

# Matrix-Darstellung quasi-exakt lösbarer Hamilton-Operatoren

Matrix representation  
of quasi-exactly solvable Hamiltonians

## Bachelorarbeit

zur Erlangung des Grades Bachelor of Science  
am Institut für Theoretische Physik  
der Westfälischen Wilhelms Universität Münster

vorgelegt von

**Sebastian Engelnkemper**

Geb. am: 29.04.1989 in: Lippstadt

Ausgegeben und betreut von

**Prof. Dr. Gernot Münster**

Institut für Theoretische Physik

Münster, den 6. Juli 2012

Diese Fassung der Arbeit unterscheidet sich nur geringfügig von der am 6. Juli 2012 dem Prüfungsamt vorgelegten Version.

# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>Theoretische Grundlagen</b>	<b>2</b>
2.1	Einheitenkonvention . . . . .	2
2.2	Spezielle Lineare Gruppe $SL(n, \mathbb{R})$ und Lie-Algebra $sl(n, \mathbb{R})$ . . . . .	2
2.3	Imaginäre Phasentransformation . . . . .	3
2.4	Darstellung durch Differentialoperatoren . . . . .	5
2.5	Konstruktion von Hamilton-Operatoren . . . . .	8
2.6	Einschub: Lösung von Gleichungen $(2j+1)$ ten Grades . . . . .	10
<b>3</b>	<b>Eindimensionaler anharmonischer Oszillator im <math>x^6</math>-Potential</b>	<b>12</b>
3.1	Konstruktion von Hamilton-Operator & Potential . . . . .	12
3.1.1	Gerade Zustände . . . . .	12
3.1.2	Ungerade Zustände . . . . .	14
3.2	Lösung der Schrödingergleichung für allgemeine Parameter $\mu$ und $\nu$ .	16
3.2.1	Fall: $j = \frac{1}{2}$ . . . . .	16
3.2.2	Fall: $j = 1$ . . . . .	20
3.2.3	Fall: $j = \frac{3}{2}$ . . . . .	23
3.3	Interpretation der Ergebnisse . . . . .	28
<b>4</b>	<b>Hyperbolisches Potential</b>	<b>29</b>
4.1	Konstruktion von Hamilton-Operator & Potential . . . . .	29
4.1.1	Gerade Zustände . . . . .	30
4.1.2	Ungerade Zustände . . . . .	32
4.2	Lösung der Schrödingergleichung für allgemeines $\alpha$ . . . . .	33
4.2.1	Fall $j = \frac{1}{2}$ . . . . .	33
4.2.2	Fall $j = 1$ . . . . .	36
4.2.3	Fall $j = \frac{3}{2}$ . . . . .	40
4.3	Interpretation der Ergebnisse . . . . .	43
<b>5</b>	<b>Zusammenfassung</b>	<b>44</b>
	<b>Literatur</b>	<b>46</b>

# 1 Einleitung

Um in der Quantenphysik Energien und Wellenfunktionen von Teilchen in unterschiedlichen Potentialen zu bestimmen, werden Hamilton-Operatoren konstruiert, welche je nach Darstellungsform durch das Aufstellen der stationären Schrödinger-Gleichung auf verschiedene mathematische Probleme führen. In wenigen Ausnahmefällen, wie zum Beispiel im Fall des quantenmechanischen harmonischen Oszillators, sind diese Probleme analytisch exakt lösbar. Die Energiewerte und Wellenfunktionen, die alle übrigen Informationen beinhalten, können also vom Grundzustand bis hin zu beliebigen angeregten Zuständen exakt berechnet werden.

Betrachtet man reale physikalische Gegebenheiten, so führt dies meist auf mathematische Problemstellungen, welche nur durch numerische Verfahren und/oder Vereinfachungen des Modells näherungsweise gelöst werden können. In der Physik ist dies der Regelfall, der oft das eigentliche Hindernis darstellt und Supercomputer für mehrere Monate beschäftigen kann.

In den beiden genannten Fällen bezieht sich der Begriff der Lösbarkeit jeweils auf das gesamte Spektrum der Zustände. Zwischengeordnet findet sich weitergehend eine dritte Art von Hamilton-Operatoren, deren Spektrum sich in einen exakt lösbaren Teil und einen nicht exakt lösbaren Rest aufteilt. Die so beschaffenen Potentiale bzw. Hamilton-Operatoren werden als quasi-exakt lösbar bezeichnet und sollen in dieser Arbeit in der Darstellung durch Hamilton-Matrizen behandelt werden. Alle Betrachtungen werden sich auf den eindimensionalen Fall beschränken.

Der Ausgangspunkt soll dabei kein physikalisches Problem, sondern die Lie-Algebra  $\mathfrak{sl}(n, \mathbb{R})$ , sein. Ausgehend von Leiteroperatoren dieser Algebra wird zunächst der einfachste quasi-exakt lösbare Fall, das eindimensionale Doppelmulden-Potential mit  $x^6$  Term konstruiert, das unter anderem als einfaches Modell in der Molekülphysik Verwendung findet. Weitergehend wird im Anschluss ein weiteres Doppelmuldenpotential über hyperbolische Funktionen konstruiert und untersucht.

Die Matrix-Darstellung der Hamilton-Operatoren wird jeweils auf Eigenwertprobleme führen, deren Lösung beliebig kompliziert werden kann und bis zu einem gewissen Grad algebraisch bestimmt wird.

Ordnet man die quasi-exakt lösbaren Probleme in den historischen Kontext der Quantenmechanik ein, wurden diese überraschend spät entdeckt und untersucht. Die mittlerweile gut erforschte Mathematik hinter der Quantenphysik schien lange Zeit keine neuen Entdeckungen zu bieten. Dies änderte sich in den 1980er Jahren mit der allgemeinen Vermutung der Existenz der benannten zwischengeordneten Hamilton-Operatoren [1]. Die Konstruktion durch eine Lie-Algebra wurde erstmals 1988 von Turbiner physikalisch erarbeitet. Unabhängig davon wurde dies von mathematischer Seite aus kurze Zeit später von Kamran und Olver erreicht. Eine weitere Erarbeitung des Problems gelang 1994 Ushveridze, der allerdings im Gegensatz zu dieser Arbeit eine analytische Herangehensweise verfolgte.



## 2 Theoretische Grundlagen

### 2.1 Einheitenkonvention

Da in dieser Arbeit weniger physikalische Werte als die Konstruktion und Analyse von Potentialen bzw. Hamilton-Operatoren im Vordergrund stehen, wird durchweg folgende Einheitenkonvention verwendet:

$$\hbar = \frac{h}{2\pi} := 1 \quad \text{und} \quad 2m := 1 .$$

Dabei ist  $m$  die Teilchenmasse und  $h$  das Planck'sche Wirkungsquantum.

### 2.2 Spezielle Lineare Gruppe $SL(n, \mathbb{R})$ und Lie-Algebra $\mathfrak{sl}(n, \mathbb{R})$

Die Allgemeine Lineare Gruppe  $GL(n, \mathbb{R})$  umfasst alle  $n \times n$ -Matrizen mit Koeffizienten aus dem Körper  $\mathbb{R}$ . Die Spezielle Lineare Gruppe  $SL(n, \mathbb{R})$  ist eine Untergruppe der Allgemeinen Linearen Gruppe mit der Eigenschaft, dass die Determinante stets den Wert 1 annimmt [3]:

$$SL(n, \mathbb{R}) := \{A \in GL(n, \mathbb{R}) \mid \det(A) = 1\} .$$

Die Lie-Algebra der Speziellen Linearen Gruppe wird als  $\mathfrak{sl}(n, \mathbb{R})$  bezeichnet und bildet eine Untergruppe der  $GL(n, \mathbb{R})$  mit verschwindender Spur:

$$\mathfrak{sl}(n, \mathbb{R}) := \{M \in GL(n, \mathbb{R}) \mid \text{Sp}(M) = 0\} .$$

Betrachtet man den einfachsten Fall  $n = 2$ , lässt sich eine triviale Basis ( $M_0, M_+, M_-$ ) für diese Gruppe finden:

$$M_0 := \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad M_+ := \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad M_- := \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} , \quad (1)$$

sodass gilt:

$$M = \begin{pmatrix} a & b \\ c & -a \end{pmatrix} = 2aM_0 + bM_+ + cM_- .$$

$\forall M \in \mathfrak{sl}(2, \mathbb{R})$  mit:  $a, b, c \in \mathbb{R}$ .

Der Vorfaktor  $\frac{1}{2}$  für  $M_0$  ergibt sich aus Definitionsgründen. Des Weiteren erfüllen die Matrizen der gefundenen Basis die Vertauschungsrelationen der Lie-Algebra:

$$[M_+, M_-] = 2M_0 , \quad [M_0, M_{\pm}] = \pm M_{\pm} . \quad (2)$$

Beweis:

$$\begin{aligned} [M_+, M_-] &= M_+M_- - M_-M_+ = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = 2M_0 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
[M_0, M_+] &= M_0 M_+ - M_+ M_0 = \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{2} \\ 0 & 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & -\frac{1}{2} \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} = +M_+
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
[M_0, M_-] &= M_0 M_- - M_- M_0 = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ -\frac{1}{2} & 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ \frac{1}{2} & 0 \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} = -M_-
\end{aligned}$$

□

Die Darstellung dieser Algebra kann verschiedene Formen annehmen [3]. In Kapitel 2.4 wird die Darstellung durch Differentialoperatoren und durch Matrizen für bestimmte Darstellungsräume nähergehend behandelt.

### 2.3 Imaginäre Phasentransformation

Um die eindimensionale stationäre Schrödingergleichung<sup>1</sup>

$$\hat{H}\psi(x) = E\psi(x) \quad (3)$$

$$\text{mit: } \hat{H} = -\left(\frac{\partial}{\partial x}\right)^2 + V(x) \quad (4)$$

mit Hilfe der  $\mathfrak{sl}(2, \mathbb{R})$  darstellen und lösen zu können, muss zum einen der Hamilton-Operator  $\hat{H}$  durch die gefundenen Basiselemente (vgl. (1)) ausgedrückt und zum anderen ein geeigneter geschlossener Darstellungsraum definiert werden. Die Normierungsbedingung für die Wellenfunktion  $\psi(x)$

$$\int |\psi(x)|^2 dx = 1$$

muss im Allgemeinen für alle  $\psi(x)$  gewährleistet sein. Aufgrund der Einheitenkonvention (s. Kap. 2.1) wird auf die Normierung der in den Beispielen ohnehin nur numerisch normierbaren Wellenfunktionen verzichtet. Dies wird in den Plots dennoch durch Wolfram Mathematica durchgeführt, um eine Vergleichbarkeit zu gewährleisten.

Es bietet sich weitergehend an, die Wellenfunktion in der Form

$$\psi(x) = \tilde{\psi}(x) \exp(-a(x)) \quad (5)$$

darzustellen.

Um dies zu erreichen, wird zunächst die unitäre Phasentransformation

$$\psi(x) \rightarrow \psi(x) \exp(i\alpha) , \quad (6)$$

<sup>1</sup>  $E (= E_n)$  und  $\psi(x) (= \psi_n(x))$  definieren hier den Eigenwert und die zugehörige Wellenfunktion des Zustands mit der Quantenzahl  $n$ . Auf die Angabe der Quantenzahl im Index wird für die Allgemeinen theoretischen Überlegungen verzichtet.

betrachtet. Die Gleichungen (3) und (4) sind bekanntermaßen invariant unter dieser Transformation [3]. Um die gewünschte Form (vgl. (5)) zu erhalten, muss gewährleistet werden, dass  $\alpha$  eine vollständig imaginäre von  $x$  abhängige Funktion ist (s. (7)). Die stationäre Schrödingergleichung ist nicht invariant gegenüber der Transformation

$$\psi(x) \rightarrow \tilde{\psi}(x) \exp(i\alpha(x)) . \quad (7)$$

Wie aus der Elektrodynamik bekannt [1], liefert diese Transformation hingegen folgende Gleichung für  $\tilde{\psi}(x)$ :

$$\left[ - \left( \frac{\partial}{\partial x} + iA(x) \right)^2 + V(x) \right] \tilde{\psi}(x) = E\tilde{\psi}(x), \quad (8)$$

mit:  $A(x) = \frac{\partial \alpha}{\partial x}$  .

Dies ist für alle  $\alpha(x)$  gegeben, sodass durch die Definition  $\alpha(x) := ia(x)$  die gewünschte Form (vgl. (6)) erreicht wird und sich folgende Gleichung für  $\tilde{\psi}(x)$  ergibt:

$$\left[ - \left( \frac{\partial}{\partial x} - A(x) \right)^2 + V(x) \right] \tilde{\psi}(x) = E\tilde{\psi}(x), \quad (9)$$

mit:  $A(x) \rightarrow iA(x)$  .

Die Eigenwerte  $E$  des Operators

$$\hat{H}_T := \left[ - \left( \frac{\partial}{\partial x} - A(x) \right)^2 + V(x) \right] \quad (10)$$

$$= - \frac{d^2}{dx^2} + A(x) \frac{d}{dx} + \frac{A(x)}{dx} + A(x) \frac{d}{dx} - A^2(x) + V(x)$$

$$= - \frac{d^2}{dx^2} + 2A(x) \frac{d}{dx} + \Delta V(x) \quad (11)$$

mit:  $\Delta V(x) = V(x) + A'(x) - A^2(x)$  (12)

stimmen folglich mit den Eigenwerten des Hamilton-Operators aus Gleichung (3) überein. Es reicht für eine Energiebetrachtung also aus, die Eigenwerte von  $\hat{H}_T$  zu ermitteln. Die Wellenfunktion  $\psi(x)$  ergibt sich im Rückschluss aus Gleichung (5) zu:

$$\begin{aligned} \psi(x) &= \tilde{\psi}(x) \exp(-a(x)) \\ &= \tilde{\psi}(x) \exp \left( - \int A(x) dx \right) . \end{aligned} \quad (13)$$

## 2.4 Darstellung durch Differentialoperatoren

Zur Konstruktion von eindimensionalen Potentialen bzw. von  $\hat{H}_T$  durch Elemente der  $\mathfrak{sl}(2, \mathbb{R})$  Algebra, müssen die Matrizen  $M_0$  und  $M_{\pm}$  durch Differentialoperatoren dargestellt werden. Da das Doppelmulden-Potential in Kapitel 3 mit ausschließlich geradzahligem Potenzen von  $x$  der einfachste zu konstruierende Fall ist, bietet es sich vorerst an, einen gekrümmten Raum in  $\xi$  mit

$$\xi(x) = x^2$$

zu betrachten. Für allgemeine Potentiale nimmt  $\xi(x)$  beliebige Formen an (vgl. Kap. 4). Des Weiteren wirkt der zu konstruierende Operator  $\hat{H}_T$  nur auf  $\tilde{\psi}(x)$ , sodass die Elemente  $\mathcal{P}_{2j}(\xi(x))^2$  des Darstellungsraums  $\mathfrak{D}$  durch eine Basis aus Monomen  $R_j$  konstruiert werden können, ohne den exponentiellen Faktor von  $\psi(x)$  zu verändern

(s. Kap. 2.3):

$$R_j = \{\xi^0, \xi^1, \xi^2, \dots, \xi^{2j}\} . \quad (14)$$

Die Darstellung der Leiteroperatoren durch Differentialoperatoren, die auf  $\mathcal{P}_{2j}(\xi(x))$  wirken, kann wie folgt erreicht werden:

$$\begin{aligned} \hat{T}_0 &:= -j + \xi \frac{d}{d\xi} , \\ \hat{T}_+ &:= 2j\xi - \xi^2 \frac{d}{d\xi} , \\ \hat{T}_- &:= \frac{d}{d\xi} . \end{aligned} \quad (15)$$

Diese erfüllen die geforderten Vertauschungsrelationen

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

Beweis:

$$\begin{aligned} [\hat{T}_+, \hat{T}_-] &= \left( 2j\xi - \xi^2 \frac{d}{d\xi} \right) \frac{d}{d\xi} - \frac{d}{d\xi} \left( 2j\xi - \xi^2 \frac{d}{d\xi} \right) \\ &= 2j\xi \frac{d}{d\xi} - \xi^2 \frac{d^2}{d\xi^2} - 2j + 2\xi \frac{d}{d\xi} - 2j\xi \frac{d}{d\xi} + \xi^2 \frac{d^2}{d\xi^2} \\ &= -2j + 2\xi \frac{d}{d\xi} \\ &= 2\hat{T}_0 \end{aligned}$$

<sup>2</sup> Die Notation  $\mathcal{P}_{2j}(\xi)$  bezeichnet hier ein Polynome des Grades  $2j$  in  $\xi$ . Der halbzahlige Parameter  $j$  wird in der folgenden Betrachtung die Anzahl der exakt lösbarer Zustände festlegen (s. Kap. 2.5)

$$\begin{aligned}
[\hat{T}_+, \hat{T}_0] &= \left(2j\xi - \xi^2 \frac{d}{d\xi}\right) \left(-j + \xi \frac{d}{d\xi}\right) - \left(-j + \xi \frac{d}{d\xi}\right) \left(2j\xi - \xi^2 \frac{d}{d\xi}\right) \\
&= -2j^2\xi + 2j\xi^2 \frac{d}{d\xi} + j\xi^2 \frac{d}{d\xi} - \xi^2 \frac{d}{d\xi} - \xi^3 \frac{d^2}{d\xi^2} \\
&\quad + 2j^2\xi - j\xi^2 \frac{d}{d\xi} - 2j\xi - 2j\xi^2 \frac{d}{d\xi} + 2\xi^2 \frac{d}{d\xi} + \xi^3 \frac{d}{d\xi} \\
&= -2j\xi + \xi^2 \frac{d}{d\xi} \\
&= -\hat{T}_+ \\
[\hat{T}_-, \hat{T}_0] &= \frac{d}{d\xi} \left(\xi \frac{d}{d\xi} - j\right) - \left(\xi \frac{d}{d\xi} - j\right) \frac{d}{d\xi} \\
&= \frac{d}{d\xi} + \xi \frac{d^2}{d\xi^2} - j \frac{d}{d\xi} - \xi \frac{d^2}{d\xi^2} + j \frac{d}{d\xi} \\
&= \frac{d}{d\xi} \\
&= +\hat{T}_-
\end{aligned}$$

□

Die Elemente  $\mathcal{P}_{2j}(\xi(x)) \in \mathfrak{D}$  sind Polynome des Grades  $2j$  in  $\xi$ :

$$\mathcal{P}_{2j}(\xi(x)) = \sum_i^{2j} c_i \xi^i \left( = \sum_i^{2j} c_i x^{2i} \right).$$

Diese sind für die betrachteten Beispiele symmetrisch in  $x$  und entsprechen daher geraden Wellenfunktionen  $\tilde{\psi}(x)$ . Des Weiteren bestimmen die Polynome die physikalisch relevanten Nullstellen der Gesamtwellenfunktion  $\psi(x)$ . Diese hat damit im Allgemeinen damit  $2j$  Nullstellen in  $\xi$ . Die ungeraden Zustände ergeben sich im Späteren durch eine geeignete Wahl von  $a(x)$  (vgl. (13) bzw. Kap. 4.1.2).

Der Raum  $\mathfrak{D}$  ist darüber hinaus gegenüber den Operatoren  $\hat{T}_{0,+,-}$  geschlossen.

Beweis:

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

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

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

□

Betrachtet man die Operatoren in Matrix-Darstellung ergibt sich:

$$\begin{aligned}
T_0 &= \begin{pmatrix} j & 0 & & & \dots & 0 \\ 0 & j-1 & 0 & & \dots & 0 \\ 0 & 0 & j-2 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \dots & 0 & \dots & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \dots & & 0 & 2-j & 0 & 0 \\ 0 & \dots & & & 0 & 1-j & 0 \\ 0 & \dots & & & & 0 & -j \end{pmatrix} \\
T_+ &= \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 2 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \dots & 0 & \dots & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \dots & & 0 & 2j-2 & 0 & 0 \\ 0 & \dots & & & 0 & 2j-1 & 0 \\ 0 & \dots & & & & 0 & 2j \\ 0 & \dots & & & & & 0 \end{pmatrix} \\
T_- &= \begin{pmatrix} 0 & & & & \dots & 0 \\ 2j & 0 & & & \dots & 0 \\ 0 & 2j-1 & 0 & & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 2j-2 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \dots & 0 & \dots & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \dots & & 0 & 2 & 0 & 0 \\ 0 & \dots & & & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (16)
\end{aligned}$$

Diese Matrizen wirken auf einen Vektorraum der Dimension  $2j+1$ . Die Komponenten der entsprechenden Vektoren sind durch die Koeffizienten  $c_i$  gegeben:

$$\vec{P}_{2j} = \begin{pmatrix} c_{2j} \\ c_{2j-1} \\ c_{2j-2} \\ \vdots \\ c_2 \\ c_1 \\ c_0 \end{pmatrix} \quad (17)$$

## 2.5 Konstruktion von Hamilton-Operatoren

Konstruiert man eine Hamilton-Matrix<sup>3</sup>  $H_T$  durch die Matrizen  $T_{0,+,-}$  derart, dass

$$H_T = \sum_{\alpha,\beta} d_{\alpha,\beta} T_\alpha T_\beta + \sum_{\gamma} d_\gamma T_\gamma \quad (18)$$

$$\text{mit: } d_{\alpha,\beta}, d_\gamma \in \mathbb{R} ,$$

führt dies auf ein Eigenwertproblem

$$\begin{aligned} H_T \vec{P}_{2j} &= E \vec{P}_{2j} \\ \Rightarrow \det(H_T - E\mathbf{1}) &= 0 , \end{aligned} \quad (19)$$

dessen  $2j + 1$  Eigenwerte exakt lösbar sind [1] und den gesuchten Energien  $E$  (vgl. (3)) entsprechen. Die zugehörigen Eigenvektoren  $\vec{P}_{2j}$  liefern die Koeffizienten für die Polynome  $\mathcal{P}_{2j}(\xi(x))$  bzw.  $\tilde{\psi}(x)$ . Eine weitere Untersuchung des Hamilton-Operators nach Gleichung (11) liefert schlussendlich die Wellenfunktion  $\psi(x)$  (s. (13)).

Der Zusammenhang zwischen dem konstruierten Hamilton-Operator  $\hat{H}_T$  und dem allgemeinen Operator  $\hat{H}$  (vgl. Kap. 2.3), deren  $2j + 1$  exakt lösbare Eigenwerte übereinstimmen, ist durch eine Blockstruktur der unendlich dimensionalen Matrix  $H$  zu verstehen. Diese Struktur resultiert direkt aus der Konstruktion gemäß Gleichung (18) und kann durch folgendes Schema dargestellt werden [1]:

$$H = \left( \begin{array}{ccc|cc} h_{11} & \cdots & h_{1N} & 0 & \cdots \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \cdots \\ h_{N1} & \cdots & h_{NN} & 0 & \cdots \\ \hline 0 & \cdots & 0 & H_R & \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \end{array} \right) \quad (20)$$

$$\text{mit: } N = 2j + 1$$

Die konstruierten Hamilton-Operatoren bzw. -Matrizen  $H_T$  entsprechen in dieser Darstellung der oberen Teilmatrix mit der Dimension  $(2j + 1) \times (2j + 1)$ . Die nicht-verschwindene Teilmatrix  $H_R$  repräsentiert die übrigen nicht-exakt lösbaren Zustände des Systems.

<sup>3</sup>  $H_T$  ist die zugehörige Matrix-Darstellung zum Operator  $\hat{H}_T$ . Der Index  $T$  kennzeichnet die exakt lösbare Teilmatrix der unendlich dimensionalen Gesamtmatrix  $H$ . Die Koeffizienten  $d_{\alpha,\beta}$  bzw.  $d_\gamma$  sind bei der Konstruktion spezifisch durch die jeweilige Problemstellung gegeben.

Um die gewonnenen Erkenntnisse bezüglich der  $\mathfrak{sl}(2, \mathbb{R})$  und der Darstellung durch Differenzialoperatoren für einen expliziten Hamilton-Operator der gewünschten Form (vgl. (11)) nutzbar zu machen, wird zunächst der Impulsterm  $-\frac{d^2}{dx^2}$  für den einfachsten Fall  $\xi(x) = x^2$  durch die Operatoren  $\hat{T}_{0,+,-}$  ausgedrückt:

$$-\frac{d^2}{dx^2} = -4\xi \frac{d^2}{d\xi^2} - 2\frac{d}{d\xi} = -4\hat{T}_0\hat{T}_- - 2(2j+1)\hat{T}_- \quad (21)$$

Beweis:

$$\begin{aligned} -4\hat{T}_0\hat{T}_- - 2(2j+1)\hat{T}_- &= \left( \xi \frac{d}{d\xi} - j \right) \frac{d}{d\xi} - 4j \frac{d}{d\xi} - 2\frac{d}{d\xi} \\ &= -4\xi \frac{d^2}{d\xi^2} + 4j \frac{d}{d\xi} - 4j \frac{d}{d\xi} - 2\frac{d}{d\xi} \\ &= -2\frac{d}{d\xi} - 4\xi \frac{d^2}{d\xi^2} \end{aligned} \quad (22)$$

$$\begin{aligned} \frac{d}{dx} &= \frac{d\xi}{dx} \frac{d}{d\xi} = 2x \frac{d}{d\xi} \\ \Rightarrow -\frac{d^2}{dx^2} &= -\frac{d}{dx} \left( 2x \frac{d}{d\xi} \right) \\ &= -\frac{d}{dx} (2x) \frac{d}{d\xi} - 2x \frac{d}{dx} \frac{d}{d\xi} \\ &= -2\frac{d}{d\xi} - 2x \left( 2x \frac{d^2}{d\xi^2} \right) \\ &= -2\frac{d}{d\xi} - 4\xi \frac{d^2}{d\xi^2} \end{aligned} \quad (23)$$

$$(22), (23) \Rightarrow (21)$$

□

Der Operator  $\hat{H}_T$  nimmt für  $\xi(x) = x^2$  damit die allgemeine Form

$$\boxed{\hat{H}_T = -4\hat{T}_0\hat{T}_- - 2(2j+1)\hat{T}_- + 2A(x)\frac{d}{dx} + \Delta V(x)} \quad (24)$$

an. Der Term  $2A(x)\frac{d}{dx} + \Delta V(x) := \tilde{V}$  kann durch eine geeignete Linearkombination von  $\hat{T}_{0,+,-}$  konstruiert werden (vgl. Kap. 3.1 bzw. 4.1).



## 2.6 Einschub: Lösung von Gleichungen $(2j+1)$ ten Grades

Die Bestimmung der Eigenwerte der  $H_T$  Matrix führt über die Determinante zu einem Polynom vom Grad  $2j + 1$ . Theoretisch kann dieses Polynom  $\forall j$  entweder analytisch oder numerisch beliebig genau gelöst werden:

(i)  $j = \frac{1}{2}$

Der Fall  $j = \frac{1}{2}$  führt auf ein Polynom 2. Grades. Die Gleichung

$$aE^2 + bE + c = 0$$

wird zunächst durch die reduzierte Form

$$E^2 + pE + q = 0$$

mit:  $p = \frac{b}{a}$      $q = \frac{c}{a}$

umgeformt, sodass die Lösungen durch

$$\boxed{E_{1,2} = -\frac{p}{2} \pm \sqrt{\frac{p^2}{4} - q}} \quad (25)$$

gegeben sind [2].

(ii)  $j = 1$

Der Fall  $j = 1$  führt auf ein Polynom 3. Grades, dessen Lösung über die Formeln von Cardano erreicht werden kann. Die Gleichung

$$aE^3 + bE^2 + cE + d = 0$$

kann analog zu (i) und durch die Substitution  $\varepsilon = E + \frac{b}{3a}$  in die reduzierte Form überführt werden:

$$\varepsilon^3 + 3p\varepsilon + 2q = 0 \quad (26)$$

$$\text{mit: } 3p = \frac{3ac - b^2}{3a^2} \quad 2q = \frac{2b^3}{27a^3} - \frac{bc}{3a^2} + \frac{d}{a}.$$

Durch eine weitere Substitution  $\varepsilon = u + v$  geht Gleichung 24 in

$$u^3 + v^3 + (u + v)(3uv + 3p) + 2q = 0 \quad (27)$$

über. Diese Gleichung ist erfüllt für:

$$u^3 + v^3 = -2q \quad \text{und} \quad uv = -p \Leftrightarrow u^3v^3 = -p^3. \quad (28)$$

Über den Vietaschen Wurzelsatz [2] folgt daraus:

$$u^3 = -q + \sqrt{q^2 + p^3} \quad \text{und} \quad v^3 = -q - \sqrt{q^2 + p^3}$$

bzw:

$$\varepsilon = u + v = \sqrt[3]{-q + \sqrt{q^2 + p^3}} + \sqrt[3]{-q - \sqrt{q^2 + p^3}}.$$

Die neun auftretenden Lösungen für  $\varepsilon$  reduzieren sich wegen  $uv = -p$  auf:

$\varepsilon_1 = u + v \quad \text{mit:}$ $\varepsilon_2 = u \left( -\frac{1}{2} + \frac{i}{2}\sqrt{3} \right) + v \left( -\frac{1}{2} - \frac{i}{2}\sqrt{3} \right)$ $\varepsilon_3 = u \left( -\frac{1}{2} - \frac{i}{2}\sqrt{3} \right) + v \left( -\frac{1}{2} + \frac{i}{2}\sqrt{3} \right)$	$(29)$
<p>mit: <math>u, v \in \mathbb{C}.</math></p>	$(30)$

Diese Lösungen nehmen je nach Vorzeichen der Diskriminate  $D = q^2 + p^3$

- a) eine reelle und zwei komplexe Werte (für  $D > 0$ )
- b) drei reelle Werte (für  $D < 0$ )
- c) einen dreifachen reellen Wert (für  $D = 0$ )

an. In der späteren Berechnung der Eigenwerte über das charakteristische Polynom, wird sich zeigen, dass stets  $D < 0$  gelten muss, um physikalisch sinnvolle Eigenwerte zu erhalten und eine Entartung auszuschließen. Eine analoge Betrachtung gilt auch für den Radikanden in (i).

(iii)  $j \geq \frac{3}{2}$

Die Fälle  $j \geq \frac{3}{2}$  führen analog auf Gleichungen vierten oder höheren Grades. Gleichungen vierten Grades sind über bekannte zu (ii) analoge Verfahren lösbar. Gleichungen fünften oder höheren Grades können im Allgemeinen nur durch Näherungsverfahren behandelt werden [2].

Die allgemeine Bestimmung der Eigenwerte von  $H_T$  und somit die Berechnung der möglichen Energieniveaus im jeweiligen Potential wird im Rahmen dieser Arbeit exemplarisch bis zum Fall (ii) durchgeführt, da die (numerische) Lösung der auftretenden Gleichungen nicht schwerpunktmäßig betrachtet werden soll. Dennoch werden Spezialfälle auch für  $j > 1$  nähergehend untersucht.

Mit den in den vorherigen Kapiteln behandelten mathematischen Grundlagen ist es nun möglich beliebige Potentiale zu konstruieren und auszuwerten.

### 3 Eindimensionaler anharmonischer Oszillator im $x^6$ -Potential

#### 3.1 Konstruktion von Hamilton-Operator & Potential

In den Kapiteln 2.3 und 2.5 wird über die imaginäre Phasentransformation und mithilfe der Operatoren  $\hat{T}_{0,+,-}$  eine allgemeine Form für mögliche Hamilton-Operatoren  $\hat{H}_T$  gefunden (vgl. (11)). Der verbleibende Term  $\tilde{V}$  kann über verschiedene Linearkombinationen von  $\hat{T}_{0,+,-}$  dargestellt werden und beliebige Formen annehmen.

Um die Konstruktion von Potentialen  $V(\xi)$  bzw.  $V(x)$  anschaulich zu realisieren, empfiehlt es sich, zunächst den einfachsten Fall zu betrachten. Dieser führt auf einen anharmonischen Oszillator dessen Potential Terme  $\propto x^6$  enthält. Das so konstruierte Doppelmuldenpotential dient beispielsweise als einfaches Modell zur Beschreibung einiger Moleküle. Ein Beispiel hierfür ist das Ammoniak-Molekül  $\text{NH}_3$ , das in Masern (*Microwave Amplification by Stimulated Emission of Radiation*) eingesetzt wird [4].

##### 3.1.1 Gerade Zustände

Eine einfache Konstruktion von  $\tilde{V} = 2A(x)\frac{d}{dx} + \Delta V$  ergibt sich beispielsweise durch die Wahl:

$$\tilde{V}_g = 2A_g(x)\frac{d}{dx} + \Delta V_g(x) = -4\nu\hat{T}_+ + 4\mu\hat{T}_0 \quad (31)$$

mit:  $\nu, \mu \in \mathbb{R}, \quad \nu, \mu \geq 0$ .

Über die Definition (15) ergibt sich:

$$\tilde{V}_g = -4\nu \left( 2j\xi - \xi^2 \frac{d}{d\xi} \right) + 4\mu \left( -j + \xi \frac{d}{d\xi} \right)$$

und mit  $\xi(x) = x^2$  bzw.  $\frac{d}{d\xi} = \frac{1}{2x} \frac{d}{dx}$ :

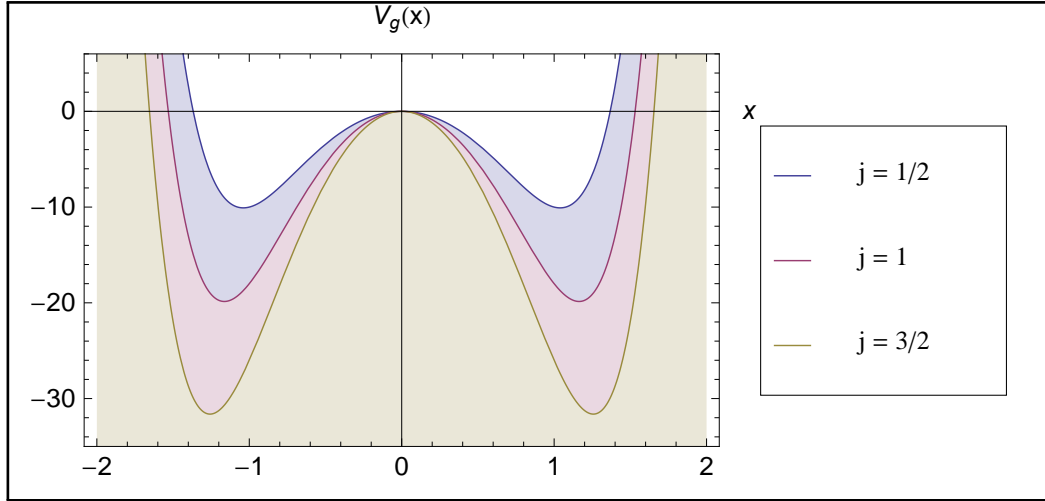
$$\begin{aligned} \tilde{V}_g &= -4\nu \left( 2jx^2 - \frac{x^4}{2x} \frac{d}{dx} \right) + 4\mu \left( -j + \frac{x^2}{2x} \frac{d}{dx} \right) \\ &= 2 \underbrace{(\nu x^3 + \mu x)}_{A_g(x)} \frac{d}{dx} + \underbrace{(-8\nu j x^2 - 4\mu j)}_{\Delta V_g(x)} \end{aligned} \quad (32)$$

(vgl. (31)). Das zugehörige Potential  $V_g(x)$  wird damit nach Gleichung (12) zu:

$$\begin{aligned} V_g(x) &= \Delta V_g(x) - A'_g(x) + A_g^2(x) \\ &= -8\nu j x^2 - 4\mu j - 3\nu x^2 - \mu + (\nu x^3 + \mu x)^2 \\ &= -8\nu j x^2 - 4\mu j - 3\nu x^2 - \mu + \nu^2 x^6 + 2\nu\mu x^4 + \mu^2 x^2 \end{aligned}$$

$$V_g(x) = \nu^2 x^6 + 2\nu\mu x^4 + [\mu^2 - \nu(8j + 3)]x^2 - \mu(1 + 4j) \quad (33)$$

Wählt man  $\nu = 0$ , erhält man den Trivialfall des harmonischen Oszillators. In Abbildung 1 wird das Verhalten für verschiedene Werte für  $j$  deutlich.

Abbildung 1:  $V_g(x)$  mit  $\mu = 0$ ,  $\nu = 2$  und  $j = \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}$ 

Der Hamilton-Operator ist mit (31) gegeben durch:

$$\hat{H}_{T,g} = -4\hat{T}_0\hat{T}_- - 2(2j+1)\hat{T}_- - 4\nu\hat{T}_+ + 4\mu\hat{T}_0. \quad (34)$$

In der Matrix-Darstellung wird dieser ausgehend von (16) zu:

$$\begin{aligned} H_{T,g} = & -4 \begin{pmatrix} 0 & & & & & & \dots & 0 \\ 2j(j-1) & 0 & & & & & \dots & 0 \\ 0 & (2j-1)(j-2) & 0 & & & & \dots & 0 \\ 0 & 0 & (2j-2)(j-3) & 0 & & & \dots & 0 \\ 0 & \dots & 0 & \dots & 0 & & \dots & 0 \\ 0 & \dots & \dots & 0 & 2(1-j) & & \dots & 0 \\ 0 & \dots & \dots & \dots & 0 & -j & \dots & 0 \end{pmatrix} \\ & -2(2j+1) \begin{pmatrix} 0 & & & & & & \dots & 0 \\ 2j & 0 & & & & & \dots & 0 \\ 0 & 2j-1 & 0 & & & & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 2j-2 & 0 & & & \dots & 0 \\ 0 & \dots & 0 & \dots & 0 & & \dots & 0 \\ 0 & \dots & \dots & 0 & 2 & & \dots & 0 \\ 0 & \dots & \dots & \dots & 0 & 1 & \dots & 0 \end{pmatrix} \\ & -4\nu \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & & & & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 2 & 0 & & & \dots & 0 \\ 0 & \dots & 0 & \dots & & & \dots & 0 \\ 0 & \dots & \dots & 0 & 2j-2 & & \dots & 0 \\ 0 & \dots & \dots & \dots & 0 & 2j-1 & \dots & 0 \\ 0 & \dots & \dots & \dots & \dots & 0 & \dots & 2j \\ 0 & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & 0 \end{pmatrix} \\ & +4\mu \begin{pmatrix} j & 0 & & & & & \dots & 0 \\ 0 & j-1 & 0 & & & & \dots & 0 \\ 0 & 0 & j-2 & 0 & & & \dots & 0 \\ 0 & \dots & 0 & \dots & & & \dots & 0 \\ 0 & \dots & \dots & 0 & 2-j & & \dots & 0 \\ 0 & \dots & \dots & \dots & 0 & 1-j & \dots & 0 \\ 0 & \dots & \dots & \dots & \dots & 0 & \dots & -j \end{pmatrix} \\ \rightarrow H_{T,g} = & \begin{pmatrix} 4\mu j & -4\nu & 0 & & & & \dots & 0 \\ 4j(1-4j) & 4\mu(j-1) & -8\nu & 0 & & & \dots & 0 \\ 0 & 4j(5-4j)-6 & 4\mu(j-2) & \dots & 0 & & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 4j(9-4j)-20 & \dots & 4\nu(2-2j) & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \dots & 0 & \dots & 4\mu(2-j) & 4\nu(1-2j) & \dots & 0 \\ 0 & \dots & \dots & 0 & -12 & 4\mu(1-j) & \dots & -8\nu j \\ 0 & \dots & \dots & \dots & 0 & -2 & \dots & -4\mu j \end{pmatrix} \quad (35) \end{aligned}$$

Die Dimension von  $H_{T,g}$  beträgt  $(2j+1) \times (2j+1)$ . Die Wellenfunktionen sind nach Gleichung (13) gegeben durch:

$$\psi_g(x) = \tilde{\psi}(x) \exp\left(-\int A_g(x) dx\right)$$

$$\rightarrow \boxed{\psi_g(x) = \mathcal{P}_{2j}(x^2) \exp\left(-\frac{1}{4}\nu x^4 - \frac{1}{2}\mu x^2 + \text{const.}\right)}. \quad (36)$$

Diese Wellenfunktionen sind offenbar symmetrisch in  $x$ . Die Konstruktion der ungeraden Wellenfunktionen erfordert eine Anpassung des entsprechenden Hamilton-Operators.

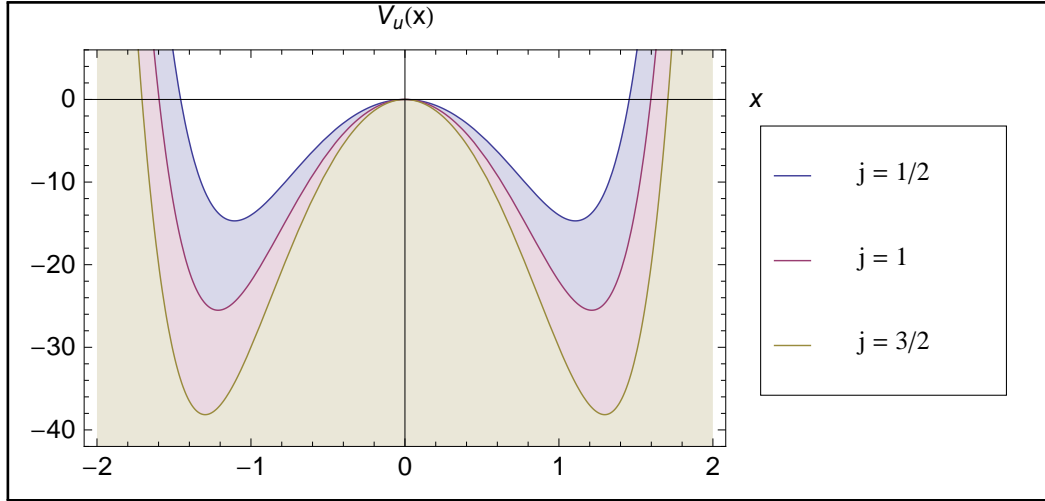
### 3.1.2 Ungerade Zustände

Die Herleitung der ungeraden Wellenfunktionen erfolgt über eine Modifikation der „Phase“  $a(x)$ . Fügt man dem Term  $\tilde{V}_g$  eine Komponente  $-4\hat{T}_-$  hinzu, verhält sich das Potential wie folgt:

$$\begin{aligned} \tilde{V}_u &= \tilde{V}_g - 4\hat{T}_- \\ &= -4\nu\hat{T}_+ + 4\mu\hat{T}_0 - 4\hat{T}_- \\ &= -4\nu\left(2jx^2 - \frac{x^4}{2x} \frac{d}{dx}\right) + 4\mu\left(-j + \frac{x^2}{2x} \frac{d}{dx}\right) - \frac{2}{x} \frac{d}{dx} \\ \tilde{V}_u &= 2 \underbrace{\left(\nu x^3 + \mu x - \frac{1}{x}\right)}_{A_u(x)} \frac{d}{dx} + \underbrace{(-8\nu j x^2 - 4\mu j)}_{\Delta V_u(x)} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow V_u(x) &= \Delta V_u(x) - A'_u(x) + A_u^2(x) \\ &= -8\nu j x^2 - 4\mu j - 3\nu x^2 - \mu - \frac{1}{x^2} + \left(\nu x^3 + \mu x - \frac{1}{x}\right)^2 \\ &= -8\nu j x^2 - 4\mu j - 3\nu x^2 - \mu - \frac{1}{x^2} + \nu^2 x^6 + \nu\mu x^4 \\ &\quad - \nu x^2 + \mu\nu x^4 + \mu^2 x^2 - \mu - \nu x^2 - \mu + \frac{1}{x^2} \end{aligned}$$

$$\rightarrow \boxed{V_u(x) = \nu^2 x^6 + 2\nu\mu x^4 + [\mu^2 - \nu(8j+5)]x^2 - \mu(3+4j)} \quad (37)$$

Abbildung 2:  $V_u(x)$  mit  $\mu = 0$ ,  $\nu = 2$  und  $j = \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}$ 

Im Vergleich zu Abbildung 1 wird deutlich, dass  $V_g(x)$  und  $V_u(x)$  die gleiche Form aufweisen, das Potential  $V_u(x)$  für die ungeraden Zustände allerdings „tiefer“ ist. Des Weiteren machen die Gleichungen (33) und (38) deutlich, dass es nicht möglich ist, gerade und ungerade Zustände für ein Potential zu bestimmen. Dies gilt  $\forall \mu, \nu, j$ . Der Hamilton-Operator für die ungeraden Zustände ist gegeben durch:

$$\hat{H}_{T,u} = -4\hat{T}_0\hat{T}_- - 2(2j+1)\hat{T}_- - 4\nu\hat{T}_+ + 4\mu\hat{T}_0 - 2\hat{T}_- . \quad (38)$$

In der Matrix-Darstellung nimmt dieser analog zu (35) folgende Form an:

$$\begin{aligned}
 H_{T,u} &= H_{T,g} - 4T_- \\
 &= \begin{pmatrix} 4\mu j & -4\nu & 0 & \dots & 0 \\ 4j(1-4j) & 4\mu(j-1) & -8\nu & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 4j(5-4j)-6 & 4\mu(j-2) & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 4j(9-4j)-20 & \dots & 4\nu(2-2j) & 0 \\ 0 & \dots & 0 & \dots & 4\mu(2-j) & 4\nu(1-2j) \\ 0 & \dots & \dots & 0 & -12 & 4\mu(1-j) & -8\nu j \\ 0 & \dots & \dots & \dots & 0 & -2 & -4\mu j \end{pmatrix} \\
 &\quad - 4 \begin{pmatrix} 0 & \dots & \dots & \dots & 0 \\ 2j & 0 & \dots & \dots & 0 \\ 0 & 2j-1 & \dots & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 2j-2 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \dots & 0 & \dots & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \dots & \dots & 0 & 2 & 0 & 0 \\ 0 & \dots & \dots & 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \\
 \rightarrow H_{T,u} &= \begin{pmatrix} 4\mu j & -4\nu & 0 & \dots & 0 \\ -4j(4j+1) & 4\mu(j-1) & -8\nu & 0 & \dots & 0 \\ 0 & -4j(4j-3)-2 & 4\mu(j-2) & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -4j(4j-7)-12 & \dots & 4\nu(2-2j) & 0 \\ 0 & \dots & 0 & \dots & 4\mu(2-j) & 4\nu(1-2j) \\ 0 & \dots & \dots & 0 & -20 & 4\mu(1-j) & -8\nu j \\ 0 & \dots & \dots & \dots & 0 & -6 & -4\mu j \end{pmatrix}
 \end{aligned} \quad (39)$$

Die Wellenfunktionen ergeben sich nun zu:

$$\begin{aligned}\psi_u(x) &= \tilde{\psi}(x) \exp\left(-\int A_u(x) dx\right) \\ &= \mathcal{P}_{2j}(x^2) \exp\left(-\frac{1}{4}\nu x^4 - \frac{1}{2}\mu x^2 + \ln(x) + \text{const.}\right) \\ \rightarrow \boxed{\psi_u(x) &= \mathcal{P}_{2j}(x^2) x \exp\left(-\frac{1}{4}\nu x^4 - \frac{1}{2}\mu x^2 + \text{const.}\right)} .\end{aligned}\quad (40)$$

Diese sind antisymmetrisch in  $x$ .

### 3.2 Lösung der Schrödingergleichung für allgemeine Parameter $\mu$ und $\nu$

Um die Energieniveaus  $E$  und die zugehörigen Wellenfunktionen  $\psi(x)$  für verschiedene Werte von  $j$  zu berechnen, muss die stationäre Schrödingergleichung (3) für die jeweiligen Hamilton-Operatoren  $H_T$  gelöst werden (vgl. Kap. 2.5). Dies führt auf die Gleichung:

$$H_T \vec{P}_{2j} = E \vec{P}_{2j} , \quad (41)$$

aus der die Eigenwerte  $E$  und Eigenvektoren  $\vec{P}_{2j}$  gewonnen werden können.

#### 3.2.1 Fall: $j = \frac{1}{2}$

Wählt man den Parameter  $j = \frac{1}{2}$ , entspricht der Hamilton-Operator in Matrix-Darstellung einer  $2 \times 2$ -Matrix. Für die geraden Zustände nimmt dieser folgende explizite Gestalt an:

$$H_{T,g} = \begin{pmatrix} 2\mu & -4\nu \\ -2 & -2\mu \end{pmatrix} . \quad (42)$$

Die Eigenwertgleichung für diese Matrix ist dann durch

$$\det(H_{T,g} - E\mathbf{1}) = 0 \quad (43)$$

gegeben. Das charakteristische Polynom berechnet sich über die Regel von Sarrus [2]:

$$\begin{aligned} & - (2\mu - E^{(g)}) (2\mu + E^{(g)}) - 8\nu = 0 \\ \Leftrightarrow & \quad - (4\mu^2 - (E^{(g)})^2) - 8\nu = 0 \\ \Leftrightarrow & \quad (E^{(g)})^2 - 8\nu - 4\mu^2 = 0 .\end{aligned}\quad (44)$$

Die Eigenwerte<sup>4</sup> ergeben sich damit nach Gleichung (25) mit  $p = 0$  und  $q = -(8\nu + 4\mu^2)$  zu:

$$E_{1,2}^{(g)} = \mp \sqrt{8\nu + 4\mu^2}$$

$$\rightarrow \boxed{E_{1,2}^{(g)} = \mp 2\sqrt{2\nu + \mu^2} .} \quad (45)$$

Die Eigenvektoren sind dann wie folgt gegeben:

$$\vec{P}_{1,2}^{(g)} = \begin{pmatrix} -\mu - \frac{1}{2}E_{1,2}^{(g)} \\ 1 \end{pmatrix} \quad (46)$$

Beweis:

$$\begin{aligned} 0 &\stackrel{!}{=} \left( H_{T,g} - E_{1,2}^{(g)} \mathbf{1} \right) \cdot \vec{P}_{1,2}^{(g)} \\ &= \begin{pmatrix} 2\mu - E_{1,2}^{(g)} & -4\nu \\ -2 & -2\mu - E_{1,2}^{(g)} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} -\mu - \frac{1}{2}E_{1,2}^{(g)} \\ 1 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} -2\mu^2 - \mu E_{1,2}^{(g)} + \mu E_{1,2}^{(g)} + \frac{1}{2}(E_{1,2}^{(g)})^2 - 4\nu \\ 2\mu + E_{1,2}^{(g)} - 2\mu - E_{1,2}^{(g)} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} -2\mu^2 + 2(2\nu + \mu^2) - 4\nu \\ 0 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (47)$$

□

Wie in Kapitel 2.5 beschrieben, liefern die Komponenten der Eigenvektoren  $\vec{P}_{1,2}$  die Koeffizienten für die Polynome  $\mathcal{P}_{1,2}(x^2)$ . Aus Gleichung (36) folgen also unmittelbar die Wellenfunktionen  $\psi_{1,2}(x)$ :

$$\psi_{1,2}^{(g)}(x) = \left[ 1 + \left( -\mu - \frac{1}{2}E_{1,2}^{(g)} \right) x^2 \right] \exp \left( -\frac{1}{4}\nu x^4 - \frac{1}{2}\mu x^2 + \text{const.} \right) .$$

$$\rightarrow \boxed{\psi_{1,2}^{(g)}(x) = \left[ 1 + \left( -\mu \pm \sqrt{2\nu + \mu^2} \right) x^2 \right] \exp \left( -\frac{1}{4}\nu x^4 - \frac{1}{2}\mu x^2 \right)} \quad (48)$$

Der konstante Faktor  $\exp(\text{const.})$  verändert die Aufenthaltswahrscheinlichkeit nicht und wird daher vernachlässigt. Mit  $\mu = 0$  und  $\nu = 2$  nehmen die Wellenfunktionen und Energiewerte folgende Form an:

$$\psi_{1,2}^{(g)}(x) = [1 \pm 2x^2] \exp \left( -\frac{1}{2}x^4 \right)$$

$$E_{1,2}^{(g)} = \mp 4 .$$

<sup>4</sup> Die Nummerierung der Zustände im Index bezieht sich nicht auf die eigentliche Quantenzahl  $n$ , sondern lediglich auf die energetische festgelegte Reihenfolge der Zustände.



Die Wahl  $\mu = 0$  bedeutet im Wesentlichen eine Verschiebung des Potentials, verändert seine Doppelmuldenform allerdings nur unwesentlich (vgl. (33) bzw. Abb. 1), was diesen Fall in den Plots repräsentativ für  $\mu \neq 0$  stehen lässt.

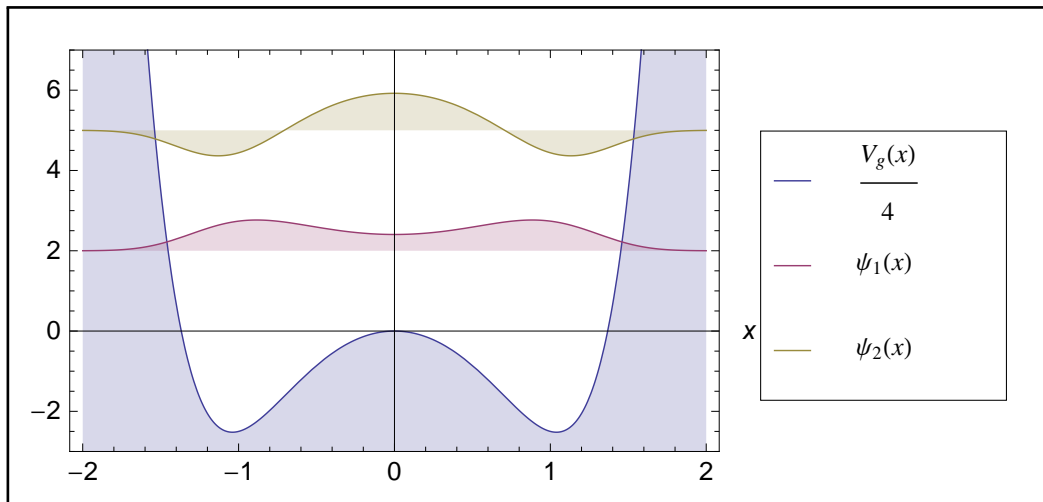


Abbildung 3: Skizze  $V_g(x)$  und numerisch normierte  $\psi_{1,2}^{(g)}(x)$  mit  $\mu = 0$   $\nu = 2$  und  $j = \frac{1}{2}$

Das Potential ist in diesem Plot so wie in allen folgenden der Übersicht wegen herunterskaliert. Des Weiteren wird auf eine Beschriftung der Ordinate verzichtet, da Potential und Wellenfunktion ohnehin verschiedene Einheiten besitzen.

Analog zu (42) ergibt sich der Hamilton-Operator für die ungeraden Zustände:

$$H_{T,u} = \begin{pmatrix} 2\mu & -4\nu \\ -6 & -2\mu \end{pmatrix}. \quad (49)$$

Damit wird das charakteristische Polynom zu:

$$\begin{aligned} & -(2\mu - E^{(u)}) (2\mu + E^{(u)}) - 24\nu = 0 \\ \Leftrightarrow & -(4\mu^2 - (E^{(u)})^2) - 24\nu = 0 \\ \Leftrightarrow & (E^{(u)})^2 - 24\nu - 4\mu^2 = 0. \end{aligned} \quad (50)$$

Die zugehörigen Eigenwerte sind also:

$$\boxed{E_{1,2}^{(u)} = \mp 2\sqrt{6\nu + \mu^2}} \quad (51)$$

mit den Eigenvektoren:

$$\vec{P}_{1,2}^{(u)} = \begin{pmatrix} \frac{1}{3} \left( -\mu - \frac{1}{2} E_{1,2}^{(u)} \right) \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (52)$$

Beweis:

$$\begin{aligned}
0 &\stackrel{!}{=} \left( H_{T,u} - E_{1,2}^{(u)} \mathbb{1} \right) \cdot \vec{P}_{1,2}^{(u)} \\
&= \begin{pmatrix} 2\mu - E_{1,2}^{(u)} & -4\nu \\ -6 & -2\mu - E_{1,2}^{(u)} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \frac{1}{3} \left( -\mu - \frac{1}{2} E_{1,2}^{(u)} \right) \\ 1 \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} \frac{1}{3} \left( -2\mu^2 - \mu E_{1,2}^{(u)} + \mu E_{1,2}^{(u)} + \frac{1}{2} (E_{1,2}^{(u)})^2 \right) - 4\nu \\ 2\mu + E_{1,2}^{(u)} - 2\mu - E_{1,2}^{(u)} \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} -\frac{2}{3}\mu^2 + \frac{2}{3}(6\nu + \mu^2) - 4\nu \\ 0 \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}
\end{aligned} \tag{53}$$

□

Aus Gleichung (40) folgt für die Wellenfunktionen:

$$\begin{aligned}
\psi_{1,2}^{(u)}(x) &= x \left[ 1 + \frac{1}{3} \left( -\mu - \frac{1}{2} E_{1,2}^{(u)} \right) x^2 \right] \exp \left( -\frac{1}{4} \nu x^4 - \frac{1}{2} \mu x^2 \right) \\
\rightarrow \psi_{1,2}^{(u)}(x) &= \left[ x + \frac{1}{3} \left( -\mu \pm \sqrt{6\nu + \mu^2} \right) x^3 \right] \exp \left( -\frac{1}{4} \nu x^4 - \frac{1}{2} \mu x^2 \right).
\end{aligned} \tag{54}$$

Mit  $\mu = 0$  und  $\nu = 2$  nehmen die Wellenfunktionen und Energiewerte folgende Form an:

$$\begin{aligned}
\psi_{1,2}^{(u)}(x) &= \left[ x \pm \frac{2}{\sqrt{3}} x^3 \right] \exp \left( -\frac{1}{2} x^4 \right) \\
E_{1,2}^{(u)} &= \mp 4\sqrt{3}
\end{aligned}$$

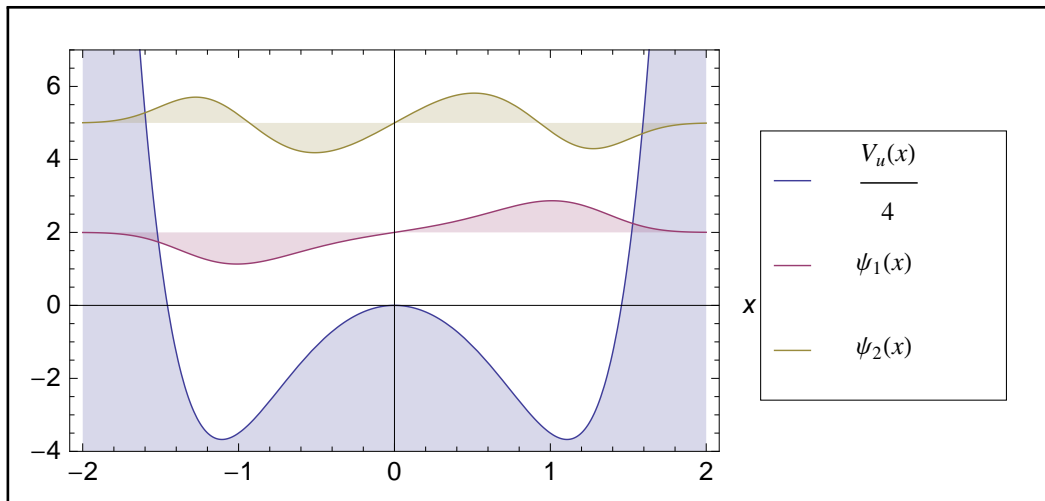


Abbildung 4: Skizze  $V_u(x)$  und numerisch normierte  $\psi_{1,2}^{(u)}(x)$  mit  $\mu = 0$ ,  $\nu = 2$  und  $j = \frac{1}{2}$

**3.2.2 Fall:  $j = 1$** 

Setzt man  $j = 1$ , ergibt sich der Hamilton-Operator durch eine  $3 \times 3$ -Matrix. Für die geraden Zustände ist dieser ausgehend von (35) explizit gegeben durch:

$$H_{T,g} = \begin{pmatrix} 4\mu & -4\nu & 0 \\ -12 & 0 & -8\nu \\ 0 & -2 & -4\mu \end{pmatrix}. \quad (55)$$

Analog zu (44) ergibt sich für die Eigenwertgleichung:

$$\begin{aligned} & (4\mu - E^{(g)}) (-E^{(g)}) (-4\mu - E^{(g)}) - 16\nu (4\mu - E^{(g)}) - 48\nu (-4\mu - E^{(g)}) = 0 \\ \Leftrightarrow & (16\mu^2 - (E^{(g)})^2) E^{(g)} - 64\mu\nu + 16\nu E^{(g)} + 192\mu\nu + 48\nu E^{(g)} = 0 \\ \Leftrightarrow & (E^{(g)})^3 - E^{(g)} (16\mu^2 + 64\nu) + 128\mu\nu = 0 \end{aligned} \quad (56)$$

Nach Gleichung (29) mit  $p = -\left(\frac{16}{3}\mu^2 + \frac{64}{3}\nu\right)$  und  $q = 64\mu\nu$  werden die Eigenwerte dann zu:

$$\begin{aligned} E_1^{(g)} &= u \left( -\frac{1}{2} + \frac{i}{2}\sqrt{3} \right) + v \left( -\frac{1}{2} - \frac{i}{2}\sqrt{3} \right) \\ E_2^{(g)} &= u + v \\ E_3^{(g)} &= u \left( -\frac{1}{2} - \frac{i}{2}\sqrt{3} \right) + v \left( -\frac{1}{2} + \frac{i}{2}\sqrt{3} \right) \end{aligned}$$

mit:

$$u = \sqrt[3]{-64\mu\nu + \sqrt{4096\mu^2\nu^2 - \left(\frac{16}{3}\mu^2 + \frac{64}{3}\nu\right)^3}}$$

$$v = \sqrt[3]{-64\mu\nu - \sqrt{4096\mu^2\nu^2 - \left(\frac{16}{3}\mu^2 + \frac{64}{3}\nu\right)^3}}$$
(57)

mit den zugehörigen Eigenvektoren:

$$\vec{P}_{1,2,3}^{(g)} = \begin{pmatrix} \frac{1}{24} \left( (E_{1,2,3}^{(g)})^2 + 4\mu E_{1,2,3}^{(g)} - 16\nu \right) \\ -\frac{1}{2} \left( E_{1,2,3}^{(g)} + 4\mu \right) \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (58)$$

Die Wellenfunktionen ergeben sich dann zu:

$$\begin{aligned} \psi_{1,2,3}^{(g)}(x) &= \left[ 1 - \frac{1}{2} \left( E_{1,2,3}^{(g)} + 4\mu \right) x^2 + \frac{1}{24} \left( (E_{1,2,3}^{(g)})^2 + 4\mu E_{1,2,3}^{(g)} - 16\nu \right) x^4 \right] \\ &\cdot \exp \left( -\frac{1}{4}\nu x^4 - \frac{1}{2}\mu x^2 \right). \end{aligned} \quad (59)$$

Für den Fall  $\mu = 0$  und  $\nu = 2$  nehmen die Wellenfunktionen und Energiewerte folgende Form an:

$$\begin{aligned}\psi_2^{(g)}(x) &= \left[1 - \frac{4}{3}x^4\right] \exp\left(-\frac{1}{2}x^4\right) \\ \psi_{1,3}^{(g)}(x) &= \left[1 \pm 4\sqrt{2}x^2 + 4x^4\right] \exp\left(-\frac{1}{2}x^4\right) \\ E_2^{(g)} &= 0 \\ E_{1,3}^{(g)} &= \mp 8\sqrt{2}\end{aligned}\tag{60}$$

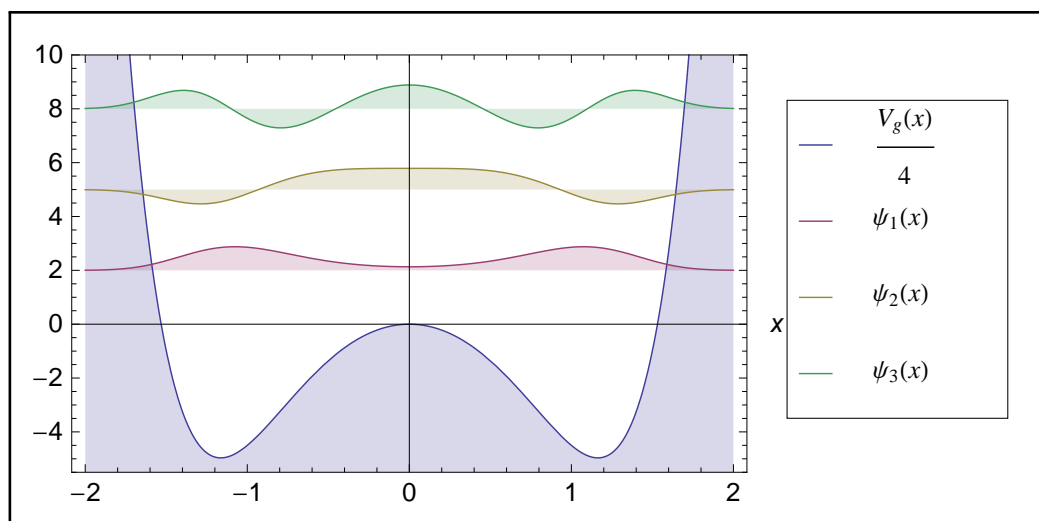


Abbildung 5: Skizze  $V_g(x)$  und numerisch normierte  $\psi_{1,2,3}^{(g)}(x)$  mit  $\mu = 0$   $\nu = 2$  und  $j = 1$

Der Hamilton-Operator mit  $j = 1$  für die ungeraden Zustände ist gegeben durch:

$$H_{T,u} = \begin{pmatrix} 4\mu & -4\nu & 0 \\ -20 & 0 & -8\nu \\ 0 & -6 & -4\mu \end{pmatrix}\tag{61}$$

mit dem charakteristischen Polynom:

$$\begin{aligned}(4\mu - E^{(u)}) (-E^{(u)}) (-4\mu - E^{(u)}) - 48\nu (4\mu - E^{(u)}) - 80\nu (-4\mu - E^{(u)}) &= 0 \\ \Leftrightarrow (16\mu^2 - (E^{(u)})^2) E^{(u)} - 96\mu\nu + 48\nu E^{(u)} + 320\mu\nu + 80\nu E^{(u)} &= 0 \\ \Leftrightarrow (E^{(u)})^3 - E^{(u)} (16\mu^2 + 128\nu) + 128\mu\nu &= 0.\end{aligned}\tag{62}$$

Dieses liefert analog zu Gleichung (57) über Gleichung (29) mit  $p = -\left(\frac{16}{3}\mu^2 + \frac{128}{3}\nu\right)$  und  $q = 64\mu\nu$  die Eigenwerte:

$$\begin{aligned}
 E_1^{(u)} &= u \left( -\frac{1}{2} + \frac{i}{2}\sqrt{3} \right) + v \left( -\frac{1}{2} - \frac{i}{2}\sqrt{3} \right) \\
 E_2^{(u)} &= u + v \\
 E_3^{(u)} &= u \left( -\frac{1}{2} - \frac{i}{2}\sqrt{3} \right) + v \left( -\frac{1}{2} + \frac{i}{2}\sqrt{3} \right)
 \end{aligned}$$

mit:

$$\begin{aligned}
 u &= \sqrt[3]{-64\mu\nu + \sqrt{4096\mu^2\nu^2 - \left(\frac{16}{3}\mu^2 + \frac{128}{3}\nu\right)^3}} \\
 v &= \sqrt[3]{-64\mu\nu - \sqrt{4096\mu^2\nu^2 - \left(\frac{16}{3}\mu^2 + \frac{128}{3}\nu\right)^3}}
 \end{aligned}$$
(63)

mit den Eigenvektoren:

$$\vec{P}_{1,2,3}^{(u)} = \begin{pmatrix} \frac{1}{120} \left( (E_{1,2,3}^{(u)})^2 + 4\mu E_{1,2,3}^{(u)} - 48\nu \right) \\ -\frac{1}{6} \left( E_{1,2,3}^{(u)} + 4\mu \right) \\ 1 \end{pmatrix}.$$
(64)

Damit sind die Wellenfunktionen gegeben durch:

$$\rightarrow \psi_{1,2,3}^{(u)}(x) = \left[ x - \frac{1}{6} \left( E_{1,2,3}^{(u)} + 4\mu \right) x^3 + \frac{1}{120} \left( (E_{1,2,3}^{(u)})^2 + 4\mu E_{1,2,3}^{(u)} - 48\nu \right) x^5 \right] \cdot \exp \left( -\frac{1}{4}\nu x^4 - \frac{1}{2}\mu x^2 \right).$$
(65)

Setzt man wieder  $\mu = 0$  und  $\nu = 2$ , ergibt sich der Spezialfall:

$$\begin{aligned}
 \psi_2^{(u)}(x) &= \left[ x - \frac{4}{5}x^5 \right] \exp \left( -\frac{1}{2}x^4 \right) \\
 \psi_{1,3}^{(u)}(x) &= \left[ x \pm \frac{16}{6}x^3 + \frac{4}{3}x^5 \right] \exp \left( -\frac{1}{2}x^4 \right) \\
 E_2^{(u)} &= 0 \\
 E_{1,3}^{(u)} &= \mp 16
 \end{aligned}$$
(66)

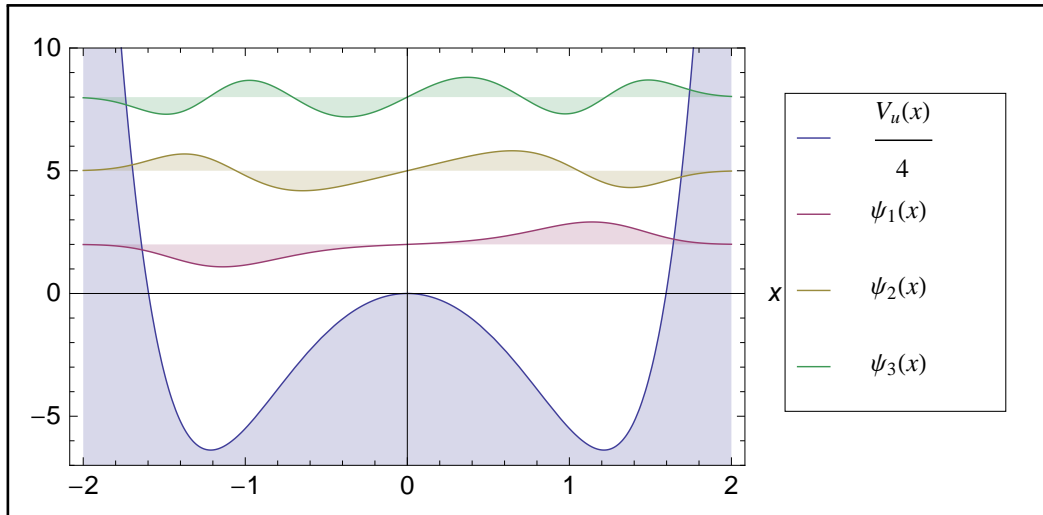


Abbildung 6: Skizze  $V_u(x)$  und numerisch normierte  $\psi_{1,2,3}^{(u)}(x)$  mit  $\mu = 0$   $\nu = 2$  und  $j = 1$

### 3.2.3 Fall: $j = \frac{3}{2}$

Gibt man den Wert  $j = \frac{3}{2}$  vor, wird der Hamilton-Operator durch eine  $4 \times 4$ -Matrix dargestellt. Für die geraden Zustände nimmt diese folgende Gestalt an:

$$H_{T,g} = \begin{pmatrix} 6\mu & -4\nu & 0 & 0 \\ -30 & 2\mu & -8\nu & 0 \\ 0 & -12 & -2\mu & -12\nu \\ 0 & 0 & -2 & -6\mu \end{pmatrix}. \quad (67)$$

Über den Laplac'schen Entwicklungssatz [2] folgt für das charakteristische Polynom:

$$(E^{(g)})^4 - (40\mu^2 + 240\nu)(E^{(g)})^2 - 768\mu\nu E^{(g)} + 144\mu^4 + 1728\mu^2\nu + 2880\nu^2 = 0. \quad (68)$$

Diese Gleichung ist, wie in der Theorie beschrieben, allgemein analytisch lösbar. Exemplarisch für weitere Fälle wird hier ein Spezialfall betrachtet: Für den Fall  $\mu = 0$  fällt das charakteristische Polynom auf folgende Gestalt zurück:

$$(E^{(g)})^4 - 240\nu(E^{(g)})^2 + 2880\nu^2 = 0.$$

Über die Substitution  $z := (E^{(g)})^2$  erhält man:

$$z^2 - 240\nu z + 2880\nu^2 = 0.$$

Wendet man Formel (25) mit  $p = -240\nu$  und  $q = 2880\nu^2$  an, erhält man für  $z$ :

$$\begin{aligned} z_{1,2} &= 120\nu \pm \sqrt{14400\nu^2 - 2880\nu^2} \\ &= (5 \pm 2\sqrt{5}) 24\nu \end{aligned}$$

und nach Rücksubstitution  $E_{1,2}^{(g)} = \pm\sqrt{z}$ :

$$\rightarrow \boxed{\begin{aligned} E_{1,2}^{(g)} &= -2\sqrt{6\nu \left(5 \pm 2\sqrt{5}\right)} \\ E_{3,4}^{(g)} &= +2\sqrt{6\nu \left(5 \mp 2\sqrt{5}\right)}. \end{aligned}} \quad (69)$$

Über die Spezielle Hamiltonmatrix

$$H_{T,g} = \begin{pmatrix} 0 & -4\nu & 0 & 0 \\ -30 & 0 & -8\nu & 0 \\ 0 & -12 & 0 & -12\nu \\ 0 & 0 & -2 & 0 \end{pmatrix}$$

für diesen Fall ergeben sich dann die Eigenvektoren zu:

$$\vec{P}_{1,2,3,4}^{(g)} = \begin{pmatrix} -\frac{\nu}{3\sqrt{5}} E_{1,2,3,4}^{(g)} \\ \frac{1}{24} (E_{1,2,3,4}^{(g)})^2 - \nu \\ -\frac{1}{2} E_{1,2,3,4}^{(g)} \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (70)$$

Die Wellenfunktionen für diesen Spezialfall nehmen damit folgende Form an:

$$\boxed{\begin{aligned} \psi_{1,2,3,4}^{(g)}(x) &= \left[ 1 - \frac{1}{2} E_{1,2,3,4}^{(g)} x^2 + \left( \frac{1}{24} (E_{1,2,3,4}^{(g)})^2 - \nu \right) x^4 - \frac{\nu}{3\sqrt{5}} E_{1,2,3,4}^{(g)} x^6 \right] \\ &\cdot \exp\left(-\frac{1}{4}\nu x^4\right). \end{aligned}} \quad (71)$$

Setzt man beispielsweise  $\nu = 2$  ergeben sich folgende Eigenwerte:

$$\begin{aligned} E_{1,2}^{(g)} &= -4\sqrt{3 \left(5 \pm 2\sqrt{5}\right)} \\ E_{3,4}^{(g)} &= +4\sqrt{3 \left(5 \mp 2\sqrt{5}\right)}. \end{aligned}$$

Damit sind die zugehörigen Wellenfunktionen:

$$\begin{aligned} \psi_{1,2}^{(g)}(x) &= \left[ 1 + 2\sqrt{3(5 \pm 2\sqrt{5})}x^2 + \left( \frac{1}{12}(5 \pm 2\sqrt{5}) - 2 \right)x^4 + \frac{8\sqrt{5 \pm 2\sqrt{5}}}{\sqrt{15}}x^6 \right] \\ &\quad \cdot \exp\left(-\frac{1}{2}x^4\right) \\ \psi_{3,4}^{(g)}(x) &= \left[ 1 - 2\sqrt{3(5 \mp 2\sqrt{5})}x^2 + \left( \frac{1}{12}(5 \mp 2\sqrt{5}) - 2 \right)x^4 - \frac{8\sqrt{5 \mp 2\sqrt{5}}}{\sqrt{15}}x^6 \right] \\ &\quad \cdot \exp\left(-\frac{1}{2}x^4\right) . \end{aligned}$$

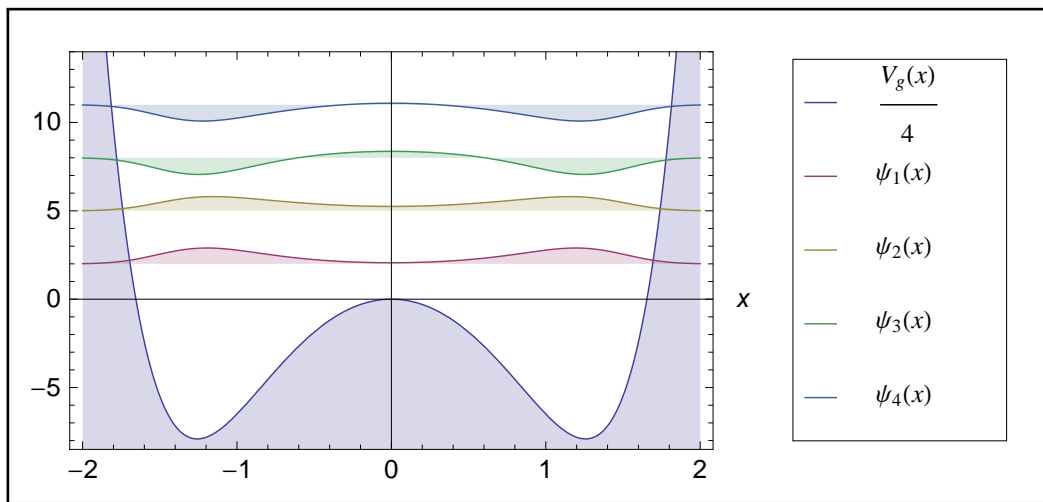


Abbildung 7: Skizze  $V_g(x)$  und numerisch normierte  $\psi_{1,2,3,4}^{(g)}(x)$  mit  $\mu = 0$ ,  $\nu = 2$  und  $j = \frac{3}{2}$

Betrachtet man die ungeraden Zustände für den Fall  $j = \frac{3}{2}$ , wird die zugehörige Hamilton-Matrix zu:

$$H_{T,u} = \begin{pmatrix} 6\mu & -4\nu & 0 & 0 \\ -42 & 2\mu & -8\nu & 0 \\ 0 & -20 & -2\mu & -12\nu \\ 0 & 0 & -6 & -6\mu \end{pmatrix} \quad (72)$$

mit dem charakteristischen Polynom:

$$(E^{(u)})^4 - (40\mu^2 + 400\nu)(E^{(u)})^2 - 768\mu\nu E^{(u)} + 144\mu^4 + 2880\mu^2\nu + 12096\nu^2 = 0 . \quad (73)$$

Betrachtet man wieder den Spezialfall  $\mu = 0$  wird dieses zu:

$$(E^{(u)})^4 - 400\nu(E^{(u)})^2 + 12096\nu^2 = 0 .$$

Analog zu den geraden Zuständen ergibt die Substitution  $z := (E^{(u)})^2$ :

$$z^2 - 400\nu z + 12096\nu^2 = 0$$



und mit  $p = -400\nu$  sowie  $q = 12096\nu^2$ :

$$z_{1,2} = \left(25 \pm 2\sqrt{109}\right) 8\nu ,$$

beziehungsweise:

$$\boxed{\begin{aligned} E_{1,2}^{(u)} &= -2\sqrt{2\nu \left(25 \pm 2\sqrt{109}\right)} \\ E_{3,4}^{(u)} &= +2\sqrt{2\nu \left(25 \mp 2\sqrt{109}\right)} . \end{aligned}} \quad (74)$$

Über die spezielle Hamiltonmatrix

$$H_{T,u} = \begin{pmatrix} 0 & -4\nu & 0 & 0 \\ -42 & 0 & -8\nu & 0 \\ 0 & -20 & 0 & -12\nu \\ 0 & 0 & -6 & 0 \end{pmatrix}$$

erhält man die zugehörigen Eigenvektoren

$$\vec{P}_{1,2,3,4}^{(u)} = \begin{pmatrix} -\frac{\nu}{315} (\sqrt{109} - 2) E_{1,2,3,4}^{(u)} \\ \frac{1}{120} (E_{1,2,3,4}^{(u)})^2 - \frac{3}{5}\nu \\ -\frac{1}{6} E_{1,2,3,4}^{(u)} \\ 1 \end{pmatrix} \quad (75)$$

und die Wellenfunktionen

$$\boxed{\begin{aligned} \psi_{1,2,3,4}^{(u)}(x) &= \left[ x - \frac{1}{6} E_{1,2,3,4}^{(u)} x^3 + \left( \frac{1}{120} (E_{1,2,3,4}^{(u)})^2 - \frac{3}{5}\nu \right) x^5 \right. \\ &\quad \left. - \frac{\nu}{315} (\sqrt{109} - 2) E_{1,2,3,4}^{(u)} x^7 \right] \exp\left(-\frac{1}{4}\nu x^4\right) . \end{aligned}} \quad (76)$$

Der bekannte Spezialfall  $\nu = 2$  liefert:

$$\begin{aligned} E_{1,2}^{(u)} &= -4\sqrt{25 \pm 2\sqrt{109}} \\ E_{3,4}^{(u)} &= +4\sqrt{25 \mp 2\sqrt{109}} . \end{aligned}$$

Die Wellenfunktionen nehmen in diesem Fall folgende Gestalt an:

$$\begin{aligned} \psi_{1,2}^{(u)}(x) &= \left[ x + \frac{2}{3} \sqrt{25 \pm 2\sqrt{109}} x^3 + \left( \frac{2}{15} (25 \pm 2\sqrt{109}) - \frac{6}{5} \right) x^5 \right. \\ &\quad \left. + \frac{8}{315} (\sqrt{109} - 2) \sqrt{25 \pm 2\sqrt{109}} x^7 \right] \exp\left(-\frac{1}{2} x^4\right) \\ \psi_{3,4}^{(u)}(x) &= \left[ x - \frac{2}{3} \sqrt{25 \mp 2\sqrt{109}} x^3 + \left( \frac{2}{15} (25 \mp 2\sqrt{109}) - \frac{6}{5} \right) x^5 \right. \\ &\quad \left. - \frac{8}{315} (\sqrt{109} - 2) \sqrt{25 \mp 2\sqrt{109}} x^7 \right] \exp\left(-\frac{1}{2} x^4\right). \end{aligned}$$

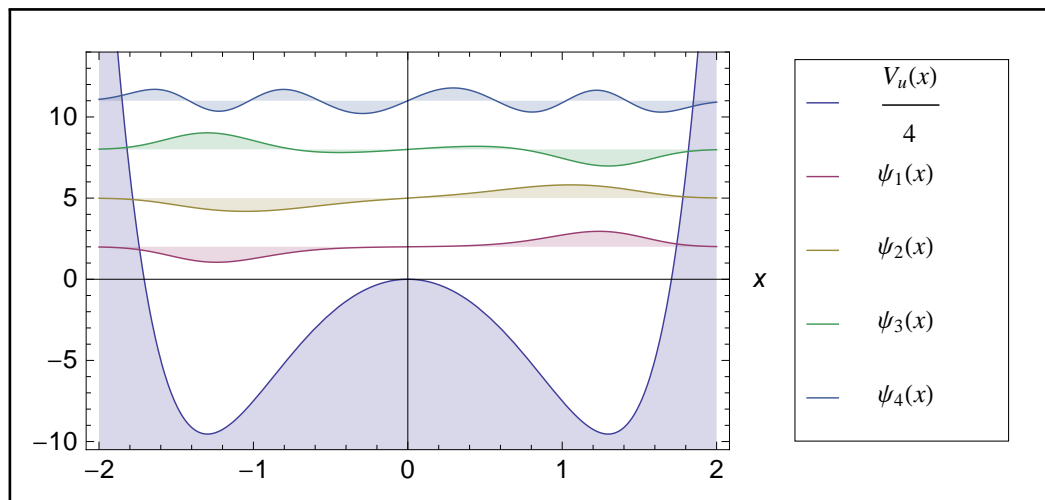


Abbildung 8: Skizze  $V_u(x)$  und numerisch normierte  $\psi_{1,2,3,4}^{(u)}(x)$  mit  $\mu = 0$ ,  $\nu = 2$  und  $j = \frac{3}{2}$

### 3.3 Interpretation der Ergebnisse

Wie in [1] beschrieben, unterliegt das untersuchte Potential der „energy reflection“-Symmetrie. Diese zeichnet sich dadurch aus, dass die Energien (vgl. z.B. (74)) positive und negative Werte symmetrisch um null annehmen. Des Weiteren wird an Gleichung (69) und (74) deutlich, dass sich die Differenzen der Eigenwerte und damit die Abstände der Energien um den Wert null verringern.

Weitergehend ist erkennbar, dass das Potential positive und negative Eigenwerte annimmt. In Kapitel 3.2.2 verschwindet für den Spezialfall  $\mu = 0$  ein Eigenwert sowohl für die geraden, als auch die ungeraden Wellenfunktionen.

Die Energiewerte des harmonischen Oszillators sind im Vergleich immer positiv und ungleich null (vgl. [5]); ein grundlegender Unterschied also. Rein qualitativ betrachtet, wird an den Plots der Wellenfunktionen (vgl. Abb. 8) allerdings erkennbar, dass diese bei höheren Energien in ihrem Verlauf zunehmend denen des harmonischen Oszillators entsprechen. Dies ist mit der klassischen Vorstellung zu erklären, dass ein höher energetisches Teilchen einen wesentlich größeren Teil des Potentials im positiven Bereich „sieht“ und damit die Doppelmuldenstruktur im Grenzfall in eine Parabel übergeht.

Betrachtet man die Zahl der Nullstellen bzw. „Knoten“ der Wellenfunktionen, wird erkennbar, dass diese für die geraden Zustände für alle betrachteten Fälle  $n = \{0, 2, 4, \dots\}$ <sup>5</sup> Nullstellen besitzen. Für die ungeraden Zustände ergibt sich hingegen  $n = \{1, 3, 5, \dots\}$ . Dies ist konsistent mit der Tatsache, dass das Potential gerade und ungerade Zustände in abwechselnder Reihenfolge annehmen soll. Des Weiteren kann mit Hilfe des Knotensatzes der tiefste gerade Zustand jeweils als Grundzustand identifiziert werden. Für die ungeraden Wellenfunktionen stellt der tiefste gefundene Eigenwert jeweils den ersten angeregten Zustand dar.

---

<sup>5</sup> Die Zahl  $n \in \mathbb{N}$  beschreibt hier die Anzahl der Knoten. Durch den Knotensatz [5] ergibt sich daraus die Quantenzahl des Zustands. Nach diesem besitzt die Wellenfunktion eines Zustandes mit der Quantenzahl  $n$  genau  $n$  Knoten. ( $n = 0, 1, 2, 3, \dots$ )

## 4 Hyperbolisches Potential

### 4.1 Konstruktion von Hamilton-Operator & Potential

Durch die erarbeitete Lie-Algebra lassen sich neben dem obigen eine Vielzahl von Potentialen konstruieren. Ein weiteres Doppelmuldenpotential, das eine ähnliche physikalische Anwendung wie das  $x^6$ -Potential findet (vgl. Kap. 3), ist ein hyperbolisches Potential mit Termen  $\propto \sinh^2(x)$  sowie  $\propto \cosh(x)$ . Dies soll zum Vergleich analog zu Kapitel 3 untersucht werden.

Der Darstellungsraum wird nun durch  $\xi(x) = \cosh(x)$  definiert. Die Funktionen  $\tilde{\psi}(x)$  (vgl. (13)) sind nun also Polynome in  $\cosh(x)$ :

$$\tilde{\psi}(x) = \mathcal{P}_{2j}(\xi(x)) = \mathcal{P}_{2j}(\cosh(x)) \quad (77)$$

Der Impulsterm berechnet sich zunächst zu  $-\frac{d^2}{dx^2} = -(\hat{T}_0\hat{T}_0 - \hat{T}_-\hat{T}_-) - 2j\hat{T}_0 + j^2$ .  
Beweis:

$$\begin{aligned} -\frac{d}{dx} &= \frac{d\xi}{dx} \frac{d}{d\xi} = \sinh(x) \frac{d}{d\xi} \\ \Rightarrow -\frac{d^2}{dx^2} &= -\frac{d}{dx} \left( \sinh(x) \frac{d}{d\xi} \right) \\ &= -\cosh(x) \frac{d}{d\xi} - \sinh^2(x) \frac{d^2}{d\xi^2} \\ &= -\xi \frac{d}{d\xi} - (\xi^2 - 1) \frac{d^2}{d\xi^2} \end{aligned} \quad (78)$$

$$\begin{aligned} -(\hat{T}_0\hat{T}_0 - \hat{T}_-\hat{T}_-) - 2j\hat{T}_0 + j^2 &= -\left( \left( -j + \xi \frac{d}{d\xi} \right) \left( -j + \xi \frac{d}{d\xi} \right) - \frac{d^2}{d\xi^2} \right) + 2j^2 \\ &\quad - 2j\xi \frac{d}{d\xi} + j^2 \\ &= -\left( j^2 - j\xi \frac{d}{d\xi} - j\xi \frac{d}{d\xi} + \xi \frac{d}{d\xi} + \xi^2 \frac{d^2}{d\xi^2} - \frac{d^2}{d\xi^2} \right) \\ &\quad + 2j^2 - 2j\xi \frac{d}{d\xi} + j^2 \\ &= -\xi \frac{d}{d\xi} - (\xi^2 - 1) \frac{d^2}{d\xi^2} \end{aligned} \quad (79)$$

□

## 4.1.1 Gerade Zustände

Wählt man den Zusatzterm  $\tilde{V}_g = -2\alpha(\hat{T}_- + \hat{T}_+)$  ( $\alpha > 0$ ) ergibt sich analog zu Kapitel 3.1.1 für das Potential:

$$\begin{aligned}
 \tilde{V}_g &= -2\alpha(\hat{T}_- + \hat{T}_+) \\
 &= -2\alpha \left( \frac{d}{d\xi} + 2j\xi - \xi^2 \frac{d}{d\xi} \right) \\
 &= -2\alpha \left( \frac{1}{\sinh(x)} \frac{d}{dx} + 2j \cosh(x) - \cosh^2(x) \frac{1}{\sinh(x)} \frac{d}{dx} \right) \\
 &= -2\alpha \frac{1}{\sinh(x)} (1 - \cosh^2(x)) \frac{d}{dx} - 4\alpha j \cosh(x) \\
 &= \underbrace{2\alpha \sinh(x)}_{A_g(x)} \frac{d}{dx} + \underbrace{-4\alpha j \cosh(x)}_{\Delta V_g(x)}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \Rightarrow V_g(x) &= \Delta V_g(x) - A'_g(x) + A_g^2(x) \\
 &= -4\alpha j \cosh(x) - \alpha \cosh(x) + \alpha^2 \sinh^2(x)
 \end{aligned}$$

$$\rightarrow \boxed{V_g(x) = \alpha^2 \sinh^2(x) - \alpha(4j + 1) \cosh(x)} \quad (80)$$

Für  $\alpha = \frac{1}{2}$  ergibt sich folgender Verlauf für verschiedene  $j$ :

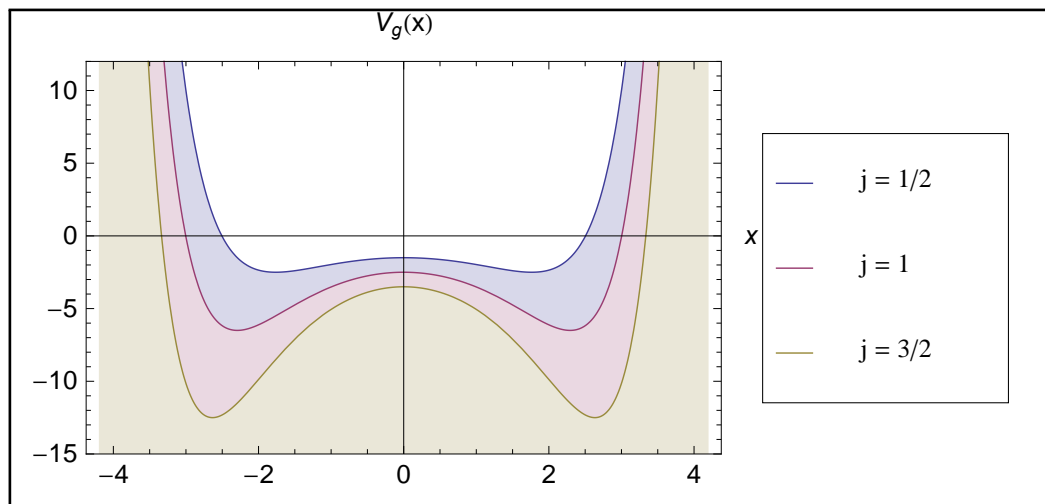


Abbildung 9:  $V_g(x)$  mit  $\alpha = \frac{1}{2}$  und  $j = \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}$

Die Wahl  $\alpha = \frac{1}{2}$  ist relativ willkürlich zu verstehen. Für diesen Spezialfall nehmen die Eigenwerte für die untersuchten Matrizen in vielen Fällen sehr übersichtliche Werte an.

Der dazugehörige Hamilton-Operator ist gegeben durch:

$$\hat{H}_{T,g} = -(\hat{T}_0 \hat{T}_0 - \hat{T}_- \hat{T}_-) - 2j \hat{T}_0 - 2\alpha(\hat{T}_- + \hat{T}_+) \quad (81)$$

und in seiner Matrix-Darstellung:

$$\begin{aligned}
 H_{T,g} = & - \begin{pmatrix} j^2 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & (j-1)^2 & 0 & \dots & 0 \\ -2j(2j-1) & 0 & (j-2)^2 & 0 & 0 \\ 0 & -(2j-1)(2j-2) & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & -(2j-2)(2j-3) & \dots & 0 \\ 0 & \dots & 0 & \dots & (2-j)^2 \\ 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \dots & 0 & -2 & (1-j)^2 \\ & & & & 0 \\ & & & & (-j)^2 \end{pmatrix} \\
 & - \begin{pmatrix} 2j^2 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 2j(j-1) & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 2j(j-2) & 0 & 0 \\ 0 & \dots & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \dots & 0 & 0 & 2j(2-j) \\ 0 & \dots & 0 & 2j(2-j) & 0 \\ 0 & \dots & 0 & 0 & 2j(1-j) \\ 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ & & & & -2j^2 \end{pmatrix} \\
 & -2\alpha \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ 2j & 0 & 2 & \dots & 0 \\ 0 & 2j-1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 2j-2 & 0 & 2j-2 \\ 0 & \dots & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \dots & 0 & \dots & 2j-1 \\ 0 & \dots & 0 & 0 & 2 \\ 0 & \dots & 0 & 2 & 0 \\ & & & 0 & 1 \\ & & & & 0 \end{pmatrix} \\
 \rightarrow H_{T,g} = & \begin{pmatrix} -3j^2 & -2\alpha & 0 & \dots & 0 \\ -4\alpha j & -3j^2 + 4j - 1 & -4\alpha & 0 & 0 \\ 2j(2j-1) & -2\alpha(2j-1) & -3j^2 + 8j - 4 & \dots & 0 \\ 0 & (2j-1)(2j-2) & -2\alpha(2j-2) & \dots & 2\alpha(2-2j) \\ 0 & 0 & (2j-1)(2j-3) & \dots & j^2 - 4 \\ 0 & \dots & 0 & \dots & -4\alpha \\ 0 & \dots & 0 & 0 & 2 \\ & & & & 2\alpha(1-2j) \\ & & & & 0 \\ & & & & j^2 - 1 \\ & & & & -4\alpha j \\ & & & & j^2 \end{pmatrix}.
 \end{aligned}$$

(82)

Der Summand  $+j^2$  aus dem Impulsterm ist konstant und wird daher vernachlässigt. Die Wellenfunktionen sind dann gegeben durch:

$$\psi_g(x) = \mathcal{P}_{2j}(\cosh(x)) \exp\left(-\int A_g(x) dx\right)$$

$$\rightarrow \boxed{\psi_g(x) = \mathcal{P}_{2j}(\cosh(x)) \exp(-\alpha \cosh(x))} \quad (83)$$

Die Integrationskonstante kann dabei wiederum vernachlässigt werden.

### 4.1.2 Ungerade Zustände

Da die gefundenen Wellenfunktionen  $\psi_g(x)$  symmetrisch in  $x$  sind, muss der Hamilton-Operator analog zu Kapitel 3.1.2 modifiziert werden:

$$\begin{aligned}
 \tilde{V}_u(x) &= \tilde{V}_g(x) - 2\hat{T}_0 \\
 &= -2\alpha(\hat{T}_- + \hat{T}_+) - 2\hat{T}_0 \\
 &= 2\alpha \sinh(x) \frac{d}{dx} + -4\alpha j \cosh(x) + 2j - 2\xi \frac{d}{d\xi} \\
 &= 2\alpha \sinh(x) \frac{d}{dx} + -4\alpha j \cosh(x) + 2j - 2 \cosh(x) \frac{1}{\sinh(x)} \frac{d}{dx} \\
 &= 2 \underbrace{(\alpha \sinh(x) - \coth(x))}_{A_u(x)} \frac{d}{dx} + \underbrace{j(2 - 4\alpha \cosh(x))}_{\Delta V_u(x)}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \Rightarrow V_u(x) &= \Delta V_u(x) - A'_u(x) + A_u^2(x) \\
 &= 2j - 4\alpha \cosh(x) - \alpha \cosh(x) - \frac{1}{\sinh^2(x)} + \alpha^2 \sinh^2(x) - \alpha \cosh(x) \\
 &\quad + \coth^2(x) \\
 &= 2j - 4j\alpha \cosh(x) - 2\alpha \cosh(x) + \alpha^2 \sinh^2(x) + \frac{1}{\sinh^2(x)} (\cosh^2(x) - 1) \\
 &= 2j + 1 - 4j\alpha \cosh(x) - 2\alpha \cosh(x) + \alpha^2 \sinh^2(x)
 \end{aligned}$$

$$\rightarrow \boxed{V_u(x) = \alpha^2 \sinh^2(x) - \alpha(4j + 2) \cosh(x)} . \quad (84)$$

Der konstante Term  $2j + 1$  ist nicht relevant für das Potential und wird in diesem Fall vernachlässigt.

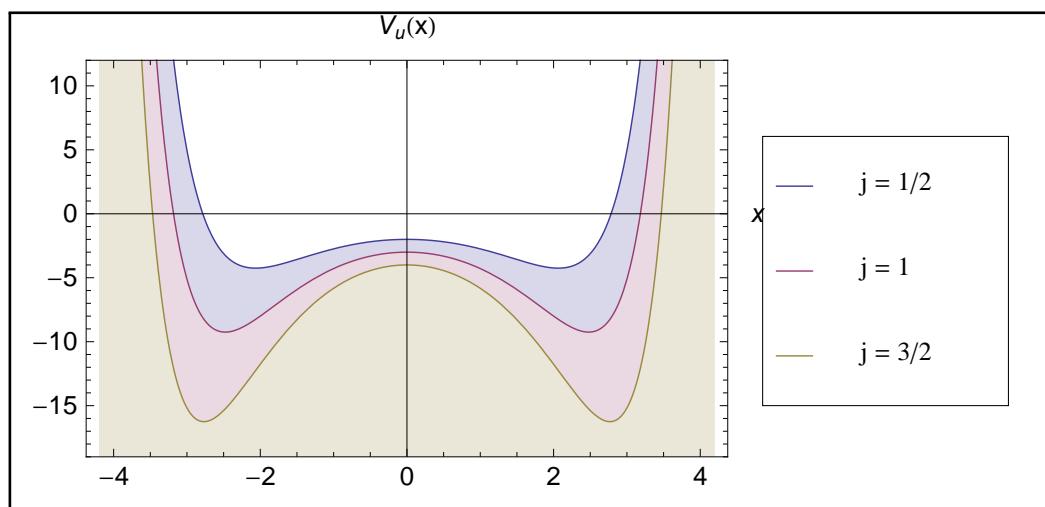


Abbildung 10:  $V_u(x)$  mit  $\alpha = \frac{1}{2}$  und  $j = \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}$

Analog zu den Potentialen  $V_g$  und  $V_u$ , die in Kapitel 3 berechnet werden, wird auch hier deutlich, dass  $V_g \neq V_u \forall \alpha, j$ .

Für den Hamilton-Operator gilt:

$$\hat{H}_{T,u} = -(\hat{T}_0\hat{T}_0 - \hat{T}_-\hat{T}_-) - 2j\hat{T}_0 - 2\alpha(\hat{T}_- + \hat{T}_+) - 2\hat{T}_0 \quad (85)$$

und in Matrix-Darstellung:

$$H_{T,u} = H_{T,g} - 2T_0$$

$$\rightarrow H_{T,u} = \begin{pmatrix} -3j^2 - 2j & -2\alpha & 0 & \dots & 0 \\ -4\alpha j & -3j^2 + 2j + 1 & -4\alpha & 0 & 0 \\ 2j(2j-1) & -2\alpha(2j-1) & -3j^2 + 6j & \dots & 0 \\ 0 & (2j-1)(2j-2) & -2\alpha(2j-2) & \dots & 2\alpha(2-2j) & 0 \\ 0 & 0 & (2j-1)(2j-3) & \dots & j^2 + 2j - 8 & 2\alpha(1-2j) & 0 \\ 0 & \dots & 0 & \dots & -4\alpha & j^2 + 2j - 1 & -4\alpha j \\ 0 & \dots & \dots & 0 & 2 & -2\alpha & j^2 + 2j \end{pmatrix}. \quad (86)$$

Die Wellenfunktionen berechnen sich dann wie folgt:

$$\begin{aligned} \psi_u(x) &= \mathcal{P}_{2j}(\cosh(x)) \exp\left(-\alpha \cosh(x) + \int \coth(x) dx\right) \\ &= \mathcal{P}_{2j}(\cosh(x)) \exp(-\alpha \cosh(x) + \ln(\sinh(x))) \\ &\rightarrow \boxed{\psi_u(x) = \mathcal{P}_{2j}(\cosh(x)) \sinh(x) \exp(-\alpha \cosh(x))} \end{aligned} \quad (87)$$

Diese sind antisymmetrisch in  $x$ .

## 4.2 Lösung der Schrödingergleichung für allgemeines $\alpha$

### 4.2.1 Fall $j = \frac{1}{2}$

Die Hamilton-Matrix für die geraden Zustände wird für  $j = \frac{1}{2}$  nach Gleichung (82) zu:

$$H_{T,g} = \begin{pmatrix} -\frac{3}{4} & -2\alpha \\ -2\alpha & \frac{1}{4} \end{pmatrix}. \quad (88)$$

Mit dem charakteristischen Polynom:

$$(E^{(g)})^2 + \frac{1}{2}E^{(g)} - 4\alpha^2 - \frac{3}{16} = 0. \quad (89)$$

Über Gleichung (25) ergeben sich damit die Eigenwerte wie folgt:

$$\rightarrow \boxed{E_{1,2}^{(g)} = -\frac{1}{4} \mp \sqrt{4\alpha^2 + \frac{1}{4}}} \quad (90)$$

mit den zugehörigen Eigenvektoren:

$$\vec{P}_{1,2}^{(g)} = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2\alpha} \left(E_{1,2}^{(g)} - \frac{1}{4}\right) \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (91)$$



Damit nehmen die Wellenfunktionen folgende Gestalt an:

$$\psi_{1,2}^{(g)}(x) = \left[ 1 - \frac{1}{2\alpha} \left( E_{1,2}^{(g)} - \frac{1}{4} \right) \cosh(x) \right] \exp(-\alpha \cosh(x))$$

$$\rightarrow \boxed{\psi_{1,2}^{(g)}(x) = \left[ 1 + \frac{1}{2\alpha} \left( \frac{1}{2} \pm \sqrt{4\alpha^2 + \frac{1}{4}} \right) \cosh(x) \right] \exp(-\alpha \cosh(x)) .} \quad (92)$$

Für den Spezialfall  $\alpha = \frac{1}{2}$  ergeben sich die Eigenwerte:

$$E_{1,2}^{(g)} = -\frac{1}{4} \mp \frac{\sqrt{5}}{2}$$

und Wellenfunktionen

$$\psi_{1,2}^{(g)} = \left[ 1 + \left( \frac{1}{2} \pm \frac{\sqrt{5}}{2} \right) \cosh(x) \right] \exp\left(-\frac{1}{2} \cosh(x)\right) .$$

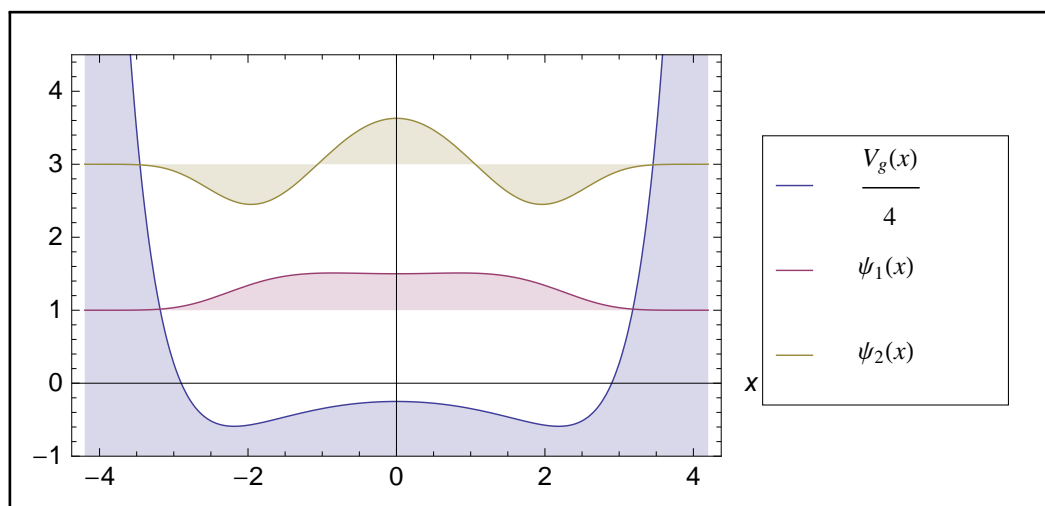


Abbildung 11:  $V_g(x)$  und numerisch normierte  $\psi_{1,2}^{(g)}(x)$  mit  $\alpha = \frac{1}{2}$  und  $j = \frac{1}{2}$

Für die ungeraden Zustände ergibt sich folgende Hamilton-Matrix:

$$H_{T,g} = \begin{pmatrix} -\frac{7}{4} & -2\alpha \\ -2\alpha & \frac{5}{4} \end{pmatrix} . \quad (93)$$

Das zugehörige charakteristische Polynom ist gegeben durch:

$$(E^{(u)})^2 + \frac{1}{2}E^{(g)} - 4\alpha^2 - \frac{35}{16} = 0 . \quad (94)$$

Die Lösungen dieser Gleichung sind dann folgende:

$$\rightarrow E_{1,2}^{(u)} = -\frac{1}{4} \mp \sqrt{4\alpha^2 + \frac{9}{4}}, \quad (95)$$

$$\vec{P}_{1,2}^{(u)} = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2\alpha} \left( E_{1,2}^{(u)} - \frac{5}{4} \right) \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (96)$$

Die Wellenfunktionen nehmen somit folgende Gestalt an:

$$\psi_{1,2}^{(u)}(x) = \left[ 1 - \frac{1}{2\alpha} \left( E_{1,2}^{(u)} - \frac{5}{4} \right) \cosh(x) \right] \sinh(x) \exp(-\alpha \cosh(x))$$

$$\rightarrow \psi_{1,2}^{(u)}(x) = \left[ 1 + \frac{1}{2\alpha} \left( \frac{3}{2} \pm \sqrt{4\alpha^2 + \frac{9}{4}} \right) \cosh(x) \right] \sinh(x) \exp(-\alpha \cosh(x)). \quad (97)$$

Für den beispielhaften Fall  $\alpha = \frac{1}{2}$  ergibt sich dann:

$$E_{1,2}^{(u)} = -\frac{1}{4} \mp \frac{\sqrt{13}}{2}$$

sowie

$$\psi_{1,2}^{(u)} = \left[ 1 + \left( \frac{3}{2} \pm \frac{\sqrt{13}}{2} \right) \cosh(x) \right] \sinh(x) \exp\left(-\frac{1}{2} \cosh(x)\right).$$

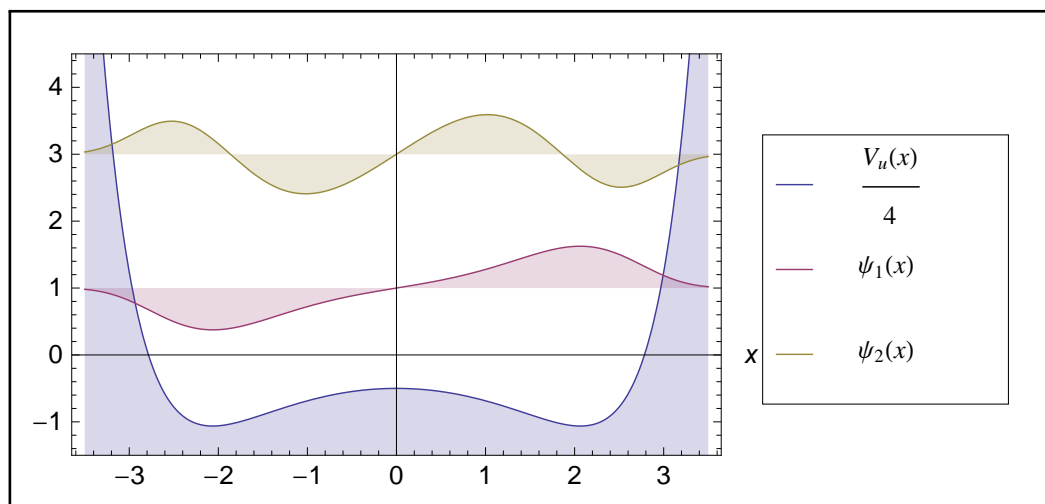


Abbildung 12:  $V_u(x)$  und numerisch normierte  $\psi_{1,2}^{(u)}(x)$  mit  $\alpha = \frac{1}{2}$  und  $j = \frac{1}{2}$

4.2.2 Fall  $j = 1$ 

Wählt man  $j = 1$ , ergibt sich die Hamilton-Matrix für die geraden Zustände folgendermaßen:

$$H_{T,g} = \begin{pmatrix} -3 & -2\alpha & 0 \\ -4\alpha & 0 & -4\alpha \\ 2 & -2\alpha & 1 \end{pmatrix}. \quad (98)$$

Das charakteristische Polynom ist dann gegeben durch:

$$(E_{1,2,3}^{(g)})^3 + 2(E_{1,2,3}^{(g)})^2 - (16\alpha^2 + 3)E_{1,2,3}^{(g)} - 32\alpha^2 = 0. \quad (99)$$

Mit der Lösung aus Kapitel 2.6 Abschnitt (ii) erhält man nun:

$$\begin{aligned} a &= 1 ; \quad b = 2 ; \quad c = -16\alpha^2 - 3 ; \quad d = -32\alpha^2 \\ \Rightarrow p &= -\frac{16}{3}\alpha^2 - \frac{10}{9} \\ q &= \frac{35}{27} - \frac{32}{3}\alpha^2 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} E_1^{(g)} &= u \left( -\frac{1}{2} + \frac{i}{2}\sqrt{3} \right) + v \left( -\frac{1}{2} - \frac{i}{2}\sqrt{3} \right) - \frac{2}{3} \\ E_2^{(g)} &= u + v - \frac{2}{3} \\ E_3^{(g)} &= u \left( -\frac{1}{2} - \frac{i}{2}\sqrt{3} \right) + v \left( -\frac{1}{2} + \frac{i}{2}\sqrt{3} \right) - \frac{2}{3} \\ \text{mit: } u &= \frac{1}{3} \sqrt[3]{288\alpha^2 + 3\sqrt{25 - 768\alpha^2(16\alpha^4 - 2\alpha^2 + 5)} - 35} \\ v &= \frac{1}{3} \sqrt[3]{288\alpha^2 - 3\sqrt{25 - 768\alpha^2(16\alpha^4 - 2\alpha^2 + 5)} - 35} \end{aligned} \quad (100)$$

Mit den Eigenvektoren:

$$\vec{P}_{1,2,3}^{(g)} = \begin{pmatrix} \frac{(E_{1,2,3}^{(g)})^2 - E_{1,2,3}^{(g)} - 8\alpha^2}{2E_{1,2,3}^{(g)} + 8\alpha^2} \\ -2\alpha \frac{1 + E_{1,2,3}^{(g)}}{E_{1,2,3}^{(g)} + 4\alpha^2} \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (101)$$

Die zugehörigen Wellenfunktionen ergeben sich dann wie folgt:

$$\rightarrow \psi_{1,2,3}^{(g)}(x) = \left[ 1 - 2\alpha \frac{1 + E_{1,2,3}^{(g)}}{E_{1,2,3}^{(g)} + 4\alpha^2} \cosh(x) + \frac{(E_{1,2,3}^{(g)})^2 - E_{1,2,3}^{(g)} - 8\alpha^2}{2E_{1,2,3}^{(g)} + 8\alpha^2} \cosh^2(x) \right] \exp(-\alpha \cosh(x)). \quad (102)$$

Legt man weitergehend wieder  $\alpha = \frac{1}{2}$  fest, berechnet sich die Lösung zu:

$$E_{1,3}^{(g)} = \frac{1}{2} \left( -1 \mp \sqrt{33} \right)$$

$$E_2^{(g)} = -1$$

mit den Wellenfunktionen:

$$\psi_{1,3}^{(g)}(x) = \left[ 1 - \cosh(x) - \frac{1}{4} \left( 5 \pm \sqrt{33} \right) \cosh^2(x) \right] \exp \left( -\frac{1}{2} \cosh(x) \right)$$

$$\psi_2^{(g)}(x) = \left[ 1 + \cosh(x) - \frac{1}{2} \cosh^2(x) \right] \exp \left( -\frac{1}{2} \cosh(x) \right) .$$

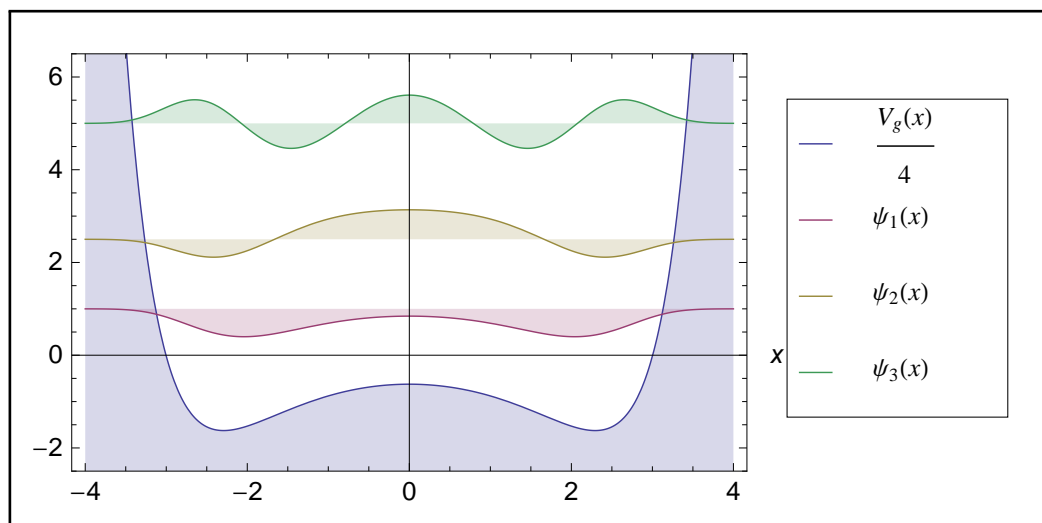


Abbildung 13:  $V_g(x)$  und numerisch normierte  $\psi_{1,2,3}^{(g)}(x)$  mit  $\alpha = \frac{1}{2}$  und  $j = 1$

Betrachtet man die ungeraden Wellenfunktionen ergibt sich die Hamilton-Matrix zu:

$$H_{T,u} = \begin{pmatrix} -5 & -2\alpha & 0 \\ -4\alpha & 0 & -4\alpha \\ 2 & -2\alpha & 3 \end{pmatrix} . \quad (103)$$

Das charakteristische Polynom dieser Matrix ist gegeben durch:

$$(E_{1,2,3}^{(u)})^3 + 2(E_{1,2,3}^{(u)})^2 - (16\alpha^2 + 15)E_{1,2,3}^{(u)} - 32\alpha^2 = 0 . \quad (104)$$

Analog zu den geraden Zuständen ergibt sich dann:

$$a = 1 ; \quad b = 2 ; \quad c = -16\alpha^2 - 15 ; \quad d = -32\alpha^2$$

$$\Rightarrow p = -\frac{16}{3}\alpha^2 - \frac{49}{9}$$

$$q = \frac{143}{27} - \frac{32}{3}\alpha^2$$

$$\begin{aligned}
E_1^{(u)} &= u \left( -\frac{1}{2} + \frac{i}{2}\sqrt{3} \right) + v \left( -\frac{1}{2} - \frac{i}{2}\sqrt{3} \right) - \frac{2}{3} \\
E_3^{(u)} &= u + v - \frac{2}{3} \\
E_2^{(u)} &= u \left( -\frac{1}{2} - \frac{i}{2}\sqrt{3} \right) + v \left( -\frac{1}{2} + \frac{i}{2}\sqrt{3} \right) - \frac{2}{3} \\
\text{mit: } u &= \frac{1}{3} \sqrt[3]{288\alpha^2 + 12\sqrt{3}\sqrt{-256\alpha^6 - 592\alpha^4 - 991\alpha^2 - 225} - 143} \\
v &= \frac{1}{3} \sqrt[3]{288\alpha^2 - 12\sqrt{3}\sqrt{-256\alpha^6 - 592\alpha^4 - 991\alpha^2 - 225} - 143}
\end{aligned} \tag{105}$$

und:

$$\vec{P}_{1,2,3}^{(u)} = \begin{pmatrix} -\frac{(E_{1,2,3}^{(u)})^2 - 3E_{1,2,3}^{(u)} - 8\alpha^2}{2E_{1,2,3}^{(u)} + 8\alpha^2} \\ -2\alpha \frac{E_{1,2,3}^{(u)} - 1}{E_{1,2,3}^{(u)} + 4\alpha^2} \\ 1 \end{pmatrix}. \tag{106}$$

Die Wellenfunktionen sind damit:

$$\rightarrow \psi_{1,2,3}^{(u)}(x) = \left[ 1 - 2\alpha \frac{E_{1,2,3}^{(u)} - 1}{E_{1,2,3}^{(u)} + 4\alpha^2} \cosh(x) + \frac{(E_{1,2,3}^{(u)})^2 - 3E_{1,2,3}^{(u)} - 8\alpha^2}{2E_{1,2,3}^{(u)} + 8\alpha^2} \cosh^2(x) \right] \exp(-\alpha \cosh(x)). \tag{107}$$

Das bekannte Beispiel liefert folgende exemplarische Lösung:

$$\begin{aligned}
E_1^{(u)} &= \frac{1}{6} \left( \sqrt[3]{-71 + 18i\sqrt{685}} (-1 + i\sqrt{3}) + \sqrt[3]{-71 - 18i\sqrt{685}} (-1 - i\sqrt{3}) - 4 \right) \\
&\approx -5,30007 \\
E_2^{(u)} &= \frac{1}{6} \left( \sqrt[3]{-71 + 18i\sqrt{685}} (-1 - i\sqrt{3}) + \sqrt[3]{-71 - 18i\sqrt{685}} (-1 + i\sqrt{3}) - 4 \right) \\
&\approx -0,40716 \\
E_3^{(u)} &= \frac{1}{3} \left( \sqrt[3]{-71 - 18i\sqrt{685}} + \sqrt[3]{-71 + 18i\sqrt{685}} - 4 \right) \\
&\approx 3,70722.
\end{aligned}$$

Die Wellenfunktionen sind dann durch

$$\begin{aligned}\psi_1^{(u)}(x) &= [1 + c_{1,1} \cosh(x) + c_{1,2} \cosh^2(x)] \sinh(x) \exp\left(-\frac{1}{2} \cosh(x)\right) \\ \psi_2^{(u)}(x) &= [1 + c_{2,1} \cosh(x) + c_{2,2} \cosh^2(x)] \sinh(x) \exp\left(-\frac{1}{2} \cosh(x)\right) \\ \psi_3^{(u)}(x) &= [1 + c_{3,1} \cosh(x) + c_{3,2} \cosh^2(x)] \sinh(x) \exp\left(-\frac{1}{2} \cosh(x)\right).\end{aligned}$$

gegeben. Die Parameter  $c_{i,j}$  erhält man durch einsetzen der Eigenwerte in Gleichung (106):

$$\begin{aligned}c_{1,1} &= -\frac{E_1^{(u)} - 1}{E_1^{(u)} + 1} \approx -1,46511 \\ c_{2,1} &= -\frac{E_2^{(u)} - 1}{E_2^{(u)} + 1} \approx 2,37356 \\ c_{3,1} &= -\frac{E_3^{(u)} - 1}{E_3^{(u)} + 1} \approx -0,57512 \\ c_{1,2} &= -\frac{(E_1^{(u)})^2 - 3E_1^{(u)} - 2}{2E_1^{(u)} + 2} \approx -4,88259 \\ c_{2,2} &= -\frac{(E_2^{(u)})^2 - 3E_2^{(u)} - 2}{2E_2^{(u)} + 2} \approx -0,51680 \\ c_{3,2} &= -\frac{(E_3^{(u)})^2 - 3E_3^{(u)} - 2}{2E_3^{(u)} + 2} \approx 0,06605.\end{aligned}$$

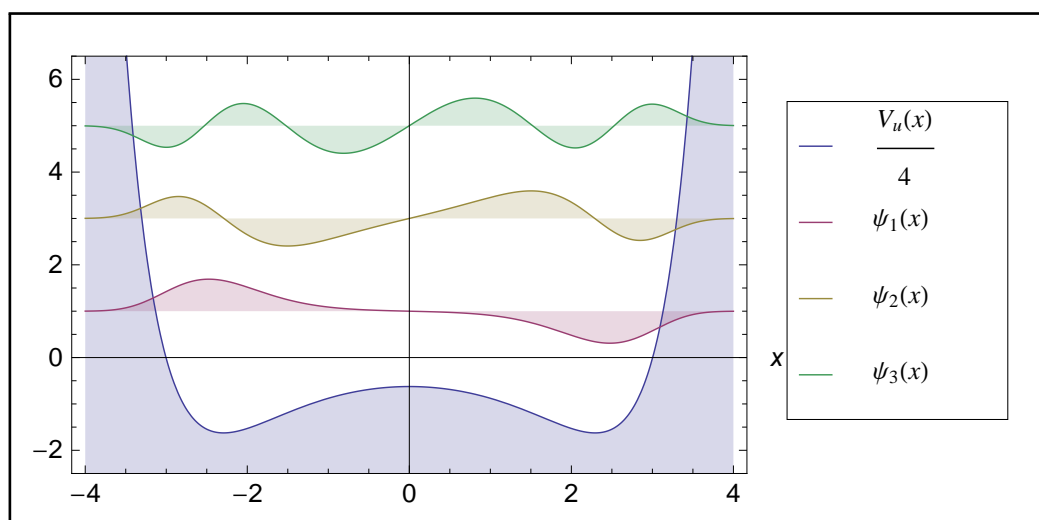


Abbildung 14:  $V_u(x)$  und numerisch normierte  $\psi_{1,2,3}^{(u)}(x)$  mit  $\alpha = \frac{1}{2}$  und  $j = 1$

### 4.2.3 Fall $j = \frac{3}{2}$

Dieser Fall führt für die geraden Zustände zunächst auf eine  $4 \times 4$  Hamilton-Matrix:

$$H_{T,g} = \begin{pmatrix} -\frac{27}{4} & -2\alpha & 0 & 0 \\ -6\alpha & -\frac{7}{4} & -4\alpha & 0 \\ 6 & -4\alpha & \frac{5}{4} & -6\alpha \\ 0 & 2 & -2\alpha & \frac{9}{4} \end{pmatrix}. \quad (108)$$

Das charakteristische Polynom ist dann:

$$\begin{aligned} & (E_{1,2,3,4}^{(g)})^4 + 5(E_{1,2,3,4}^{(g)})^3 - \left(40\alpha^2 + \frac{121}{8}\right) (E_{1,2,3,4}^{(g)})^2 - \left(228\alpha^2 + \frac{279}{16}\right) E_{1,2,3,4}^{(g)} \\ & + 144\alpha^4 + \frac{297}{2}\alpha^2 + \frac{8505}{256} = 0. \end{aligned} \quad (109)$$

Für dieses Polynom sind mit den in Kapitel 2.6 dargestellten Methoden keine Lösungen zu finden. Auch lässt sich kein  $\alpha \in \mathbb{R}$  finden, für das sich das Polynom derart vereinfacht, dass es lösbar würde. Um eine bessere Vergleichbarkeit zum  $x^6$  Potential sicherzustellen, wird das Eigenwertproblem an dieser Stelle numerisch gelöst. Wolfram Mathematica liefert folgende Lösung für  $\alpha = \frac{1}{2}$ :

$$\begin{aligned} E_1^{(g)} &\approx -7,0515 \\ E_2^{(g)} &\approx -2,4394 \\ E_3^{(g)} &\approx 0,0670 \\ E_4^{(g)} &\approx 4,4239. \end{aligned}$$

Die ebenfalls numerisch berechneten Eigenvektoren liefern die Wellenfunktionen:

$$\begin{aligned} \psi_1^{(g)}(x) &\approx [1 + 4,9995 \cosh(x) - 2,1510 \cosh^2(x) - 7,1342 \cosh^3(x)] \\ &\quad \cdot \exp\left(-\frac{1}{2} \cosh(x)\right) \\ \psi_2^{(g)}(x) &\approx [1 - 2,4847 \cosh(x) - 3,5870 \cosh^2(x) + 0,8321 \cosh^3(x)] \\ &\quad \cdot \exp\left(-\frac{1}{2} \cosh(x)\right) \\ \psi_3^{(g)}(x) &\approx [1 + 0,5590 \cosh(x) - 0,8120 \cosh^2(x) + 0,1191 \cosh^3(x)] \\ &\quad \cdot \exp\left(-\frac{1}{2} \cosh(x)\right) \\ \psi_4^{(g)}(x) &\approx [1 - 1,2961 \cosh(x) + 0,4389 \cosh^2(x) - 0,0393 \cosh^3(x)] \\ &\quad \cdot \exp\left(-\frac{1}{2} \cosh(x)\right) \end{aligned}$$

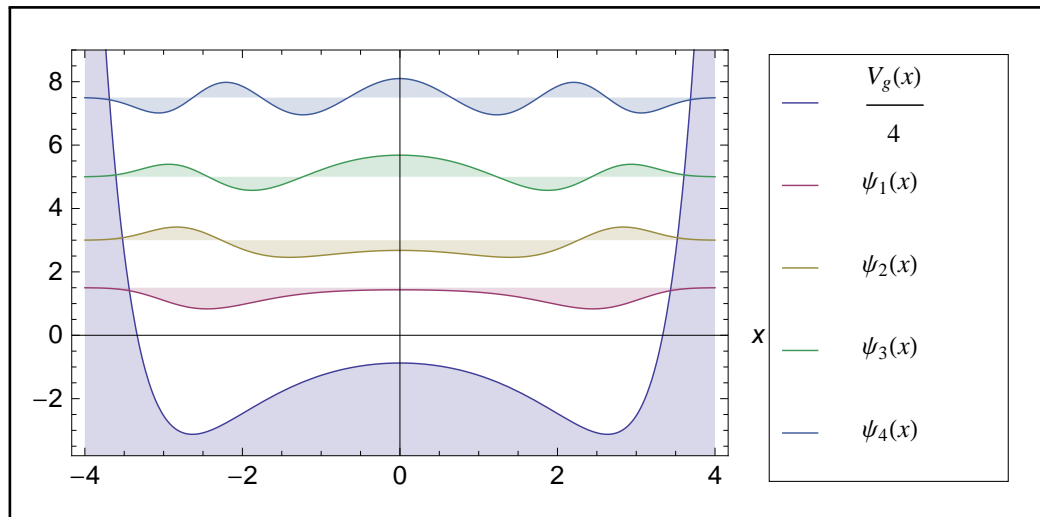


Abbildung 15:  $V_g(x)$  und numerisch berechnete und normierte  $\psi_{1,2,3,4}^{(g)}(x)$  mit  $\alpha = \frac{1}{2}$  und  $j = \frac{3}{2}$

Für die ungeraden Wellenfunktionen ergibt sich analog:

$$H_{T,u} = \begin{pmatrix} -\frac{39}{4} & -2\alpha & 0 & 0 \\ -6\alpha & -\frac{11}{4} & -4\alpha & 0 \\ 6 & -4\alpha & \frac{9}{4} & -6\alpha \\ 0 & 2 & -2\alpha & \frac{21}{4} \end{pmatrix} \quad (110)$$

mit dem charakteristischen Polynom:

$$\begin{aligned} (E_{1,2,3,4}^{(u)})^4 + 5(E_{1,2,3,4}^{(u)})^3 - \left(40\alpha^2 + \frac{441}{8}\right) (E_{1,2,3,4}^{(u)})^2 - \left(228\alpha^2 + \frac{855}{16}\right) E_{1,2,3,4}^{(u)} \\ + 144\alpha^4 + \frac{279}{2}\alpha^2 + \frac{81081}{256} = 0. \end{aligned} \quad (111)$$

Auch hier lässt sich weder eine Lösung noch eine Vereinfachung finden. Die numerischen Lösungen sind:

$$\begin{aligned} E_1^{(u)} &\approx -10,0360 \\ E_2^{(u)} &\approx -3,1637 \\ E_3^{(u)} &\approx 1,7650 \\ E_4^{(u)} &\approx 6,4347. \end{aligned}$$



Über die Eigenvektoren nehmen die Wellenfunktionen damit folgende Gestalt an:

$$\psi_1^{(u)}(x) \approx [1 + 6,7999 \cosh(x) - 4,2430 \cosh^2(x) - 14,8381 \cosh^3(x)] \cdot \exp\left(-\frac{1}{2} \cosh(x)\right)$$

$$\psi_2^{(u)}(x) \approx [1 - 2,3359 \cosh(x) - 5,3748 \cosh^2(x) + 0,8161 \cosh^3(x)] \cdot \exp\left(-\frac{1}{2} \cosh(x)\right)$$

$$\psi_3^{(u)}(x) \approx [1 + 1,7962 \cosh(x) - 0,8444 \cosh^2(x) + 0,0733 \cosh^3(x)] \cdot \exp\left(-\frac{1}{2} \cosh(x)\right)$$

$$\psi_4^{(u)}(x) \approx [1 - 0,8202 \cosh(x) + 0,1823 \cosh^2(x) - 0,0113 \cosh^3(x)] \cdot \exp\left(-\frac{1}{2} \cosh(x)\right)$$

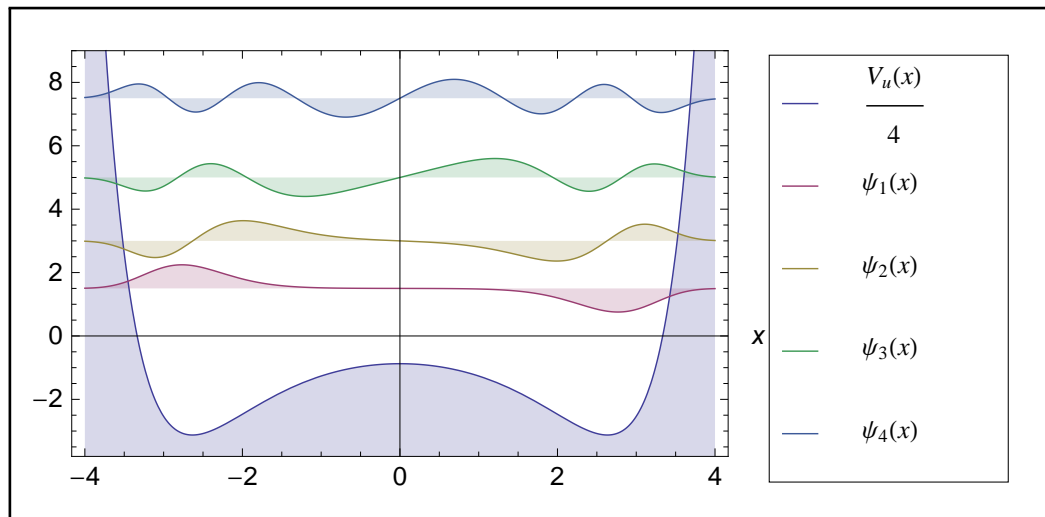


Abbildung 16:  $V_u(x)$  und numerisch berechnete und normierte  $\psi_{1,2,3,4}^{(u)}(x)$  mit  $\alpha = \frac{1}{2}$  und  $j = \frac{3}{2}$

### 4.3 Interpretation der Ergebnisse

Im Gegensatz zu dem in Kapitel 3 untersuchten Potential unterliegt das Hyperbolische Potential nicht der „energy reflection“-Symmetrie. Die Eigenwerte sind für alle betrachteten Beispiele bezüglich des Nullpunktes ungeordnet. Die numerisch errechneten Eigenwerte in Kapitel 4.2.3 lassen die Vermutung zu, dass auch bei diesem Potential eine Kondensation der Energien um den Nullpunkt auftritt. Qualitativ ist erkennbar, dass die Eigenwerte insgesamt ins Negative verschoben sind. Vergleicht man die Potentialverläufe (Abb. 9 und 1), ist genau dieser Effekt zu erwarten, da das Hyperbolische Potential bei Betrachtung des Ursprungs zum  $x^6$ -Potential in gewisser Weise abgesenkt ist.

Weitergehend tritt der Effekt, dass die Wellenfunktionen in energetisch höheren Zuständen denen eines harmonischen Oszillators ähneln, stärker auf als bei der Untersuchung des ersten Potentials. Dies wird besonders für den Fall  $j = \frac{3}{2}$  deutlich. In Abbildung 16 ist erkennbar, dass die Wellenfunktionen bei steigender Energie im Bereich der Mulden von einem extremalen Verhalten in zwei „separate“ harmonische Oszillatoren (vgl.  $\psi_3(x)$ ) übergeht und schlussendlich wieder das Verhalten eines einzigen harmonischen Oszillators annimmt.

Betrachtet man auch für dieses Potential die Knoten der Wellenfunktionen ergibt sich ein zum ersten Potential analoges Verhalten: Die tiefsten geraden Wellenfunktionen stellen die Grundzustände dar, wohingegen die tiefsten ungeraden Zustände die ersten angeregten sind.

## 5 Zusammenfassung

Durch die theoretische Betrachtung der Lie-Algebra  $\mathfrak{sl}(2, \mathbb{R})$  konnten Leiteroperatoren  $T_{0,+,-}$  gefunden werden, mit Hilfe derer Hamilton-Operatoren konstruiert werden können, die die geforderten Eigenschaften eines quasi-exakt lösbaren Systems enthalten (vgl. Kap. 2.5). Für die spätere Untersuchung der expliziten Potentiale, bzw. der entsprechenden Hamilton-Operatoren wurden die Leiteroperatoren zum einen in Form von Matrizen (16) und zum anderen durch Differentialoperatoren (15) dargestellt. Des Weiteren wurde ein Darstellungsraum  $\mathfrak{D}$  gefunden der gegenüber  $\hat{T}_{0,+,-}$  geschlossen ist. Die generalisierte Variable in  $\mathfrak{D}$  wird mit  $\xi(x)$  bezeichnet. Diese nimmt je nach betrachtetem Potential verschiedene Formen an.

Nach der Ausarbeitung der theoretischen Grundlagen wurden zwei Doppelmuldenpotentiale bezüglich ihrer Eigenwerte und Eigenfunktionen für verschiedene Werte von  $j$  untersucht. Insgesamt wird in der Berechnung deutlich, dass die Definition der exakten Lösbarkeit von jeweils  $2j + 1$  Eigenwerten zu relativieren ist: Abhängig von  $j$  führt die Lösung der Schrödingergleichung im Allgemeinen zwangsläufig auf die Lösung einer Gleichung des Grades  $2j + 1$ . Diese ist allerdings für  $j > \frac{3}{2}$  nur noch numerisch durchführbar. In Kapitel 3.2.3 konnte ein beispielhafter Spezialfall gefunden werden, bei dem sich die Gleichung derart vereinfacht, dass eine Lösung auch für einen höheren Grad möglich ist.

Die Untersuchung des anharmonischen Oszillators im  $x^6$  Potential lieferte die erwartete Symmetrie der Energiewerte bezüglich der Nullenergie [1]. Für den Fall  $j = \frac{3}{2}$  kann weitergehend eine Kondensation der Eigenwerte um den Nullpunkt beobachtet werden. Der Abstand der Energieniveaus nimmt also im negativen Bereich ab und im positiven Bereich wieder zu.

Im Allgemeinen nimmt das Potential sowohl positive als auch negative Eigenwerte an. Dies ist allerdings aufgrund der willkürlichen Wahl der Nullenergie nicht weiter aussagekräftig.

Des Weiteren konnte für alle betrachteten Fälle für die niedrigen Energiewerte ein extremales Verhalten der Wellenfunktionen im Bereich der Potentialmulden gefunden werden. Hinsichtlich der Tatsache, dass für das Betragsquadrat der Wellenfunktion in diesen Bereichen Maxima zu erwarten sind, entspricht dies in groben Zügen der klassischen Erwartung an die Problemstellung. Für höher angeregte Energieniveaus ähnelt die Wellenfunktion qualitativ betrachtet in ihrem Verlauf der Wellenfunktionen angeregter Niveaus im harmonischen Oszillator [5]. Diese Beobachtung kann durch die Vorstellung erklärt werden, dass das lokale Maximum des Potentials im Ursprung für sehr hochenergetische Teilchen innerhalb des Potentials an „Relevanz“ verliert und das Potential im Grenzfall in das eines harmonischen Oszillators übergeht. Gegen diesen Effekt wirkt der Einfluss von  $j$  auf das Potential (vgl. Abb. 1). Da bei steigendem  $j$  die Mulden des Potentials immer ausgeprägter werden, treten hier die Analogien zum harmonischen Oszillator erst bei höheren Energien auf (vgl. Abb. 3 und 8). So weisen die Wellenfunktionen in den Abbildungen 5 und 6 nur im Grundzustand das besagte extremale Verhalten auf. In den Abbildungen 7 und 8 sind die ersten 3 bzw. 4 Niveaus derart beschaffen. In Abbildung 8 wird zudem deutlich, dass dieser Effekt zwischen den einzelnen Niveaus offenbar „abrupt“ eintritt.

Das zweite, in diesem Fall hyperbolische, Doppelmuldenpotential lieferte durch die Untersuchung der Energieniveaus und Wellenfunktionen einen guten Vergleich zum anharmonischen Oszillator. Auch dieses Potential nimmt positive sowie negative Eigenwerte an. Ein symmetrisches Verhalten der Energien, wie es im  $x^6$  Potential beobachtet werden konnte, ist in diesem Potential jedoch nicht gegeben. Für den Fall  $j = \frac{3}{2}$  konnte keine exakte Lösung durch die erarbeiteten Methoden gefunden werden. Auch gibt es keine Werte für  $\alpha$ , die eine Vereinfachung des Problems bewirken. Um die Eigenwerte auf eine Kondensation in der Nähe der Nullenergie zu überprüfen, wurde dieser Fall numerisch betrachtet. Die numerische Lösung der Eigenwertgleichung lieferte Energieniveaus, die augenscheinlich ein ähnliches Verhalten bezüglich der Nullenergie aufweisen wie im ersten Potential.

Der Vergleich zum harmonischen Oszillator liefert ein zum  $x^6$  Potential analoges Verhalten. Das Verschwinden der Extremstellen der Wellenfunktionen tritt beim hyperbolischen Potential in ähnlicher Form auf wie beim anharmonischen Oszillator. Allerdings wird bei dieser Betrachtung deutlich, dass der Effekt schon bei niedrigeren Energien aufzutreten scheint.

Insgesamt sind die Energiewerte im hyperbolischen Potential ins Negative verschoben. Dies ist mit der Tatsache zu begründen, dass dieses insgesamt im Vergleich zum  $x^6$  Potential abgesenkt zu sein scheint. Dies bewirkt trivialerweise eine globale Absenkung der Energieeigenwerte. Dieser Interpretationsansatz ist allerdings durch die Tatsache zu relativieren, dass für die ungeraden Zustände ein konstanter Term vernachlässigt wird (s. (84)).

Insgesamt zeigen die Lösungen zu beiden Potentialen qualitativ ein analoges Verhalten. Vergleicht man die Plots der verschiedenen Potentiale für verschiedene  $j$  miteinander, wird deutlich, dass die Wellenfunktionen einen sehr ähnlichen Verlauf aufweisen. Aufgrund der ähnlich aufgebauten Potentiale entspricht dies der Erwartung. Die gefundenen Eigenwerte und Eigenfunktionen sind jeweils die niedrigsten geraden bzw. ungeraden Zustände, die das Potential annimmt.

## Literatur

- [1] M.A. SHIFMAN:  
*ITEP Lectures on Particle Physics and Field Theory*  
World Scientific, Singapur, 1999.
- [2] BRONSTEIN, SEMENDJAJEW, MUSIOL, MÜHLIG:  
*Taschenbuch der Mathematik; 7. Auflage*  
Verlag Harri Deutsch, Frankfurt a. Main, 2008.
- [3] CHRISTIAN B. LANG, NORBERT PUCKER:  
*Mathematische Methoden in der Physik; 2. Auflage*  
Spektrum Akademischer Verlag, München, 2005.
- [4] CLAUDE COHEN-TANNOUJDI, BERNARD DIU, FRANK LALOË:  
*Quantenmechanik Band 1; 3. Auflage*  
Walter de Gruyter GmbH, Berlin, 2007
- [5] GERNOT MÜNSTER:  
*Quantentheorie; 2. Auflage*  
Walter de Gruyter GmbH, Berlin, 2010.

Folgende Programme wurden für die Erstellung von Grafiken und für Rechnungen verwendet:

- WOLFRAM RESEARCH EUROPE, LTD.:  
*Mathematica*, Vers. 8.0.4.0

## **Erklärung**

Hiermit versichere ich, dass ich die vorliegende Arbeit selbstständig verfasst und keine anderen als die angegebenen Quellen und Hilfsmittel benutzt habe, dass alle Stellen der Arbeit, die wörtlich oder sinngemäß aus anderen Quellen übernommen wurden, als solche kenntlich gemacht sind und dass die Arbeit in gleicher oder ähnlicher Form noch keiner Prüfungsbehörde vorgelegt wurde.

Münster, den 6. Juli 2012