Christoph Schnarr & Michael Schrapp

Ferienkurs *Quantenmechanik* – Sommer 2010

(Näherungsverfahren)

1 Ritzsches Variationsverfahren

Für das angegebene Potential

$$V(x) = \begin{cases} fx & \text{für } x > 0 \\ +\infty & \text{für } x < 0 \end{cases} \tag{1}$$

führe man das Variationsverfahren unter Verwendung der Versuchsfunktionenschar $u(x)$ mit dem Variationsparameter α durch:

$$u(x) = xe^{-\alpha x}$$

Geben Sie die dazugehörige minimierte Energie an.

Geben Sie zudem ein Beispiel an, wo dieses Potential in der Realität auftauchen kann.

Hinweis: Die Formel $\int\limits_0^\infty dx\, x^n\, e^{-px} = \frac{n!}{p^{n+1}}$ kann hilfreich sein.

LÖSUNG:

Für das zu minimierende Energiefunktional gilt:

$$E(\alpha) = \frac{\langle u(x)|H|u(x)\rangle}{\langle u(x)|u(x)\rangle}$$

Zunächst berechnen wir:

$$\begin{aligned}
\langle u(x)|u(x)\rangle &= \int\limits_0^\infty dx\, x^2\, e^{-2\alpha x} = \frac{1}{4\alpha^3} \\
\langle u(x)|H|u(x)\rangle &= \int\limits_0^\infty dx\, x\, e^{-\alpha\, x} \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + fx \right) xe^{-\alpha x} \\
&= \frac{\hbar^2\alpha}{m}\int\limits_0^\infty dx x e^{-2\alpha x} - \frac{\hbar^2\alpha^2}{2m}\int\limits_0^\infty dx x^2 e^{-2\alpha x} + f\int\limits_0^\infty dx x^3 e^{-2\alpha x} \\
&= \frac{\hbar^2}{8m\alpha} + \frac{3f}{8\alpha^4} \\
&\Rightarrow \underline{\underline{E(\alpha) = \frac{\hbar^2\alpha^2}{2m} + \frac{3f}{2\alpha}}}
\end{aligned}$$

Die Minimierung liefert:

$$\begin{aligned}\frac{dE(\alpha)}{d\alpha} &= 0\\ \Rightarrow \alpha_0 &= \left(\frac{3mf}{2\hbar^2}\right)^{1/3}\\ E(\alpha_0) &= \frac{9}{4}\left(\frac{2f^2\hbar^2}{3m}\right)^{1/3}\end{aligned}$$

Wählen wir $f = mg$, so handelt es sich um die potentielle Energie eines Teilchens im homogenen Gravitationsfeld der Erde. Das Teilchen wird bei $x = 0$ von einer ideal reflektierenden Ebene zurückgeworfen.

2 Störungstheorie 1. Ordnung

Zwei identische Teilchen befinden sich in einem unendlich hohen Potentialtopf mit Wänden bei $x = 0$ und $x = a$. Für die Einteilchenwellenfunktion gilt:

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

Wir lassen die beiden Teilchen über das Potential

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

schwach miteinander wechselwirken.

1. Berechnen Sie die Grundzustandsenergie in erster Ordnung Störungstheorie.

LÖSUNG:

1. Die Energiekorrektur in 1. Ordnung Störungstheorie lautet:

$$\begin{aligned}\langle 00| - aV_0\delta(x_1 - x_2)|00\rangle &= -a\int_0^a\int_0^a \left(\frac{2}{a}\right)^2 V_0 \sin^2\left(\frac{n_1\pi x_1}{a}\right)\sin^2\left(\frac{n_2\pi x_2}{a}\right)\delta(x_1 - x_2)dx_1dx_2\\ &= -\frac{4V_0}{a}\int_0^a \sin^2\left(\frac{n\pi x}{a}\right)\sin^2\left(\frac{n\pi x}{a}\right)dx\\ &= -\frac{4V_0}{a}\int_0^a \sin^4\left(\frac{n\pi x}{a}\right)dx\end{aligned}$$

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

Damit ist die Grundzustandsenergie die Summe der beiden ungestörten Teilchenenergien plus die Energiekorrektur.

$$E_0 = E_1^0 + E_2^0 - \frac{3}{2}V_0 = \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}(1^2 + 1^2) - \frac{3}{2}V_0 = \frac{\hbar^2\pi^2}{ma^2} - \frac{3}{2}V_0$$

3 Eckige Versuchswelle

Gegeben Sei ein Teilchen in einem Potentialkasten mit unendlich hohen Wänden und der Breite L.

Als Versuchswellenfunktion sei

$$\psi(x) = A \begin{cases} L - |x| & \text{für } |x| < L \\ 0 & \text{für } |x| > L \end{cases} \tag{2}$$

gegeben.

1. Bestimmen Sie die Normierungskonstante A.
2. Schätzen Sie die Grundzustandsenergie ab und vergleichen sie es mit dem exakten Resultat $E_0 = \frac{\pi^2\hbar^2}{8mL^2}$.

LÖSUNG:

1. Es muss $\langle\psi|\psi\rangle = 1$ gelten:

$$\begin{aligned} A^2 \left[\int_{-L}^{0} (L+x)^2 dx + \int_{0}^{L} (L-x)^2 dx \right] &\overset{!}{=} 1 \\ A^2 \left(\left[\frac{1}{3}(L+x)^3 \right]_{-L}^{0} + \left[\frac{1}{3}(L-x)^3 \right]_{0}^{L} \right) &= 1 \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \underline{\underline{A = \sqrt{\frac{3}{2L^3}}}}$$

2. Die Grundzustandsenergie schätzen wir über $E_0 = \langle\psi|H|\psi\rangle$ ab. Dazu benötigen wir die 1. und 2. Ableitung der Wellenfunktion:

$$\psi'(x) = \begin{cases} A & \text{für } -L < x < 0 \\ -A & \text{für } 0 < x < L \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \tag{3}$$

$$\psi''(x) = A\delta(x+L) - 2A\delta(x) + A\delta(x-L) \tag{4}$$

Man hat es bei der 1. Ableitung mit 3 Unstetigkeitsstellen zu tun. Dabei hat die Ableitung jeweils einen Sprung. Die Ableitung eines "Sprungs" entspricht aber gerade einer Delta-Funktion.

Dies liefert:

$$\begin{aligned} E_0 &= \langle\psi|H|\psi\rangle = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\right) \int_{-L}^{L} dx \psi(x) \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) \\ &= -\frac{A\hbar^2}{2m} \int_{-L}^{L} dx \psi(x) \left[\delta(x+L) - 2\delta(x) + \delta(x-L)\right] \\ &= \frac{A^2 L \hbar^2}{m} \\ &= \frac{3\hbar^2}{2mL^2} \end{aligned}$$

Vergleichen wir das mit dem exakten Ergebnis ($E_0 = \frac{\pi^2\hbar^2}{8mL^2}$), so sehen wir, dass die durch Variationsrechnung bestimmte Grundzustandsenergie etwas größer als die exakte Energie ist, was mit dem Ritzschen Prinzip übereinstimmt.

4 Oszillator mit quadratischer Störung

Gegeben sei die Lösung des eindimensionalen harmonischen Oszillators:

$$\begin{aligned} \widehat{\mathcal{H}}_0 &= \frac{\widehat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega_0^2}{2}\widehat{x}^2 && (5) \\ \widehat{H}_0 \left|n\right\rangle &= \epsilon_n \left|n\right\rangle && (6) \\ \epsilon_n &= \hbar\omega_0 \left(n + \frac{1}{2}\right) && (7) \end{aligned}$$

Nun soll das gestörte System mit dem Hamiltonoperator

$$\widehat{H} = \widehat{H}_0 + \widehat{V} \tag{8}$$

betrachten werden, wobei:

$$\begin{aligned} \widehat{V} &= \lambda\,\widehat{x}^2 && (9) \\ (\lambda &> 0). && (10) \end{aligned}$$

1. Berechnen Sie die Energieverschiebungen in 1. und 2. Ordnung Störungstheorie.
2. Vergleichen Sie die Ergebnisse mit dem exakten Resultat.

Lösung:

1. Da die ungestörten Zustände $\{|n\rangle\}$ nicht entartet sind, ist die Störungstheorie für nichtentartete Zustände anzuwenden.

   In 1. Ordnung Störungstheorie ist die Energieverschiebung durch den Erwartungswert des Störoperators mit den ungestörten Zuständen gegeben:

$$E_n^{(1)} = \langle n|\widehat{V}|n\rangle = \lambda\,\langle n|\widehat{x}^2|n\rangle = \frac{\hbar\lambda}{m\omega_0}\left(n + \frac{1}{2}\right) \tag{11}$$

   Hierbei ist:

$$\begin{aligned} \langle n|\widehat{x}^2|n\rangle &= \langle n|\frac{\hbar}{2m\omega_0}\left(\widehat{a}^\dagger\widehat{a}^\dagger + \widehat{a}\widehat{a} + \widehat{a}^\dagger\widehat{a} + \widehat{a}\widehat{a}^\dagger\right)|n\rangle \\ &= \frac{\hbar}{2m\omega_0}\left(\langle n|\widehat{a}^\dagger\widehat{a}^\dagger|n\rangle + \langle n|\widehat{a}\widehat{a}|n\rangle + \langle n|\widehat{a}^\dagger\widehat{a}|n\rangle + \langle n|\widehat{a}\widehat{a}^\dagger|n\rangle\right) \\ &= \frac{\hbar}{2m\omega_0}\left(\langle n|\sqrt{n+1}\sqrt{n+2}|n+2\rangle + \langle n|\sqrt{n}\sqrt{n-1}|n-2\rangle + \langle n|\sqrt{n}\sqrt{n}|n\rangle + \langle n|\sqrt{n+1}\sqrt{n+1}|n\rangle\right) \\ &= \frac{\hbar}{2m\omega_0}\left(\sqrt{n+1}\sqrt{n+2}\,\langle n|n+2\rangle + \sqrt{n}\sqrt{n-1}\,\langle n|n-2\rangle + \sqrt{n}\sqrt{n}\,\langle n|n\rangle + \sqrt{n+1}\sqrt{n+1}\,\langle n|n\rangle\right) \\ &= \frac{\hbar}{2m\omega_0}\left(n\,\langle n|n\rangle + (n+1)\,\langle n|n\rangle\right) \\ &= \underline{\underline{\frac{\hbar}{m\omega_0}\left(n + \frac{1}{2}\right)}} \end{aligned}$$

In der 2. Ordnung Störungstheorie ist die Energieverschiebung gegeben durch:

$$
\begin{aligned}
E_n^{(2)} &= \sum_{n' \neq n}^{\infty} \frac{|\langle n|\widehat{V}|n'\rangle|^2}{\epsilon_n - \epsilon_{n'}} \\
&= \frac{\lambda^2}{\hbar\omega_0} \sum_{n' \neq n}^{\infty} \frac{|\langle n|\widehat{x}^2|n'\rangle|^2}{n - n'} \\
&= \frac{\lambda^2}{\hbar\omega_0} \sum_{n' \neq n}^{\infty} \frac{|\langle n|\frac{\hbar}{2m\omega_0}\left(a^\dagger a^\dagger + aa + a^\dagger a + aa^\dagger\right)|n'\rangle|^2}{n - n'} \\
&= \frac{\lambda^2\hbar}{4m^2\omega_0^3} \sum_{n' \neq n}^{\infty} \frac{|\langle n|\sqrt{n'+1}\sqrt{n'+2}|n'+2\rangle + \langle n|\sqrt{n'}\sqrt{n'-1}|n'-2\rangle + \langle n|\sqrt{n'}^2|n'\rangle + \langle n|\sqrt{n'+1}^2|n'\rangle|^2}{n - n'} \\
&= \frac{\lambda^2\hbar}{4m^2\omega_0^3} \left[\frac{\left|\sqrt{n-2+1}\sqrt{n-2+2}\right|^2}{n-n+2} + \frac{\left|\sqrt{n+2}\sqrt{n+2-1}\right|^2}{n-n-2}\right] \\
&= \underline{\underline{-\frac{\lambda^2\hbar}{2m^2\omega_0^3}\left(n + \frac{1}{2}\right)}}
\end{aligned}
$$

2. Der harmonische Oszillator $\widehat{\mathcal{H}}_0$ ergibt mit der Störung $\widehat{V}$ wieder einen harmonischen Oszillator:

$$
\widehat{\mathcal{H}} = \widehat{\mathcal{H}}_0 + \lambda\widehat{x}^2 = \frac{\widehat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}\widehat{x}^2 \qquad \text{mit} \qquad \omega = \omega_0\sqrt{1 + \frac{2\lambda}{m\omega_0^2}} \tag{12}
$$

Für diesen Fall sind die exakten Energieeigenwerte bekannt:

$$
E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right) = \hbar\omega_0\sqrt{1 + \frac{2\lambda}{m\omega_0^2}}\left(n + \frac{1}{2}\right) \tag{13}
$$

Die Störungstheorie entspricht einer Entwicklung nach Potenzen von λ:

$$
\begin{aligned}
E_n &= \hbar\omega_0\left[1 + \frac{\lambda}{m\omega_0^2} - \frac{\lambda^2}{2m^2\omega_0^4} + ...\right] && (14) \\
&= \epsilon_n + E_n^{(1)} + E_n^{(2)} + ... && (15)
\end{aligned}
$$

Dies stimmt mit den Energieverschiebungen, welche störungstheoretisch berechnet wurden, überein.

5 Asymptotik von WKB-Wellenfunktionen

Bestimmen Sie das asymptotische Verhalten der WKB-Wellenfunktion tief im klassisch verbotenen Bereich, also im Grenzfall $x \to \infty$, für

1. das lineare Potential $V(x) = F \cdot x$ mit $F > 0$.
2. das Potential $V(x) = \frac{1}{2} m\omega^2 x^2$ des harmonischen Oszillators.

Hinweise zu 2.:

- $\int \sqrt{x^2 - a^2}\, dx = \frac{1}{2} \left[x\sqrt{x^2 - a^2} - a^2 \ln\left(x + \sqrt{x^2 - a^2}\right)\right] + C$
- Entwickeln Sie den Integranden in der Exponentialfunktion für große x

Lösungsidee:

Die angegebenen Potentiale in den allgemeinen Ausdruck für eine exponentiell abfallende WKB-Wellenfunktion

$$u(x) = N \frac{1}{\sqrt{\kappa(x)}} \exp\left(-\int_{x_0}^{x} \kappa(x') dx'\right)$$

mit

$$\kappa = \sqrt{2m \frac{V(x) - E}{\hbar^2}}$$

einsetzen und die sich ergebenden Integrale auswerten.

Lösung:

1. Für das lineare Potential $V(x) = F \cdot x$ mit $F > 0$ ergibt die Auswertung des Integrals[1]:

$$-\frac{\sqrt{2m}}{\hbar} \int_{x_0}^{x} \sqrt{F \cdot x' - E} dx' = -\frac{\sqrt{2m}}{\hbar} \frac{2}{3F} (Fx - E)^{3/2}$$

Die WKB-Wellenfunktion lautet folglich:

$$\begin{aligned} u(x) &= N \frac{1}{\left(2m (Fx - E) / \hbar^2\right)^{1/4}} \exp\left(-\frac{2\sqrt{2m}}{3\hbar F} (Fx - E)^{3/2}\right) \\ &\propto \frac{1}{x^{1/4}} \exp\left(-\frac{2\sqrt{2m}}{3\hbar F} (Fx)^{3/2}\right) \end{aligned}$$

[1] Eine Änderung der unteren Integrationsgrenze x_0 liefert lediglich einen konstanten Faktor, der durch die Normierungskonstante N kompensiert werden kann. Deswegen sei der Einfachheit halber hier und im Folgenden angenommen, dass x_0 so gewählt ist, dass die Stammfunktion von κ bei x_0 verschwindet, sodass die untere Integralgrenze keinen Beitrag liefert.

2. Für das Potential des harmonischen Oszillators $V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$ kann unter Verwendung des angegebenen Integrals geschrieben werden:

$$\begin{aligned}
u(x) &= \frac{N}{\left(\frac{2m\frac{m\omega^2x^2}{2}-E}{\hbar^2}\right)^{1/4}} \exp\left(-\int \frac{\sqrt{2m}}{\hbar}\sqrt{\frac{m\omega^2x^2}{2}-E}\right) \\
&= \frac{N}{\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}\sqrt{x^2-\frac{2E}{m\omega^2}}}} \exp\left(-\frac{m\omega}{\hbar}\int\sqrt{x^2-\frac{2E}{m\omega^2}}\right) \\
&= \frac{N}{\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}\sqrt{x^2-\frac{2E}{m\omega^2}}}} \exp\left\{-\frac{m\omega}{\hbar}\left[\frac{x}{2}\sqrt{x^2-\frac{2E}{m\omega^2}}-\frac{E}{m\omega^2}\ln\left(x+\sqrt{x^2-\frac{2E}{m\omega^2}}\right)\right]\right\}
\end{aligned}$$

Somit folgt:

$$\begin{aligned}
u(x) &\propto \frac{1}{\sqrt{x}}\exp\left[-\frac{m\omega}{\hbar}\left(\frac{x^2}{2}-\frac{E}{m\omega^2}\ln(2x)\right)\right] \\
&= x^{E/\hbar\omega-1/2}\exp\left(-\frac{m\omega}{\hbar}\frac{x^2}{2}\right)
\end{aligned}$$

Der Exponentialterm hat die erwartete Form der Eigenfunktionen des harmonischen Oszillators. Damit das auch für den Vorfaktor gilt, muss gelten:

$$E = \left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega$$

Dies entspricht exakt der bekannten Energiequantisierung.