Jan Myrheim, 13. februar 2002

## P.C. Hemmer: Kvantemekanikk. Løsning oppgave 9.3

Gitt følgende Hamilton-operator for to partikler med masse $m$ i en dimensjon:

$$H = \frac{p_1^2}{2m} + \frac{p_2^2}{2m} - \alpha\delta(x_1 - x_2) \equiv T_1 + T_2 + W \ .$$

$H$ er en sum av tre bidrag, de kinetiske energiene $T_1$ og $T_2$ og vekselvirkningspotensialet $W = -\alpha\delta(x_1 - x_2)$.

Oppgaven er å vise at den antisymmetriske bølgefunksjonen

$$\Psi(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\psi_i(x_1)\psi_j(x_2) - \psi_j(x_1)\psi_i(x_2)\right)$$

aldri kan gi binding mellom partiklene.

Det er nok å vise at energien aldri kan bli mindre enn energien for to frie partikler, med Hamilton-operatoren $H = T_1 + T_2$. Det følger av at vekselvirkningspotensialet $W$ har forventningsverdi null i enhver antisymmetrisk tilstand,

$$\langle W\rangle = -\alpha \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x_1 \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x_2 \ \Psi^*(x_1, x_2) \ \delta(x_1 - x_2) \ \Psi(x_1, x_2) = -\alpha \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x_1 \ |\Psi(x_1, x_1)|^2 = 0 \ .$$

Antisymmetrien $\Psi(x_1, x_2) = -\Psi(x_2, x_1)$ impliserer nemlig at $\Psi(x_1, x_1) = -\Psi(x_1, x_1)$ og dermed $\Psi(x_1, x_1) = 0$.

To partikler i en tilstand med antisymmetrisk rombølgefunksjon ser aldri delta-funksjonspotensialet. Men merk at fermioner har andre kvantetall enn posisjon, slik som spinn. Og hvis de har antisymmetrisk spinnbølgefunksjon, må de ha symmetrisk rombølgefunksjon, og da merker de delta-funksjonspotensialet.

## Løsning oppgave 9.4

Med den symmetriske bølgefunksjonen

$$\Psi(x_1, x_2) = \psi(x_1)\psi(x_2)$$

har vi følgende forventningsverdi av Hamilton-operatoren $H$ ovenfor:

$$\begin{aligned}
\langle H\rangle &= \langle T_1\rangle + \langle T_2\rangle + \langle W\rangle \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x_1 \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x_2 \ \Psi^*(x_1, x_2) \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} \right) - \alpha\delta(x_1 - x_2) \right) \Psi(x_1, x_2) \ .
\end{aligned}$$

Ved hjelp av delvis integrasjon finner vi f.eks. at

$$\begin{aligned}
\langle T_1\rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x_1 \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x_2 \ \Psi^*(x_1, x_2) \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} \right) \Psi(x_1, x_2) \\
&= \left( \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x_1 \ \psi^*(x_1) \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} \right) \psi(x_1) \right) \left( \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x_2 \ \psi^*(x_2)\psi(x_2) \right) \\
&= \frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x_1 \ \frac{\partial\psi^*(x_1)}{\partial x_1} \frac{\partial\psi(x_1)}{\partial x_1} \ .
\end{aligned}$$

Videre finner vi at $\langle T_2 \rangle = \langle T_1 \rangle$, og at

$$\begin{aligned}\langle W \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x_1 \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x_2 \; \Psi^*(x_1, x_2) \left(-\alpha\delta(x_1 - x_2)\right) \Psi(x_1, x_2) \\ &= = -\alpha \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x_1 \; \Psi^*(x_1, x_1)\Psi(x_1, x_1) = -\alpha \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x_1 \; (\psi^*(x_1)\psi(x_1))^2 \; .\end{aligned}$$

Alt i alt gir det at

$$\langle H \rangle = \langle T_1 \rangle + \langle T_2 \rangle + \langle W \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x \left( \frac{\hbar^2}{m} \frac{\mathrm{d}\psi^*(x)}{\mathrm{d}x} \frac{\mathrm{d}\psi(x)}{\mathrm{d}x} - \alpha(\psi^*(x)\psi(x))^2 \right) .$$

Vi ønsker å finne den enpartikkelbølgefunksjonen $\psi$ som minimaliserer $\langle H \rangle$ og samtidig oppfyller normeringsbetingelsen $\mathcal{N} = 0$, der

$$\mathcal{N} = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x \; \psi^*(x)\psi(x) - 1 \; .$$

Vi innfører da en Lagrange-multiplikator $\lambda$ og ekstremaliserer

$$\langle H \rangle - \lambda\mathcal{N} = S + \lambda \; ,$$

der

$$S = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x \; \mathcal{L} \; ,$$

og

$$\mathcal{L} = \frac{\hbar^2}{m} \frac{\partial\psi^*(x)}{\partial x} \frac{\partial\psi(x)}{\partial x} - \alpha(\psi^*(x)\psi(x))^2 - \lambda\psi^*(x)\psi(x) \; .$$

Siden $\lambda$ er konstant, er det $S$ som må ekstremaliseres ($S$ og $\mathcal{L}$ tilsvarer henholdsvis virkningsintegralet og Lagrange-tettheten i Lagrange-formalismen for feltteori).

Ekstremaliseringsbetingelsen er Euler–Lagrange-ligningen

$$\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\psi^*} - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} \left( \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\left(\frac{\mathrm{d}\psi^*}{\mathrm{d}x}\right)} \right) = 0 \; ,$$

som blir den såkalte kubiske Schrödinger-ligningen:

$$-\frac{\hbar^2}{m} \frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2} - 2\alpha(\psi^*\psi)\psi = \lambda\psi \; .$$

Rett og slett for å ikke havne alt for langt ut på viddene, antar vi her at $\psi$ er reell, og da får vi ligningen

$$-\frac{\hbar^2}{m} \psi'' - 2\alpha\psi^3 = \lambda\psi \; . \tag{1}$$

Etter multiplikasjon med $\psi' = \mathrm{d}\psi/\mathrm{d}x$ kan den integreres en gang, med det resultat at

$$-\frac{\hbar^2}{2m} (\psi')^2 - \frac{\alpha}{2} \psi^4 = \frac{\lambda}{2} \psi^2 + \mu \; ,$$

der $\mu$ er en integrasjonskonstant.

Skal vi ha en bundet tilstand, så må vi forlange at $\Psi(x_1, x_2) = \psi(x_1)\psi(x_2) \to 0$ dersom vi f.eks. holder $x_1$ fast og lar $x_2 \to \pm\infty$, dvs. at vi må forlange at $\psi(x_2) \to 0$ når $x_2 \to \pm\infty$. Vi bør samtidig forlange at $\psi'(x_2) \to 0$ når $x_2 \to \pm\infty$ Følgelig må vi velge $\mu = 0$. Det gir ligningen

$$(\psi')^2 + \frac{\alpha m}{\hbar^2}\,\psi^4 + \frac{m\lambda}{\hbar^2}\,\psi^2 = 0 \;.$$

Med $\alpha > 0$ og $\psi$ reell kan denne ligningen løses bare dersom $\lambda < 0$. La oss definere to konstanter $A > 0$ og $B > 0$ slik at

$$A^2 = -\frac{m\lambda}{\hbar^2} \;, \qquad \frac{A^2}{B^2} = \frac{\alpha m}{\hbar^2} \;.$$

Om vi definerer $\phi = \psi/B$, har vi da at

$$\phi' = \pm A\phi\sqrt{1-\phi^2} \;.$$

Siden $\phi' = \mathrm{d}\phi/\mathrm{d}x$, kan vi separere variable i denne ligningen, slik:

$$\frac{\mathrm{d}\phi}{\phi\sqrt{1-\phi^2}} = \pm A\,\mathrm{d}x \;.$$

La $\chi = 1/\phi$, da gjelder at

$$\frac{\mathrm{d}\phi}{\phi} = \mathrm{d}(\ln\phi) = -\mathrm{d}(\ln\chi) = -\frac{\mathrm{d}\chi}{\chi} \;,$$

og at

$$\frac{\mathrm{d}\phi}{\phi\sqrt{1-\phi^2}} = -\frac{\mathrm{d}\chi}{\chi\sqrt{1-\phi^2}} = \pm\frac{\mathrm{d}\chi}{\sqrt{\chi^2-1}} \;.$$

Hvis vi her setter inn $\chi = \cosh u$ (eller eventuelt $\chi = -\cosh u$ dersom $\chi < 0$), får vi at

$$\frac{\mathrm{d}\phi}{\phi\sqrt{1-\phi^2}} = \pm\frac{\sinh u\;\mathrm{d}u}{\sqrt{\cosh^2 u - 1}} = \pm\mathrm{d}u \;.$$

Det gir da ligningen

$$\mathrm{d}u = \pm A\,\mathrm{d}x \;,$$

og følgelig

$$\phi = \pm\frac{1}{\cosh u} = \pm\frac{1}{\cosh(A(x-x_0))} \;,$$

der $x_0$ er en vilkårlig integrasjonskonstant. Vi kan velge $x_0 = 0$, det er bare spørsmål om å velge nullpunkt for koordinaten $x$. Fortegnet på bølgefunksjonen $\psi$ spiller heller ingen rolle, vi kan alltid velge $\psi \geq 0$, slik at

$$\psi(x) = B\phi(x) = \frac{B}{\cosh(Ax)} \;.$$

Det kan virke som vi har lov til å velge Lagrange-multiplikatoren $\lambda$ fritt, men det er et krav at $\psi$ skal være normert:

$$1 = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\;(\psi(x))^2 = B^2\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{d}x}{\cosh^2(Ax)} = \frac{B^2}{A}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{d}y}{\cosh^2 y} \;,$$

med substitusjonen $y = Ax$. Vi har at

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathrm{d}y}{\cosh^2 y} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{4\;\mathrm{d}y}{(\mathrm{e}^y + \mathrm{e}^{-y})^2} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{4\,\mathrm{e}^{2y}\;\mathrm{d}y}{(\mathrm{e}^{2y}+1)^2} = \int_0^{\infty} \frac{2\;\mathrm{d}z}{(z+1)^2} = -\frac{2}{z+1}\Big|_0^{\infty} = 2\;,$$

med substitusjonen $z = \mathrm{e}^{2y}$. Vi må ha at

$$1 = \frac{2B^2}{A} = 2A\,\frac{B^2}{A^2} = 2\sqrt{-\frac{m\lambda}{\hbar^2}}\;\frac{\hbar^2}{\alpha m} = 2\sqrt{-\frac{\lambda\hbar^2}{\alpha^2 m}}\;,$$

dvs. at

$$\lambda = -\frac{\alpha^2 m}{4\hbar^2}\;.$$

Det gir at $\psi(x) = B/\cosh(Ax)$ med

$$A = \sqrt{-\frac{m\lambda}{\hbar^2}} = \frac{\alpha m}{2\hbar^2}\;, \qquad B = \sqrt{\frac{A}{2}} = \sqrt{\frac{\alpha m}{4\hbar^2}}\;.$$

Så var det minimumsverdien av energien $\langle H\rangle$, som vi altså oppnår med den bølgefunksjonen $\psi$ vi nettopp har funnet. Vi bruker ligning (1), og får da at

$$\begin{aligned}\langle H\rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x \left(\frac{\hbar^2}{m}\left(\frac{\partial\psi}{\partial x}\right)^2 - \alpha(\psi(x))^4\right) = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x \left(-\frac{\hbar^2}{m}\,\psi\,\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} - \alpha\psi^4\right) \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x \left(\lambda\psi^2 + \alpha\psi^4\right) = \lambda + \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}y\;\frac{\alpha B^4}{A\cosh^4 y}\;,\end{aligned}$$

fortsatt med $y = Ax$. Vi har, tilsvarende som ovenfor, at

$$\begin{aligned}\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathrm{d}y}{\cosh^4 y} &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{16\;\mathrm{d}y}{(\mathrm{e}^y+\mathrm{e}^{-y})^4} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{16\,\mathrm{e}^{4y}\;\mathrm{d}y}{(\mathrm{e}^{2y}+1)^4} = \int_0^{\infty} \frac{8z\;\mathrm{d}z}{(z+1)^4} \\ &= -\frac{8z}{3(z+1)^3}\Big|_0^{\infty} + \int_0^{\infty} \frac{8\;\mathrm{d}z}{3(z+1)^3} = -\frac{4}{3(z+1)^2}\Big|_0^{\infty} = \frac{4}{3}\;.\end{aligned}$$

Det gir at

$$\langle H\rangle = \lambda + \frac{4\alpha B^4}{3A} = \lambda + \frac{2\alpha B^2}{3} = -\frac{\alpha^2 m}{4\hbar^2} + \frac{\alpha^2 m}{6\hbar^2} = -\frac{\alpha^2 m}{12\hbar^2}\;. \tag{2}$$

## Hvor godt er dette estimatet for bindingsenergien?

Det er nå spørsmålet. Som kjent er delta-funksjonspotensialet $W = W(x_1 - x_2) = -\alpha\delta(x_1 - x_2)$ eksakt løsbart. Siden potensialet bare avhenger av relativkoordinaten $x = x_1 - x_2$, kan vi kvantisere den totale impulsen $P = p_1 + p_2$. Når vi dessuten innfører den relative impulsen $p = (p_1 - p_2)/2$, har vi at

$$H = \frac{p_1^2}{2m} + \frac{p_2^2}{2m} - \alpha\delta(x_1 - x_2) = \frac{P^2}{4m} + \frac{p^2}{m} - \alpha\delta(x)\;.$$

Til den totale impulsen $P$ svarer den totale massen $2m$, og til den relative impulsen $p$ svarer den reduserte massen $m/2$. For å beregne bindingsenergien er vi bare interessert i den relative bevegelsen til partiklene, som beskrives av den relative Hamilton-operatoren

$$H_{\mathrm{rel}} = \frac{p^2}{m} - \alpha\delta(x)\;.$$

Det vil si at vi kan forbedre vårt estimat av bindingsenergien ved å trekke fra massesenterenergien: estimatet av den rene bindingsenergien er

$$\langle H_{\mathrm{rel}} \rangle = \langle H \rangle - \frac{\langle P^2 \rangle}{4m} \ .$$

Vi har at $P^2 = {p_1}^2 + {p_2}^2 + 2p_1 p_2$, og at

$$\begin{aligned}\langle p_1 p_2 \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x_1 \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x_2 \ \Psi^*(x_1, x_2) \left( -\hbar^2 \frac{\partial}{\partial x_1} \frac{\partial}{\partial x_2} \right) \Psi(x_1, x_2) \\ &= -\hbar^2 \left( \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x_1 \ \psi^*(x_1) \, \psi'(x_1) \right) \left( \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x_2 \ \psi^*(x_2) \, \psi'(x_2) \right) = 0 \ .\end{aligned}$$

De to integralene er begge lik null, fordi $\psi(x)$ er en like funksjon: $\psi(x) = \psi(-x)$, og dens deriverte er følgelig en odde funksjon: $\psi'(x) = -\psi'(-x)$. Et annet argument gir samme konklusjon dersom $\psi$ er reell, da har vi nemlig at

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x_1 \ \psi^*(x_1) \, \psi'(x_1) = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x \ \psi(x) \, \psi'(x) = \frac{1}{2} \left( \psi(x) \right)^2 \Big|_{-\infty}^{\infty} = 0 \ .$$

Vi har dermed at

$$\frac{\langle P^2 \rangle}{4m} = \frac{\langle {p_1}^2 + {p_2}^2 \rangle}{4m} = \frac{\langle T_1 + T_2 \rangle}{2} = \frac{\langle H - W \rangle}{2} \ .$$

Både $\langle H \rangle$ og $\langle W \rangle$ har vi regnet ut tidligere, og vi får at

$$\frac{\langle P^2 \rangle}{4m} = \frac{1}{2} \left( \langle H \rangle - \langle W \rangle \right) = \frac{1}{2} \left( -\frac{\alpha^2 m}{12\hbar^2} + \frac{\alpha^2 m}{6\hbar^2} \right) = \frac{\alpha^2 m}{24\hbar^2} \ .$$

Det gir følgende forbedrede estimat for bindingsenergien:

$$\langle H_{\mathrm{rel}} \rangle = \langle H \rangle - \frac{\langle P^2 \rangle}{4m} = -\frac{\alpha^2 m}{12\hbar^2} - \frac{\alpha^2 m}{24\hbar^2} = -\frac{\alpha^2 m}{8\hbar^2} \ .$$

La oss nå sammenligne med den eksakte bindingsenergien. Vi skal løse Schrödingerligningen

$$H_{\mathrm{rel}} \, \psi_{\mathrm{rel}} = E_{\mathrm{rel}} \, \psi_{\mathrm{rel}} \ ,$$

der $\psi_{\mathrm{rel}} = \psi_{\mathrm{rel}}(x) = \psi_{\mathrm{rel}}(x_1 - x_2)$ er den eksakte bølgefunksjonen for grunntilstanden og $E_{\mathrm{rel}}$ er energien, $E_{\mathrm{rel}} < 0$. Ligningen skrevet ut er:

$$-\frac{\hbar^2}{m} \, \psi''_{\mathrm{rel}}(x) - \alpha \delta(x) \, \psi_{\mathrm{rel}}(x) = E_{\mathrm{rel}} \psi_{\mathrm{rel}}(x) \ .$$

Definer

$$\kappa = \sqrt{-\frac{m E_{\mathrm{rel}}}{\hbar^2}} \ ,$$

da har vi for $x \neq 0$ at

$$\psi''_{\mathrm{rel}}(x) = \kappa^2 \psi_{\mathrm{rel}}(x) \ .$$

Den akseptable løsningen, som går mot null når $x \to \pm\infty$ og er kontinuerlig i $x = 0$, er

$$\psi_{\text{rel}}(x) = \begin{cases} C\,\mathrm{e}^{-\kappa x} & \text{for} \quad x \geq 0\ , \\ C\,\mathrm{e}^{\kappa x} & \text{for} \quad x \leq 0\ , \end{cases}$$

med en normeringskonstant $C$. Delta-funksjonspotensialet håndterer vi ved å integrere Schrödingerligningen over et lite intervall omkring $x = 0$, det gir ligningen

$$-\frac{\hbar^2}{m}\left(\psi'_{\text{rel}}(0+) - \psi'_{\text{rel}}(0-)\right) - \alpha\psi_{\text{rel}}(0) = 0\ .$$

Løsningen er

$$\kappa = \frac{\alpha m}{2\hbar^2}\ ,$$

og det gir den eksakte bindingsenergien

$$E_{\text{rel}} = -\frac{\hbar^2\kappa^2}{m} = -\frac{\alpha^2 m}{4\hbar^2}\ .$$

Vi ser at vårt estimat ved hjelp av Hartree-metoden, dvs. variasjonsmetoden med en symmetrisk prøvebølgefunksjon som er et produkt: $\Psi(x_1, x_2) = \psi(x_1)\psi(x_2)$, gir bare halvparten av den korrekte bindingsenergien, selv etter at vi har trukket fra massesenterenergien!

## Vi må da kunne gjøre et bedre estimat?

Ved nærmere ettertanke blir det klart at utgangspunktet vårt var feil. Vi gikk inn for å minimalisere $\langle H\rangle$, men vi burde heller minimalisere $\langle H_{\text{rel}}\rangle$.

Vi fant ovenfor at

$$\langle H_{\text{rel}}\rangle = \langle H\rangle - \frac{\langle P^2\rangle}{4m} = \langle H\rangle - \frac{\langle T_1 + T_2\rangle}{2} = \frac{\langle T_1 + T_2\rangle}{2} + \langle W\rangle\ .$$

Fratrekket av massesenterenergien er ekvivalent med å halvere den kinetiske energien, og det er faktisk ganske forståelig: en produktbølgefunksjon for et topartikkelsystem gir like stort bidrag til den kinetiske energien for massesenterbevegelsen som for den relative bevegelsen. En halvering av den kinetiske energien for en gitt bølgefunksjon oppnår vi ganske enkelt ved å doble massen, altså erstatte $m$ med $2m$. Dermed har vi uten mer regning den modifiserte bølgefunksjonen

$$\Psi_{\text{mod}}(x_1, x_2) = \psi_{\text{mod}}(x_1)\psi_{\text{mod}}(x_2)\ ,$$

med

$$\psi_{\text{mod}}(x) = \frac{B'}{\cosh(A'x)}$$

og

$$A' = \frac{\alpha m}{\hbar^2}\ , \qquad B' = \sqrt{\frac{\alpha m}{2\hbar^2}}\ .$$

Vårt forbedrede estimat av minimumsverdien av $\langle H_{\text{rel}}\rangle$ finner vi ved å erstatte $m$ med $2m$ i ligning (2):

$$\langle H_{\text{rel}}\rangle = -\frac{\alpha^2 m}{6\hbar^2}\ .$$

Dette er $2/3$ av den eksakte verdien. Fremdeles ikke så imponerende, kanskje, men i hvert fall litt bedre enn $1/2$.