

Dwucząstkowe równanie Schrödingera

Dwucząstkowa funkcja falowa $\psi(t, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$

$|\psi(t, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)|^2$ - gęstość prawdopodobieństwa znalezienia w chwili czasu t cząstki 1 w punkcie \mathbf{r}_1 i cząstki 2 w punkcie \mathbf{r}_2 .

Dwucząstkowe równanie Schrödingera

Funkcja falowa $\psi(t, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ spełnia równanie Schrödingera

$$i\hbar \frac{\partial \psi(t, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)}{\partial t} = \hat{H} \psi(t, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \left(-\frac{\hbar^2 \Delta_1}{2m_1} - \frac{\hbar^2 \Delta_2}{2m_2} + V_1(t, \mathbf{r}_1) + V_2(t, \mathbf{r}_2) + V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \right) \psi(t, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$$

$V_i(t, \mathbf{r}_i)$ - energia potencjalna i -tej cząstki, $i = 1, 2$, wynikająca z oddziaływania z zewnętrznym polem sił;

$V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$ - energia potencjalna pary cząstek związana z ich oddziaływaniem wzajemnym.

Separacja ruchu względnego i ruchu środka masy

Zakładamy, że $V_i(t, \mathbf{r}_i) = 0$ i wprowadzamy zmienne:

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathbf{R} \equiv \frac{m_1 \mathbf{r}_1 + m_2 \mathbf{r}_2}{M} \quad - \text{położenie środka masy} \\ \mathbf{r} \equiv \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2 \quad - \text{położenie względne} \end{array} \right. \quad \left\{ \begin{array}{l} \mathbf{r}_1 = \mathbf{R} + \frac{m_2}{M} \mathbf{r} \\ \mathbf{r}_2 = \mathbf{R} - \frac{m_1}{M} \mathbf{r} \end{array} \right. \quad M \equiv m_1 + m_2$$

Wyrażamy $\mathbf{R}, \mathbf{r}, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2$ przez współrzędne kartezjańskie

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathbf{R} = (X, Y, Z) \\ \mathbf{r} = (x, y, z) \end{array} \right. \quad \left\{ \begin{array}{l} \mathbf{r}_1 = (x_1, y_1, z_1) \\ \mathbf{r}_2 = (x_2, y_2, z_2) \end{array} \right.$$

i obliczamy

$$\frac{\partial}{\partial x_1} = \frac{\partial X}{\partial x_1} \frac{\partial}{\partial X} + \frac{\partial x}{\partial x_1} \frac{\partial}{\partial x} = \frac{m_1}{M} \frac{\partial}{\partial X} + \frac{\partial}{\partial x}, \quad \frac{\partial}{\partial x_2} = \frac{\partial X}{\partial x_2} \frac{\partial}{\partial X} + \frac{\partial x}{\partial x_2} \frac{\partial}{\partial x} = \frac{m_2}{M} \frac{\partial}{\partial X} - \frac{\partial}{\partial x},$$

$$\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} = \left(\frac{m_1}{M} \frac{\partial}{\partial X} + \frac{\partial}{\partial x} \right)^2 = \left(\frac{m_1}{M} \right)^2 \frac{\partial^2}{\partial X^2} + 2 \frac{m_1}{M} \frac{\partial^2}{\partial X \partial x} + \frac{\partial^2}{\partial x^2},$$

$$\frac{\partial^2}{\partial x_2^2} = \left(\frac{m_2}{M} \frac{\partial}{\partial X} - \frac{\partial}{\partial x} \right)^2 = \left(\frac{m_2}{M} \right)^2 \frac{\partial^2}{\partial X^2} - 2 \frac{m_2}{M} \frac{\partial^2}{\partial X \partial x} + \frac{\partial^2}{\partial x^2}.$$

Wykład VIII cd.

Mechanika kwantowa

$$\text{A zatem } \frac{1}{m_1} \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{1}{m_2} \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} = \frac{1}{M} \frac{\partial^2}{\partial X^2} + \frac{1}{\mu} \frac{\partial^2}{\partial x^2}$$

$$\mu \equiv \frac{m_1 m_2}{M} - \text{masa zredukowana układu cząstek, } m_1 \ll m_2 \Rightarrow \mu \approx m_1.$$

$$\text{Ponieważ } \Delta_1 = \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_1^2} \text{ i } \Delta_2 = \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_2^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_2^2}, \text{ ostatecznie dostajemy}$$

$$\frac{1}{m_1} \Delta_1 + \frac{1}{m_2} \Delta_2 = \frac{1}{M} \Delta_R + \frac{1}{\mu} \Delta_r.$$

W nowych zmiennych dwucząstkowe równanie Schrödingera przybiera postać

$$i\hbar \frac{\partial \psi(t, \mathbf{R}, \mathbf{r})}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2 \Delta_R}{2M} - \frac{\hbar^2 \Delta_r}{2\mu} + V(\mathbf{r}) \right) \psi(t, \mathbf{R}, \mathbf{r}).$$

Dokonując separacji zależności od czasu tak jak w przypadku jednocząstkowego równania Schrödingera, otrzymujemy dwucząstkowe równanie Schrödingera bez czasu

$$\left(-\frac{\hbar^2 \Delta_R}{2M} - \frac{\hbar^2 \Delta_r}{2\mu} + V(\mathbf{r}) \right) \phi(\mathbf{R}, \mathbf{r}) = U \phi(\mathbf{R}, \mathbf{r}),$$

gdzie $\psi(t, \mathbf{R}, \mathbf{r}) = e^{-i\frac{Ut}{\hbar}} \phi(\mathbf{R}, \mathbf{r})$, a U jest całkowitą energią pary cząstek.

Zakładamy teraz, że funkcję $\phi(\mathbf{R}, \mathbf{r})$ można przedstawić w postaci $\phi(\mathbf{R}, \mathbf{r}) = \psi(\mathbf{R}) \varphi(\mathbf{r})$ i rozseparowujemy zależność od \mathbf{R} od zależności od \mathbf{r} w równaniu Schrödingera bez czasu:

$$\begin{aligned} -\varphi(\mathbf{r}) \frac{\hbar^2 \Delta_R}{2M} \psi(\mathbf{R}) - \psi(\mathbf{R}) \frac{\hbar^2 \Delta_r}{2\mu} \varphi(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{R}) \varphi(\mathbf{r}) &= U \psi(\mathbf{R}) \varphi(\mathbf{r}) \quad \left| \times \frac{1}{\psi(\mathbf{R}) \varphi(\mathbf{r})} \right. \\ \underbrace{-\frac{1}{\psi(\mathbf{R})} \frac{\hbar^2 \Delta_R}{2M} \psi(\mathbf{R})}_{=U-E} \underbrace{-\frac{1}{\varphi(\mathbf{r})} \frac{\hbar^2 \Delta_r}{2\mu} \varphi(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r})}_{=E} &= U. \end{aligned}$$

Widzimy, że pierwszy człon zależy tylko \mathbf{R} , a drugi tylko od \mathbf{r} , więc muszą się równać odpowiednio dobranym stałym, aby równanie było spełnione dla każdego \mathbf{R} i \mathbf{r} . Dostajemy więc dwa równania Schrödingera bez czasu:

$$\begin{cases} -\frac{\hbar^2 \Delta_R}{2M} \psi(\mathbf{R}) = (U - E) \psi(\mathbf{R}) & - \text{swobodny ruch środka masy pary cząstek} \\ \left(-\frac{\hbar^2 \Delta_r}{2\mu} + V(\mathbf{r}) \right) \varphi(\mathbf{r}) = E \varphi(\mathbf{r}) & - \text{ruch względny pary cząstek} \end{cases}$$