

Beispiele: Harmonischer Oszillator und Kastenpotential

Ramona Wohlleb

Mathematische Strukturen der Quantenmechanik

Sommersemester 2011

1 Der harmonische Oszillator

In Analogie zum klassischen harmonischen Oszillator ist der eindimensionale quantenharmonische Oszillator durch den Hamilton-Operator

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}q^2 = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{m\omega^2}{2}x^2$$

definiert.

Sei $V(x) = \frac{m\omega^2}{2}x^2$. Ist $A \subseteq \mathbb{R}$ kompakt, also abgeschlossen und beschränkt, so gilt

$$\int_A |V(x)|^2 dx = \int_A \left| \frac{m\omega^2}{2}x^2 \right|^2 dx = \frac{m^2\omega^4}{4} \int_A x^4 dx < \infty.$$

Somit gilt $V \in L^2_{loc}(\mathbb{R})$. Da offensichtlich $V \geq 0$ gilt, ist H nach [Str, S.73 Theorem 4.3.4] wesentlich selbstadjungiert auf $C_0^\infty(\mathbb{R})$. Das Spektrum lässt sich daher mit Hilbertraumtechniken ermitteln. Wir wollen das Spektrum allerdings mit algebraischen Methoden lösen.

Um die Rechnungen zu erleichtern, gehen wir von p und q über zu

$$q' := \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}q, \quad p' := \frac{1}{\sqrt{m\hbar\omega}}p, \quad H' := \frac{1}{\hbar\omega}H.$$

Außerdem definieren wir die sogenannten (unbeschränkten) Auf- und Absteigeoperatoren

$$a := \frac{1}{\sqrt{2}}(q' + ip'), \quad a^* = \left(\frac{1}{\sqrt{2}}(q' + ip') \right)^* = \frac{1}{\sqrt{2}}(q'^* - ip'^*) = \frac{1}{\sqrt{2}}(q' - ip').$$

Des Weiteren sei $N := a^*a$. Dann gilt

$$\begin{aligned} [a, a^*] &= \frac{1}{2}[q' + ip', q' - ip'] \\ &= \frac{1}{2} \left(\underbrace{[q', q']}_{=0} + i \underbrace{[p', q']}_{=-[q', p']} - i[q', p'] - ii \underbrace{[p', p']}_{=0} \right) \\ &= -i[q', p'] \\ &= -i\sqrt{\frac{m\omega}{m\hbar^2\omega}}[q, p] \\ &= -i\frac{1}{\hbar}i\hbar \\ &= 1, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
H' &= \frac{1}{\hbar\omega} H \\
&= \frac{1}{2} \left(\frac{m\omega}{\hbar} q^2 + \frac{1}{m\hbar\omega} p^2 \right) \\
&= \frac{1}{2} \left((q')^2 + (p')^2 \right) \\
&= \frac{1}{4} (q'q' + iq'p' - ip'q' + p'p' + q'q' - iq'p' + ip'q' + p'p') \\
&= \frac{1}{4} ((q' - ip')(q' + ip') + (q' + ip')(q' - ip')) \\
&= \frac{1}{2} (a^*a + aa^*) \\
&= \frac{1}{2} (2a^*a + [a, a^*]) \\
&= a^*a + \frac{1}{2} \\
&= N + \frac{1}{2},
\end{aligned}$$

$$[N, a] = [a^*a, a] = a^*aa - aa^*a = [a^*, a]a = -[a, a^*]a = -a$$

und

$$[N, a^*] = [a^*a, a^*] = a^*aa^* - a^*a^*a = a^*[a, a^*] = a^*.$$

Um das Spektrum von H zu bestimmen, genügt es also, das Spektrum von N zu untersuchen.

Da N selbstadjungiert ist, können wir den unitären Operator $T(s) := \exp(isN)$ für $s \in \mathbb{R}$ definieren. Sei $F(s) := T(s)aT(s)^* = T(s)aT(-s)$. Dann gilt

$$\begin{aligned}
\frac{dF(s)}{ds} &= iT(s)aT(-s) + T(s)0T(-s) + T(s)a(-iN)T(-s) \\
&= iT(s)NaT(-s) - iT(s)aNT(-s) \\
&= iT(s)[N, a]T(-s) \\
&= -iT(s)aT(-s) \\
&= -iF(s).
\end{aligned}$$

Folglich gilt $F(s) = \exp(-is)F(0)$ und somit

$$T(s)aT(s)^{-1} = T(s)aT(-s) = F(s) = \exp(-is)F(0) = \exp(-is)a. \quad (1)$$

Damit folgt

$$T(s)a^*T(s)^{-1} = (T(s)aT(s)^{-1})^* \stackrel{(1)}{=} (\exp(-is)a)^* = \exp(is)a^*. \quad (2)$$

Die Gleichungen (1) und (2) implizieren, dass $T(2\pi)$ mit a und a^* kommutiert. Somit kommutiert $T(2\pi)$ auch mit der Heisenberg-Algebra, die von diesen erzeugt wird. Auf Grund der Irreduzibilität muss $T(2\pi)$ ein Vielfaches der Identität sein. Es gibt also ein $\theta \in \mathbb{R}$ mit $T(2\pi) = \exp(i\theta)\mathbb{1}$. Sei $T'(s) := T(s) \exp(-\frac{is\theta}{2\pi}) = \exp(is(N - \frac{\theta}{2\pi}))$. Dann gilt

$$T'(2\pi) = T(2\pi) \exp(-i\theta) = \exp(i\theta) \exp(-i\theta)\mathbb{1} = \mathbb{1} = T'(0).$$

Die spektrale Darstellung

$$T'(s) = \int_{\sigma(N - \frac{\theta}{2\pi})} dE(\lambda) \exp(is\lambda)$$

von $T'(s)$ liefert, da die $E(\lambda)$ paarweise orthogonal sind,

$$0 = (T'(2\pi) - \mathbb{1})^2 = \int_{\sigma(N - \frac{\theta}{2\pi})} dE(\lambda) (\exp(i2\pi\lambda) - \mathbb{1})^2.$$

Somit gilt $\text{supp } dE(\lambda) \subseteq \mathbb{Z}$; d.h. $N - \frac{\theta}{2\pi}$ und somit auch N und H' haben ein diskretes Spektrum.

Wir wollen nun das Spektrum von N explizit berechnen. Sei $0 < \lambda \in \sigma(N)$ und ψ_λ der zu λ gehörige Eigenvektor. Dann gilt

$$\psi_\lambda \in D(N) = \{\psi \in L^2(\mathbb{R}) \mid N\psi \in L^2(\mathbb{R})\}.$$

Somit auch $a\psi_\lambda \in L^2(\mathbb{R})$; d.h. $\psi_\lambda \in D(a)$. Also ist $a\psi_\lambda$ wohldefiniert. Es gilt

$$\|a\psi_\lambda\|^2 = (\psi_\lambda, N\psi_\lambda) = \lambda\|\psi_\lambda\|^2 > 0$$

und folglich $a\psi_\lambda \neq 0$. Wegen

$$\frac{d \exp(isN)\psi_\lambda}{ds} = iN \exp(isN)\psi_\lambda = i \exp(isN)N\psi_\lambda = i\lambda \exp(isN)\psi_\lambda$$

gilt

$$T(s)\psi_\lambda = \exp(isN)\psi_\lambda = \exp(is\lambda) \exp(i \cdot 0 \cdot N)\psi_\lambda = \exp(is\lambda)\psi_\lambda. \quad (3)$$

Dann erhalten wir

$$T(s)a\psi_\lambda \stackrel{(1)}{=} \exp(-is)aT(s)\psi_\lambda \stackrel{(3)}{=} \exp(-is)a \exp(is\lambda)\psi_\lambda = \exp(i(\lambda - 1)s)a\psi_\lambda$$

und folglich

$$\exp(is(N - (\lambda - 1)))a\psi_\lambda = a\psi_\lambda. \quad (4)$$

Wegen (4) gilt

$$\begin{aligned}
0 &= \left. \frac{d \exp(is(N - (\lambda - 1)))a\psi_\lambda}{ds} \right|_{s=0} \\
&= i(N - (\lambda - 1)) \exp(is(N - (\lambda - 1)))a\psi_\lambda|_{s=0} \\
&= i(N - (\lambda - 1))a\psi_\lambda.
\end{aligned}$$

Also gilt

$$Na\psi_\lambda = (\lambda - 1)a\psi_\lambda$$

und somit $\lambda - 1 \in \sigma(N)$. Da $\sigma(N)$ positiv (und nicht leer) ist, muss daher schon $\sigma(N) \subseteq \mathbb{N}$ und $0 \in \sigma(N)$ gelten.

Betrachten wir nun analog a^* . Sei $\lambda \in \sigma(N)$ und ψ_λ der zugehörige Eigenvektor. Dann gilt $\psi_\lambda \in D(a^*)$ und (wegen $\lambda \geq 0$)

$$\|a^*\psi_\lambda\|^2 = (\psi_\lambda, aa^*\psi_\lambda) = (\psi_\lambda, (1 + N)\psi_\lambda) = (\psi_\lambda, (1 + \lambda)\psi_\lambda) = (1 + \lambda)\|\psi_\lambda\|^2 > 0.$$

Also ist $a^*\psi_\lambda \neq 0$. Es gilt

$$T(s)a^*\psi_\lambda \stackrel{(2)}{=} \exp(is)a^*T(s)\psi_\lambda \stackrel{(3)}{=} \exp(is(\lambda + 1))a^*\psi_\lambda$$

und folglich

$$\exp(is(N - (\lambda + 1)))a\psi_\lambda = a\psi_\lambda. \quad (5)$$

Wegen (5) gilt

$$\begin{aligned}
0 &= \left. \frac{d \exp(is(N - (\lambda + 1)))a^*\psi_\lambda}{ds} \right|_{s=0} \\
&= i(N - (\lambda + 1)) \exp(is(N - (\lambda + 1)))a^*\psi_\lambda|_{s=0} \\
&= i(N - (\lambda + 1))a^*\psi_\lambda.
\end{aligned}$$

Also gilt

$$Na^*\psi_\lambda = (\lambda + 1)a^*\psi_\lambda.$$

Also folgt $\lambda + 1 \in \sigma(N)$ und somit $\sigma(N) = \mathbb{N}$. Damit erhalten wir

$$\sigma(H) = \left\{ E_n := \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) \mid n \in \mathbb{N} \right\}.$$

Für den Eigenvektor ψ_0 zum Eigenwert 0 gilt wegen

$$\|a\psi_0\|^2 = (\psi_0, N\psi_0) = 0$$

schon

$$(q' + ip')\psi_0 = \sqrt{2}a\psi_0 = 0;$$

d.h. ψ_0 erfüllt [Str, S.66 Gleichung (3.4.3)] und ist somit der Fock-Vektor.

Mit $x' := \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x$ gilt $q' = x'$ und wegen $\frac{dx'}{dx} = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$

$$ip' = i \frac{1}{\sqrt{m\hbar\omega}}p = i \frac{1}{\sqrt{m\hbar\omega}} \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \frac{d}{dx} = \frac{d}{dx'}.$$

Somit ist ψ_0 Lösung der folgenden Differentialgleichung

$$\left(x' + \frac{d}{dx'}\right)\psi_0(x') = 0. \quad (6)$$

Die Gaußsche Wellenfunktion, die wir in [Str, S.65ff] behandelt haben, löst (6). Wie oben gesehen, erhalten wir aus ψ_0 durch n -maliges Anwenden von a^* den Eigenvektor ψ_n zum Eigenwert n . Genauer gilt

$$\psi_n(x') = \frac{1}{\sqrt{n!}}(a^*)^n\psi_0(x') = \frac{1}{\sqrt{n!2^n}} \exp\left(-\frac{(x')^2}{2}\right) H_n(x'),$$

wobei der Vorfaktor $\frac{1}{\sqrt{n!}}$ für die Normierung sorgt und $H_n(x')$ die Hermite-Polynome vom Grad n und Parität $(-1)^n$ sind.

Beim klassischen harmonischen Oszillator sind bei gegebener Energie E nur Konfigurationen möglich, für die $V(x) = \frac{m\omega^2 x^2}{2} \leq E$ gilt. Wie man in Abbildung 1 sieht, kann die Aufenthaltswahrscheinlichkeit für den quantenharmonischen Oszillator auch in diesem klassisch verbotenen Bereich positiv sein. Dies steht jedoch nicht im Widerspruch zur Energieerhaltung, da die Bestimmung des Ortes zu einer Impulsänderung und somit zu einer Energieänderung führt.

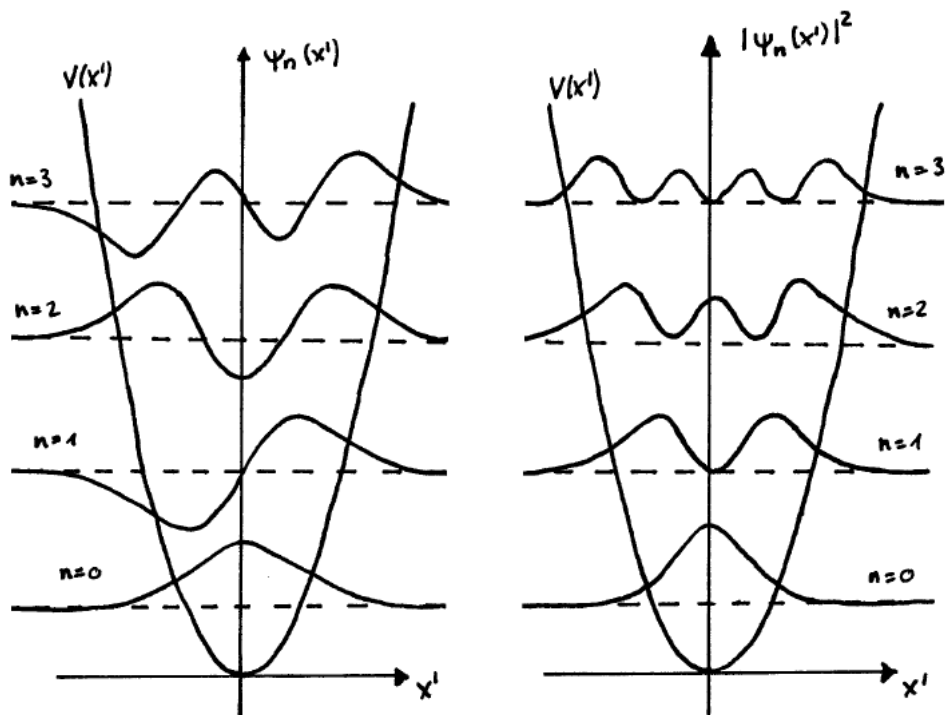


Abbildung 1: Die Lösungen der Schrödinger-Gleichung.

2 Das Kastenpotential

Wir betrachten nun das Potential

$$V(x) = \begin{cases} V_0, & \text{falls } |x| > d \\ 0, & \text{falls } |x| \leq d \end{cases}$$

für gewisse $d, V_0 > 0$. Dieses Potential erfüllt offensichtlich das Kato-Kriterium. Der zugehörige Hamilton-Operator lautet dann

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x).$$

Somit ist die Eigenwertgleichung

$$-\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) = \frac{2m}{\hbar^2}(E - V_0)\psi(x) \quad (7)$$

für $|x| > d$ und

$$-\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) = \frac{2m}{\hbar^2}E\psi(x) \quad (8)$$

für $|x| \leq d$ zu lösen.

Da $-\frac{d^2}{dx^2}$ ein positiver Operator¹ ist, gilt $H \geq V(x) \geq 0$. Also kann $E \in \sigma(H)$ nur gelten, wenn $E \geq 0$ ist.

Da das Potential V gerade ist, sind die Lösungen der Schrödinger-Gleichung entweder gerade oder ungerade.

Betrachten wir zunächst den Fall $0 \leq E < V_0$. Definiere

$$\rho := \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E)} \quad \text{und} \quad k := \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}E}.$$

Die Gleichungen (7) und (8) liefern uns die Lösungsansätze

$$\psi(x) = A_1 \exp(\rho x) + A_2 \exp(-\rho x)$$

für $x < -d$,

$$\psi(x) = B_1 \exp(ikx) + B_2 \exp(-ikx)$$

für $|x| \leq d$ und

$$\psi(x) = C_1 \exp(\rho x) + C_2 \exp(-\rho x)$$

¹Mit Hilfe partieller Integration zeigt man, dass für L^2 -Funktionen f, g die Gleichung $(\frac{d}{dx}f, g) = (f, -\frac{d}{dx}g)$ gilt. Also gilt $-\frac{d^2}{dx^2} = \frac{d}{dx}(\frac{d}{dx})^*$ und ist somit positiv.

für $x > d$. Da ψ eine L^2 -Funktion ist, muss ψ im Unendlichen verschwinden. Daher gilt $A_2 = C_1 = 0$.

Ist ψ gerade, so muss einerseits $A_1 = C_2$ gelten und andererseits für alle $|x| \leq d$

$$\begin{aligned} 0 &= \psi(x) - \psi(-x) \\ &= (B_1 - B_2) \exp(ikx) + (B_2 - B_1) \exp(-ikx). \end{aligned}$$

Da $\exp(ikx)$ und $\exp(-ikx)$ linear unabhängig sind, muss also $B_1 = B_2$ gelten. Die Bedingung $\psi \in D(-\frac{d^2}{dx^2})$ erfordert, dass sowohl ψ als auch ψ' stetig in d sind. Also folgt

$$\begin{aligned} B_1 \exp(ikd) + B_1 \exp(-ikd) &= A_1 \exp(-\rho d) \\ \Leftrightarrow 2B_1 \cos(kd) &= A_1 \exp(-\rho d) \\ \Leftrightarrow B_1 &= \frac{A_1 \exp(-\rho d)}{2 \cos(kd)} \end{aligned} \tag{9}$$

und

$$\begin{aligned} (B_1 \exp(ikx) + B_1 \exp(-ikx))' \Big|_{x=d} &= (A_1 \exp(-\rho x))' \Big|_{x=d} \\ \Leftrightarrow 2B_1 (\cos(kx))' \Big|_{x=d} &= (A_1 \exp(-\rho x))' \Big|_{x=d} \\ \Leftrightarrow -2B_1 k \sin(kd) &= -A_1 \rho \exp(-\rho d) \\ \stackrel{(9)}{\Leftrightarrow} -\frac{A_1 \exp(-\rho d)}{\cos(kd)} k \sin(kd) &= -A_1 \rho \exp(-\rho d) \\ \Leftrightarrow k \tan(kd) &= \rho. \end{aligned}$$

Im geraden Fall ist die Schrödinger-Gleichung für $0 \leq E < V_0$ also genau dann lösbar, wenn E die Gleichung

$$k \tan(kd) = \rho \tag{10}$$

erfüllt, und es gilt in diesem Fall

$$\psi(x) = A_1 \begin{cases} \exp(\rho x), & \text{falls } x < -d \\ \frac{\exp(-\rho d)}{\cos(kd)} \cos(kx), & \text{falls } |x| \leq d, \\ \exp(-\rho x), & \text{falls } x > d \end{cases}$$

wobei A_1 lediglich ein Normierungsfaktor ist.

Im ungeraden Fall erhält man analog, dass die Schrödinger-Gleichung für $0 \leq E < V_0$ genau dann lösbar ist, wenn E die Gleichung

$$k \cot(kd) = -\rho \tag{11}$$

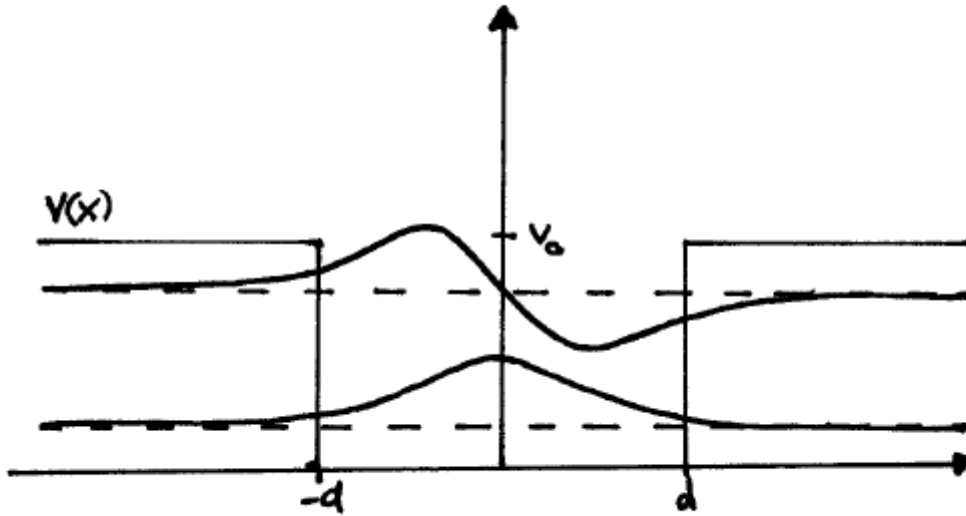


Abbildung 2: Die Lösungen der Schrödinger-Gleichung.

erfüllt, und in diesem Fall gilt

$$\psi(x) = A_1 \begin{cases} \exp(\rho x), & \text{falls } x < -d \\ -\frac{\exp(-\rho d)}{\sin(kd)} \sin(kx), & \text{falls } |x| \leq d \\ -\exp(-\rho x), & \text{falls } x > d \end{cases}$$

wobei A_1 ein Normierungsfaktor ist.

Die Gleichungen (10) und (11) lassen sich graphisch lösen. Dazu setzt man

$$y := kd \quad \text{und} \quad g := \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} V_0 d}$$

und formt die Gleichungen (10) und (11) um zu

$$\tan(y) = \frac{\rho}{k} = \frac{\rho d}{y} = \frac{\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - E) d^2}}{y} = \frac{\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} V_0 d^2 - \frac{2m}{\hbar^2} E d^2}}{y} = \frac{\sqrt{g^2 - y^2}}{y}$$

bzw.

$$\tan(y) = -\frac{k}{\rho} = -\frac{y}{\sqrt{g^2 - y^2}}.$$

Dann zeigt Abbildung 3, dass diese Gleichungen nur diskrete Lösungen besitzen. Somit ist das Spektrum von H im Bereich $[0, V_0)$ diskret.

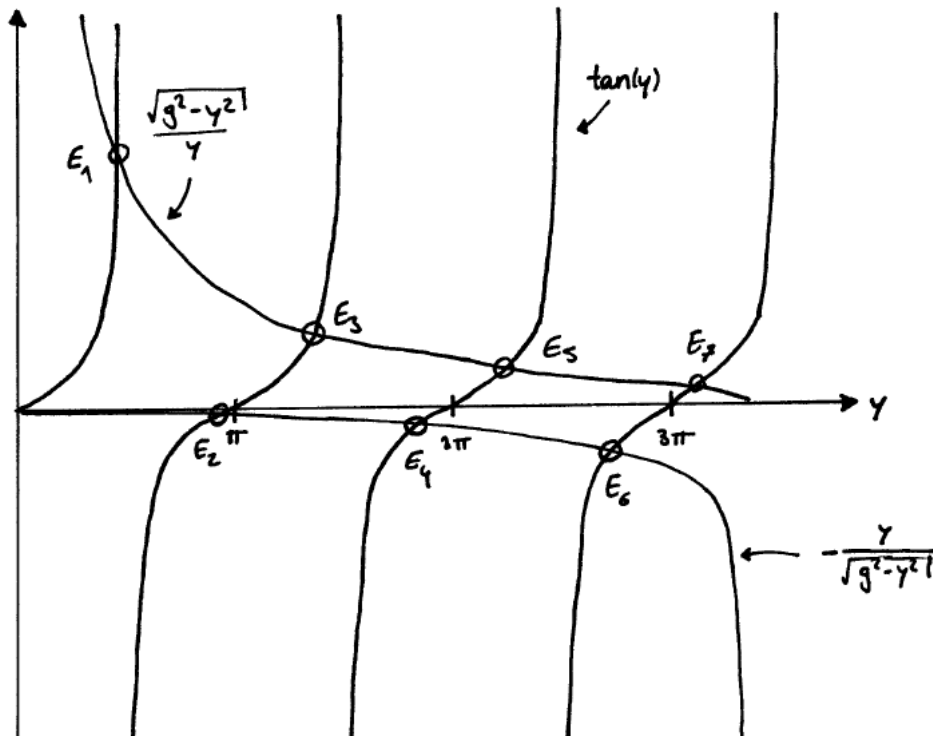


Abbildung 3: Graphische Lösung von (10) und (11).

Betrachten wir nun den Fall $E \geq V_0$. Man kann zeigen, dass für jedes $E \geq V_0$ die Schrödinger-Gleichung eine Lösung besitzt. Daher gilt $[V_0, \infty) \subseteq \sigma(H)$; d.h. das Spektrum ist in diesem Bereich kontinuierlich.

Betrachten wir nun den Grenzübergang $V_0 \rightarrow \infty$. Dann gilt $\rho \rightarrow \infty$. Für die geraden Eigenfunktionen erhalten wir dann die Bedingung $k \tan(kd) = \infty$; d.h. $kd = \frac{\pi}{2}(2n + 1)$ für ein $n \in \mathbb{N}$, also

$$E = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\pi^2}{(2d)^2} (2n + 1)^2 \quad \text{für ein } n \in \mathbb{N}.$$

Analog erhält man für die ungeraden Eigenfunktionen die Bedingung

$$E = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\pi^2}{(2d)^2} (2n)^2 \quad \text{für ein } n \in \mathbb{N}.$$

Außerdem gibt es keinen kontinuierlichen Teil des Spektrums mehr. Somit gilt für den unendlichen Potentialtopf

$$\sigma(H) = \left\{ E_n := \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\pi^2}{(2d)^2} n^2 \mid n \in \mathbb{N} \right\}.$$

Das Grenzpotential für $V_0 \rightarrow \infty$ erfüllt offensichtlich nicht das Kato-Kriterium. Daher definiert H in diesem Fall keinen eindeutigen selbstadjungierten Operator auf $D\left(\frac{d^2}{dx^2}\right)$.

Literatur

- [Str] F. Strocchi: *An Introduction to the Mathematical Structure of Quantum Mechanics: A Short Course for Mathematicians*, World Scientific Publishing, 2005.