

# Näherungsmethoden

**Tutoren:**

Jinming Lu, Konrad Schönleber

19.02.09

Nur wenige quantenmechanische Probleme (z.B. der harmonische Oszillator dieser ist jedoch oft selbst eine Näherung) lassen sich exakt lösen, es ist somit nötig verschiedene Näherungsmethoden zu verwenden.

In dieser Vorlesung werden wir drei Näherungsmethoden betrachten, die verschiedene Problemstellungen abdecken.

Mit der Störungstheorie kann man Probleme behandeln, bei denen sich der Hamiltonoperator nur um einen kleinen Zusatzterm von einem exakt lösbaeren Hamiltonoperator unterscheidet.

Die Variationsmethode kann verwendet werden, wenn das Aussehen der Wellenfunktion bereits ungefähr bekannt ist. Man variiert dann einen Parameter und optimiert damit das Ergebnis. Man verwendet die Variationsmethode meist zur Bestimmung der Grundzustandsenergie.

Die WKB-Näherung schließlich ist eine sogenannte semi-klassische Näherungsmethode und kann in (1d-)Systemen verwendet werden in denen die kinetische Energie viel größer als die potentielle Energie ist.

## 1 Störungstheorie

In der Störungstheorie sind zwei grundsätzlich verschiedene Fälle zu unterscheiden.

Die zeitunabhängige Störungstheorie beschäftigt sich mit der Veränderung der bekannten Eigenzustände und der entsprechenden Energien.

Im Gegensatz dazu macht man mit Hilfe der zeitabhängigen Störungstheorie Aussagen über die Übergangswahrscheinlichkeiten zwischen den ungestörten Zuständen unter Einfluss der Störung.

### 1.1 Zeitunabhängige Störungstheorie

Wir nehmen folgenden Hamiltonoperator an:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \lambda \hat{H}_1$$

wobei  $\hat{H}_0$  ein exakt lösbarer Hamiltonoperator mit  $\hat{H}|n_0\rangle = E_n^0|n_0\rangle$  und  $\lambda \hat{H}_1$  ein kleiner Störterm sind.

Wir betrachten zunächst den Fall energetisch nicht entarteter Zustände, d.h. zu jedem  $E_n^0$  gibt es nur genau einen Eigenzustand  $|n_0\rangle$ .

Weiterhin nehmen wir hier an, dass  $\lambda$  klein ist und die Erwartungswerte von  $\hat{H}_1$  höchstens in der selben Größenordnung wie die von  $\hat{H}_0$  liegen.

Die grundlegende Annahme ist nun, dass jeder ungestörten Eigenzustand  $|n_0\rangle$  durch die Störung in einen Zustand des gestörten Systems  $|n\rangle$  überführt wird.

Es gilt also:

$$\lim_{\lambda \rightarrow 0} |n\rangle = |n_0\rangle$$

Wir entwickeln nun den gesuchten Eigenzustand des gestörten Systems  $|n\rangle$  in Eigenzustände des ungestörten Systems:

$$|n\rangle = c_{n_0}|n_0\rangle + \sum_{m_0 \neq n_0} d_{m_0}|m_0\rangle$$

Wir sehen:

$$\langle n|n\rangle = 1 \Rightarrow |c_{n_0}|^2 + \sum_{m_0 \neq n_0} |d_{m_0}|^2 = 1$$

Da die Eigenzustände des ungestörten Systems eine Orthonormalbasis bilden, gilt näherungsweise (linear in  $\lambda$ ) wegen  $\lim_{\lambda \rightarrow 0} |n\rangle = |n_0\rangle$ :

$$c_{n_0} = 1 \quad \text{und} \quad d_{m_0} = O(\lambda)$$

Nun betrachten wir mit einem beliebigen ungestörten Eigenzustand  $|l_0\rangle \neq |n_0\rangle$ :

$$(\hat{H} - E_n)|n\rangle = 0$$

$$\Rightarrow \langle l_0 | (\hat{H} - E_n) | n \rangle = d_{l_0} (E_{l_0} - E_n) + \lambda \langle l_0 | \hat{H}_1 | n_0 \rangle + \lambda \sum_{m_0 \neq n_0} d_{m_0} \langle l_0 | \hat{H}_1 | m_0 \rangle = 0$$

Der dritte Term ist  $\propto \lambda^2$  und kann daher in linearer Näherung vernachlässigt werden.

Wir erhalten also Näherung:

$$d_{l_0} = \lambda \frac{\langle l_0 | \hat{H}_1 | n_0 \rangle}{E_n - E_{l_0}} + O(\lambda^2)$$

Damit können wir nun den Zustand  $|n\rangle$  aufschreiben:

$$|n\rangle = |n_0\rangle + \lambda \sum_{m_0 \neq n_0} \frac{\langle m_0 | \hat{H}_1 | n_0 \rangle}{E_n - E_{m_0}} |m_0\rangle + O(\lambda^2)$$

Die Eigenenergien erhalten wir über:

$$\langle n_0 | (\hat{H} - E_n) | n \rangle = (E_{n_0} - E_n) + \lambda \langle n_0 | \hat{H}_1 | n_0 \rangle + \lambda \sum_{m_0 \neq n_0} d_{m_0} \langle n_0 | \hat{H}_1 | m_0 \rangle = 0$$

$$\Rightarrow E_n = E_{n_0} + \lambda \langle n_0 | \hat{H}_1 | n_0 \rangle + \lambda^2 \sum_{m_0 \neq n_0} \frac{|\langle n_0 | \hat{H}_1 | m_0 \rangle|^2}{E_{n_0} - E_{m_0}} + O(\lambda^3)$$

Wir erkennen sofort die Energiekorrekturen 1. und 2. Ordnung.

Wir wollen nun noch die mögliche energetische Entartung der ungestörten Zustände berücksichtigen (z.B. Wasserstoffatom).  
 Es folgt hier nun keine lange Herleitung, sondern nur ein plausibles Ergebnis.  
 Es gelte:

$$\hat{H}_0|n_0^i\rangle = E_{n_0}$$

Wir schreiben nun:

$$|n\rangle = \sum_i \alpha_i |n_0^i\rangle + \lambda \sum_{m_0 \neq n_0} \frac{\langle m_0 | \hat{H}_1 | n_0 \rangle}{E_{n_0} - E_{m_0}} \sum_i \beta_i |m_0^i\rangle + O(\lambda^2)$$

Wir betrachten Energiekorrekturen nun nur noch linear in  $\lambda$  und können den letzten Term vernachlässigen:

$$\sum_i |\alpha_i|^2 = 1 \Rightarrow$$

$$\langle n | \hat{H} | n \rangle = \underbrace{\sum_i |\alpha_i|^2 E_{n_0}}_{=E_{n_0}} + \lambda \sum_i \sum_j \alpha_j^* \alpha_i \langle n_0^j | \hat{H}_1 | n_0^i \rangle$$

Damit gilt für die Energiekorrektur 1.Ordnung in  $\lambda$ :

$$\alpha_j (\langle n | \hat{H} | n \rangle - E_{n_0}) = \lambda \sum_i \alpha_i \langle n_0^j | \hat{H}_1 | n_0^i \rangle$$

Mit dieser Formel kann man die Energiekorrekturen 1.Ordnung in  $\lambda$  berechnen.

## 1.2 Zeitabhängige Störungstheorie

Nun gehen wir davon aus, dass wir zu einem ungestörten System mit zeitunabhängigem Hamiltonoperator  $\hat{H}_0$  zur Zeit  $t = t_0$  eine Störung  $V(t)$  hinzuschalten.

$$i\hbar \partial_t |\Psi(t)\rangle = (H_0 + \Theta(t - t_0)V(t)) |\Psi(t)\rangle$$

Mit der Anfangsbedingung:  $|\Psi(t)\rangle = |\Psi_0(t)\rangle$  falls  $t \leq t_0$

Wir wechseln in das sog. Wechselwirkungsbild (Dirac-Bild), um die Zeitentwicklung verursacht durch den Operator  $H_0$  loszuwerden und nur noch die durch das hinzugeschaltete Potential verursachte Zeitentwicklung zu berücksichtigen.

Wir definieren dazu:

$$|\Psi(t)\rangle_I = e^{iH_0 t/\hbar} |\Psi(t)\rangle$$

Wir leiten dies nach der Zeit ab und setzen die Schrödingergleichung ein:

$$i\hbar \partial_t |\Psi(t)\rangle_I = -H_0 |\Psi(t)\rangle_I + e^{iH_0 t/\hbar} (H_0 + V(t)) |\Psi(t)\rangle$$

$$\Rightarrow i\hbar \partial_t |\Psi(t)\rangle_I = \underbrace{e^{iH_0 t/\hbar} V(t) e^{-iH_0 t/\hbar}}_{:=V_I(t)} |\Psi(t)\rangle_I$$

Wir schreiben nun diese Gleichung in der Integraldarstellung:

$$|\Psi(t)\rangle_I = |\Psi(t_0)\rangle_I + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t V_I(t') |\Psi(t')\rangle_I dt'$$

Wir führen nun Picard Iteration bis zur ersten Ordnung (Übergänge erster Ordnung) aus und erhalten:

$$|\Psi(t)\rangle_I = |\Psi(t_0)\rangle_I + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t V_I(t') |\Psi(t_0)\rangle_I dt'$$

Nun nehmen wir an, der ungestörte Hamiltonoperator  $H_0$  habe die Energieeigenzustände  $|n(t)\rangle =: e^{-iH_0 t/\hbar} |n\rangle$  mit den Energieeigenwerte  $E_n$ .

Wir wollen nun die Übergangswahrscheinlichkeit 1.Ordnung vom Zustand  $|n\rangle$  in den Zustand  $|m\rangle$  berechnen.

Die Übergangsamplitude ist:

$$\langle m(t)|\Psi(t)\rangle = \langle m|e^{iH_0 t\hbar}|\Psi(t)\rangle = \langle m|\Psi(t)\rangle_I$$

Der Anfangszustand ist wenig überraschend:

$$|\Psi_0(t_0)\rangle_I = |\Psi(t_0)\rangle_I = e^{iH_0 t_0/\hbar} |n(t_0)\rangle = |n\rangle$$

Wir erhalten also:

$$|\Psi(t)\rangle_I = |n\rangle + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t V_I(t') |n\rangle dt'$$

Damit ergibt sich die Übergangsamplitude zu:

$$\begin{aligned} \langle m(t)|\Psi(t)\rangle &= \langle m|\Psi(t)\rangle_I = \underbrace{\langle m|n\rangle}_{=\delta_{mn}} + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t \langle m|V_I(t')|n\rangle dt' = \\ &= \delta_{mn} + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t e^{i(E_m - E_n)t'/\hbar} \langle m|V(t')|n\rangle dt' \end{aligned}$$

Die Übergangswahrscheinlichkeit zwischen verschiedenen Zuständen ist also:

$$P_{nm}(t) = |\langle m(t)|\Psi(t)\rangle|^2 = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_{t_0}^t e^{i(E_m - E_n)t'/\hbar} \langle m|V(t')|n\rangle dt' \right|^2$$

### 1.2.1 Fermis Goldene Regel

Wir betrachten nun den Fall einer eingeschalteten, konstanten Störung.

$$V(t) = \Theta(t)V_0$$

Wir werden sehen, dass Übergänge 1.Ordnung hier nur in einem Kontinuum von Zuständen möglich sind.

Es gilt nämlich:

$$P_{nm}(t) = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_0^t e^{i(E_m - E_n)t'/\hbar} \langle m|V|n\rangle dt' \right|^2$$

Es folgt mit  $\omega_{mn} := \frac{E_m - E_n}{\hbar}$ :

$$P_{nm}(t) = \frac{1}{\hbar^2} \left| \frac{e^{i\omega_{mn}t} - 1}{\omega_{mn}} \langle m|V|n\rangle \right|^2 = \frac{1}{\hbar^2} \left( \frac{\sin(\omega_{mn}t/2)}{\omega_{mn}/2} \right)^2 |\langle m|V|n\rangle|^2$$

Für ausreichend große Zeiten gilt:  $\left(\frac{\sin(\omega_{mn}t/2)}{\omega_{mn}/2}\right) = 2\pi t\delta(\omega_{mn})$

Damit folgt:

$$P_{nm} = \frac{2\pi t}{\hbar} \delta(E_m - E_n) |\langle m|V|n\rangle|^2$$

Für die Übergangswahrscheinlichkeit pro Zeit gilt demnach:

$$\Gamma_{nm} = \frac{2\pi}{\hbar} \delta(E_m - E_n) |\langle m|V|n\rangle|^2$$

In einem Kontinuum von Zuständen sind somit Übergänge möglich, dort gilt mit der Zustandsdichte  $\rho(E_m)$ :

$$\sum_n \Gamma_{nm} = \int \rho(E_m) \Gamma_{nm} dE_m = \rho(E_m) \frac{2\pi}{\hbar} |\langle m|V|n\rangle|^2$$

## 2 Variationsmethode

Die Variationsmethode ist gut geeignet die Energie des Grundzustandes eines komplizierten Systems zu finden.

Seien  $|n\rangle$  die Eigenzustände des Hamiltonoperators  $H$ , dann folgt für einen beliebigen  $|\Psi\rangle$ :

$$\begin{aligned} \langle \Psi|H|\Psi\rangle &= \sum_n \langle n|\Psi\rangle \langle n|H|\Psi\rangle = \sum_n E_n |\langle n|\Psi\rangle|^2 \geq E_0 \sum_n |\langle n|\Psi\rangle|^2 = E_0 \langle \Psi|\Psi\rangle \\ &\Rightarrow E_0 \leq \frac{\langle \Psi|H|\Psi\rangle}{\langle \Psi|\Psi\rangle} \end{aligned}$$

Wir müssen also zu einem gegebenen Problem zunächst eine sinnvolle, von einem Parameter abhängige Wellenfunktion finden und diese dann minimieren.

Die Energie wird dabei sehr genau bestimmt. Um dies einzusehen betrachten wir einen Zustand, der vom exakten Zustand minimal abweicht:

$$|\Psi\rangle = |\Psi_0\rangle + |\epsilon\rangle$$

mit  $\sqrt{\langle \epsilon|\epsilon\rangle}$  klein.

Dann folgt:

$$\frac{\langle \Psi|H|\Psi\rangle}{\langle \Psi|\Psi\rangle} = \frac{E_n + \langle \epsilon|H|\epsilon\rangle}{\langle n|n\rangle + \langle \epsilon|\epsilon\rangle} = E_n + O(\langle \epsilon|\epsilon\rangle)$$

## 3 WKB-Näherung

Die WKB-Näherung kann besonders gut für 1d-Probleme mit hoher kinetischer Energie verwendet werden, also z.B. bei der Streuung hochenergetischer Teilchen an einem Target.

Wir gehen hierbei davon aus, dass die de-Broglie-Wellenlänge  $\lambda = \frac{2\pi\hbar}{p}$  nur langsam im Bereich des Potentials variiert.

Die Methode ist halbklassisch, d.h. wir gehen zwar von der Schrödingergleichung aus, setzen aber einen klassischen Impuls ein:

$$p(x) := \sqrt{2m(E - V(x))}$$

Die Schrödingergleichung erhält damit die Form:

$$\partial_x^2 \Psi(x) + \frac{p^2(x)}{\hbar^2} \Psi(x) = 0$$

Die Änderung des klassischen Impulses ist nur schwach im betrachteten Bereich:

$$\hbar |\partial_x p(x)| \ll |p(x)|^2$$

Wir setzen nun für  $\Psi(x)$  mit einer einfachen Exponentialfunktion an:

$$\Psi(x) = e^{\frac{i}{\hbar} S(x)}$$

$S$  hat dieselbe Dimension wie  $\hbar$ , nämlich die einer Wirkung.

Wir entwickeln nun  $S$  in eine Reihe über  $\hbar$ :

$$S(x) = W(x) + \frac{\hbar}{i} W_1(x) + O(\hbar^2)$$

Aus der Schrödingergleichung folgt nun:

$$\begin{aligned} i\hbar S''(x) \Psi(x) - S'^2(x) \Psi(x) &= -p^2(x) \Psi(x) \\ \Rightarrow (W')^2 - i\hbar(W'' + 2W_1'W') + O(\hbar^2) &= p^2 \end{aligned}$$

Aufgrund der Forderung  $\hbar |\partial_x p(x)| \ll |p(x)|^2$  vernachlässigen wir die  $O(\hbar^2)$  Term und es gilt näherungsweise:

$$\begin{aligned} W'' + 2W_1'W' &= 0 \\ \Rightarrow W_1' &= \frac{d}{dx} \ln(W')^{-\frac{1}{2}} \end{aligned}$$

Weiterhin folgt aus dem Wegfall der  $O(\hbar)$  Terme:

$$W(x) = \pm \int_x p(x') dx'$$

Wir fassen nun also zusammen:

$$\begin{aligned} W_1(x) = \ln(W'(x))^{-\frac{1}{2}} &\Rightarrow e^{W_1(x)} = \frac{1}{\sqrt{p(x)}} \\ \Rightarrow \Psi(x) = \frac{1}{\sqrt{p^2(x)}} \exp\left(\pm \int_x p(x') dx'\right) &=: \frac{1}{\sqrt{p^2(x)}} e^{\pm i\omega(x)} \end{aligned}$$

Im klassisch erlaubten Bereich  $E \geq V(x)$  liefert dies oszillierende und im klassisch verbotenen Bereich exponentiell fallende Lösungen.