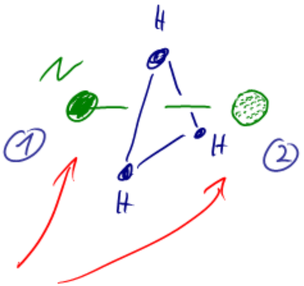
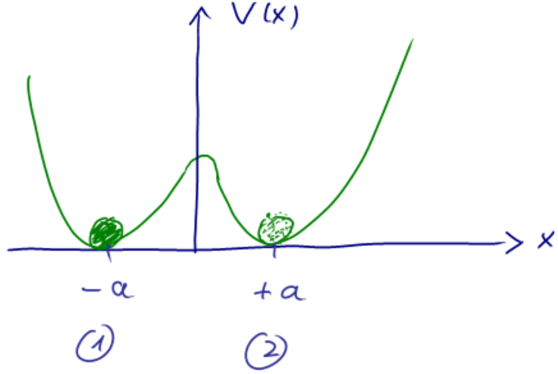
# Teilchen im Doppelmuldenpotenzial:

z. B. N-Atom im Ammoniak-Molekül $NH_3$:




$\rightarrow \hat{x} \quad \hat{=}$




äquivalente Positionen des N-Atoms

Welche Position nimmt N-Atom im Grundzustand ein?

klassische Physik: ① oder ②

Quantenmechanik: beide zugleich: Grundzustand ist Superposition von ① und ② !

## Quantenmechanische Beschreibung:

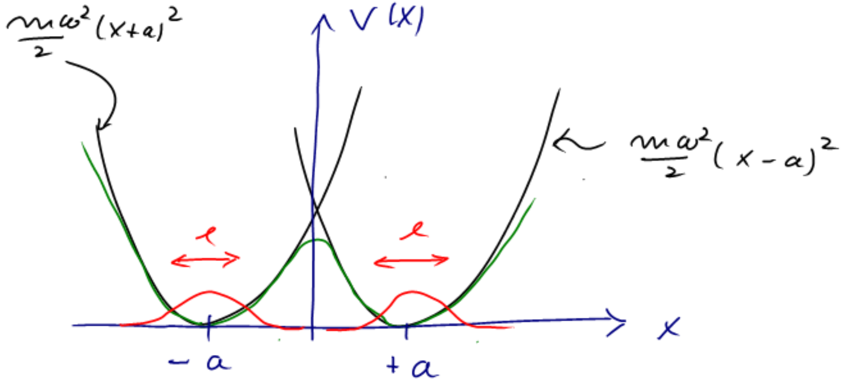
naiver Zugang (z.B. mittels Modellpotenzial $V(x) = c_1 x^2 + c_2 x^4$

$\rightarrow H = p^2/2m + V \rightarrow$ Schröd. Gleichung in Ortsdarstellung, etc.) schwierig,

Statt dessen: Beschreibung mittels Näherungsmethoden

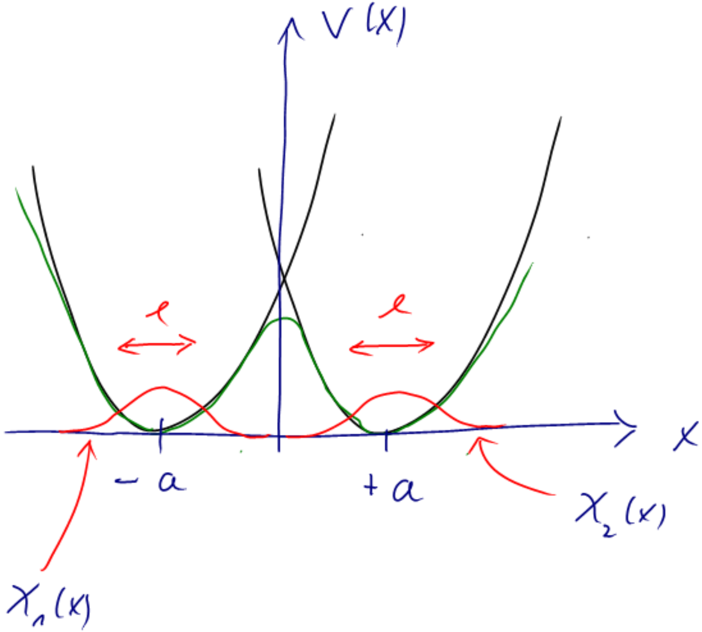
Ausgangspunkt: nahe Gleichgewichtslagen bei $x = \pm a$ Potenzial in guter Näherung parabolisch:

$$V(x) \approx \frac{m\omega^2}{2} \begin{cases} (x+a)^2 & : x \approx -a \\ (x-a)^2 & : x \approx +a \end{cases}$$




$\boxed{2 \times \text{ harm. Oszillator!}}$

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




$|\chi_1\rangle$ : Grundzustand harm. Oszill., $\omega$, $x_0 = -a$

$|\chi_2\rangle$ : Grundzustand harm. Oszill., $\omega$, $x_0 = +a$

$\downarrow$

$$\boxed{\chi_{1/2}(x) = (\pi l^2)^{-\frac{1}{4}} e^{-(x \pm a)^2/2l^2}}$$

$\rightsquigarrow$ im Grenzfall $\frac{a}{l} \to \infty$ <u>kein</u> Tunneln $\rightsquigarrow$ Teilchen <u>entweder</u> bei $x = -a$ <u>oder</u> $x = +a$

**Was passiert bei $\frac{a}{l}$ „groß", aber endlich?**

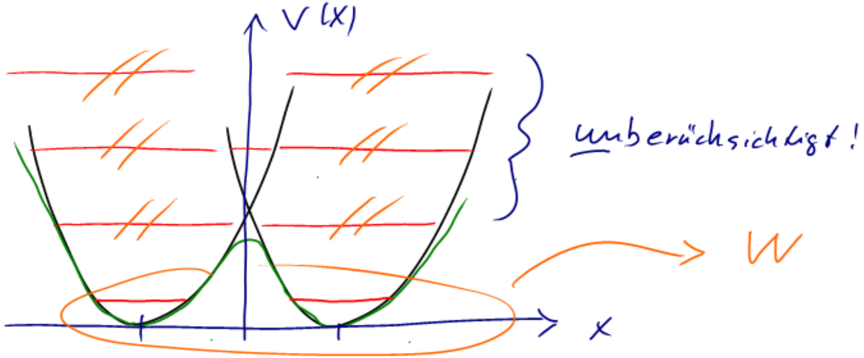
→ "Störungstheorie" basierend auf Annahme, dass

<u>Grundzustand</u> $|\psi_0\rangle$ in <u>guter Näherung</u> durch Linear-kombination von $|\chi_1\rangle$ und $|\chi_2\rangle$ darstellbar.

m.a.W.: $|\psi_0\rangle$ <u>exakter</u> Grundzustand des <u>genäherten</u> ("effektiven") Hamiltonian

$$\boxed{\tilde{H} = P H P}$$

wobei $P$ Projektion auf $W = \mathrm{Span}\{|\chi_1\rangle, |\chi_2\rangle\} \subset \mathcal{H}$



ONB von $W = \mathrm{Span}\{|\chi_1\rangle, |\chi_2\rangle\}$ ?

Problem: $|\chi_1\rangle, |\chi_2\rangle$ normiert, aber nicht orthogonal:

$$\langle \chi_1 | \chi_2 \rangle = \int \frac{dx}{\sqrt{\pi \ell^2}} e^{-(x+a)^2/2\ell^2} e^{-(x-a)^2/2\ell^2} = \underbrace{\int \frac{dx}{\sqrt{\pi \ell^2}} e^{-x^2/\ell^2}}_{=1} \cdot e^{-a^2/\ell^2}$$

d. h. $\boxed{\langle \chi_1 | \chi_2 \rangle = e^{-a^2/\ell^2} =: \lambda}$ $\rightarrow$ $0 < \lambda \ll 1$ !

Trick:
- $|a_1\rangle := |\chi_1\rangle + |\chi_2\rangle$, $|a_2\rangle := |\chi_1\rangle - |\chi_2\rangle$
  offenbar orthogonal;
- $\| a_1 \|^2 = 2 + 2\lambda$, $\| a_2 \|^2 = 2 - 2\lambda$

$\rightarrow$

$$\boxed{\begin{aligned} |\alpha_1\rangle &:= (2+2\lambda)^{-1/2} (|\chi_1\rangle + |\chi_2\rangle) \\ \text{und} \quad |\alpha_2\rangle &:= (2-2\lambda)^{-1/2} (|\chi_1\rangle - |\chi_2\rangle) \quad \text{bilden ONB} \end{aligned}}$$

$$\rightarrow \quad P = |\alpha_1\rangle\langle\alpha_1| + |\alpha_2\rangle\langle\alpha_2| = \sum_{l=1,2} |\alpha_l\rangle\langle\alpha_l|$$

$$\rightarrow \quad \tilde{H} = PHP = \sum_{l,m=1,2} |\alpha_l\rangle \underbrace{\langle\alpha_l|H|\alpha_m\rangle}_{=:\,H_{lm}} \langle\alpha_m|$$

$$= \sum_{l,m} H_{lm} \, |\alpha_l\rangle\langle\alpha_m|$$

$\rightarrow$ Matrixdarstellung von $\tilde{H}$ bzgl. $B = \{|\alpha_1\rangle, |\alpha_2\rangle\}$ :

$$\underline{\underline{\tilde{H}}} = \begin{pmatrix} H_{11} & H_{12} \\ H_{21} & H_{22} \end{pmatrix}$$

$\rightarrow$ bestimme $H_{11}$, $H_{12}$, $H_{22}$, $H_{11}$ unter Berücksichtigung aller Symmetrien: $\langle\chi_1|H|\chi_1\rangle \overset{!}{=} \langle\chi_2|H|\chi_2\rangle$ ; $\langle\chi_1|H|\chi_2\rangle \overset{!}{=} \langle\chi_2|H|\chi_1\rangle$ :

- $H_{11} = \langle \alpha_1 | H | \alpha_1 \rangle = \frac{1}{1+\lambda} \left( \langle \chi_1 | H | \chi_1 \rangle + \langle \chi_1 | H | \chi_2 \rangle \right)$ (1)

- $H_{22} = \langle \alpha_2 | H | \alpha_2 \rangle = \frac{1}{1-\lambda} \left( \langle \chi_1 | H | \chi_1 \rangle - \langle \chi_1 | H | \chi_2 \rangle \right)$ (2)

- $H_{12} = \langle \alpha_1 | H | \alpha_2 \rangle \overset{!}{=} 0$ , $H_{21} = \langle \alpha_2 | H | \alpha_1 \rangle \overset{!}{=} 0$

$\rightarrow$ $\tilde{H} = \begin{pmatrix} H_{11} & 0 \\ 0 & H_{22} \end{pmatrix}_B$ ; d.h. $\underline{\underline{|\alpha_1\rangle}} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_B$ Energieeigenzust. zur Energie $\underline{\underline{H_{11}}}$,

$\underline{\underline{|\alpha_2\rangle}} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_B$ Energieeigenzustand zur Energie $\underline{\underline{H_{22}}}$

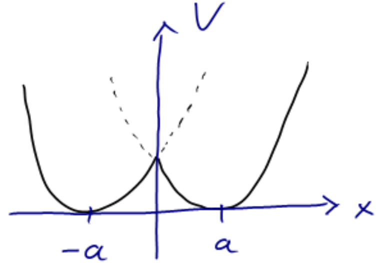
um zu entscheiden ob $H_{11} < H_{22}$ ($\rightarrow |\alpha_1\rangle$ Grundzustand) oder $H_{22} < H_{11}$ ($\rightarrow |\alpha_2\rangle$ Grundzustand) müssen wir $H_{11}$, $H_{22}$ nach (1) bzw. (2) weiter auswerten $\rightarrow$

mit Hamiltonian $H = p^2/2m + V$ in Ortsdarstellung,

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) ,$$

und speziell gewähltem Potenzial

$$V(x) = \frac{m\omega^2}{2}\begin{cases} (x+a)^2 & : x < 0 \\ (x-a)^2 & : x > 0 \end{cases}$$




sowie $\chi_{1/2}(x) = (\pi\ell^2)^{-1/4}\, e^{-(x\pm a)^2/2\ell^2}$ erhält man nach etwas Rechnen

$$\boxed{H_{11} = \frac{\hbar\omega}{2}(1-\lambda) , \quad H_{22} = \frac{\hbar\omega}{2}(1+\lambda)} ,$$

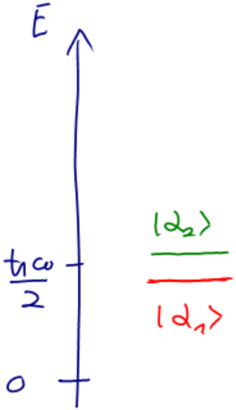
jeweils in führender Ordnung von $\lambda = e^{-a^2/\ell^2} \ll 1$ .

$\rightarrow$ • $|\alpha_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2+2\lambda}}\left(|\chi_1\rangle + |\chi_2\rangle\right)$ ist Grundzustand

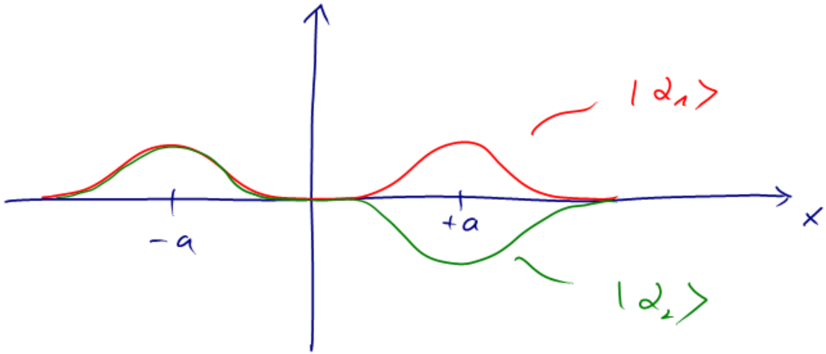
mit Energie $E_1 = \frac{\hbar\omega}{2}(1-\lambda)$ (symmetrisch)

• $|\alpha_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2-2\lambda}}\left(|\chi_1\rangle - |\chi_2\rangle\right)$ ist Energieeigenzust.

mit Energie $E_2 = \frac{\hbar\omega}{2}(1+\lambda)$ (anti-symmetrisch)



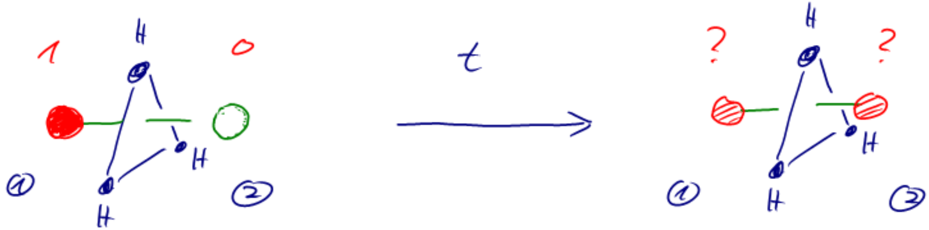

$$\updownarrow\ \Delta E = \hbar\omega\lambda = \hbar\omega e^{-a^2/\ell^2}$$




Literatur zum Doppelmuldenpotenzial: Feynman Lectures III, Ch. 8, 9

## Übungsaufgaben:

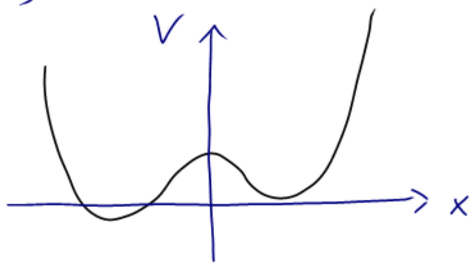
1) N-Atom befinde sich bei $t=0$ im Zustand $|\chi_1\rangle$. Mit welcher Wkt liegt es bei $t>0$ in $|\chi_1\rangle$ bzw $|\chi_2\rangle$ vor?




$t=0$ $\qquad\qquad\qquad\qquad$ $t>0$

2) $NH_3$-Molekül im homogenen elektrischen Feld $\vec{E} = E_0 \hat{x}$:

$\rightarrow$




Grundzustand?

Eigenenergien?

Anwendung: Ammoniak-Maser

Microwave
amplification by
stimulated
emission of
radiation

siehe z.B. Feynman Lectures III, Ch. 9.