

Ferienkurs Quantenmechanik - Lösungen

Sommersemester 2013

Daniel Rosenblüh und Florian Häse

Fakultät für Physik

Technische Universität München

12. September 2013

Aufgabe 1 (**)

Der Hamiltonoperator für ein (positiv) geladenes Teilchen im elektromagnetischen Feld ist

$$H_{elm} = \frac{1}{2m} (-i\hbar\vec{\nabla} - e\vec{A})^2 - e\Phi$$

Zeigen Sie, dass die Kontinuitätsgleichung $\partial_t(\Psi^*\Psi) + \vec{\nabla} \cdot \vec{j} = 0$ gilt, wenn der Stromdichtevektor \vec{j} gleich

$$\vec{j} = \frac{1}{2m} \left\{ i\hbar(\Psi\vec{\nabla}\Psi^* - \Psi^*\vec{\nabla}\Psi) - 2e\vec{A}\Psi^*\Psi \right\}$$

ist. Beweisen Sie weiterhin, dass \vec{j} eichinvariant ist.

Lösung:

Da in der Definition des Stromdichtevektors \vec{j} sowohl die Wellenfunktion Ψ selbst, als auch ihr komplex Konjugiertes enthalten sind, muss man zwei Formulierungen der zeitabhängigen Schrödingergleichung betrachten

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = H\Psi \quad \text{und} \quad -i\hbar\frac{\partial\Psi^*}{\partial t} = (H\Psi)^*$$

In der nun folgenden Rechnung muss beachtet werden, dass sowohl das skalare Potential Φ als auch das Vektorpotential \vec{A} reell sind. Ferner werden die beiden Formulierungen der Schrödingergleichung verwendet werden, um die zeitlichen Ableitungen der Wellenfunktion Ψ und ihres komplex Konjugierten zu substituieren.

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\Psi^*\Psi) &= \frac{1}{i\hbar}(\Psi^*H\Psi - \Psi(H\Psi)^*) \\ &= \frac{1}{2im\hbar} \left[\Psi^* \left((-i\hbar\vec{\nabla} - e\vec{A})(-i\hbar\vec{\nabla} - e\vec{A})\Psi - 2me\Phi\Psi \right) \right. \\ &\quad \left. - \Psi \left((i\hbar\vec{\nabla} - e\vec{A})(i\hbar\vec{\nabla} - e\vec{A})\Psi^* - 2me\Phi\Psi^* \right) \right] \\ &= \frac{1}{2im\hbar} \left[\Psi^* \left(-\hbar^2\vec{\nabla}^2\Psi + ie\hbar(\vec{\nabla} \cdot \vec{A} + \vec{A} \cdot \vec{\nabla})\Psi \right) \right. \\ &\quad \left. - \Psi \left(-\hbar^2\vec{\nabla}^2\Psi^* - ie\hbar(\vec{\nabla} \cdot \vec{A} + \vec{A} \cdot \vec{\nabla})\Psi^* \right) \right] \end{aligned}$$

Um diesen Ausdruck weiter umformen zu können, bedarf es einer kleinen Zwischenrechnung. Wir sehen, dass

$$\Psi^*(\vec{\nabla} \cdot \vec{A} + \vec{A} \cdot \vec{\nabla})\Psi + \Psi(\vec{\nabla} \cdot \vec{A} + \vec{A} \cdot \vec{\nabla})\Psi^* = 2\vec{A} \cdot \Psi^* \vec{\nabla} \Psi + 2(\vec{\nabla} \cdot \vec{A} \Psi^* \Psi + 2\vec{A} \cdot \Psi(\vec{\nabla} \Psi^*)) = \vec{\nabla} \cdot (2\vec{A} \Psi^* \Psi)$$

Demnach kann man die zeitliche Ableitung der Wahrscheinlichkeitsdichte umformen zu

$$\begin{aligned} \dots &= \frac{1}{2im\hbar} \vec{\nabla} \cdot \left(-\hbar^2 \Psi^* \Psi + \hbar^2 \Psi \vec{\nabla} \Psi^* + 2ie\hbar \vec{A} \Psi^* \Psi \right) \\ &= -\vec{\nabla} \cdot \vec{j} \end{aligned}$$

womit die Gültigkeit der Kontinuitätsgleichung für diese Definition des Stromdichtevektors gezeigt ist.

Nun wollen wir noch die Eichinvarianz des Stromdichtevektors beweisen. Dazu betrachten wir eine Eichtransformation mit einem Skalarfeld Λ der Gestalt

$$\vec{A} \rightarrow \vec{A} + \vec{\nabla} \Lambda \quad \text{und} \quad \Psi \rightarrow e^{ie\Lambda/\hbar} \Psi = \zeta \Psi$$

Wendet man diese Transformation auf den Stromdichtevektor an, dann erhält man

$$\begin{aligned} \vec{j} &\rightarrow \frac{1}{2m} \left[i\hbar \left(\zeta \Psi \zeta^{-1} \left(\vec{\nabla} \Psi^* - \frac{ie}{\hbar} (\vec{\nabla} \Lambda) \Psi^* \right) - \zeta^{-1} \Psi^* \zeta \left(\vec{\nabla} \Psi + \frac{ie}{\hbar} (\vec{\nabla} \Lambda) \Psi \right) \right) \right. \\ &\quad \left. - 2e(\vec{A} + \vec{\nabla} \Lambda) \zeta^{-1} \Psi^* \zeta \Psi \right] \\ &= \vec{j} + \frac{e}{2m} \Psi^* \Psi \vec{\nabla} \Lambda (1 + 1 - 2) = \vec{j} \end{aligned}$$

womit auch die Eichinvarianz des so definierten Stromdichtevektors gezeigt ist.

Aufgabe 2 (**)

Betrachten Sie ein Teilchen der Masse m und Ladung $-e$ in einem homogenen Magnetfeld $\vec{B} = (0, 0, \mathcal{B})$ und einem dazu gekreuzten homogenen elektrischen Feld $\vec{E} = (\mathcal{E}, 0, 0)$. Bestimmen Sie das Spektrum der Eigenenergien $E(p_z, n)$ und die zugehörigen Eigenfunktionen $\Psi(\vec{r})$.

Hinweis:

Eine geeignete Eichung des Vektorpotentials $A_y(\vec{r})$ führt auf einen verschobenen harmonischen Oszillator. Wählen Sie das Skalarpotential $\Phi(x)$ so, dass es beim Erwartungswert $x_0 = \langle x \rangle$ der x -Koordinate verschwindet. Formen Sie die x -abhängigen Terme im Hamiltonoperator durch eine quadratische Ergänzung um. Zeigen Sie, dass der Mittelwert der Geschwindigkeit in y -Richtung $v_y = (p_y + eA_y)/m$ gleich $\langle v_y \rangle = -\mathcal{E}/\mathcal{B}$ ist!

Lösung:

Bei dieser Aufgabe sind die wichtigsten Punkte der Lösung bereits gegeben, wir müssen diese Punkte also nur noch abarbeiten. Zunächst wählen wir geeignete Vertreter für das skalare Potential und das Vektorpotential. Gegeben wurde, dass das skalare Potential

so zu wählen ist, dass es beim Erwartungswert x_0 der x -Koordinate verschwindet. Demnach definieren wir

$$\Phi = -E(x - x_0) \quad \text{und} \quad \vec{A} = \mathcal{B}x\vec{e}_y$$

Daraus resultieren die elektrischen und magnetischen Felder

$$\vec{E} = -\partial_t \vec{A} - \vec{\nabla}\Phi \quad \text{und} \quad \vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A}$$

Damit kann man den Hamiltonoperator für dieses Problem aufstellen, wobei die auftretenden Potentiale bereits durch das elektrische und das magnetische Feld substituiert werden

$$H = \frac{1}{2m} [p_x^2 + (p_y + e\mathcal{B}x)^2 + p_z^2] + e\mathcal{E}(x - x_0)$$

Es ist hierbei bekannt, dass $\vec{p} = -i\hbar\vec{\nabla}$. Wir sehen, dass der Hamiltonoperator offenbar mit p_y und p_z kommutiert, $[H, p_{y,z}]$, da der Hamiltonoperator lediglich von x explizit abhängig ist. Aufgrund dessen können wir bereits im Hamiltonoperator die Impulsoperatoren p_y und p_z durch ihre Eigenwerte $\hbar k_y$ und $\hbar k_z$ ersetzen

$$\begin{aligned} H &= -\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2 + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} + \frac{1}{2m}(\hbar k_y + e\mathcal{B}x)^2 + e\mathcal{E}(x - x_0) \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2 + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} + \frac{e^2 \mathcal{B}^2}{2m} \left(x + \frac{\hbar k_y}{e\mathcal{B}}\right)^2 - \frac{\hbar k_y \mathcal{E}}{\mathcal{B}} - \frac{m\mathcal{E}^2}{2\mathcal{B}^2} - e\mathcal{E}x_0 \end{aligned}$$

In dieser Gleichung erkennen wir den Hamiltonoperator eines verschobenen harmonischen Oszillators der Frequenz $\omega = e\mathcal{B}/m$. Die dazugehörigen Energieeigenwerte sind daher

$$E(k_z, n) = \frac{e\hbar\mathcal{B}}{m} \left(n + \frac{1}{2}\right) + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} - \frac{\hbar k_y \mathcal{E}}{\mathcal{B}} - \frac{m\mathcal{E}^2}{2\mathcal{B}^2} - e\mathcal{E}x_0$$

Die dazugehörigen Eigenfunktionen sind

$$\Psi(\vec{r}) = e^{i(k_y y + k_z z)} \Psi_n^{\text{OSZ}} \left(\underbrace{x + \frac{\hbar k_y}{e\mathcal{B}} + \frac{m\mathcal{E}}{e\mathcal{B}^2}}_{x-x_0} \right)$$

Hierbei ist der Erwartungswert von x gleich

$$\langle x \rangle = x_0 = -\frac{\hbar k_y}{e\mathcal{B}} - \frac{m\mathcal{E}}{e\mathcal{B}^2}$$

Die Energieeigenwerte sind damit also

$$E(k_z, n) = \frac{e\hbar\mathcal{B}}{m} \left(n + \frac{1}{2} \right) + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} + \frac{m\mathcal{E}^2}{2\mathcal{B}}$$

Der Erwartungswert der Geschwindigkeit in y -Richtung ist damit

$$\langle v_y \rangle = \frac{1}{m} \langle p_y + eA_y \rangle = \frac{1}{m} \langle p_y + e\mathcal{B}x \rangle = \frac{1}{m} (\hbar k_y + e\mathcal{B}x_0) = -\frac{\mathcal{E}}{\mathcal{B}}$$

Aufgabe 3 (*)**

Betrachten Sie das Wasserstoffatom in einem schwachen homogenen Magnetfeld $\vec{B} = (0, 0, B)$. Bei Berücksichtigung des Elektronenspins lautet der zugehörige Hamiltonoperator

$$H = \frac{1}{2m} (\vec{p} + e\vec{A})^2 - \frac{\alpha\hbar c}{r} + \mu_B \vec{\sigma} \cdot \vec{B}$$

mit dem Bohrschen Magneton $\mu_B = e\hbar/2m$ und den Pauli-Spinmatrizen $\vec{\sigma}$. Bestimmen Sie (zu linearer Ordnung in B) die Eigenenergien $E(n, m_l, m_s)$. Skizzieren Sie die Aufspaltung der Energieniveaus zu $n = 1, 2, 3$ und geben Sie den verbleibenden Entartungsgrad an!

Lösung:

Eine geschickte Wahl für das Vektorpotential \vec{A} ist, wie bereits in der Vorlesung gezeigt $\vec{A} = \frac{1}{2}\vec{B} \times \vec{r}$. Da die Eigenenergien zu linearer Ordnung in B bestimmt werden sollen, muss der Wechselwirkungs-Hamiltonoperator zunächst linearisiert werden. Der Wechselwirkungs-Hamiltonoperator beschreibt dabei folgenden Teil des Hamiltonoperators

$$H = \underbrace{\frac{\vec{p}^2}{2m} - \frac{\alpha\hbar c}{r}}_{H_{\text{Wasserstoff}}} + \underbrace{\frac{e}{2m} (\vec{p} \cdot \vec{A} + \vec{A} \cdot \vec{p} + \vec{A}^2)}_{H_{\text{int}}} + \mu_B \vec{\sigma} \cdot \vec{B}$$

Die Energieeigenwerte des Wasserstoff-Hamiltonoperators sind bereits bekannt, so dass lediglich die Energieeigenwerte des Wechselwirkungs-Hamiltonoperators H_{int} berechnet werden müssen. Den im Vektorpotential quadratischen Term können wir dabei vernachlässigen, da das Vektorpotential linear in B ist.

$$H_{\text{int}} = \frac{e}{2m} (\vec{p} \cdot \vec{A} + \vec{A} \cdot \vec{p}) + \mu_B \vec{\sigma} \cdot \vec{B}$$

Zunächst stellen wir fest, dass $[x_i, p_j] = i\hbar\delta_{ij}$, so dass $\vec{p} \cdot \vec{A} = \vec{A} \cdot \vec{p}$. Ferner kann man die Definition des Vektorpotentials einsetzen und erhält somit

$$H_{\text{int}} = \frac{e}{2m} \underbrace{(\vec{B} \times \vec{r}) \cdot \vec{p}}_{=\vec{p} \cdot (\vec{B} \times \vec{r})} + \mu_B \vec{\sigma} \cdot \vec{B}$$

Nun ist bekannt, dass das Spatprodukt invariant unter zyklischer Vertauschung ist. Demnach ist $\vec{p} \cdot (\vec{B}\vec{r}) = \vec{B}(\vec{r} \times \vec{p})$ wobei wir in der zweiten Klammer den Drehimpulsoperator \vec{L} wiederfinden. Der Wechselwirkungs-Hamiltonoperator kann damit zu Folgendem umgeformt werden

$$H_{\text{int}} = \frac{e}{2m} \vec{B} \cdot \vec{L} + \mu_B \vec{\sigma} \cdot \vec{B} = \mu_B \left(\frac{1}{\hbar} \vec{L} + \vec{\sigma} \right) \cdot \vec{B} = \mu_B B \left(\frac{1}{\hbar} L_z + \sigma_z \right)$$

da das Magnetfeld lediglich in z -Richtung zeigt. Die z -Komponente des Bahndrehimpulses und die dritte Paulimatrix kommutieren jeweils mit dem Hamiltonoperator, so dass Energieeigenfunktionen $\Psi_{n,l,m_l,m_s}(\vec{r} = R_{nl}(r)Y_{lm_l}(\theta, \phi)\chi_{m_s})$ ebenfalls Eigenfunktionen von L_z und σ_z sind. Die Eigenenergien sind demzufolge

$$E(n, m_l, m_s) = -\frac{m\alpha^2 c^2}{2n^2} + \mu_B B(m_l + 2m_s)$$

mit $m_l = -l, \dots, l$ und $m_s = \pm 1/2$.

1 Störungstheorie

Aufgabe 4 (*)

Angenommen der Hamiltonoperator eines Systems ist abhängig von einem Parameter λ . Die Eigenenergien und Eigenfunktionen von $H(\lambda)$ seien durch $E_n(\lambda)$ und $\Psi_n(\lambda)$ bezeichnet. Das Feynman-Hellmann Theorem lautet dann

$$\frac{\partial E_n}{\partial \lambda} = \left\langle \Psi_n \left| \frac{\partial H}{\partial \lambda} \right| \Psi_n \right\rangle$$

unter der Annahme, dass E_n nicht degeneriert sind oder die Ψ_n die "guten" Eigenfunktionen sind.

- (i) Beweisen Sie das Feynman-Hellmann Theorem!
- (ii) Wenden Sie dieses Theorem auf den eindimensionalen quantenmechanischen harmonischen Oszillator an. Bestimmen Sie so die Erwartungswerte $\langle V \rangle$ und $\langle T \rangle$ sowie eine Relation zwischen diesen. Nutzen Sie dazu
- (a) $\lambda = \omega$
- (b) $\lambda = \hbar$
- (c) $\lambda = m$

Beziehen Sie Ihre Ergebnisse auf Aussagen des Virialsatzes über dieses System.

Lösung:

- (i) Für einen konkreten Wert λ_0 wollen wir den Hamiltonoperator $H(\lambda_0)$ als ungestört betrachten. Durch eine kleine Störung $d\lambda$ kann man von diesem Wert abweichen und erreicht $\lambda = \lambda_0 + d\lambda$. Der störende Hamiltonoperator ist damit

$$H' = H(\lambda_0 + d\lambda) - H(\lambda_0) = \left(\frac{\partial H}{\partial \lambda} \right) d\lambda$$

in erster Ordnung Taylorentwicklung. Die Energiekorrektur dE_n kann man der aus der Vorlesung bekannten Gleichung berechnet werden

$$dE_n = E_n^1 = \langle \Psi_n^0 | H' | \Psi_n^0 \rangle = \left\langle \Psi_n \left| \frac{\partial H}{\partial \lambda} \right| \Psi_n \right\rangle d\lambda$$

Diese Gleichung muss nun noch umgestellt werden, um das Feynman-Hellmann Theorem zu reproduzieren.

$$\frac{\partial E_n}{\partial \lambda} = \left\langle \Psi_n \left| \frac{\partial H}{\partial \lambda} \right| \Psi_n \right\rangle$$

- (ii) Der eindimensionale quantenmechanische harmonische Oszillator wird beschrieben durch folgenden Hamiltonoperator

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \quad \text{wobei} \quad E_n = \hbar \omega \left(n + \frac{1}{2} \right)$$

- (a) Zunächst betrachten wir ω als den eingeführten Parameter λ . Die zu berechnenden Ableitungen sind

$$\frac{\partial E_n}{\partial \omega} = \hbar \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad \text{und} \quad \frac{\partial H}{\partial \omega} = m \omega x^2$$

Wendet man nun das Feynman-Hellman Theorem an, dann ergibt sich

$$\hbar \left(n + \frac{1}{2} \right) = \langle n | m \omega x^2 | n \rangle$$

Nun ist bekannt, dass das Potential des eindimensionalen quantenmechanischen harmonischen Oszillators $V = \frac{1}{2} m \omega^2 x^2$ ist. Nach einiger Umformung erhält man also

$$\langle V \rangle = \left\langle n \left| \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \right| n \right\rangle = \frac{1}{2} \hbar \omega \left(n + \frac{1}{2} \right) = \frac{1}{2} E_n$$

- (b) Nun betrachten wir \hbar als den eingeführten Parameter λ . Die zu berechnenden Ableitungen sind dann

$$\frac{\partial E_n}{\partial \hbar} = \omega \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad \text{und} \quad \frac{\partial H}{\partial \hbar} = -\frac{\hbar}{m} \frac{d^2}{dx^2}$$

Wendet man nun das Feynman-Hellman Theorem an, dann ergibt sich

$$\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) = \left\langle n \left| -\frac{\hbar}{m} \frac{d^2}{dx^2} \right| n \right\rangle$$

Nun ist bekannt, dass der kinetische Term des eindimensionalen quantenmechanischen harmonischen Oszillators $T = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2}$ ist. Nach einiger Umformung erhält man also

$$\langle T \rangle = \left\langle n \left| -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \right| n \right\rangle = \omega \left(n + \frac{1}{2} \right) = \frac{1}{2} \hbar \omega \left(n + \frac{1}{2} \right) = \frac{1}{2} E_n$$

- (c) Nun betrachten wir m als den eingeführten Parameter λ . Die zu berechnenden Ableitungen sind dann

$$\frac{\partial E_n}{\partial m} = 0 \quad \text{und} \quad \frac{\partial H}{\partial m} = \frac{\hbar^2}{2m^2} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} \omega^2 x^2 = -\frac{1}{m} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \right) + \frac{1}{m} \left(\frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \right)$$

Hier kommen nun aber genau die Ausdrücke für das Potential und den kinetischen Term des Hamiltonoperators vor. Daher kann man mit Hilfe des Feynman-Hellmann Theorems schlussfolgern, dass gilt

$$0 = -\frac{1}{m} \langle T \rangle + \frac{1}{m} \langle V \rangle \quad \Rightarrow \quad \langle T \rangle = \langle V \rangle$$

was konsistent mit den Aussagen des Virialtheorems ist.

Aufgabe 5 (**)

Berechnen Sie zu erster Ordnung in λ die Energieverschiebung im Grundzustand des eindimensionalen quantenmechanischen harmonischen Oszillators, wenn das Störpotential $H_1 = \lambda x^4$ zum Hamiltonoperator $H_0 = \frac{p^2}{2m} + \frac{m}{2} \omega^2 x^2$ hinzuaddiert wird. Berechnen Sie auch die Korrektur in zweiter Ordnung $\delta E_0^{(2)} \propto \lambda^2$

Lösung:

Zur Lösung dieser Aufgabe verwendet man geschickterweise die Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren b^\dagger und b , da man sich so durchaus viel Rechenaufwand sparen kann. Die erste Ordnung Störungstheorie ergibt

$$\delta E_0^{(1)} = \langle 0 | \lambda x^4 | 0 \rangle = \lambda \| x^2 | 0 \rangle \|^2$$

Nun ist es sinnvoll, den Ort x durch Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren auszudrücken. Es ist

$$x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(b + b^\dagger) \quad \text{und} \quad x^2 = \frac{\hbar}{2m\omega}(b + b^\dagger)^2$$

Zu beachten ist, dass der Grundzustand durch den Vernichtungsoperator vernichtet wird. Aus diesem Grund ist

$$\begin{aligned} x^2|0\rangle &= \frac{\hbar}{2m\omega} ((b + b^\dagger)^2|0\rangle) = \frac{\hbar}{2m\omega} ((b + b^\dagger)|1\rangle) \\ &= \frac{\hbar}{2m\omega} (\sqrt{2}|2\rangle + |0\rangle) \end{aligned}$$

Nutzt man die Orthonormalität der Eigenzustände findet man für die Energiekorrektur erster Ordnung

$$\delta E_0^{(1)} = \frac{3\lambda\hbar^2}{4m^2\omega^2}$$

Die Verschiebung in zweiter Ordnung ist

$$\delta E_0^{(2)} = \lambda^2 \sum_{n \neq 0} \frac{|\langle \Psi | x^4 | 0 \rangle|^2}{E_0 - E_n} = \lambda^2 \left(\frac{\hbar}{2m\omega} \right)^4 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{|\langle n | (b + b^\dagger)^4 | 0 \rangle|^2}{-n\hbar\omega}$$

Hier wendet man erneut die Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren an und findet

$$(b + b^\dagger)^4|0\rangle = (b + b^\dagger) (\sqrt{2}|2\rangle + |0\rangle) = (b + b^\dagger) (\sqrt{6}|3\rangle + 3|1\rangle) = 2\sqrt{6}|4\rangle + 6\sqrt{2}|2\rangle + 3|0\rangle$$

Demnach ist die Energiekorrektur zweiter Ordnung gerade

$$\delta E_0^{(2)} = -\frac{\lambda^2\hbar^3}{16m^4\omega^5} \left(\frac{(6\sqrt{2})^2}{2} + \frac{(6\sqrt{2})^2}{4} \right) = -\frac{21\lambda^2\hbar^3}{8m^4\omega^5}$$

Aufgabe 6 (***)

Zum Coulombpotential werde ein Korrekturterm proportional zu $1/r^2$ hinzuaddiert, d.h.

$$V(r) = -\frac{\alpha\hbar c}{r} + \frac{\hbar^2 g}{2mr^2}$$

mit $g > -1/4$. Die zufällige Entartung des Wasserstoffspektrums bzgl. l wird nun aufgehoben. Berechnen Sie das zugehörige Energiespektrum E_{nl} exakt und entwickeln Sie die Spektralformel bis zur Ordnung g . Vergleichen Sie den Term linear in g mit dem Erwartungswert des Störpotentials.

Hinweis: Die Radialgleichung für $u(\rho)$ erfährt folgende Modifikation: $l(l + 1) \rightarrow l(l + 1) + g = l'(l' + 1)$.

Hinweis: Es gilt $\langle r^{-2} \rangle = [a_B^2 n^3 (l + 1/2)]^{-1}$

Lösung:

Analog zum Wasserstoffatom erwarten wir für die Lösung dieses Problems eine Wellenfunktion der Gestalt $\Psi(\vec{r}) = u(r)/r Y_{lm}(\theta, \phi)$. Setzt man diesen Ansatz in die Schrödingergleichung ein, dann liefert der Radialanteil der Schrödingergleichung gerade

$$\left[\frac{\hbar^2}{2m} \left(-\partial_r^2 + \frac{l(l+1) + g}{r^2} \right) - \frac{\alpha \hbar c}{r} - E \right] u(r) = 0$$

Diese Gleichung kann man unter Einführung dimensionsloser Größen vereinfachen. Dazu nutzen wir $\rho = \frac{r}{\hbar} \sqrt{-2mE}$ und $\rho_0 = \alpha c \sqrt{\frac{-2m}{E}}$. Setzt man diese Größen in die Schrödingergleichung ein, dann erhält man

$$\left(\partial_\rho^2 - \frac{l(l+1) + g}{\rho^2} + \frac{\rho_0}{\rho} - 1 \right) \tilde{u}(\rho) = 0$$

Um diese Gleichung in die Form der bekannten Gleichung für das Wasserstoffatom zu bringen, führt man die neue Größe l' ein, die definiert ist durch $l(l+1) + g = l'(l'+1)$, also $l' = -\frac{1}{2} + \sqrt{\left(l + \frac{1}{2}\right)^2 + g}$. Der Ansatz, der die Asymptotik korrekt berücksichtigt ist wie bereits in der Vorlesung gesehen

$$\tilde{u}(\rho) = \rho^{l'+1} e^{-\rho} w(\rho)$$

Die somit resultierende Potenzreihe für $w(\rho) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k \rho^k$ führt auf die Rekursionsrelation

$$\frac{a_{k+1}}{a_k} = \frac{2(k + l' + 1) - \rho_0}{(k + 1)(k + 2l' + 2)}$$

Diese Rekursionsrelation muss nun abbrechen, um eine normierbare Lösung zu generieren. Daher fordert man

$$\begin{aligned} \rho_0 &= 2(l' + 1 + k_0) = 2 \left(k_0 + \frac{1}{2} + \sqrt{\left(l + \frac{1}{2}\right)^2 + g} \right) \\ &= 2 \left(n - l - \frac{1}{2} + \sqrt{\left(l + \frac{1}{2}\right)^2 + g} \right) \stackrel{!}{=} \alpha c \sqrt{\frac{-2m}{E}} \end{aligned}$$

Die Energien sind daher

$$E_{nl} = mc^2 \alpha^2 \left[-\frac{1}{2n^2} + \frac{g}{n^3(2l+1)} \right]$$

Nun kann man den Erwartungswert des Störoperators zum Wasserstoffhamiltonoperator berechnen. Der Störoperator lautet

$$\delta V = \frac{\hbar^2 g}{2mr^2}$$

so dass der Erwartungswert folgender ist

$$\langle \delta V \rangle = \frac{\hbar^2 g}{2m} \langle r^{-2} \rangle = \frac{\hbar^2 g}{2ma_B^2 n^3 (l + \frac{1}{2})} = mc^2 \alpha^2 \frac{g}{n^3 (2l + 1)} + \mathcal{O}(g^2)$$

Aufgabe 7 (*)**

Betrachten Sie den zweidimensionalen quantenmechanischen harmonischen Oszillator beschrieben durch den Hamiltonoperator

$$H_0 = \frac{1}{2m} (p_x^2 + p_y^2) + \frac{m}{2} \omega^2 (x^2 + y^2)$$

Berechnen Sie die Energieverschiebung aufgrund eines Störpotentials $H_1 = \varepsilon m \omega^2 xy$ im Grundzustand und im (entarteten) ersten angeregten Zustand in erster Ordnung Störungstheorie. Interpretieren Sie ihr Resultat. Lösen Sie das Problem nun exakt, beispielsweise durch Diagonalisierung der quadratischen Form für das Gesamtpotential, und vergleichen Sie mit einer Berechnung der Grundzustandsverschiebung in zweiter Ordnung Störungstheorie.

Lösung:

Zunächst betrachten wir den Oszillatorteil des Hamiltonoperators H_0 . Für diesen gilt bekanntermaßen

$$H_0 |n_1, n_2\rangle = \hbar \omega (n_1 + n_2 + 1)$$

Die Störung für den Grundzustand in erster Ordnung liefert nur einen verschwindenden Beitrag, wie man durch konkrete Berechnung sehen kann.

$$\delta E_{00}^{(1)} = \langle 00 | H_1 | 00 \rangle = \varepsilon m \omega^2 \int_{-\infty}^{+\infty} dx x \Psi_0^2(x) \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} dy y \Psi_0^2(y) = 0$$

Die Integrale verschwinden jeweils beide aus Paritätsgründen. Da die Integranden jeweils ungerade sind und über ein Intervall integriert wird, das symmetrisch zum Ursprung ist, verschwinden die Werte der Integrale. Für den ersten angeregten Zustand muss Störungstheorie für entartete Zustände angewendet werden. Wir berechnen daher analog des Skriptes

$$\begin{pmatrix} \langle 10 | H_1 | 10 \rangle & \langle 10 | H_1 | 01 \rangle \\ \langle 01 | H_1 | 10 \rangle & \langle 01 | H_1 | 01 \rangle \end{pmatrix}$$

Bei der Berechnung eines jeden einzelnen Matrixelementes sehen wir

$$\begin{aligned}\langle 10|H_1|10\rangle &= \varepsilon m\omega^2 \int_{-\infty}^{+\infty} dx x \Psi_1^2(x) \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} dy y \Psi_0^2(y) = 0 \\ \langle 01|H_1|01\rangle &= \varepsilon m\omega^2 \int_{-\infty}^{+\infty} dx x \Psi_0^2(x) \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} dy y \Psi_1^2(y) = 0\end{aligned}$$

mit dem gleichen Argument, wie wir es bereits vorher verwendet haben. Die Nebendiagonalterme hingegen sind

$$\begin{aligned}\langle 10|H_1|01\rangle &= \varepsilon m\omega^2 \langle 0|x|1\rangle \langle 1|y|0\rangle = \varepsilon m\omega^2 \sqrt{\frac{1}{2m\omega}} \langle 0|b + b^\dagger|1\rangle \sqrt{\frac{1}{2m\omega}} \langle 1|b + b^\dagger|0\rangle = \frac{\varepsilon}{2} \hbar\omega \\ \langle 01|H_1|10\rangle &= \varepsilon m\omega^2 \langle 1|x|0\rangle \langle 0|y|1\rangle = \varepsilon m\omega^2 \sqrt{\frac{1}{2m\omega}} \langle 1|b + b^\dagger|0\rangle \sqrt{\frac{1}{2m\omega}} \langle 0|b + b^\dagger|1\rangle = \frac{\varepsilon}{2} \hbar\omega\end{aligned}$$

Die zu berechnende Matrix ist daher

$$\frac{\varepsilon}{2} \hbar\omega \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \text{mit Eigenwerten} \quad \delta E_\pm^{(1)} = \pm \frac{\varepsilon}{2} \hbar\omega$$

Die zugehörigen Eigenzustände sind dabei

$$|\Psi_\pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|10\rangle \pm |01\rangle)$$

Damit haben wir störungstheoretisch die Energiekorrekturen ausrechnen können. Störungstheorie muss bei diesem Problem allerdings angewendet werden, da eine exakte Lösung ebenso möglich ist. Für die exakte Lösung ist es sinnvoll das Potential zu diagonalisieren

$$V(x, y) = \frac{m}{2} \omega^2 (x^2 + 2\varepsilon xy y^2) = \frac{m}{2} \omega^2 (x, y) \begin{pmatrix} 1 & \varepsilon \\ \varepsilon & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$$

Bei der Diagonalisierung der hier auftretenden Matrix erhält man die Eigenvektoren

$$\hat{e}_\pm = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \pm 1 \end{pmatrix}$$

Für eine entsprechende Koordinatentransformation sind die Normalkoordinaten

$$(\xi \hat{e}_+ + \eta \hat{e}_-) \quad \text{mit} \quad \xi = \frac{1}{\sqrt{2}}(x + y), \quad \eta = \frac{1}{\sqrt{2}}(x - y)$$

Das Potential kann demnach in neuen Koordinaten geschrieben werden als

$$V(\xi, \eta) = \frac{m}{2}\omega^2 [(1 + \varepsilon)\xi^2 + (1 - \varepsilon)\eta^2]$$

Nun müssen allerdings noch die Impulse transformiert werden. Dazu betrachten wir

$$\begin{aligned} \partial_x &= \frac{\partial \xi}{\partial x} \cdot \frac{\partial}{\partial \xi} + \frac{\partial \eta}{\partial x} \cdot \frac{\partial}{\partial \eta} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\partial_\xi + \partial_\eta) \\ \partial_y &= \frac{\partial \xi}{\partial y} \cdot \frac{\partial}{\partial \xi} + \frac{\partial \eta}{\partial y} \cdot \frac{\partial}{\partial \eta} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\partial_\xi - \partial_\eta) \end{aligned}$$

Demnach ist $p_x^2 + p_y^2 = 1/2(p_\xi + p_\eta)^2 + 1/2(p_\xi - p_\eta)^2 = p_\xi^2 + p_\eta^2$. Der Hamiltonoperator ist also

$$H = H_0 + H_1 = \frac{1}{2m}(p_\xi^2 + p_\eta^2) + \frac{m}{2}\omega^2 ((1 + \varepsilon)\xi^2 + (1 - \varepsilon)\eta^2)$$

Die ist allerdings der Hamiltonoperator von zwei ungekoppelten Oszillatoren mit den Frequenzen $\omega\sqrt{1 \pm \varepsilon}$. Das exakte Energiespektrum ist also

$$\begin{aligned} E(n_1, n_2) &= \hbar\omega \left(\sqrt{1 + \varepsilon} \left(n_1 + \frac{1}{2} \right) + \sqrt{1 - \varepsilon} \left(n_2 + \frac{1}{2} \right) \right) \\ &= \hbar\omega \left[n_1 + n_2 + 1 \frac{\varepsilon}{2}(n_1 - n_2) - \frac{\varepsilon^2}{8}(n_1 + n_2 + 1) \right] + \mathcal{O}(\varepsilon^3) \end{aligned}$$

in Übereinstimmung mit dem störungstheoretischen Resultat. Zweite Ordnung Störungstheorie liefert

$$\delta E_{00}^{(2)} = \sum_{(n_1, n_2) \neq (0,0)} \frac{|\langle n_1 n_2 | H_1 | 00 \rangle|^2}{E(0,0) - E(n_1, n_2)} = -\frac{\varepsilon^2 m^2 \omega^4}{\hbar\omega} \sum_{(n_1, n_2) \neq (0,0)} \frac{|\langle n_1 n_2 | xy | 00 \rangle|^2}{n_1 + n_2}$$

Nun kann man leicht nachrechnen, dass gilt

$$\begin{aligned} x|0\rangle &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(b + b^\dagger)|0\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}|1\rangle \\ y|0\rangle &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(b - b^\dagger)|0\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}|1\rangle \end{aligned}$$

Also liefert nur der Zustand mit $n_1 = n_2 = 1$ einen Beitrag

$$\delta E_{00}^{(2)} = -\frac{\varepsilon^2 m^2 \omega^4}{\hbar\omega} \cdot \frac{\hbar^2}{4m^2 \omega^2} \frac{1}{1+1} = -\frac{\varepsilon^2}{8} \hbar\omega$$

in Übereinstimmung mit der Entwicklung des exakten Resultates.