Matthias Herzog

Ferienkurs Quantenmechanik

Näherungsmethoden

1 Kurze Fragen

a) Wann darf man die Störungsrechnung anwenden?

Lösung Bei kleiner Störung und wenn man Zustände und Energien nach λ entwickeln kann.

b) Welche Testfunktionen sind bei der Variationsrechnung erlaubt, und welche Testfunktionen sind besonders geeignet?

Lösung Erlaubt: im Prinzip alle

Besonders geeignet: ähnliches asymptotisches Verhalten wie exakte Lösung

2 Mehrteilchensystem

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

$$|n_1 n_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|n_1\rangle |n_2\rangle + |n_2\rangle |n_1\rangle \right). \tag{1}$$

Die Einteilchenwellenfunktion in Ortsdarstellung lautet

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

Über ein Potential erfahren die beiden Teilchen eine schwache Wechselwirkung:

$$V(x_1, x_2) = -aV_0 \delta(x_1, x_2) \tag{3}$$

mit konstantem V_0. Berechnen Sie die Grundzustandsenergie in erster Ordnung Störungstheorie.

Hinweis:

$$\int \sin^4(bx)\,\mathrm{d}x = \frac{3}{8}x - \frac{1}{4b}\sin(2bx) + \frac{1}{32}\sin(4bx) \tag{4}$$

Lösung:

Die Energiekorrektur in erster Ordnung Störungstheorie ist:

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

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

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

Mit dem Hinweis wird die letzte Gleichung zu

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

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

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

Die Energie in erster Ordnung Störungstheorie ist

$$E_0 \cong E_{n1}^0 + E_{n2}^0 - \frac{3V_0}{2} \quad (11)$$

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

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

3 Variationsrechnung und Störungstheorie

a) Zeigen Sie mit Hilfe der Variationsmethode, dass die Grundzustandsenergie in erster Ordnung Störungstheorie nie kleiner ist als die tatsächliche Grundzustandsenergie:

$$E_0^0 + E_0^1 \geq E_0 \quad (14)$$

Lösung:

Wir setzen den Energieerwartungswert an als

$$E_0 = \left\langle 0 \middle| \hat{H} \middle| 0 \right\rangle \quad (15)$$

wobei $|0\rangle$ der tatsächliche (normierte) Grundzustand zu $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}'$ ist. Das Variationstheorem sagt aus, dass jede beliebige Funktion an Stelle von ψ einen höheren Erwartungswert hat. Folglich können wir die (normierten) Eigenzustände zum ungestörten Hamiltonoperator $|n_0\rangle$ nehmen:

$$\left\langle 0 \middle| \hat{H} \middle| 0 \right\rangle \leq \left\langle 0_0 \middle| \hat{H}_0 + \hat{H}' \middle| 0_0 \right\rangle \quad (16)$$

$$= E_0^0 + \left\langle 0_0 \middle| \hat{H}' \middle| 0_0 \right\rangle \quad (17)$$

Der zweite Term ist aber gerade die Definition der Energiekorrektur in erster Ordnung Störungstheorie,

$$\left\langle 0 \middle| \hat{H} \middle| 0 \right\rangle \leq E_0^0 + E_0^1 \quad (18)$$

b) Zeigen Sie außerdem, dass die Energiekorrektur zum Grundzustand in zweiter Ordnung Störungstheorie nie größer als 0 ist:

$$E_0^2 \leq 0 \quad (19)$$

Lösung:

Die Energiekorrektur in zweiter Ordnung lautet

$$E_0^2 = \sum_{m\neq 0} \frac{\left\langle m_0 \middle| \hat{H}' \middle| 0_0 \right\rangle \left\langle 0_0 \middle| \hat{H}' \middle| m_0 \right\rangle}{\left(E_0^0 - E_m^0\right)} \quad (20)$$

$$= \sum_{m\neq 0} \frac{\left|\left\langle m_0 \middle| \hat{H}' \middle| 0_0 \right\rangle\right|^2}{\left(E_0^0 - E_m^0\right)} \quad (21)$$

Der Zähler ist offensichtlich nie negativ. Da aber $E_m^0 \geq E_0^0$ für alle m gilt, ist der Nenner immer negativ. Deshalb ist E_0^2 immer negativ oder 0.

4 Variationsverfahren

Führen Sie für das Potential

$$V(x) = \begin{cases} fx & \text{für } x \geq 0 \\ +\infty & \text{für } x < 0 \end{cases} \tag{22}$$

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

$$u(x) = x\mathrm{e}^{-\alpha x}. \tag{23}$$

a) Geben Sie die dazugehörige minimierte Energie an.

Hinweis:

$$\int_0^\infty x^n \mathrm{e}^{-px} \mathrm{d}x = \frac{n!}{p^{n+1}} \tag{24}$$

Lösung:

Für das zu minimierende Energiefunktional gilt:

$$E(\alpha) = \frac{\langle u(x) | \hat{H} | u(x) \rangle}{\langle u(x) | u(x) \rangle} \tag{25}$$

Wir berechnen Zähler und Nenner getrennt:

$$\langle u(x) | u(x) \rangle = \int_0^\infty x^2 \mathrm{e}^{-2\alpha x} \mathrm{d}x = \frac{1}{4\alpha^3} \tag{26}$$

$$\langle u(x) | \hat{H} | u(x) \rangle = \int_0^\infty x\mathrm{e}^{-\alpha x} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + fx \right) x\mathrm{e}^{-\alpha x} \mathrm{d}x \tag{27}$$

$$= \frac{\hbar^2 \alpha}{m} \int_0^\infty x\mathrm{e}^{-2\alpha x} \mathrm{d}x - \frac{\hbar^2 \alpha^2}{2m} \int_0^\infty x^2 \mathrm{e}^{-2\alpha x} \mathrm{d}x + f \int_0^\infty x^3 \mathrm{e}^{-2\alpha x} \mathrm{d}x \tag{28}$$

$$= \frac{\hbar^2}{8m\alpha} + \frac{3f}{8\alpha^4} \tag{29}$$

und erhalten damit

$$E(\alpha) = \frac{\hbar^2 \alpha^2}{2m} + \frac{3f}{2\alpha} \tag{30}$$

Dieser Ausdruck wird jetzt minimiert:

$$\frac{\mathrm{d}E(\alpha)}{\mathrm{d}\alpha} = 0 \tag{31}$$

$$\Rightarrow \alpha_0 = \left(\frac{3mf}{2\hbar^2} \right)^{1/3} \tag{32}$$

$$\Rightarrow E(\alpha_0) = \frac{9}{4} \left(\frac{2f^2\hbar^2}{3m} \right)^{1/3} \tag{33}$$

b) Überlegen Sie sich ein Beispiel, wo dieses Potential in der Realität auftauchen kann.

Lösung:

Wenn man $f = mg$ wählt, handelt es sich um die potentielle Energie eines Teilchens im homogenen Gravitationsfeld der Erde. Das Teilchen wird bei x=0 an der Erdoberfläche reflektiert.

5 Heliumatom

Wir betrachten jetzt ein Heliumatom, bestehend aus 2 Protonen ($Z = 2$) und zwei Elektronen, wobei in sehr guter Näherung angenommen werden kann, dass der Atomkern unendlich schwer ist. Unter Vernachlässigung relativistischer und durch Spins hervorgerufener Effekte lautet der Hamiltonoperator

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \hat{H}_1 + \hat{H}_2 + V \qquad (34) \\ \text{mit} \quad \hat{H}_i &= \frac{\hat{P}_i^2}{2m_e} - \frac{2e^2}{|\mathbf{x}_i|} \qquad (35) \\ \text{und} \quad V(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) &= \frac{e^2}{|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2|}. \qquad (36) \end{aligned}$$

V beschreibt die abstossende Kraft zwischen den beiden Elektronen und ist als Störterm zu betrachten. Berechnen Sie die Energiezustände für das ungestörte Problem und geben sie das Integral für die Grundzustandsenergie dieses Problems in 1.Ordnung Störungstheorie an.

Lösung:

Die stationäre Schrödingergleichung für das ungestörte Problem lautet:

$$\left(\hat{H}_1 + \hat{H}_2\right) \Psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = E^{(0)} \Psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2). \qquad (37)$$

Um sie zu lösen machen wir den folgenden Produktansatz

$$\Psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \Psi_1(\mathbf{x}_1,) \Psi_2(\mathbf{x}_2,) \qquad (38)$$

Damit zerfällt die Schrödingergleichung in zwei Gleichungen für wasserstoffähnliche Systeme,

$$\hat{H}_i \Psi_i(\mathbf{x}_i,) = E_i^{(0)} \Psi_i(\mathbf{x}_i,), \qquad E^{(0)} = E_1^{(0)} + E_2^{(0)} \qquad (39)$$

mit den Lösungen

$$\begin{aligned} \Psi_i(\mathbf{x}) &= \Psi_{n_i,l_i,m_i}(\mathbf{x},) \qquad (40) \\ &= g_{n_i,l_i}(r) Y_{l_i,m_i}(\theta, \varphi) \qquad (41) \\ E_i^{(0)} &= -\frac{2m_e c^2 \alpha_e^2}{n_i^2} \qquad (42) \end{aligned}$$

Für die nichtentartete Grundzustandsenergie des Heliumatoms ($n_1 = n_2 = 1$) folgt damit in 0. Ordnung

$$E_{1,1}^{(0)} = -4m_e c^2 \alpha_e^2 = -108.8\,\mathrm{eV} \qquad (43)$$

Zum Vergleich: Der experimentelle Wert beträgt $-78.98\,\mathrm{eV}$. Für die Korrektur in 1. Ordnung hat man das Integral

$$\begin{aligned} E_{1,1}^{(1)} &= \int \mathrm{d}^3x_1 \int \mathrm{d}^3x_2 \, |\Psi_{1,0,0}(\mathbf{x}_1,)|^2 \, |\Psi_{1,0,0}(\mathbf{x}_2,)|^2 \, \frac{e^2}{|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2|} \qquad (44) \\ &= \frac{e^2}{\pi^2} \left(\frac{2}{r_0}\right)^6 \int \mathrm{d}r_1 r_1^2 \mathrm{e}^{-4r_1/r_0} \int \mathrm{d}r_2 r_2^2 \mathrm{e}^{-4r_2/r_0} \int \mathrm{d}\Omega_1 \int \mathrm{d}\Omega_2 \frac{1}{|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2|} \qquad (45) \end{aligned}$$

Nach Einführung von Kugelkoordinaten kann man dieses Integral lösen und erhält

$$E_{1,1}^{(1)} = \frac{5}{4} m_e c^2 \alpha_e^2 = 34\,\mathrm{eV}. \qquad (46)$$

Insgesamt ergibt sich also für die Grundzustandsenergie des Heliumatoms bis zur 1. Ordnung

$$E_{1,1} \approx E_{1,1}^{(0)} + E_{1,1}^{(1)} = -74.8\,\mathrm{eV} \qquad (47)$$