

VL9: Kapitel 4: Quantenmechanische Anwendungen

Im Kapitel 3.1 haben wir gesehen, dass wir anstatt des Lagrange-Formalismus auch den Hamilton-Formalismus benutzen können, um die Dynamik eines mechanischen Systems zu beschreiben. Der Lagrange-Formalismus liefert mit den Euler-Lagrange-Gleichungen ein System von f Differentialgleichungen 2. Ordnung, wohingegen der Hamilton-Formalismus ein System von $2f$ Differentialgleichungen 1. Ordnung liefert. Ein System von gewöhnlichen Differentialgleichungen 1. Ordnung lässt sich insbesondere numerisch leicht simulieren, dazu hatten wir uns letzte Woche die anharmonischen Oszillatoren angesehen.

Die eigentliche Bedeutung des Hamilton-Formalismus besteht aber darin, dass durch ihn die Verbindung zur Quantenmechanik hergestellt wird. In der Quantenmechanik hat man immer einen Hamilton-Operator, und den bekommt man aus der Hamilton-Funktion. Typischerweise möchte man dann die Eigenwerte und Eigenfunktionen dieses Operators bestimmen, aber das ist für die meisten Fälle nicht mehr in analytisch geschlossener Form möglich. Dementsprechend existiert ein gesamtes Arsenal von Näherungsverfahren und Rechenschemata, mit denen dann versucht wird, auf mehr oder weniger systematische Art und Weise das Eigenwertproblem für den Hamilton-Operator zu lösen oder die Berechnung von damit zusammenhängenden Größen zu ermöglichen. In diesen Kontext fallen dann auch die Beispiele, die wir uns jetzt noch in diesem 4. Kapitel anschauen wollen.

Kurz zur weiteren Vorgehensweise: PhysikerInnen im Master werden mit dem quantenmechanischen Setup recht gut vertraut sein, MathematikerInnen möglicherweise eher weniger. Also, um die Veranstaltung doch im wesentlichen für alle self contained zu halten, machen wir erst ein kurzes Kapitel 4.0, Die Postulate der Quantenmechanik, um da so ein bisschen an die Grundlagen zu erinnern, und dann geht es also im Kapitel 4.1 mit dem quantenmechanischen harmonischen Oszillator weiter.

Kapitel 4.0: Die Postulate der Quantenmechanik

Die Postulate der Quantenmechanik verbinden Dinge aus der realen Welt mit Objekten in einer physikalischen Theorie. Das passiert durch mathematische Ausdrücke und Gleichungen. Die reale Welt ist nun kein mathematisches Objekt, so dass man die Postulate der Quantenmechanik nicht vergleichen kann mit, sagen wir mal, den Axiomen für die reellen Zahlen. Das ist etwas, was vollständig in einer Mathematik-Welt stattfindet. Dementsprechend findet man, je nachdem, wo man nachschaut, in welchem Buch oder auf welcher Webseite, Listen mit 2 oder 3 Postulaten bis hin zu Listen mit 8 oder 9 Postulaten, das hängt dann auch immer ein bisschen davon ab, was die Leute dann damit machen wollen. Wenn man etwa nur das Spektrum des Wasserstoff-Atoms berechnen möchte, da hat man ein Elektron im Coulomb-Potential, dann muss man noch nichts über das Modellieren von Vielteilchen-Zuständen sagen, man braucht da noch nichts über Fermionen und Bosonen sagen.

Für unsere Zwecke hier in dieser Veranstaltung wäre vielleicht die folgende Liste mit 4 Postulaten angemessen:

- (I) Quantenzustand \Rightarrow Wellenfunktion in einem Hilbertraum
- (II) Observable \Rightarrow selbstadjungierter Operator
- (III) Messwerte einer Observablen $M \Rightarrow$ Eigenwerte von \hat{M}
- (IV) Zeitevolution eines Quantenzustandes \Rightarrow Schrödinger-Gleichung

Etwas detaillierter:

| Postulate | Classical Mechanics | Quantum Mechanics |
|-----------|---|---|
| I | A state of a classical system is given by a pair $(x(t), p(t)) \in \mathbb{R}^6$ with $x(t)$ being the position and $p(t)$ being the momentum of the particle at time t . | A state of the quantum system is given by a vector $\psi(t)$ in some Hilbert space \mathcal{H} . In coordinate space representation, $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^3)$ and $ \psi(x, t) ^2 d^3x$ is the probability of finding the particle at x in the volume element d^3x at time t . |
| II | A physical measurable quantity M is given by a real valued function $M(x, p)$ of position x and momentum p . | Let the position operator \hat{x} and the momentum operator \hat{p} be given by $\hat{x}\psi = x\psi(x, t)$, multiplication with x , and $\hat{p}\psi = \frac{\hbar}{i}\nabla\psi$. Then the measurable quantity M is represented by a self-adjoint operator $\hat{M} = M(\hat{x}, \hat{p})$. |
| III | A measurement of M is $M(x, p)$. The act of measurement does not disturb the state of the system. | A measurement of M yields a value from the set of eigenvalues of \hat{M} . If ψ_n is a normalized eigenvector of \hat{M} with eigenvalue λ_n , then the probability of obtaining λ_n as a result of the measurement on the system in the normalized state ψ is given by $ \langle\psi, \psi_n\rangle ^2$. As a result of the measurement process, the state of the system suddenly changes from ψ to ψ_n . |
| IV | The time evolution is given by $\dot{x}_t = \frac{p_t}{m} = \nabla_p H$ $\dot{p}_t = -\nabla_x V = -\nabla_x H$ with Hamilton function $H(x, p) = \frac{p^2}{2m} + V(x).$ | The time evolution is given by the time dependent Schrödinger equation $i\hbar\frac{d}{dt}\psi(t) = \hat{H}\psi(t)$ with Hamilton operator $\hat{H} = H(\hat{x}, \hat{p}) = H(x, \frac{\hbar}{i}\nabla_x)$ |

Um die zeitliche Entwicklung eines quantenmechanischen Systems zu beschreiben, muss man also die zeitabhängige Schrödinger-Gleichung

$$i\hbar\frac{d}{dt}\psi(t) = \hat{H}\psi(t) \tag{1}$$

lösen mit dem Hamilton-Operator

$$\hat{H} = H\left(x, \frac{\hbar}{i}\nabla_x\right) = \frac{1}{2m}\left(\frac{\hbar}{i}\nabla_x\right)^2 + V(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(x) \quad (2)$$

Wenn man da den Ansatz

$$\psi(x, t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \varphi(x) \quad (3)$$

macht und das in (1) einsetzt, bekommt man eine zeitunabhängige Gleichung für das $\varphi(x)$,

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(x)\right\}\varphi(x) = E\varphi(x) \quad (4)$$

oder etwas kompakter geschrieben

$$\hat{H}\varphi = E\varphi \quad (5)$$

das ist dann die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung. Typischerweise¹, etwa für Oszillator-Potentiale $V(x)$, gibt es einen Set von diskreten Energie-Eigenwerten $\{E_n\}_{n=0,1,2,\dots}$ und eine Menge von Eigenfunktionen $\{\varphi_n(x)\}_{n=0,1,2,\dots}$ mit

$$\hat{H}\varphi_n = E_n\varphi_n \quad (6)$$

und der Eigenschaft, dass die $\{\varphi_n(x)\}_{n=0,1,2,\dots}$ eine vollständige Orthonormalbasis des Raumes $L^2(\mathbb{R}^3)$ aller Wellenfunktionen sind. Das heisst also, dass jede Wellenfunktion, jeder Anfangszustand etwa, jedes

$$\psi_0 \in L^2(\mathbb{R}^3) := \left\{\psi : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{C} \mid \int_{\mathbb{R}^3} |\psi(x)|^2 d^3x < \infty\right\} \quad (7)$$

nach den φ_n entwickelt werden kann:

$$\psi_0(x) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \varphi_n(x) \quad (8)$$

mit Entwicklungskoeffizienten

$$c_n = \langle \psi_0, \varphi_n \rangle := \int_{\mathbb{R}^3} \psi_0(x) \overline{\varphi_n(x)} d^3x \quad (9)$$

Gemäss Gleichung (1) und (6) ist die Zeitevolution der Eigenfunktionen gegeben durch

$$\varphi_n(x, t) = e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t} \varphi_n(x) \quad (10)$$

das heisst, die $\varphi_n(x, t)$ lösen die zeitabhängige Schrödingergleichung (1), so dass also die Zeitevolution eines beliebigen Anfangszustandes ψ_0 gegeben ist durch

$$\psi_t(x) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t} \varphi_n(x) \quad (11)$$

¹die mathematisch rigorose Analyse von Schrödinger-Operatoren ist ein sehr weites Feld und kann, je nach Kontext, mit einem hohen technischen Aufwand einhergehen

Um also die zeitliche Entwicklung eines quantenmechanischen Systems berechnen zu können, benötigt man Informationen über das Eigenwertspektrum $\{E_n\}$ und die Eigenfunktionen $\{\varphi_n\}$ des Hamilton-Operators \hat{H} , man muss also das Eigenwertproblem (6) lösen. Es wird jetzt sicherlich nicht überraschen, dass das für die meisten Systeme in analytisch geschlossener Form nicht möglich ist. Es gibt zwar allgemeine mathematische Sätze, die einem unter gewissen Voraussetzungen garantieren, dass es eine vollständige Orthonormalbasis aus Eigenfunktionen geben muss, aber meistens ist es eben nicht möglich, diese dann auch explizit anzugeben. Dementsprechend ist es dann nicht klar, wie man bei gegebenem Anfangszustand ψ_0 das $\psi_t(x)$ aus Gleichung (11) bestimmen kann, so dass man etwa in der Lage wäre, eine Grösse wie

$$\langle x_t \rangle := \int_{\mathbb{R}^3} x |\psi_t(x)|^2 d^3x, \quad (12)$$

das beschreibt dann den Aufenthaltsort des Teilchens zur Zeit t , konkret als Funktion von der Zeit t zu plotten.

Wir wollen jetzt folgendes machen:

- (i) Wir betrachten zunächst den harmonischen Oszillator. Im nächsten Kapitel 4.1 werden wir das Eigenwertproblem (6) für den harmonischen Oszillator in analytisch geschlossener Form vollständig lösen. Das kann man auf mehrere Art und Weisen machen, wir nehmen den Formalismus mit den Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren, die werden wir dann auch beim anharmonischen Oszillator verwenden.
- (ii) Im Kapitel 4.2 betrachten wir dann einen anharmonischen Oszillator mit Potential $V(x) = \frac{1}{2}x^2 + \frac{\lambda}{4}x^4$. In dem Fall ist das Eigenwertproblem (6) nicht mehr analytisch in geschlossener Form lösbar, und man ist auf Näherungsmethoden angewiesen. Eine dieser Näherungsmethoden ist Bohr-Sommerfeld Quantisierung. Das werden wir erst einmal ganz einfach benutzen und uns anschauen, wie gut das hinkommt. Eine genauere Begründung, warum das funktioniert, oder warum vielleicht noch leicht verbesserte Versionen davon wie Einstein-Brillouin-Keller oder EBK-Quantisierung funktionieren, werden wir erstmal nicht betrachten. Eine Möglichkeit, sich das in einem etwas systematischeren Setting genauer anzuschauen, besteht in der WKB-Näherung. Dabei steht WKB für Wentzel, Kramers und Brillouin, und diese Sachen werden gelegentlich in einem Quantenmechanik-Modul betrachtet.
- (iii) Nachdem wir dann das Eigenwertproblem (6) für den anharmonischen Oszillator approximativ gelöst haben, benutzen wir dann im Kapitel 4.2.2 die Resultate aus (ii), um konkret die Grösse $\langle x_t \rangle$ aus (12) zu berechnen, für einen Anfangszustand ψ_0 , der im wesentlichen das quantenmechanische Analogon zu $x_{t=0} = x_0$ und $p_{t=0} = 0$ ist. Das liefert dann die Bilder von der VL-homepage, das β entspricht dem Parameter vor dem x^4 -Term im Potential, wenn wir also schreiben $V(x) = \frac{1}{2}x^2 + \frac{\lambda}{4}x^4$, wäre das kein β sondern hier ein λ .
- (iv) Schliesslich werfen wir im Kapitel 4.3 noch einen kurzen Blick auf das sogenannte Two Site Bose Hubbard Model. Das Hubbard Modell wurde ursprünglich für die approximative Beschreibung von wechselwirkenden Elektronen in einem Festkörper gemacht um etwa Effekte wie Supraleitung oder den Metall-Isolator-Übergang zu beschreiben. Es ist ein quantenmechanisches Vielteilchenmodell und hat damit die typische Eigenschaft, dass der Rechen- oder Simulationsaufwand exponentiell mit der Systemgrösse ansteigt. In jüngster Zeit ist dieses Modell wieder sehr aktuell geworden, da es auf Grund von bahnbrechenden experimentellen Fortschritten möglich geworden ist, dieses Modell in sehr reiner Form in Systemen von ultrakalten Atomen in optischen Gittern zu realisieren.

Kapitel 4.1: Der quantenmechanische harmonische Oszillator

Wir betrachten ein Teilchen der Masse m in einem eindimensionalen harmonischen Potential der Form

$$V(x) = \frac{D}{2} x^2$$

wobei D etwa die Federkonstante einer spiralförmigen Feder mit linearem Kraftgesetz

$$F = -Dx$$

ist. Die Hamilton-Funktion des klassischen Systems ist dann gegeben durch

$$H = H(x, p) = \frac{m}{2} \dot{x}^2 + \frac{D}{2} x^2 = \frac{1}{2m} p^2 + \frac{D}{2} x^2$$

mit dem klassischen Impuls $p = m \dot{x}$. Die Bewegungsgleichung lautet

$$\ddot{x} + \omega^2 x = 0$$

mit der Eigenfrequenz

$$\omega = \sqrt{\frac{D}{m}}$$

und hat die allgemeine Lösung

$$x_t = x_0 \cos(\omega t) + \frac{\dot{x}_0}{\omega} \sin(\omega t) .$$

Quantenmechanisch wird das System dann durch den Hamilton-Operator

$$\hat{H} = H(\hat{x}, \hat{p}) = \frac{1}{2m} \hat{p}^2 + \frac{D}{2} \hat{x}^2 = \frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \right)^2 + \frac{D}{2} x^2 = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{D}{2} x^2 \quad (13)$$

beschrieben. Dabei meint die Notation mit den Hüten, dass das Operatoren sind, und beim \hat{x} ist das dann der Operator, der eine gegebene Funktion $\varphi(x)$ einfach mit x multipliziert. Also etwas mathematischer²,

$$\begin{aligned} \hat{x}, \hat{p} &: L^2(\mathbb{R}) \rightarrow L^2(\mathbb{R}) \\ (\hat{x} \varphi)(x) &:= x \varphi(x) \\ (\hat{p} \varphi)(x) &:= \frac{\hbar}{i} \frac{d\varphi}{dx}(x) \end{aligned}$$

Das Eigenwertproblem (6) für den quantenmechanischen harmonischen Oszillator ist dann also gegeben durch

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{D}{2} x^2 \right\} \varphi_n(x) = E_n \varphi_n(x) \quad (14)$$

Wir wollen alle E_n 's und φ_n 's bestimmen, so dass (14) erfüllt ist. Dabei müssen die φ_n 's quadrat-integrabel sein, also $\int_{\mathbb{R}} |\varphi_n(x)|^2 dx < \infty$ oder, so sind die L^2 -Räume ja gerade definiert, $\varphi_n \in L^2(\mathbb{R})$.

²genau genommen sind die \hat{x}, \hat{p} nur auf einem geeigneten Definitionsbereich $D \subset L^2(\mathbb{R})$ definiert, das \hat{p} etwa ist ja eine Ableitung, also müssen die Funktionen φ dann auch differenzierbar sein; das Resultat muss aber auf jeden Fall wieder eine quadrat-integrable Funktion sein, also in $L^2(\mathbb{R})$ sein

4.1.1: Exakte Lösung des Eigenwertproblems

Wir benutzen die Notation

$$\omega^2 = \frac{D}{m}$$

und schreiben

$$\begin{aligned} \hat{H} &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{D}{2} x^2 \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{m\omega^2}{2} x^2 \\ &= \frac{\hbar\omega}{2} \left\{ -\frac{\hbar}{m\omega} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{m\omega}{\hbar} x^2 \right\} \\ &= \frac{\hbar\omega}{2} \left\{ -\ell^2 \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{\ell^2} x^2 \right\} \\ &= \frac{\hbar\omega}{2} \left\{ -\frac{d^2}{[d(x/\ell)]^2} + (x/\ell)^2 \right\} \\ &= \hbar\omega \frac{1}{2} \left\{ -\frac{d^2}{d\xi^2} + \xi^2 \right\} \end{aligned} \tag{15}$$

mit der Länge

$$\ell := \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$$

und der dimensionslosen Grösse

$$\xi := \frac{x}{\ell}$$

Wir definieren die Operatoren:

$$a := \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\xi + \frac{d}{d\xi} \right) \tag{16}$$

$$a^+ := \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\xi - \frac{d}{d\xi} \right) \tag{17}$$

Dann gilt

$$\begin{aligned} a^+ a &= \frac{1}{2} \left\{ \xi^2 - \frac{d^2}{d\xi^2} + \xi \frac{d}{d\xi} - \frac{d}{d\xi} \xi \right\} \\ &= \frac{1}{2} \left\{ \xi^2 - \frac{d^2}{d\xi^2} + \xi \frac{d}{d\xi} - 1 - \xi \frac{d}{d\xi} \right\} \\ &= \frac{1}{2} \left\{ \xi^2 - \frac{d^2}{d\xi^2} - 1 \right\} \end{aligned}$$

oder

$$\frac{1}{2} \left\{ -\frac{d^2}{d\xi^2} + \xi^2 \right\} = a^+ a + \frac{1}{2}$$

Also können wir schreiben

$$\hat{H} = \hbar\omega \left\{ a^+ a + \frac{1}{2} \right\} \tag{18}$$

Wir bestimmen zunächst eine Funktion³ $h_0 = h_0(\xi)$ mit

$$(a h_0)(\xi) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\xi + \frac{d}{d\xi} \right) h_0(\xi) \stackrel{!}{=} 0 \tag{19}$$

³für die Eigenfunktionen im ξ -Raum wollen wir die Notation $h_n = h_n(\xi)$ verwenden und für die Eigenfunktionen im x -Raum die Notation $\varphi_n = \varphi_n(x)$

Für diese Funktion gilt dann offensichtlich

$$\hat{H}h_0 = \frac{\hbar\omega}{2} h_0 \quad (20)$$

das heisst, das h_0 ist eine Eigenfunktion von \hat{H} mit Eigenwert $\varepsilon_0 = \frac{\hbar\omega}{2}$. Gleichung (19) ist äquivalent zu

$$h_0'(\xi) = -\xi h_0(\xi)$$

und wird offensichtlich gelöst von

$$h_0(\xi) := \frac{1}{\pi^{\frac{1}{4}}} e^{-\frac{\xi^2}{2}} \quad (21)$$

Dabei haben wir den Vorfaktor so gewählt, dass

$$\langle h_0, h_0 \rangle = \int_{\mathbb{R}} |h_0(\xi)|^2 d\xi = 1$$

gilt.

Jetzt definieren wir die Funktionen

$$h_n := \frac{1}{\sqrt{n!}} (a^+)^n h_0 \quad (22)$$

Dann gilt das folgende sehr grundlegende und wichtige Theorem 4.1.1, für dessen Formulierung wir eben noch den Kommutator $[A, B]$ von zwei Operatoren oder Matrizen A und B definieren wollen:

$$[A, B] := AB - BA \quad (23)$$

Theorem 4.1.1: Die Operatoren a, a^+ und die Funktionen h_0 und h_n seien definiert wie oben. Dann gilt:

a) Wir haben den Kommutator

$$[a, a^+] = 1 \quad .$$

b) Für beliebige natürliche Zahlen $n \geq 1$ haben wir die Kommutatoren

$$[a, (a^+)^n] = n(a^+)^{n-1} \quad .$$

c) Mit der Definition $h_{-1} := 0$ gilt für beliebige natürliche Zahlen $n \geq 0$

$$\begin{aligned} a h_n &= \sqrt{n} h_{n-1} \\ a^+ h_n &= \sqrt{n+1} h_{n+1} \end{aligned}$$

und

$$a^+ a h_n = n h_n \quad .$$

- d) Die $\{h_n\}_{n=0}^\infty$ sind ein orthonormales Funktionensystem. Das heisst, es gilt für beliebige natürliche Zahlen $n, m \geq 0$:

$$\langle h_m, h_n \rangle = \delta_{m,n} .$$

- e) Das Funktionensystem der $\{h_n\}_{n=0}^\infty$ ist vollständig in $L^2(\mathbb{R})$. Das heisst, jedes beliebige $\psi \in L^2(\mathbb{R})$ besitzt die Entwicklung

$$\psi(\xi) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n h_n(\xi)$$

mit Entwicklungskoeffizienten

$$c_n = \langle \psi, h_n \rangle = \int_{\mathbb{R}} \psi(\xi) \overline{h_n(\xi)} d\xi .$$

- f) Die Hermite-Polynome $H_n(\xi)$ sind definiert durch die Rekursion

$$\begin{aligned} H_0(\xi) &:= 1 \\ H_{n+1}(\xi) &:= 2\xi H_n(\xi) - H'_n(\xi) . \end{aligned}$$

Damit besitzen die h_n 's die folgende Darstellung:

$$h_n(\xi) = \frac{1}{\sqrt{2^n n! \sqrt{\pi}}} H_n(\xi) e^{-\frac{\xi^2}{2}} .$$

Beweis: Übungsblatt 9, der Teil (e) ohne Beweis⁴. ■

Wegen $\xi = x/\ell$ und $d\xi = dx/\ell$ mit der Länge

$$\ell = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \tag{24}$$

sind die normierten Eigenfunktionen im x -Raum dann gegeben durch

$$\begin{aligned} \varphi_n(x) &= \frac{1}{\sqrt{\ell}} h_n\left(\frac{x}{\ell}\right) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2^n n! \sqrt{\pi} \ell}} H_n\left(\frac{x}{\ell}\right) e^{-\frac{x^2}{2\ell^2}} \end{aligned} \tag{25}$$

und mit dem Teil (c) bekommen wir dann

$$\hat{H} \varphi_n = \varepsilon_n \varphi_n \tag{26}$$

mit den Energieeigenwerten

$$\varepsilon_n = \hbar\omega \left\{ n + \frac{1}{2} \right\} \tag{27}$$

und

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{m\omega^2}{2} x^2 = \hbar\omega \left\{ a^+ a + \frac{1}{2} \right\} . \tag{28}$$

⁴sowas wird etwa in einer Funktionalanalysis-Vorlesung bewiesen