(2粒子系のハミルトニアンの重心相対運動への分離) filename=two-particle-hamiltonian-cm-relative-separation-QA20160726.tex

1次元系において，$V(|x_1 - x_2|)$ で相互作用する，質量がそれぞれ m_1, m_2 である異種の2粒子系のハミルトニアンが次式のように与えられている．

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_1}\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} - \frac{\hbar^2}{2m_2}\frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + V(|x_1 - x_2|). \tag{1}$$

$\hbar$ はディラック定数で，2粒子の座標はそれぞれ x_1, x_2 である．以下の問いに答えよ．

(a) 重心座標 X，全質量 M，相対座標 x と換算質量 μ を以下のように定義する．

$$X \equiv \frac{m_1 x_1 + m_2 x_2}{M},\ M \equiv m_1 + m_2,\ x \equiv x_1 - x_2,\ \frac{1}{\mu} \equiv \frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2}. \tag{2}$$

換算質量 μ の意味を調べるため，$m_1 \ll m_2$ の場合と $m_1 = m_2$ の場合の μ を求めよ．

(b) 偏微分 $\partial/\partial x_1$ と $\partial/\partial x_2$ を $\partial/\partial x$ と $\partial/\partial X$ で表す関係式を求めよ．

(c) このハミルトニアンを x, X とこれらの微分演算子で表せ．

(d) この系の定常状態に対するシュレディンガー方程式を相対運動，重心運動のそれぞれの波動関数 $\phi_{\mathrm{rel}}(x), \Phi_{\mathrm{cm}}(X)$ の分離型の解を用いて解き，それぞれの解の特徴を述べよ．

(解答例)

(a) $m_1 \ll m_2$ の場合

$$\frac{1}{\mu} \approx \frac{1}{m_1} \to \mu \approx m_1 \tag{3}$$

となる, すなわち軽い方の質量の値に近似的に等しくなる．$m_1 = m_2$ の場合

$$\mu = \frac{m_1^2}{2m_1} = \frac{m_1}{2} \tag{4}$$

となる, すなわち元の質量の値の半分となる．

(b) 式 (2) より、元の変数 x_1, x_2 は x, X の関数と見なせるから、合成関数の微分公式を用いて

$$\frac{\partial}{\partial x_1} = \frac{\partial x}{\partial x_1}\frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial X}{\partial x_1}\frac{\partial}{\partial X} = \frac{\partial}{\partial x} + \frac{m_1}{M}\frac{\partial}{\partial X}, \tag{5}$$

$$\frac{\partial}{\partial x_2} = \frac{\partial x}{\partial x_2}\frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial X}{\partial x_2}\frac{\partial}{\partial X} = -\frac{\partial}{\partial x} + \frac{m_2}{M}\frac{\partial}{\partial X}. \tag{6}$$

(c) 前問の結果をハミルトニアンの運動エネルギーに代入すると

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m_1}\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} - \frac{\hbar^2}{2m_2}\frac{\partial^2}{\partial x_2^2} &= -\frac{\hbar^2}{2m_1}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{2m_1}{M}\frac{\partial}{\partial x}\frac{\partial}{\partial X} + \frac{m_1^2}{M^2}\frac{\partial^2}{\partial X^2}\right) \\ &\quad -\frac{\hbar^2}{2m_2}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{2m_2}{M}\frac{\partial}{\partial x}\frac{\partial}{\partial X} + \frac{m_2^2}{M^2}\frac{\partial^2}{\partial X^2}\right) \\ &= -\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{\hbar^2}{2M}\frac{\partial^2}{\partial X}. \end{aligned} \tag{7}$$

従って

$$\hat{H} = \left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(|x|)\right) + \left(-\frac{\hbar^2}{2M}\frac{\partial^2}{\partial X}\right) \tag{8}$$

のように、右辺の第一項は相対運動，第二項は重心運動に対応するように，分離される.

(d) 2 粒子系の定常状態の波動関数を $\psi(x_1, x_2)$，エネルギーを E とすると，シュレーディンガー方程式は

$$\hat{H}\psi(x_1, x_2) = E\psi(x_1, x_2) \tag{9}$$

と書ける．前問の結果より，ハミルトニアンを相対運動 (relative motion) と重心運動 (center-of-mass motion) に分離されるので，その解は相対運動に関係する部分 ($\phi_{\rm rel}(x)$ とする) と重心運動に関係する部分 ($\Phi_{\rm cm}(X)$ とする) 変数分離型 $\psi(x_1, x_2) = \phi_{\rm rel}(x)\Phi_{\rm cm}(X)$ となる．式 (10) を式 (9) に代入して整理すると

$$\begin{aligned} \left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2\phi_{\rm rel}(x)}{\partial x^2} + V(|x|)\phi_{\rm rel}(x)\right)\Phi_{\rm cm}(X) &+ \left(-\frac{\hbar^2}{2M}\frac{\partial^2\Phi_{\rm cm}(X)}{\partial X^2}\right)\phi_{\rm rel}(x) \\ &= E\phi_{\rm rel}(x)\Phi_{\rm cm}(X) \end{aligned} \tag{10}$$

と書ける．ただし，式 (10) の両辺を $\phi_{\rm rel}(x)\Phi_{\rm cm}(X)$ で割ると

$$\frac{\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2\phi_{\rm rel}(x)}{\partial x^2} + V(|x|)\phi_{\rm rel}(x)\right)}{\phi_{\rm rel}(x)} + \frac{\left(-\frac{\hbar^2}{2M}\frac{\partial^2\Phi_{\rm cm}(X)}{\partial X^2}\right)}{\Phi_{\rm cm}(X)} = E \tag{11}$$

と書ける．式 (11) の右辺の第一項は x のみの関数で，第二項は X のみの関数で，これらの和が一定値 E に等しい．式 (11) は恒等式であるから，右辺の第一項は一定 (今，$E_{\rm rel}$ とおく），右辺の第二項も一定 (今，$E_{\rm cm}$ とおく）でなければばならない．すなわち，

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2\phi_{\rm rel}(x)}{\partial x^2} + V(|x|)\phi_{\rm rel}(x)\right) = E_{\rm rel}\phi_{\rm rel}(x), \tag{12}$$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2M}\frac{\partial^2\Phi_{\rm cm}(X)}{\partial X^2}\right) = E_{\rm cm}\Phi_{\rm cm}(X), \tag{13}$$

$$E_{\rm rel} + E_{\rm cm} = E \tag{14}$$

と書ける．すなわち，相対運動はポテンシャル $V(|x|)$ の下での量子力学的なポテンシャル問題の解に相当し，重心運動は平面波状態 (自由粒子）に相当する．