Quasi-exakt lösbare quantenmechanische Potentiale

Ausarbeitung zum „Seminar zur Theorie der Atome, Kerne und kondensierten Materie“ vom 22.10.2014

Philipp Marauhn
✉p_mara01@uni-muenster.de

Inhaltsverzeichnis

1 Einleitung 3

2 Einheiten 4

3 Algebraischer Lösungsansatz 4

4 Lie-Algebra 4

5 Darstellungsraum 5

6 Imaginäre Phasentransformation 8

7 Lösen eines quasi-exakt lösbaren quantenmechanischen Potentials 9

8 Zusammenfassung 10

1 Einleitung

Im Rahmen dieser Ausarbeitung des Seminarvortrags vom 22.10.2014 sollen die quasi-exakt lösbaren quantenmechanischen Potentiale vorgestellt werden. Neben der allgemeinen Theorie wird beispielhaft an einem Doppelmuldenpotential gezeigt, wie man ein quasi-exakt lösbares quantenmechanisches Potential lösen kann.

In der Quantenmechanik werden Systeme im Allgemeinen über ihren Hamiltonoperator beschrieben, welcher der Summe aus kinetischer und potentieller Energie entspricht. Ziel der Quantenmechanik ist es, diesen Hamiltonoperator mit der Schrödingergleichung zu lösen, um so die Energien und die zugehörigen Zustände des Systems zu bestimmen. Jedoch ist es nur in wenigen Fällen möglich (wie z.B. beim harmonischen Oszillator), die Schrödingergleichung analytisch exakt zu lösen. Die meisten Systeme werden mit Hilfe von Näherungen numerisch berechnet.
Quasi-exakt lösbare quantenmechanische Potentiale beschreiben den Fall, dass sich eine endliche Anzahl von Eigenenergien und Eigenzuständen des Systems exakt lösen lassen, während der Rest des Spektrums nicht lösbar ist. Diese Art von Potentialen wurde zuerst von Turbiner 1988 beschrieben, wobei hier der Ansatz über die Lie-Algebra für die quantenmechanischen Potentiale gewählt wurde.

Ein einfaches Beispiel eines quasi-exakt lösbaren quantenmechanischen Potentials beschreibt das bereits angesprochene Doppelmuldenpotential. Ein solches Potential kann dafür verwendet werden, das Verhalten des Stickstoffatoms eines Ammoniakmoleküls (NH_3) zu beschreiben. Dieses kann sich sowohl oberhalb als auch unterhalb der von den Wasserstoffatomen aufgespannten Ebene befinden (siehe Abb. 1). Das Doppelmuldenpotential

$$V(x) = \frac{1}{2}(x^6 - 7x^2) \tag{1.1}$$

ist in Abbildung 2 dargestellt.

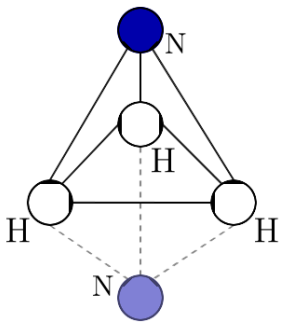

Abbildung 1 – Ammoniakmolekül

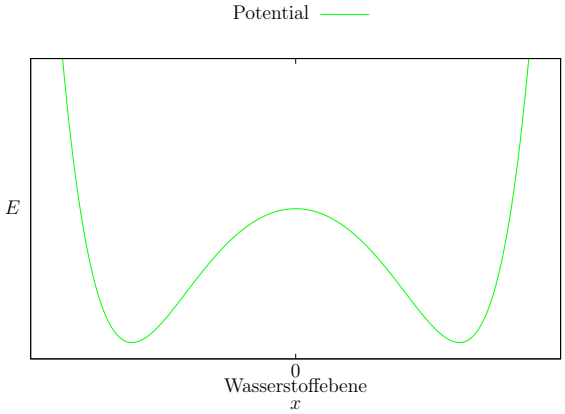

Abbildung 2 – Doppelmuldenpotential

2 Einheiten

Aus Gründen der einfacheren Lesbarkeit und weil physikalische Größen in dieser Ausarbeitung nicht im Fokus stehen, gilt im folgenden

$$\hbar = m = 1 \; . \tag{2.1}$$

$\hbar$: reduziertes Planck'sches Wirkungsquantum m: Masse

3 Algebraischer Lösungsansatz

Der algebraische Lösungsansatz für ein quasi-exakt lösbares quantenmechanisches Potential besteht darin, dass man den Hamiltonoperator $\hat{H}$ in einen exakt lösbaren Teil $\hat{H}_T$ und einen Rest $\hat{H}_R$ aufteilt. Die Eigenwerte des Operators $\hat{H}_T$ stimmen dabei mit einer Teilmenge der Eigenwerte des Hamiltonoperators $\hat{H}$ überein (siehe Kap. 6).
In der Matrixdarstellung entspricht der Lösungsansatz einer Aufteilung in eine endlich-dimensionale Matrix, deren Eigenwerte exakt lösbar sind, und eine unendlich-dimensionale Matrix.

$$H = \begin{pmatrix} H_T & 0 \\ 0 & H_R \end{pmatrix} \tag{3.1}$$

Der exakt lösbare Teil des Hamiltonoperators lässt sich schreiben als

$$\hat{H}_T = \sum_{a,b} d_{a,b} \hat{T}_a \hat{T}_b + \sum_c d_c \hat{T}_c \qquad d_{a,b}, d_c \in \mathbb{R} \; , \tag{3.2}$$

wobei $\hat{T}_i$ Operatoren einer Lie-Algebra entsprechen.

4 Lie-Algebra

Der algebraische Lösungsansatz zu quasi-exakt lösbaren quantenmechanischen Potentialen beruht auf der Idee, dass den Hamiltonoperatoren eine „versteckte“ Lie-Algebra $sl(2,\mathbb{R})$ zugrunde liegt.
Die spezielle lineare Gruppe $SL(2,\mathbb{R})$ ist eine Untergruppe der allgemeinen linearen Gruppe $GL(2,\mathbb{R})$. Ihre Lie-Algebra zeichnet sich dadurch aus, dass die Matrizen dieser Algebra die Spur 0 haben.
In der Matrixdarstellung lässt sich eine Basis von $sl(2,\mathbb{R})$ in folgender Form aufschreiben:

$$M_0 := \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \; , \quad M_+ := \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \; , \quad M_- := \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} . \tag{4.1}$$

Diese Basis erfüllt die Vertauschungsrelationen der Lie-Algebra:

$$[M_+, M_-] = 2M_0 \; , \quad [M_0, M_\pm] = \pm M_\pm \; . \tag{4.2}$$

5 Darstellungsraum

Um den Hamiltonoperator aus Gleichung (3.2) in der Lie-Algebra $sl(2,\mathbb{R})$ auszudrücken, werden die Matrizen aus (4.1) als Differentialoperatoren dargestellt.

$$\hat{T}_0 := -j + \xi \frac{d}{d\xi} \tag{5.1}$$

$$\hat{T}_+ := 2j\xi - \xi^2 \frac{d}{d\xi} \tag{5.2}$$

$$\hat{T}_- := \frac{d}{d\xi} \tag{5.3}$$

Diese Operatoren erfüllen die nachfolgenden Vertauschungsrelationen und bilden somit eine Lie-Algebra.

$$[\hat{T}_+,\hat{T}_-] = 2\hat{T}_0 \ , \quad [\hat{T}_0,\hat{T}_\pm] = \pm\hat{T}_\pm \tag{5.4}$$

Die Variable ξ hängt von der Ortsvariablen x ab und bestimmt den Darstellungsraum $\mathcal{D}$, in dem der exakt lösbare Teil des Hamiltonoperators $\hat{H}_T$ aufgestellt wird.
Aufgrund der Symmetrie des Doppelmuldenpotentials in x^2, welches beispielhaft berechnet werden soll, wird hier

$$\xi(x) = x^2 \tag{5.5}$$

gewählt. Die Elemente des 2j+1-dimensionalen Darstellungsraums $\mathcal{D}$ lassen sich mit einer Basis aus den Monomen

$$\{\xi^0,\xi^1,\xi^2,\ldots,\xi^{2j}\}$$

erzeugen. Der Parameter j ist halbzahlig und legt später die Anzahl der exakten Lösungen zu dem Hamiltonoperator fest.
Damit der exakt lösbare Teil des Hamiltonoperators in der Form aus Gleichung (3.2) geschrieben werden kann, muss der Darstellungsraum $\mathcal{D}$ gegenüber den Operatoren $\hat{T}_0$ und $\hat{T}_\pm$ geschlossen sein. Für diesen Beweis werden die Operatoren auf ein allgemeines Polynom, welches der Wellenfunktion $\widetilde{\psi}(x)$ entspricht (siehe Kap. 6),

$$\mathcal{P}_{2j}(\xi(x)) = \sum_{i=0}^{2j} c_i \xi^i = \sum_{i=0}^{2j} c_i x^{2i} \tag{5.6}$$

aus dem Darstellungsraum angewandt. Da Gleichung (5.6) in x symmetrisch ist, entspricht diese nur den geraden Wellenfunktionen $\widetilde{\psi}$. Die Berechnung ungerader Zustände

wird zum Beispiel in [1] ausgeführt.

$$\begin{aligned}
\hat{T}_+\mathcal{P}_{2j}(\xi) &= \Big(2j\xi - \xi^2\frac{d}{d\xi}\Big)(c_{2j}\xi^{2j} + \ldots + c_1\xi^1 + c_0\xi^0) \\
&= c_{2j}(2j\xi^{2j+1} - 2j\xi^{2j+1}) \\
&\quad + c_{2j-1}(2j\xi^{2j} - (2j-1)\xi^{2j}) \\
&\quad + \ldots \\
&\quad + c_1(2j\xi^2 - \xi^2) + c_0(2j\xi^1 - 0) \\
&= c_{2j-1}\xi^{2j} + \ldots + c_1(2j-1)\xi^2 + c_0 2j\xi^1 \\
&= \mathcal{P}'_{2j} \in \mathcal{D}
\end{aligned} \tag{5.7}$$

$$\begin{aligned}
\hat{T}_-\mathcal{P}_{2j}(\xi) &= \frac{d}{d\xi}(c_{2j}\xi^{2j} + \ldots + c_1\xi^1 + c_0\xi^0) \\
&= c_{2j}2j\xi^{2j-1} + c_{2j-1}(2j-1)\xi^{2j-2} + \ldots + c_1 xi^0 + 0 \\
&= \mathcal{P}'_{2j} \in \mathcal{D}
\end{aligned} \tag{5.8}$$

$$\begin{aligned}
\hat{T}_0\mathcal{P}_{2j}(\xi) &= \Big(-j + \xi\frac{d}{d\xi}\Big)(c_{2j}\xi^{2j} + \ldots + c_1\xi^1 + c_0\xi^0) \\
&= c_{2j}(-j\xi^{2j} + 2j\xi^{2j}) \\
&\quad + c_{2j-1}(-j\xi^{2j-1} + (2j-1)\xi^{2j-1}) \\
&\quad + \ldots \\
&\quad + c_1(-j\xi^1 + \xi^1) + c_0(-j\xi^0 + 0) \\
&= c_{2j}j\xi^{2j} + c_{2j-1}(j-1)\xi^{2j-1} + \ldots + c_1(1-j)\xi^1 + c_0(-j)\xi^0 \\
&= \mathcal{P}'_{2j} \in \mathcal{D}
\end{aligned} \tag{5.9}$$

Durch Vergleich der Koeffizienten c_i mit den Monomen ξ^i aus den Gleichungen (5.7) bis (5.9) ergeben sich die Matrixdarstellungen der Operatoren $\hat{T}_0$ und $\hat{T}_\pm$ zu

$$T_0 = \begin{pmatrix}
j & 0 & \ldots & & & 0 \\
0 & j-1 & 0 & \ldots & & 0 \\
0 & 0 & j-2 & 0 & \ldots & 0 \\
0 & \ldots & 0 & \ddots & 0 & 0 \\
0 & & \ldots & 0 & 1-j & 0 \\
0 & & & \ldots & 0 & -j
\end{pmatrix} \tag{5.10}$$

$$T_+ = \begin{pmatrix}
0 & 1 & 0 & \ldots & & 0 \\
0 & 0 & 2 & 0 & \ldots & 0 \\
0 & \ldots & 0 & \ddots & 0 & 0 \\
0 & & \ldots & 0 & 2j-1 & 0 \\
0 & & & \ldots & 0 & 2j \\
0 & & & & \ldots & 0
\end{pmatrix} \tag{5.11}$$

$$T_- = \begin{pmatrix} 0 & \dots & & & & 0 \\ 2j & 0 & \dots & & & 0 \\ 0 & 2j-1 & 0 & \dots & & 0 \\ 0 & 0 & \ddots & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \dots & 0 & 2 & 0 & 0 \\ 0 & & \dots & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \tag{5.12}$$

Das allgemeine Polynom entspricht in der Matrixdarstellung einem 2j+1-dimensionalen Zeilenvektor mit den Koeffizienten c_i.

$$\vec{P}_{2j} = \begin{pmatrix} c_{2j} \\ \vdots \\ c_1 \\ c_0 \end{pmatrix} \tag{5.13}$$

In der Matrixdarstellung lässt sich die Lösung der Schrödingergleichung auf das folgende Eigenwertproblem zurückführen.

$$H_T \vec{P}_{2j} = E \vec{P}_{2j} \tag{5.14}$$

Hierzu muss der Hamiltonoperator H_T über die Matrizen T_0 und $T_\pm$ dargestellt werden. Aus Gleichung (5.5) folgt

$$\frac{d}{dx} = 2x \frac{d}{d\xi} \Rightarrow \frac{d^2}{dx^2} = 4\xi \frac{d^2}{d\xi^2} + 2\frac{d}{d\xi} \ . \tag{5.15}$$

Mit den Gleichungen (5.1) bis (5.3) lässt sich der Impulsterm somit schreiben als

$$-\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial x^2} = -2T_0 T_- - (2j+1)T_- \ . \tag{5.16}$$

Für den Potentialterm wird hier der Ansatz $-\nu T_+ + \mu T_0$ gewählt, welcher letztlich zu dem Doppelmuldenpotential führt. Hierbei sind ν und μ reelle Parameter mit ν,$\mu \geq 0$. Der gesamte Hamiltonoperator H_T lautet somit

$$H_T = -2T_0 T_- - (2j+1)T_- - \nu T_+ + \mu T_0 \ . \tag{5.17}$$

In der Ortsdarstellung ergibt sich mit (5.1) bis (5.3)

$$H_T = -\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2}(\nu x^3 + \mu x)\frac{d}{dx} - 2\nu j x^2 - \mu j \ . \tag{5.18}$$

Vergleicht man diesen Hamiltonoperator mit dem des Doppelmuldenpotentials

$$H = \frac{1}{2}\Big(-\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \underbrace{(x^6 - 7x^2)}_{V(x)} \Big) \ , \tag{5.19}$$

so ist ein Term der Form $\frac{1}{2}(\nu x^3 + \mu x)\frac{d}{dx}$ in Gleichung (5.19) nicht enthalten. Dieses Problem führt auf den Begriff der imaginären Phasentransformation.

6 Imaginäre Phasentransformation

In der Quantenmechanik gilt im Allgemeinen, dass die Phase einer Wellenfunktion unbestimmt und somit beliebig ist. Dies zeigt sich auch in der Invarianz der Schrödingergleichung unter der Phasentransformation

$$\psi(x) \to \widetilde{\psi} \exp(\mathrm{i}\alpha) \,. \tag{6.1}$$

Fügt man der Wellenfunktion eine ortsabhängige Phase hinzu

$$\psi(x) \to \widetilde{\psi} \exp(\mathrm{i}\alpha(x)) \,, \tag{6.2}$$

so ist die Schrödingergleichung nicht mehr invariant unter der Transformation und der Impulsterm des Hamiltonoperators geht über zu

$$-\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial x^2} \to -\frac{1}{2}\Big(\frac{\partial}{\partial x} + \mathrm{i}A(x)\Big)^2 \quad \text{mit} \quad A = \frac{\partial \alpha}{\partial x} \,. \tag{6.3}$$

Bei der imaginären Phasentransformation wird $\alpha(x) = \mathrm{i}a(x)$ gewählt, sodass gilt

$$\psi(x) \to \widetilde{\psi} \exp(-a(x)) \tag{6.4}$$

und somit

$$\hat{H}_T := -\frac{1}{2}\Big(\frac{\partial}{\partial x} - A(x)\Big)^2 + V(x) \quad \text{mit} \quad A = \frac{\partial a}{\partial x} \,. \tag{6.5}$$

Dieser Operator wirkt nur auf die Wellenfunktion $\widetilde{\psi}(x)$, sodass die Eigenwerte von $\hat{H}_T$ mit denen des Hamiltonoperators $\hat{H}$ übereinstimmen. Außerdem gilt nach Gleichung (5.14), dass die Wellenfunktion $\widetilde{\psi}(x)$ durch Gleichung (5.6) gegeben ist.
Nach dem Ausmultiplizieren der obigen Gleichung ergibt sich $\hat{H}_T$ zu

$$\hat{H}_T = -\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + A(x)\frac{\partial}{\partial x} + \underbrace{\frac{1}{2}A'(x) - \frac{1}{2}A^2(x) + V(x)}_{\Delta V} \,. \tag{6.6}$$

Mit Hilfe der imaginären Phasentransformation wurde der Hamiltonoperator also auf eine Form der Gleichung (5.18) gebracht, sodass mit einem Koeffizientenvergleich

$$A(x) = \frac{1}{2}(\nu x^3 + \mu x) \quad \Rightarrow \quad a(x) = \int A(x)dx = \frac{\nu x^4}{8} + \frac{\mu x^2}{4} \tag{6.7}$$

folgt. Außerdem lässt sich das Potential mit dem Ansatz aus Kapitel 5 allgemein bestimmen zu

$$\begin{aligned} \Delta V(x) &= -2\nu j x^2 - \mu j = V(x) + \frac{1}{2}A'(x) - \frac{1}{2}A^2(x) \\ \Rightarrow V(x) &= \frac{\nu^2 x^6}{8} + \frac{\nu\mu x^4}{4} + \Big[\frac{\mu^2}{8} - 2\nu\Big(j + \frac{3}{8}\Big)\Big]x^2 - \mu\Big(j + \frac{1}{4}\Big) \,. \end{aligned} \tag{6.8}$$

7 Lösen eines quasi-exakt lösbaren quantenmechanischen Potentials

Um das allgemeine Potential aus Gleichung (6.8) auf die Form des Doppelmuldenpotentials (1.1) zu bringen, werden $\nu = 2$ und $\mu = 0$ gesetzt. Mit $j = \frac{1}{2}$ gilt dann

$$V(x) = \frac{1}{2}(x^6 - 7x^2)\,. \tag{7.1}$$

Wie in Kapitel 5 erwähnt, wird die Anzahl der exakt lösbaren Zustände durch j festgelegt zu $2j + 1 = 2$.
Für den exakt lösbaren Teil des Hamiltonoperators gilt nach Gleichung (5.17)

$$H_T = -2T_0T_- - 2T_- - 2T_+ = \begin{pmatrix} 0 & -2 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}\,. \tag{7.2}$$

Die Energieeigenwerte des Hamiltonoperators entsprechen also

$$\begin{aligned} \det(H_T - E_i\mathbb{1}) &= 0 \\ \Rightarrow E_{1,2} &= \pm\sqrt{2}\,. \end{aligned} \tag{7.3}$$

Die Berechnung der Koeffizienten der Wellenfunktion $\widetilde{\psi}(x)$ führt auf die Berechnung der Eigenvektoren $\vec{P}_i$ zu den Eigenenergien.

$$\begin{aligned} &(H_T - E_1 \cdot \mathbb{1}) \cdot \vec{P}_1 = 0 \\ \Leftrightarrow &\begin{pmatrix} -\sqrt{2} & -1 \\ -1 & -\sqrt{2} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} c_1 \\ c_0 \end{pmatrix} = 0 \quad \Rightarrow \quad c_0 = -\frac{1}{\sqrt{2}}c_1 \end{aligned} \tag{7.4}$$

$$\begin{aligned} &(H_T - E_2 \cdot \mathbb{1}) \cdot \vec{P}_2 = 0 \\ \Leftrightarrow &\begin{pmatrix} \sqrt{2} & -1 \\ -1 & \sqrt{2} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} c_1 \\ c_0 \end{pmatrix} = 0 \quad \Rightarrow \quad c_0 = \frac{1}{\sqrt{2}}c_1 \end{aligned} \tag{7.5}$$

Mit den Gleichungen (7.4) und (7.5) gilt für die Wellenfunktionen des Doppelmuldenpotentials

$$\psi_{1,2}(x) = (1 \mp \sqrt{2}x^2)\exp\Big(-\frac{x^4}{4}\Big) \tag{7.6}$$

und

$$E_{1,2} = \pm\sqrt{2}\,. \tag{7.7}$$

8 Zusammenfassung

Anhand eines Beispiels des Doppelmuldenpotentials wurden die theoretischen Grundlagen zur Berechnung von quasi-exakt lösbaren quantenmechanischen Potentialen mit Hilfe der Matrixdarstellung behandelt.
Dazu wurde die Lie-Algebra $sl(2,\mathbb{R})$ verwendet, welche in der Struktur des Hamiltonoperators eines quasi-exakt lösbaren quantenmechanischen Potentials enthalten ist. Der exakt lösbare Teil des Hamiltonoperators $\hat{H}_T$ schreibt sich dann als eine Summe aus einem quadratischen und einem linearen Term von Operatoren dieser Algebra (3.2).
Die Operatoren wurden dann als Differentialoperatoren in einem $2j+1$-dimensionalen Darstellungsraum $\mathcal{D}$ dargestellt, welcher abhängig vom betrachteten Potential unterschiedliche Formen annehmen kann (z.B. $\xi(x) = \cosh(x)$).
Anhand der Wirkung der Operatoren auf ein allgemeines Element aus dem Raum $\mathcal{D}$ ließ sich dann die Matrixdarstellung herleiten, sodass die Lösung der Schrödingergleichung auf ein Eigenwertproblem zurückzuführen war.
Bei der Lösung des Eigenwertproblems wurde in dem Beispiel der halbzahlige Parameter j zu $\frac{1}{2}$ gewählt, sodass genau $2j+1 = 2$ Zustände exakt berechenbar waren. Die maximale Anzahl von exakt berechenbaren Zuständen, und damit der Parameter j, ist in der Matrixdarstellung deshalb begrenzt, da die resultierende Matrix H_T diagonalisiert werden muss. Dies ist im Allgemeinen jedoch nur bis 4×4-Matrizen analytisch exakt möglich.

Literatur

[1] M.A. Shifman, *New Findings in Quantum Mechanics*, in: ITEP Lectures on Particle Physics and Field Theory, Vol. II, World Scientific, Singapur, 1999.

[2] S. Engelnkemper, Matrix-Darstellung quasi-exakt lösbarer Hamilton-Operatoren, Bachelor-Arbeit, Münster, 2012.