' = 2$ og $n' = 2$, $n'' = 0$ gir to bosontilstander, mens $n' = n'' = 1$ gir en fermiontilstand.

$E = 4\hbar\omega$: $n' = 0$, $n'' = 3$ og $n' = 2$, $n'' = 1$ gir to fermiontilstander, mens $n' = 1$, $n'' = 2$ og $n' = 3$, $n'' = 0$ gir to bosontilstander.

Vi finner det samme antallet tilstander som under punkt c). Heldigvis!