Kapitel VII

Kopplung quantenmechanischer Systeme

VII.1 Kopplung zweier bewegter Teilchen

Sei ein System bestehen aus zwei spinlosen Teilchen (1) und (2). In Analogie mit dem klassischen Fall wird für den Hamilton-Operator des Systems die Form

$$\boxed{\hat{H}_{(1+2)} = \frac{\left[\hat{\vec{p}}^{\,(1)}\right]^2}{2m_1} + \frac{\left[\hat{\vec{p}}^{\,(2)}\right]^2}{2m_2} + V(\hat{\vec{r}}_1, \hat{\vec{r}}_2)} \tag{VII.1}$$

postuliert. Dabei genügen die Komponenten $\hat{x}_i^{(a)}$, $\hat{p}_j^{(a)}$ der Orts- und Impulsoperatoren jedes Teilchens der üblichen Vertauschungsrelation

$$\left[\hat{x}_i^{(1)}, \hat{p}_j^{(1)}\right] = \left[\hat{x}_i^{(2)}, \hat{p}_j^{(2)}\right] = \mathrm{i}\hbar\delta_{ij}\hat{\mathbb{1}}. \tag{VII.2}$$

Alle andere Kommutatoren sind Null, insbesondere solche, die einen Operator auf das eine Teilchen mit einem Operator auf das andere Teilchen kombinieren.

VII.1.1 Operatoren für die Schwerpunkts- und Relativbewegung

In der Praxis eignen sich die Operatoren

$$\boxed{\hat{\vec{R}} \equiv \frac{m_1\hat{\vec{r}}^{\,(1)} + m_2\hat{\vec{r}}^{\,(2)}}{m_1 + m_2} \quad , \quad \hat{\vec{r}} \equiv \hat{\vec{r}}^{\,(1)} - \hat{\vec{r}}^{\,(2)},} \tag{VII.3a}$$

entsprechend jeweils der Schwerpunkts- und Relativkoordinate, besser zur Bestimmung der Eigenschaften des Zwei-Körper-Systems. Passend zu diesen Ortsoperatoren führt man die Impulsoperatoren

$$\boxed{\hat{\vec{P}} \equiv \hat{\vec{p}}^{\,(1)} + \hat{\vec{p}}^{\,(2)} \quad , \quad \hat{\vec{p}} \equiv \frac{m_2\hat{\vec{p}}^{\,(1)} + m_1\hat{\vec{p}}^{\,(2)}}{m_1 + m_2}} \tag{VII.3b}$$

ein, wobei $\hat{\vec{P}}$ offensichtlich dem Gesamtimpuls der zwei Teilchen entspricht. Anhand der Linearität des Kommutators zeigt man nämlich, dass die Koordinaten $\hat{x}_i$, $\hat{X}_i$ der neuen Ortsoperatoren und solche $\hat{p}_j$, $\hat{P}_j$ der Impulsoperatoren die fundamentalen Vertauschungsrelationen erfüllen, die hiernach aufgelistet werden:

- $$\left[\hat{x}_i, \hat{P}_j\right] = \hat{0} \quad \forall i, j \in \{1, 2, 3\}; \tag{VII.4a}$$

  Es gilt nämlich

  $$\left[\hat{x}_i, \hat{P}_j\right] = \left[\hat{x}_i^{(1)} - \hat{x}_i^{(2)}, \hat{p}_j^{(1)} + \hat{p}_j^{(2)}\right] = \underbrace{\left[\hat{x}_i^{(1)}, \hat{p}_j^{(1)}\right]}_{\mathrm{i}\hbar\delta_{ij}\hat{\mathbb{1}}} + \underbrace{\left[\hat{x}_i^{(1)}, \hat{p}_j^{(2)}\right]}_{\hat{0}} - \underbrace{\left[\hat{x}_i^{(2)}, \hat{p}_j^{(1)}\right]}_{\hat{0}} - \underbrace{\left[\hat{x}_i^{(2)}, \hat{p}_j^{(2)}\right]}_{\mathrm{i}\hbar\delta_{ij}\hat{\mathbb{1}}}.$$

- $$\left[\hat{X}_i, \hat{p}_j\right] = \hat{0} \quad \forall i,j \in \{1,2,3\}; \tag{VII.4b}$$

  In
  $$[\hat{X}_i, \hat{p}_j] = \frac{m_1 m_2}{(m_1+m_2)^2}\Big([\hat{x}_i^{(1)}, \hat{p}_j^{(1)}] - [\hat{x}_i^{(2)}, \hat{p}_j^{(2)}]\Big) - \frac{m_1^2}{(m_1+m_2)^2}[\hat{x}_i^{(1)}, \hat{p}_j^{(2)}] + \frac{m_2^2}{(m_1+m_2)^2}[\hat{x}_i^{(2)}, \hat{p}_j^{(1)}]$$
  sind die zwei letzten Kommutatoren gleich $\hat{0}$, während die zwei ersten in den Klammern sich aufheben.

- $$\left[\hat{x}_i, \hat{p}_j\right] = \mathrm{i}\hbar\delta_{ij}\hat{\mathbb{1}} \quad \forall i,j \in \{1,2,3\}; \tag{VII.4c}$$

- $$\left[\hat{X}_i, \hat{P}_j\right] = \mathrm{i}\hbar\delta_{ij}\hat{\mathbb{1}} \quad \forall i,j \in \{1,2,3\}; \tag{VII.4d}$$

  Sowohl in
  $$[\hat{x}_i, \hat{p}_j] = \frac{m_2}{m_1+m_2}[\hat{x}_i^{(1)}, \hat{p}_j^{(1)}] - \frac{m_1}{m_1+m_2}[\hat{x}_i^{(1)}, \hat{p}_j^{(2)}] - \frac{m_2}{m_1+m_2}[\hat{x}_i^{(2)}, \hat{p}_j^{(1)}] + \frac{m_1}{m_1+m_2}[\hat{x}_i^{(2)}, \hat{p}_j^{(2)}]$$
  als in
  $$[\hat{X}_i, \hat{P}_j] = \frac{m_1}{m_1+m_2}[\hat{x}_i^{(1)}, \hat{p}_j^{(1)}] + \frac{m_1}{m_1+m_2}[\hat{x}_i^{(1)}, \hat{p}_j^{(2)}] + \frac{m_2}{m_1+m_2}[\hat{x}_i^{(2)}, \hat{p}_j^{(1)}] + \frac{m_2}{m_1+m_2}[\hat{x}_i^{(2)}, \hat{p}_j^{(2)}]$$
  sind der zweite und der dritte Kommutator gleich $\hat{0}$, während der erste und der letzte das jeweilige Ergebnis liefern.

Dazu kommutieren alle anderen möglichen Paare von Komponenten der Observablen (VII.3):
$$\left[\hat{x}_i, \hat{x}_j\right] = \left[\hat{X}_i, \hat{X}_j\right] = \left[\hat{x}_i, \hat{X}_j\right] = \hat{0} \quad \forall i,j \in \{1,2,3\} \tag{VII.5a}$$
$$\left[\hat{p}_i, \hat{p}_j\right] = \left[\hat{P}_i, \hat{P}_j\right] = \left[\hat{p}_i, \hat{P}_j\right] = \hat{0} \quad \forall i,j \in \{1,2,3\} \tag{VII.5b}$$
Die definierenden Beziehung (VII.3b) lassen sich einfach invertieren:
$$\hat{\vec{p}}^{(1)} = \frac{m_1}{m_1+m_2}\hat{\vec{P}} + \hat{\vec{p}} \quad , \quad \hat{\vec{p}}^{(2)} = \frac{m_2}{m_1+m_2}\hat{\vec{P}} - \hat{\vec{p}}. \tag{VII.6}$$
Diese Ausdrücke können dann im kinetischen Term des Hamilton-Operators eingesetzt werden, woraus
$$\frac{\left[\hat{\vec{p}}^{(1)}\right]^2}{2m_1} + \frac{\left[\hat{\vec{p}}^{(2)}\right]^2}{2m_2} = \frac{\hat{\vec{P}}^2}{2(m_1+m_2)} + (m_1+m_2)\frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m_1m_2}$$
folgt. Unter Einführung der durch
$$\boxed{M \equiv m_1 + m_2 \quad \text{und} \quad \mu \equiv \frac{m_1 m_2}{m_1+m_2}} \tag{VII.7}$$
definierten Gesamtmasse M und reduzierten Masse μ vereinfacht sich dieser kinetische Term zu
$$\frac{\left[\hat{\vec{p}}^{(1)}\right]^2}{2m_1} + \frac{\left[\hat{\vec{p}}^{(2)}\right]^2}{2m_2} = \frac{\hat{\vec{P}}^2}{2M} + \frac{\hat{\vec{p}}^2}{2\mu}.$$
Daher kann der Hamilton-Operator nur als Funktion der Impulsoperatoren (VII.3b) und der zugehörigen Ortsoperatoren (VII.3a) geschrieben werden:
$$\hat{H}_{(1+2)} = \frac{\hat{\vec{P}}^2}{2M} + \frac{\hat{\vec{p}}^2}{2\mu} + V(\hat{\vec{R}}, \hat{\vec{r}}). \tag{VII.8}$$

VII.1.2 Vereinfachung des Zwei-Körper-Problems

Wenn das Potential V nur von der Relativkoordinate $\vec{r}$ abhängt, so dass der Ortsoperator $\hat{\vec{R}}$ für den Schwerpunkt nicht im Hamilton-Operator auftaucht, wird der Gesamtimpulsoperator mit $\hat{H}_{(1+2)}$ kommutieren:

$$[\hat{\vec{P}}, \hat{H}_{(1+2)}] = \hat{0}.$$

Das heißt einerseits, dass der Gesamtimpuls $\langle\hat{\vec{P}}\rangle$ eine Erhaltungsgröße ist. Andererseits sind $\hat{\vec{P}}$ und $\hat{H}_{(1+2)}$ gleichzeitig diagonalisierbar. Schreibt man dann den Hamilton-Operator (VII.8) in der Form

$$\hat{H}_{(1+2)} = \frac{\hat{\vec{P}}^{\,2}}{2M} + \frac{\hat{\vec{p}}^{\,2}}{2\mu} + V(\hat{\vec{r}}) \equiv \frac{\hat{\vec{P}}^{\,2}}{2M} + \hat{H}_{\text{rel.}}(\hat{\vec{r}}, \hat{\vec{p}}) \tag{VII.9}$$

um, wobei $\hat{H}_{\text{rel.}}$ der Hamilton-Operator für die durch die Operatoren $\hat{\vec{r}}$ und $\hat{\vec{p}}$ bestimmte Relativbewegung ist, so kommutiert $\hat{\vec{P}}$ auch mit $\hat{H}_{\text{rel.}}$ Sei $\{|\vec{P}, \psi_{\text{rel.}}\rangle\}$ eine Basis von gemeinsamen Eigenzuständen zu diesen zwei Operatoren:

$$\hat{\vec{P}}|\vec{P}, \psi_{\text{rel.}}\rangle = \vec{P}|\vec{P}, \psi_{\text{rel.}}\rangle \quad , \quad \hat{H}_{\text{rel.}}|\vec{P}, \psi_{\text{rel.}}\rangle = E_{\text{rel.}}|\vec{P}, \psi_{\text{rel.}}\rangle,$$

wobei $E_{\text{rel.}}$ unabhängig von $\vec{P}$ Dann ist $|\vec{P}, \psi_{\text{rel.}}\rangle$ Eigenvektor von $\hat{H}_{(1+2)}$ mit dem Eigenwert $\vec{P}^{\,2}/2M + E_{\text{rel.}}$, d.h. der Effekt des Gesamtimpulses ist „nur“ eine konstante Verschiebung der Energieniveaus.

Ich möchte den Abschnitt mit einer Diskussion anhand Tensorprodukte erweitern