

Ferienkurs *Quantenmechanik* – Sommer 2009

Quantenmechanik mit Näherungsmethoden

1 Mehrteilchensystem

Zwei identische Bosonen werden in einem unendlich hohen Potentialtopf mit Wänden bei $x = 0, a$ platziert. Ihr Zustand sei das symmetrisierte Produkt der Einteilchenwellenfunktionen

$$|n_1 n_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|n_1\rangle|n_2\rangle + |n_2\rangle|n_1\rangle) \quad (1)$$

Mit der Einteilchenwellenfunktion in Ortsdarstellung

$$\langle x|n\rangle = \psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \quad (2)$$

Wir lassen sie über ein Potential schwach miteinander wechselwirken

$$V(x_1, x_2) = -aV_0\delta(x_1 - x_2) \quad (3)$$

Berechnen sie die Grundzustandsenergie in erster Ordnung Störungstheorie.

Hinweis:

$$\int \sin^4(ax) dx = \frac{3}{8}x - \frac{1}{4a} \sin(2ax) + \frac{1}{32} \sin(4ax) \quad (4)$$

Musterlösung:

Die Energiekorrektur in erster Ordnung Störungstheorie ist

$$\langle 00| -aV_0\delta(x_1 - x_2) |00\rangle = -a \int_0^a \int_0^a \left(\frac{2}{a}\right)^2 V_0 \sin^2\left(\frac{n_1\pi x_1}{a}\right) \sin^2\left(\frac{n_2\pi x_2}{a}\right) \delta(x_1 - x_2) dx_1 dx_2 \quad (5)$$

$$= -\frac{4V_0}{a} \int_0^a \sin^2\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \sin^2\left(\frac{n\pi x}{a}\right) dx \quad (6)$$

$$= -\frac{4V_0}{a} \int_0^a \sin^4\left(\frac{n\pi x}{a}\right) dx \quad (7)$$

Mit dem Hinweis wird die letzte Gleichung zu

$$E_0^0 = -\frac{4V_0}{a} \left[\frac{3}{8}x - \frac{1}{4a} \sin(2ax) + \frac{1}{32} \sin(4ax) \right]_0^a \quad (8)$$

$$= -\frac{4V_0}{a} \cdot \frac{3a}{8} \quad (9)$$

$$= -\frac{3V_0}{2} \quad (10)$$

Die Energie in erster Ordnung Störungstheorie ist

$$E_0 \cong E_{n_1}^0 + E_{n_2}^0 - \frac{3V_0}{2} \quad (11)$$

$$= \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} (1^2 + 1^2) - \frac{3V_0}{2} \quad (12)$$

$$= \frac{\hbar^2 \pi^2}{ma^2} - \frac{3V_0}{2} \quad (13)$$

2 Zweidimensionaler harmonischer Oszillator

Der Hamiltonoperator eines zweidimensionalen harmonischen Oszillators habe die Form

$$H = \frac{(p_x^2 + p_y^2)}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 (x^2 + y^2) + \frac{1}{2}m\omega^2 \cdot 2\lambda xy \quad (14)$$

1. Berechnen sie durch die Störung hervorgerufene Energieänderung in 1. und 2. Ordnung Störungstheorie

(a) für den Grundzustand. Benutzen sie Auf- und Absteigeoperatoren

$$a = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(x + \frac{ip}{m\omega} \right) \quad (15)$$

$$a^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(x - \frac{ip}{m\omega} \right) \quad (16)$$

- (b) für das zweifach entartete niedrigste angeregte Niveau (nur 1. Ordnung)
Berechnen Sie hierbei nicht nur

$$\langle 10|H'|10\rangle; \quad \text{mit } \langle n_x^0 n_y^0 | H' | n_x^0 n_y^0 \rangle$$

und

$$\langle 01|H'|01\rangle$$

sondern auch

$$\langle 10|H'|01\rangle \quad \& \quad \langle 01|H'|10\rangle$$

und schreiben sie die Ergebnisse als Matrixgleichung

$$\begin{pmatrix} \langle 10|H'|10\rangle & \langle 10|H'|01\rangle \\ \langle 01|H'|10\rangle & \langle 01|H'|01\rangle \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = E_1^1 \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \quad (17)$$

Die Koeffizienten a und b sind die Koeffizienten vor $|10\rangle$ und $|01\rangle$, da jede Linearkombination von ihnen die Schrödingergleichung des ungestörten harmonischen Oszillators löst

$$|1^0\rangle = a|10\rangle + b|01\rangle \quad (18)$$

Wenn sie gerade Spass dran haben diagonalisieren sie die Matrix (Eigenwerte ausrechnen reicht aber auch). Die Eigenwerte entsprechen der Energiekorrektur, die Eigenvektoren den Zuständen in erster Ordnung *entarteter* Störungstheorie, welche durch die Störung ihre Entartung verlieren...

2. Berechnen sie die exakten Energieniveaus durch Koordinatentransformation auf

$$\begin{pmatrix} \bar{x} \\ \bar{y} \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$$

und vergleichen sie die Ergebnisse mit 1). *Hinweis: Das Quadrat eines Vektors a^2 ist invariant unter Drehungen in der x - y -Ebene!*

Musterlösung:

1. Die Operatorgleichung erstmal hinschreiben

$$\begin{pmatrix} a \\ a^\dagger \end{pmatrix} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \begin{pmatrix} 1 & \frac{i}{m\omega} \\ 1 & -\frac{i}{m\omega} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} \quad (19)$$

Invertieren bringt

$$\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = -\frac{1}{i} \sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}} \begin{pmatrix} -\frac{i}{m\omega} & -\frac{i}{m\omega} \\ -1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ a^\dagger \end{pmatrix} \quad (20)$$

Daraus lesen wir x und y in Auf- und Absteigeoperatoren ab

$$x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (a_x + a_x^\dagger) \quad (21)$$

$$y = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (a_y + a_y^\dagger) \quad (22)$$

(a) Die erste Korrektur ist

$$E_0^1 = \langle 00 | H' | 00 \rangle \quad (23)$$

$$= \langle 00 | \frac{1}{2} m\omega^2 \cdot 2\lambda xy | 00 \rangle \quad (24)$$

$$= \langle 00 | \frac{1}{2} m\omega^2 \cdot 2\lambda \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (a_x + a_x^\dagger) (a_y + a_y^\dagger) | 00 \rangle \quad (25)$$

Hier erkennt man bereits, dass die Auf- und Absteigeoperatoren den Zustand verändern, sie sind deswegen am Ende orthogonal aufeinander. Es gibt keine Kombination von Auf- und Absteigeoperatoren, die nicht 0 ist! Insbesondere sind auch die Räume von a_x , a_x^\dagger und a_y , a_y^\dagger disjunkt.

$$E_0^1 = 0 \quad (26)$$

Die zweite Korrektur ist

$$E_0^2 = \sum_{m \neq n} \frac{\langle m^0 | H' | n^0 \rangle \langle n^0 | H' | m^0 \rangle}{(E_n^0 - E_m^0)} \quad (27)$$

$$= \sum_{m \neq n} \frac{|\langle m^0 | H' | n^0 \rangle|^2}{(E_n^0 - E_m^0)} \quad (28)$$

$$= \sum_{m \neq n} \frac{\left| \langle m^0 | \frac{1}{2} m \omega^2 \cdot 2\lambda \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (a_x + a_x^\dagger) (a_y + a_y^\dagger) | 00 \rangle \right|^2}{(\hbar\omega - \hbar\omega(m_x + m_y + 1))} \quad (29)$$

$$= \frac{\hbar^2 \omega^2 \lambda^2}{4} \sum_{m \neq n} \frac{|\langle m^0 | a_x a_y + a_x a_y^\dagger + a_x^\dagger a_y + a_x^\dagger a_y^\dagger | 00 \rangle|^2}{(\hbar\omega - \hbar\omega(m_x + m_y + 1))} \quad (30)$$

Jeder Term mit einem Erzeuger ist 0!

$$E_0^2 = -\frac{\hbar\omega\lambda^2}{4} \sum_{m \neq n} \frac{|0 + 0 + 0 + \sqrt{0+1}\sqrt{0+1}\delta_{m_x 1}\delta_{m_y 1}|^2}{m_x + m_y} \quad (31)$$

$$= -\frac{\hbar\omega\lambda^2}{4} \frac{1}{2} \quad (32)$$

$$= -\frac{\hbar\omega\lambda^2}{8} \quad (33)$$

(b) Nach Anleitung:

$$\langle 10 | H' | 10 \rangle = 0 = \langle 01 | H' | 01 \rangle \quad (34)$$

Grund: wie bei a) kommt man mit den Erzeugern und Vernichtern nicht auf ein passendes Paar nicht orthogonaler Zustände! Weiter mit den Nebendiagonalen

$$\begin{aligned} \langle n_x^0 n_y^0 | H' | n_x^0 n_y^0 \rangle = \langle 10 | H' | 01 \rangle &= \langle 10 | \frac{1}{2} m \omega^2 \cdot 2\lambda \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (a_x + a_x^\dagger) (a_y + a_y^\dagger) | 00 \rangle \quad (35) \\ &= \frac{\hbar^2 \omega^2 \lambda^2}{4} \langle 10 | a_x a_y + a_x a_y^\dagger + a_x^\dagger a_y + a_x^\dagger a_y^\dagger | 01 \rangle \quad (36) \end{aligned}$$

Ok, derjenige Term überlebt, welcher den x-Zustand anregt und den y-Zustand vernichtet

$$\langle 10 | H' | 01 \rangle = \frac{\hbar\omega\lambda}{2} \langle 10 | a_x^\dagger a_y | 01 \rangle \quad (37)$$

$$= \frac{\hbar\omega\lambda}{2} \sqrt{0+1}\sqrt{1}\langle 10 | 10 \rangle \quad (38)$$

$$= \frac{\hbar\omega\lambda}{2} \quad (39)$$

Die Matrix muss hermitesch sein, ich erinnere an die reellen Eigenwerte. Deshalb ist

$$\langle 01 | H' | 10 \rangle = \langle 10 | H' | 01 \rangle = \frac{\hbar\omega\lambda}{2} \quad (40)$$

Die Matrixschreibweise ergibt sich zu

$$\frac{\hbar\omega\lambda}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = E_1^1 \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \quad (41)$$

Wenn man nun die Matrix (41) diagonalisieren will muss man die Eigenwertgleichung lösen

$$\det\left(\frac{\hbar\omega\lambda}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} - \gamma\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}\right) = 0 \quad (42)$$

$$\gamma^2 - \left(\frac{\hbar\omega\lambda}{2}\right)^2 = 0 \quad (43)$$

$$\gamma_{1/2} = \pm \frac{\hbar\omega\lambda}{2} \quad (44)$$

Daraus folgt also, dass

$$E_1^1 = \pm \frac{\hbar\omega\lambda}{2} \quad (45)$$

ist, für die beiden Eigenvektoren von (41). Diese sind

$$\left(\frac{\hbar\omega\lambda}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \mp \frac{\hbar\omega\lambda}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}\right)\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = 0 \quad (46)$$

$$\frac{\hbar\omega\lambda}{2}(a \pm b) = 0 \quad (47)$$

$$a = \mp b \quad (48)$$

Das + steht für den Eigenwert $+\frac{\hbar\omega\lambda}{2}$. Mit der Normierungsbedingung wird der ganze Spass

$$|1^0\rangle = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{2}}(|10\rangle + |01\rangle) & \text{mit } E_1^1 = +\frac{\hbar\omega\lambda}{2} \\ \frac{1}{\sqrt{2}}(|10\rangle - |01\rangle) & \text{mit } E_1^1 = -\frac{\hbar\omega\lambda}{2} \end{cases} \quad (49)$$

Wir können die Ergebnisse aus a) und b) zusammenfassen zu

$$E_0 \cong E_0^0 + E_0^1 + E_0^2 \quad (50)$$

$$= \hbar\omega\left(n_x + n_y + 1 + 0 - \frac{\lambda^2}{8}\right) \quad (51)$$

$$= \hbar\omega\left(1 - \frac{\lambda^2}{8}\right) \quad (52)$$

und

$$E_1 \cong E_1^0 + E_1^1 \quad (53)$$

$$= \hbar\omega\left(n_x + n_y + 1 \pm \frac{\lambda}{2}\right) \quad (54)$$

$$= \hbar\omega\left(2 \pm \frac{\lambda}{2}\right) \quad (55)$$

2. Die Trafo invertiert ergibt

$$\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \bar{x} \\ \bar{y} \end{pmatrix} \quad (56)$$

$$x = \frac{1}{\sqrt{2}}(\bar{x} - \bar{y}) \quad (57)$$

$$y = \frac{1}{\sqrt{2}}(\bar{x} + \bar{y}) \quad (58)$$

Eingesetzt in den Hamiltonoperator

$$H = \frac{(p_x^2 + p_y^2)}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 (x^2 + y^2) + \frac{\lambda}{2}m\omega^2 (\bar{x} - \bar{y}) (\bar{x} + \bar{y}) \quad (59)$$

$$= \frac{(\bar{p}_x^2 + \bar{p}_y^2)}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 (\bar{x}^2 + \bar{y}^2) + \frac{\lambda}{2}m\omega^2 (\bar{x}^2 - \bar{y}^2) \quad (60)$$

$$= \frac{(\bar{p}_x^2 + \bar{p}_y^2)}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 ((1 + \lambda)\bar{x}^2 + (1 - \lambda)\bar{y}^2)$$

Die Koeffizienten vor den Ortskoordinaten sind die neuen Frequenzen (Vorsicht: unterschiedlich in beiden Richtungen)

$$\bar{\omega}_x = \omega\sqrt{1 + \lambda} \quad (61)$$

$$\bar{\omega}_y = \omega\sqrt{1 - \lambda} \quad (62)$$

Über den üblichen Separationsansatz führt das zu einer Energie von

$$E_n = \hbar\omega \left(\sqrt{1 + \lambda} \left(\bar{n}_x + \frac{1}{2} \right) + \sqrt{1 - \lambda} \left(\bar{n}_y + \frac{1}{2} \right) \right) \quad (63)$$

Für einen Vergleich müssen wir die Wurzel für kleines λ entwickeln

$$\sqrt{1 + \lambda} \cong 1 + \frac{\lambda}{2} - \frac{3}{8}\lambda^2 \quad (64)$$

$$\sqrt{1 - \lambda} \cong 1 - \frac{\lambda}{2} - \frac{3}{8}\lambda^2 \quad (65)$$

Dies ergibt

$$E_n \cong \hbar\omega \left[(n_x + n_y + 1) + \frac{\lambda}{2} (n_x - n_y) - \frac{3}{8}\lambda^2 (n_x + n_y + 1) \right] \quad (66)$$

Ein Vergleich mit (52) und (55) ergibt, dass

- (a) für den Grundzustand die Energiekorrektur in erster Ordnung übereinstimmt
- (b) die 2. Ordnung für den Grundzustand um dem Faktor $\frac{1}{3}$ größer ist, als in (66)
- (c) die Energiekorrektur erster Ordnung für den ersten angeregten Zustand übereinstimmt

3 Eckige Versuchswelle

Betrachten sie ein Teilchen in einem Potentialkasten mit unendlich hohen Wänden

$$V = \begin{cases} 0 & |x| < L \\ \infty & \text{sonst.} \end{cases} \quad (67)$$

Wählen sie als Versuchsfunktion

$$\psi^{var}(x) = \begin{cases} A \cdot (L - |x|) & |x| < L \\ 0 & \text{sonst.} \end{cases} \quad (68)$$

1. Bestimmen sie die Normierungskonstante A

2. Schätzen sie die Grundzustandsenergie mit der Welle (68) ab und vergleichen sie mit dem exakten Resultat

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2 (n+1)^2}{8mL^2}; \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (69)$$

3. Beweisen sie folgende Aussage: Wenn eine Testwellenfunktion $|\psi\rangle$ orthogonal zum Grundzustand ist,

$$\langle \psi | n = 0 \rangle = 0 \quad (70)$$

so ist der normierte Erwartungswert des Hamiltonoperators größer als die Energie des *ersten* angeregten Zustandes.

$$\frac{\langle \psi | H | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} \geq E_1 \quad (71)$$

Gehen sie dabei vor, wie in der Vorlesung.

4. In einem symmetrischen Potential $V(x)$ ist auch der Grundzustand eine gerade Funktion. Jede antisymmetrische Testfunktion ist somit automatisch orthogonal zum Grundzustand. Verwenden sie die folgende Testwellenfunktion, um die Energie des ersten angeregten Zustandes von (67) abzuschätzen

$$\psi^{var}(x) = \begin{cases} -x - L & -L < x < -\frac{L}{2} \\ x & -\frac{L}{2} < x < \frac{L}{2} \\ -x + L & \frac{L}{2} < x < L \\ 0 & \text{sonst.} \end{cases} \quad (72)$$

und vergleichen sie das Ergebnis mit dem exakten Resultat (69)

Musterlösung:

1. Die Normierungskonstante wird bestimmt über

$$\langle \psi | \psi \rangle \stackrel{!}{=} 1 \quad (73)$$

$$A^2 \cdot \left(\int_{-L}^0 (L+x)^2 dx + \int_0^L (L-x)^2 dx \right) = 1 \quad (74)$$

$$A^2 \left(\left[\frac{1}{3} (L+x)^3 \right]_{-L}^0 + \left[\frac{1}{3} (L-x)^3 \right]_0^L \right) = 1 \quad (75)$$

$$A = \sqrt{\frac{3}{2L^3}} \quad (76)$$

2. Die Grundzustandsenergie schätzen wir ab über

$$\langle \psi | H | \psi \rangle \quad (77)$$

Dazu berechnen wir die Ableitungen der Wellenfunktion:

- (a) erste Ableitung:

$$\frac{d\psi}{dx} = \begin{cases} A & \text{für } -L < x < 0 \\ -A & \text{für } 0 < x < L \\ 0 & \text{sonst.} \end{cases} \quad (78)$$

(b) zweite Ableitung: Macht euch klar, dass die Funktion an drei Stellen unstetig ist (Zeichnung). Sie ist an den jeweiligen Stellen proportional zur Θ -Stufenfunktion. Die Ableitung der Stufenfunktion gibt die δ -Funktion (und nicht 0, wie ich damals in der Klausur verzweifelt bin ;))

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = A\delta(x+L) - 2A\delta(x) + A\delta(x-L) \quad (79)$$

in die Gleichung von oben eingesetzt

$$\langle\psi|H|\psi\rangle = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\right) \int_{-L}^L dx \psi(x) \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) \quad (80)$$

$$= -\frac{A\hbar^2}{2m} \int_{-L}^L dx \psi(x) (\delta(x+L) - 2\delta(x) + \delta(x-L)) \quad (81)$$

$$= -\frac{A\hbar^2}{2m} (\psi(-L) - 2\psi(0) + \psi(L)) \quad (82)$$

$$= \frac{A^2 L \hbar^2}{m} \quad (83)$$

$$= \frac{3\hbar^2}{2mL^2} \quad (84)$$

Um $\langle\psi|\psi\rangle$ brauchen wir uns nicht mehr kümmern, dies haben wir bereits in 1) erledigt. Wir hatten bei der Wellenfunktion keine freien Parameter angegeben, deshalb minimieren wir das Ergebnis nicht weiter, sondern stellen gleich fest

$$\frac{3}{2} \geq \frac{\pi^2}{8} \cong 1,233 \quad (85)$$

Super.

3. Beweis wie in der Vorlesung:

$$\langle\psi|H|\psi\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \langle\psi|n\rangle \langle n|H|\psi\rangle \quad (86)$$

$$= E_0 \langle\psi|0\rangle \langle 0|\psi\rangle + \sum_{n=1}^{\infty} E_n \langle\psi|n\rangle \langle n|\psi\rangle \quad (87)$$

Der erste Term ist aber nach Voraussetzung = 0, außerdem gilt für $n \geq 1$, dass $E_n \geq E_1$ da die Energieniveaus eine mit n monoton steigende Energie haben. Deswegen gilt

$$\langle\psi|H|\psi\rangle \geq \sum_{n=1}^{\infty} E_1 \langle\psi|n\rangle \langle n|\psi\rangle \quad (88)$$

Dies stellen wir noch nach E_1 um und entfernen die "Eins" $\sum_n |n\rangle \langle n|$

$$E_1 \leq \frac{\langle\psi|H|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle} \quad \square \quad (89)$$

Wir haben also eine Abschätzung des ersten angeregten Zustandes!

4. Diese Aufgabe läuft analog zur 2), ψ ist aber nicht normiert

$$\langle \psi | \psi \rangle = \int_{-L}^{-\frac{L}{2}} (-L-x)^2 dx + \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} x^2 dx + \int_{\frac{L}{2}}^L (L-x)^2 dx \quad (90)$$

$$= \frac{L^3}{6} \quad (91)$$

Die Ableitungen ergeben an vier Stellen die δ -Funktion

$$\frac{d\psi}{dx} = \begin{cases} -1 & \text{für } -L < x < -\frac{L}{2} \\ +1 & \text{für } -\frac{L}{2} < x < \frac{L}{2} \\ -1 & \text{für } \frac{L}{2} < x < L \\ 0 & \text{sonst.} \end{cases} \quad (92)$$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = \left(-\delta(x+L) + 2\delta\left(x + \frac{L}{2}\right) - 2\delta\left(x - \frac{L}{2}\right) + -\delta(x-L) \right) \quad (93)$$

Daraus folgt für die Abschätzung der Energie des ersten angeregten Zustandes E_1^{var}

$$E_1 \leq E_1^{var} = \frac{\langle \psi | H | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} \quad (94)$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{(\psi(-L) + 2\psi(-\frac{L}{2}) - 2\psi(\frac{L}{2}) - \psi(L))}{\frac{L^3}{6}} \quad (95)$$

$$= -\frac{6\hbar^2}{2m} \frac{(-L-L)}{L^3} \quad (96)$$

$$= \frac{6\hbar^2}{mL^2} \quad (97)$$

Dies vergleichen wir noch mit der tatsächlichen Energie des ersten angeregten Zustandes

$$6 \geq \frac{\pi^2}{2} \cong 4.934 \quad (98)$$

Toll.

4 Variation im harmonischen Oszillator

Schätzen sie mithilfe der Variationsmethode die Grundzustandsenergie eines 1D harmonischen Oszillators ab, mit

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \quad (99)$$

Und der Testwellenfunktion

$$\psi^{var}(x) = e^{-bx^2} \quad (100)$$

Warum kommt ihnen das Ergebnis bekannt vor?

Musterlösung:

Wir bilden E_{var}

$$E_0 \leq E_{var} = \frac{\langle \psi | H | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} \quad (101)$$

Dazu benötigen wir

1. Die Normierung

$$\langle \psi | \psi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-2bx^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{2b}} \quad (102)$$

2. Den Erwartungswert des Potentials

$$\langle \psi | V | \psi \rangle = \frac{1}{2} m \omega^2 \int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-2bx^2} dx \quad (103)$$

$$= \frac{1}{2} m \omega^2 \left(-\frac{d}{d(2b)} \right) \int_{-\infty}^{\infty} e^{-2bx^2} dx \quad (104)$$

$$= \frac{1}{2} m \omega^2 \left(-\frac{d}{d(2b)} \right) \sqrt{\frac{\pi}{2b}} \quad (105)$$

$$= \frac{1}{4} m \omega^2 \sqrt{\pi} (2b)^{-\frac{3}{2}} \quad (106)$$

Hierbei wurde guten Gewissens die Ableitung vor das Integral gezogen (die Physiker halt).

3. Den Erwartungswert des kinetischen Terms

$$\langle \psi | T | \psi \rangle = -\frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-bx^2} \left(\frac{d^2}{dx^2} \right) e^{-bx^2} dx \quad (107)$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-bx^2} \left(4b^2 x^2 e^{-bx^2} - 2b e^{-bx^2} \right) dx \quad (108)$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m} \left(-4b^2 \frac{d}{d(2b)} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-2bx^2} dx - 2b \int_{-\infty}^{\infty} e^{-2bx^2} dx \right) \quad (109)$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m} \left(2b^2 \sqrt{\pi} (2b)^{-\frac{3}{2}} - 2b \sqrt{\frac{\pi}{2b}} \right) \quad (110)$$

$$= \frac{\hbar^2}{2m} \sqrt{\frac{b\pi}{2}} \quad (111)$$

Wie im Beispiel in der Vorlesung. Dies setzen wir nun zusammen in

$$E_{var} = \frac{\frac{\hbar^2}{2m} \sqrt{\frac{b\pi}{2}} + \frac{1}{4} m \omega^2 \sqrt{\pi} (2b)^{-\frac{3}{2}}}{\sqrt{\frac{\pi}{2b}}} \quad (112)$$

$$= \frac{\hbar^2 b}{2m} + \frac{m \omega^2}{8b} \quad (113)$$

Die Energie können wir noch minimieren, indem wir nach b ableiten

$$\frac{dE_{var}}{db} = \frac{\hbar^2}{2m} - \frac{m \omega^2}{8b^2} \stackrel{!}{=} 0 \quad (114)$$

$$b_{min} = \frac{m \omega}{2\hbar} \quad (115)$$

Das ist tatsächlich das Minimum. Die negative Lösung dürfen wir nicht in die Gaußfunktion einsetzen, da sonst das Integral nicht mehr konvergiert ($b \geq 0$). Setzen wir b_{min} in (113) ein und schauen was passiert

$$E_{var}^{min} = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{m\omega}{2\hbar} + \frac{m\omega^2}{8m\omega} 2\hbar \quad (116)$$

$$= \frac{1}{2} \hbar\omega \quad (117)$$

Dieser Wert ist natürlich der *exakte* Wert! Wir haben von Anfang an die richtige Wellenfunktion verwendet, da der Grundzustand im harmonischen Oszillator eben jene Gaußfunktion ist. Dennoch wird die Gaußfunktion häufig in anderen Potentialen verwendet, da die Integrale gut durchführbar sind.

5 Variation und Störungstheorie

Beweisen sie,

1. mithilfe der Variationsmethode, dass die Grundzustandsenergie in erster Ordnung Störungstheorie größer ist als die tatsächliche Grundzustandsenergie

$$E_0^0 + E_0^1 \geq E_0 \quad (118)$$

2. dass die Energiekorrektur zum Grundzustand in zweiter Ordnung Störungstheorie immer negativ ist

$$E_0^2 \leq 0 \quad (119)$$

Musterlösung:

1. Wir setzen den Energieerwartungswert an als

$$E_0 = \langle H \rangle = \langle 0|H|0 \rangle \quad (120)$$

Wobei $|0\rangle$ der tatsächliche (normierte) Grundzustand zu $H = H_0 + H'$ ist. Das Variationstheorem sagt aus, dass jede beliebige Funktion anstelle von $|\psi\rangle$ einen höheren Erwartungswert hat. Folglich können wir die (normierten) Eigenzustände zum ungestörten Hamiltonoperator $|n_0\rangle$ nehmen

$$\langle 0|H|0 \rangle \leq \langle 0_0|H_0 + H'|0_0 \rangle \quad (121)$$

$$= E_0^0 + \langle 0_0|H'|0_0 \rangle \quad (122)$$

Der hintere Teil ist aber gerade die Definition unserer Korrektur zur Energie in erster Ordnung Störungstheorie

$$\langle 0|H|0 \rangle \leq E_0^0 + E_0^1 \quad \square \quad (123)$$

2. Die Korrektur in zweiter Ordnung lautet

$$E_0^2 = \sum_{m \neq n} \frac{\langle m^0|H'|0^0 \rangle \langle 0^0|H'|m^0 \rangle}{(E_0^0 - E_m^0)} \quad (124)$$

$$= \sum_{m \neq n} \frac{|\langle m^0|H'|0^0 \rangle|^2}{(E_0^0 - E_m^0)} \quad (125)$$

Der Zähler ist offensichtlich immer positiv. Da aber $E_m^0 \geq E_0^0$ für alle m , der Grundzustand also wirklich die tiefste Energie hat, ist der Nenner $(E_0^0 - E_m^0)$ immer negativ. Deshalb ist E_0^2 negativ. \square

6 WKB-Tunnel

Die WKB-Näherung ist praktisch bei Tunnelproblemen anwendbar

1. Berechnen sie die Tunnelwahrscheinlichkeit $T = \left| \frac{B}{A} \right|^2$, eine *große und breite* rechteckige Potentialstufe zu durchtunneln. Gehen sie dabei davon aus, dass die exponentiell ansteigende Lösung in der klassisch verbotenen Zone vernachlässigbar (dies ist erlaubt, wenn das Ergebnis für $T \ll 1$) ist und vergleichen sie die Amplituden der linksseitigen Wendepunktfunction und rechtsseitigen Wendepunktfunction.

$$\psi_{rechts}(x) = \begin{cases} \frac{A}{\sqrt{|p(x)|}} \exp \left[-\frac{1}{\hbar} \int_{x_2}^x |p(x')| dx' \right] & \text{für } x > x_2 \\ \frac{2A}{\sqrt{p(x)}} \sin \left[\frac{1}{\hbar} \int_x^{x_2} p(x') dx' + \frac{\pi}{4} \right] & \text{für } x < x_2 \end{cases} \quad (126)$$

$$\psi_{links}(x) = \frac{B}{\sqrt{p(x)}} \sin \left[\frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^x p(x') dx' + \frac{\pi}{4} \right] \quad \text{für } x > x_1 \quad (127)$$

2. Die innerhalb eines Metalls quasifreien Leitungselektronen haben dort eine geringere potentielle Energie als im Außenraum, sie können es deshalb nicht einfach so verlassen. Die Potentialstufe zum Außenraumpotential V_0 wird *Austrittsarbeit* W genannt. Sie beträgt an der Kante

$$W = V_0 - \epsilon_F \quad (128)$$

wobei ϵ_F die sog. *Fermienergie* ist.

Legt man senkrecht zur Oberfläche des Metalls ein elektrisches Feld an, verändert sich das Potential im Außenraum zu

$$V(q) = V_0 - eEq \quad (129)$$

Quantenmechanisches Tunneln wird dann möglich (Feldemission). Welcher Strom j_d ist außerhalb des Metalls nach anlegen eines Feldes beobachtbar? Nehmen sie an, dass nur Elektronen mit der Fermienergie für einen Tunnelprozess in Frage kommen und für den Strom gilt

$$j_d = j_0 \cdot T \quad (130)$$

Musterlösung:

1. Für eine breite und hohe Barrierere können wir die in der Angabe beschriebenen Wellenfunktionen annehmen. In einer Umgebung um den rechtsseitigen Wendepunkt müssen die Amplituden übereinstimmen

$$A \exp \left(-\frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} |p(x')| dx' \right) = B \quad (131)$$

Daraus folgt sofort

$$T = \left| \frac{B}{A} \right|^2 = \exp \left(-\frac{2}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} |p(x')| dx' \right) \quad (132)$$

oder in kurz

$$T(\gamma) = \exp(-2\gamma); \quad \text{für } \gamma = \frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} |p(x')| dx' \quad (133)$$

2. Wir wenden dies nun auf unser Problem an. Berechnen wir zunächst γ

$$\gamma = \frac{1}{\hbar} \int_0^{q_f} \sqrt{2m(V(q) - E)} \quad (134)$$

$$= \frac{1}{\hbar} \int_0^{q_f} \sqrt{2m(V_0 - eEq - \epsilon_F)} dq \quad (135)$$

q_f ist der Wendepunkt, ergibt sich aus

$$V_0 - eEq_f - \epsilon_F = 0 \quad (136)$$

$$\Rightarrow q_f = \frac{V_0 - \epsilon_F}{eE} \quad (137)$$

Das elementare Integral ausgewertet ergibt

$$\gamma = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m} \left[-\frac{2}{3Ee} (V_0 - eEq - \epsilon_F)^{\frac{3}{2}} \right]_0^{q_f} \quad (138)$$

$$= \frac{2}{3\hbar} \sqrt{2m} \frac{(V_0 - \epsilon_F)^{3/2}}{eE} \quad (139)$$

Der Tunnelstrom ergibt sich damit zu

$$j_d = j_o T = j_0 \exp \left(-\frac{4}{3\hbar} \sqrt{2m} \frac{(V_0 - \epsilon_F)^{3/2}}{eE} \right) \quad (140)$$

$$= j_0 \exp \left(-\frac{4}{3\hbar} \sqrt{2m} \frac{W^{3/2}}{eE} \right) \quad (141)$$

Im letzten Schritt haben wir die Definition der Austrittsarbeit W eingesetzt.

7 Quantengravitation?

Berechnen sie mithilfe der WKB-Näherung

1. Das Energiespektrum für ein Teilchen im linearisierten Gravitationsfeld der Erde

$$V = \begin{cases} mgz & \text{für } z < 0 \\ \infty & \text{sonst.} \end{cases} \quad (142)$$

Bemerkung: Das Ergebnis stimmt mit der exakten Rechnung ab dem ersten angeregten Niveau auf besser als 1% überein

2. Die Quantenzahl n , um einen Fußball von $0,5\text{kg}$ auf eine mittlere Höhe von 1 Meter zu bringen. Benutzen sie das Virialtheorem, um $\langle z \rangle$ auszurechnen.

Musterlösung:

1. Wir nehmen die Quantisierungsbedingung für *eine* harte Wand

$$\int_0^{\frac{E}{mg}} \sqrt{2m(E - mgz)} dz = \left(n - \frac{1}{4}\right) \hbar\pi \quad (143)$$

$$\sqrt{2m} \left[-\frac{2}{3mg} (E - mgz)^{\frac{3}{2}} \right]_0^{\frac{E}{mg}} = \quad (144)$$

$$\sqrt{2m} \left[\frac{2E^{\frac{3}{2}}}{3mg} \right] = \left(n - \frac{1}{4}\right) \hbar\pi \quad (145)$$

$$E_n = \left[\frac{9}{8} \pi^2 mg^2 \hbar^2 \left(n - \frac{1}{4}\right)^2 \right]^{\frac{1}{3}} \quad (146)$$

1. Virialtheorem für lineares Potential

$$\left\langle z \frac{dV}{dz} \right\rangle = mg \langle z \rangle = \langle V \rangle = 2 \langle T \rangle \quad (147)$$

$$\Rightarrow E_n = \langle T \rangle + \langle V \rangle = \frac{3}{2} \langle V \rangle \quad (148)$$

Andererseits ist $\langle V \rangle \propto \langle z \rangle$ und deswegen

$$E_n = \frac{3}{2} mg \langle z \rangle \quad (149)$$

$$\left[\frac{9}{8} \pi^2 mg^2 \hbar^2 \left(n - \frac{1}{4}\right)^2 \right]^{\frac{1}{3}} = \frac{3}{2} mg \langle z \rangle \quad (150)$$

$$n = \sqrt{\frac{(3mg \langle z \rangle)^3}{\frac{9}{8} \pi^2 mg^2 \hbar^2}} + \frac{1}{4} \quad (151)$$

Für einen Fußball von etwa $0,5kg$ liegt das bei

$$n \cong 10^{32} \quad (152)$$

Also gut im klassischen Limes.

8 Radialgleichung in WKB-Näherung

Die WKB-Näherung ist ein Näherungsverfahren für eindimensionale Probleme. Sie kann aber auf Probleme erweitert werden, die in Produktwellen zerfallen.

1. Wie lautet die Schrödingergleichung für eine Radialwelle in einem kugelsymmetrischen Potential $V(r)$?
2. Wie lautet die Quantisierungsbedingung (WKB-Gleichung) für den Radialwellenanteil?
3. Benutzen sie ihre Ergebnisse, um die Energieniveaus von Wasserstoff in WKB-Näherung zu berechnen. Vergleichen Sie ihr Ergebnis für $n \gg \frac{1}{2}$ und $n \gg l$ mit den exakten Bohr-Niveaus

$$E_n = - \left(\frac{m}{2\hbar^2} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \right) \frac{1}{n^2} \quad (153)$$

Hinweis:

$$\int_a^b \frac{dx}{x} \sqrt{(x-a)(b-x)} = \frac{\pi}{2} (\sqrt{b} - \sqrt{a})^2 \quad (154)$$

Musterlösung:

1. Die Schrödingergleichung für den Radialwellenanteil lautet

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial r^2} + V(r) + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2} \right] \psi_n(r) = E_n \psi_n(r) \quad (155)$$

Mit dem sog. "Zentrifugalterm".

2. Wir können nun in die Quantisierungsbedingung für *keine* harte Wand einsetzen, da wie wir gleich sehen werden, i.A. zwei weiche Wendepunkte haben. Bloß nicht den Zentrifugalterm vergessen!

$$\int_{r_1}^{r_2} \sqrt{2m \left(E - V(r) - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2} \right)} dr = \left(n - \frac{1}{2} \right) \hbar \pi \quad (156)$$

3. Hier setzen wir das Coulomb-Potential ein

$$\int_{r_1}^{r_2} \sqrt{2m \left(E + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r} - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2} \right)} dr = \left(n - \frac{1}{2} \right) \hbar \pi \quad (157)$$

Mit den folgenden Ersetzungen wird es kürzer

$$A = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{E} \quad B = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{E} \quad (158)$$

Das Integral wird zu

$$\sqrt{2mE} \int_{r_1}^{r_2} \sqrt{1 - \frac{A}{r} + \frac{B}{r^2}} dr \quad (159)$$

Versuchen wir dies auf die Form des Hinweises zu bringen

$$\sqrt{2mE} \int_{r_1}^{r_2} \frac{\sqrt{r^2 - Ar + B}}{r} dr = \sqrt{-2mE} \int_{r_1}^{r_2} \frac{\sqrt{(r-r_1)(r_2-r)}}{r} dr \quad (160)$$

Mit $A = r_1 + r_2$ und $B = r_1 r_2$. Der Hinweis wird eingesetzt

$$\sqrt{-2mE} \frac{\pi}{2} (\sqrt{r_2} - \sqrt{r_1})^2 = \sqrt{-2mE} \frac{\pi}{2} (r_1 + r_2 - 2\sqrt{r_1 r_2}) = \quad (161)$$

$$\sqrt{-2mE} \frac{\pi}{2} (A - 2\sqrt{B}) = \sqrt{-2mE} \frac{\pi}{2} \left(-\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{E} - 2\sqrt{-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{E}} \right) \quad (162)$$

$$= \left(n - \frac{1}{2} \right) \hbar \pi \quad (163)$$

Umstellen nach E_n ergibt

$$E_n = \frac{-(m/2\hbar^2) (e^2/4\pi\epsilon_0)^2}{\left[n - \frac{1}{2} + \sqrt{l(l+1)}\right]^2} = \frac{-E_{ryd}}{\left[n - \frac{1}{2} + \sqrt{l(l+1)}\right]^2} \quad (164)$$

Für großes n , $n \gg \frac{1}{2}$, $n \gg l$ ist das Ergebnis äquivalent zu den Bohr-Niveaus

$$E_{Bohr} = \frac{-E_{ryd}}{n^2} \quad (165)$$