UNIVERSITÄT LEIPZIG, ITP

Quantenmechanik II, WS2009/2010

Übungsblatt 5: Musterlösungen

Aufgabe 13

Die Lösung des ungestörten Problems ist wohl bekannt; wir führen die dimensionslose Koordinate:

$$\tilde{x} = \alpha x, \qquad \alpha^2 = \frac{\sqrt{mk}}{\hbar}$$

und finden

$$H_0 = \hbar\omega(a^* a + 1/2), \qquad \tilde{x} = \frac{a + a^*}{\sqrt{2}}$$

mit $\omega = \sqrt{k/m}$. Im folgenden werden die ungestörten Energieeigenfunktionen mit $|n\rangle$ bezeichnet.

Die Störung ist durch eine eifache Funktion von $\tilde{x}$ gegeben, und lässt sich durch die Vernichtungs-/Erzeugungs-Operatoren ausdrücken:

$$H' = \frac{b\tilde{x}^2}{2\alpha^2} = \frac{b}{4\alpha^2}\,(a + a^*)^2.$$

Die erste Korrektur (linear in dem Störungsparameter, z.B. b) ist gegeben durch

$$b\psi_1 = \sum_{n=1}^{\infty} |n\rangle\,\frac{(|n\rangle, H'|0\rangle)}{\hbar\omega(0-n)} \;=\; -\frac{b\sqrt{2}}{4k\cdot 2}\,|2\rangle$$

wegen $(|n\rangle, aa^*|0\rangle) = 0$ für $n \geqslant 1$, und $\alpha^2\hbar\omega = k$. Damit ist die Grundzustandswellenfunktion im ersten Ordnung gegeben durch

$$|\tilde{0}\rangle = |0\rangle - \frac{b\sqrt{2}}{8k}|2\rangle.$$

Diese Funktion ist auch normiert[1] bis auf $O(\frac{b^2}{k^2})$. Unter Verwendung der expliziten Form der Funktionen $|n\rangle$

$$|0\rangle = \sqrt{\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}}\,\exp\left[-\frac{\alpha^2 x^2}{2}\right] \tag{1}$$

$$|1\rangle = \sqrt{\frac{\alpha}{2\sqrt{\pi}}}\,2\alpha x\exp\left[-\frac{\alpha^2 x^2}{2}\right] \tag{2}$$

$$\sqrt{2}|2\rangle = \sqrt{\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}}\,(2\alpha^2 x^2 - 1)\exp\left[-\frac{\alpha^2 x^2}{2}\right] \tag{3}$$

$$\tag{4}$$

[1] Die Korrektur zur Normierung ist vom zweiten Ordnung in b.

wird ein Vergleich mit der exakten Form der gestörten Grundzustandswellenfunktion, $|\tilde{0}\rangle$, möglich.

Zu diesem Zweck betrachten wir die Störung als ein Teil des harmonischen Potential. Die neue $\tilde{\alpha}$ ist offensichtlich gegeben durch

$$\tilde{\alpha}^2 = \frac{\sqrt{2m(k+b)}}{\hbar} = \alpha^2 \cdot (1+b/k)^{1/2}.$$

Die exakte Grundzustandswellenfuntion hat die gleiche Form wie $|0\rangle$, nun mit $\alpha \to \tilde{\alpha}$:

$$|\tilde{0}\rangle_{ex} = \sqrt{\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}}(1+b/k)^{1/8} \exp\left[-\frac{\alpha^2 x^2}{2}(1+b/k)^{1/2}\right].$$

Wegen

$$(1+\kappa)^{1/8} e^{-\frac{\alpha^2 x^2}{2}(1+\kappa)^{1/2}} \approx e^{-\frac{\alpha^2 x^2}{2}}\left[1 - \frac{\kappa}{8}\left(2\alpha^2 x^2 - 1\right)\right] + O(\kappa^2)$$

erhalten wir

$$|\tilde{0}\rangle_{ex} = \sqrt{\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}} \exp\left[-\frac{\alpha^2 x^2}{2}\right]\left[1 - \frac{b}{8k}\left(2\alpha^2 x^2 - 1\right)\right] + O(\tfrac{b^2}{k^2}),$$

was mit der gefundenen Form von $|\tilde{0}\rangle$ übereinstimmt.

Aufgabe 14

Der ungestörte Hamiltonoperator, $H_0 = \frac{p^2}{2m}$, mit den Dirichlet-Randbedingungen $\psi(-a/2) = 0 = \psi(a/2)$ besitzt die Eigenfunktionen

$$|k\rangle = \sqrt{\frac{2}{a}} \cos\left(\frac{k\pi x}{a}\right), \qquad \text{für } k = 2n+1, \tag{5}$$

$$|k\rangle = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{k\pi x}{a}\right), \qquad \text{für } k = 2n, \tag{6}$$

$(n \in \mathbb{N})$, zu den Eigenwerten

$$E_k = \frac{\pi^2 \hbar^2 k^2}{2ma^2}.$$

Ein homogenes elektrisches Feld, das in der (positiven) x-Richtung ausgerichtet ist, wird durch das Potential $U = -E\,x$ beschrieben. Die potentielle Energie eines Elektrons $(q = -e)$ in einem solchen Feld ist gegeben durch $H' = exE$, wobei eE als ein kleines Parameter betrachtet wird.

Die gestörte Grundzustandswellenfunktion, korrekt bis zur ersten Ordnung in eE (Korrektur zur Normierung wird vom Ordnung $(eE)^2$), ist gegeben durch

$$|\tilde{1}\rangle = |1\rangle + \sum_{k=2}^{\infty} a_k |k\rangle$$

mit $a_k = 0$ für ungerade[2] k, und

$$a_k = \frac{(|k\rangle, H'|1\rangle)}{E_1 - E_k} = \frac{eE}{\frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}(1-k^2)}(|1\rangle, x|k\rangle) = E \cdot \frac{B}{1-k^2}\int_{-\pi/2}^{\pi/2} dy \sin(2ny)\, y \cos(y) = \ldots,$$

[2] Zur Bestimmung von a_k, für ungerade k's, wird eine ungerade Funktion über einem symmetrischen Intervall integriert.

für $k = 2n$, mit

$$B = \frac{4mea^3}{\hbar^2\pi^4}.$$

($E \cdot B$ ist dimensionslos, wie es sein soll.) Man findet leicht[3]

$$\frac{\pi^2}{2a}\left(|2n\rangle, x|1\rangle\right) = \int_{-\pi/2}^{\pi/2} dy \sin(2ny)\, y\, \cos(y) = -\frac{8(-1)^n n}{(4n^2-1)^2} \equiv c_n,$$

und damit

$$a_{2n} = +EB\frac{8n(-)^n}{(4n^2-1)^3}.$$

𝔅ei der Berechnung des Erwartungswertes des Dipolmoments, $(|\tilde{1}\rangle, -ex\,|\tilde{1}\rangle)$ beachten wir, dass die Matrixelemente $\big(|2m\rangle, ex\,|2n\rangle\big)$ verschwinden (wegen der Symmetrie $x \to -x$), und erhalten:

$$\begin{aligned}\big(|\tilde{1}\rangle, ex\,|\tilde{1}\rangle\big) = e\sum_{n=1}^{\infty}\left\{\overline{a_{2n}}\big(|2n\rangle, x|1\rangle\big) + a_{2n}\big(|1\rangle, x|2n\rangle\big)\right\} = e\sum_{n=1}^{\infty} 2a_{2n}\big(|2n\rangle, x|1\rangle\big) = \\ = -\sum_{n=1}^{\infty}\frac{256eEBa}{\pi^2}\,\frac{n^2}{(4n^2-1)^5}, \qquad (7)\end{aligned}$$

(a_{2n} sowie $\big(|1\rangle, x|2n\rangle\big)$ sind reell). Die elektrische Suszeptibilität ist damit positiv (d.h. das Elektron, unter dem Einfluss der Störung, bevorzugt den Region niedriger potenziellen Energie). Die nur noch zum Auswerten bleibende Summe kann entweder durch den Beitrag von $n = 1$ approximiert werden,

$$\frac{n^2}{(4n^2-1)^5}\Big|_{n=1} = \frac{1}{243} \approx 0.00411523$$

oder auch exakt bestimmt werden,

$$\sum_{n=1}^{\infty}\frac{n^2}{(4n^2-1)^5} = \frac{15\pi^2 - \pi^4}{12288} \approx 0.00412068.$$

Schließlich, in der ersten Ordnung der Störungstheorie, finden wir

$$\big(|\tilde{1}\rangle, -ex\,|\tilde{1}\rangle\big) = \frac{Eme^2a^4}{\hbar^2\pi^4}\,\frac{15-\pi^2}{12}\,.$$

[3]Zum Beispiel via $\int \sin(2ny)y\cos(y) = \partial_B|_1 \int \sin(2ny)\sin(By)$ mit $\sin(Ay)\sin(By) = \frac{1}{2}\left[\cos(A-B) - \cos(A+B)\right]$.

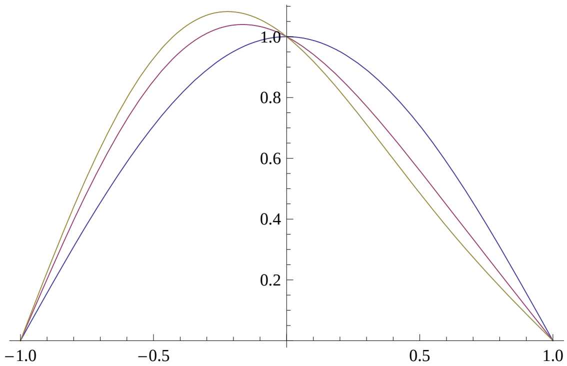

Abb.1. Grundzustandswellenfunktionen $|\tilde{1}\rangle$ für verschiedene elektrische Felder. Zu beachten ist, dass die Wellenfunktion bei $E > 0$ starker im Region niedriger potenziellen Energie ($x < 0$) lokalisiert ist.

Aufgabe 15

Im folgenden werden die Wellenfunktionen des ungestörten Problems mit ψ_L bezeichnet ($L = 0, 1, \ldots$). Die ungestörte Grundzustandswellenfunktion sei mit ψ_G, und seine (störungstheoretische) Korrekturen mit ψ_G^n ($n = 1, \ldots$) bezeichnet. Per Annahme die gestörte (nicht normierte) Grundzustandswellenfunktion $\tilde{\psi}_G$ wird durch

$$\tilde{\psi}_G = \psi_G + \sum_{n=1}^{\infty} \lambda^n \psi_G^n$$

gegeben, wobei die Korrekturen orthogonal zu ψ_G sein sollen[4], $(\psi_G, \psi_G^n) = 0$. Die Grundzustandsenergie $\tilde{E}_G$ wird auch in eine Potenzreihe in λ entwickelt,

$$\tilde{E}_G = E_G + \sum_{n=1}^{\infty} \lambda^n E_G^n.$$

Zusammen mit der Notation $H' = \lambda V$ hängen also ψ_G^n, E_G^n und V *nicht* von λ ab.

Die allgemeine Formeln der zeitunabhängigen Störungstheorie eines nicht-entarteten Energieniveaus ψ_G lauten:

$$\psi_G^n = S\left(V\psi_G^{n-1} - \sum_{k=1}^{n-1} E_G^k \psi_G^{n-k}\right) \tag{8}$$

$$E_G^n = \left(\psi_G, V\,\psi_G^{n-1}\right), \tag{9}$$

wobei

$$S = \frac{P_\perp}{E_G - H_0} = \sum_{L \neq G} \frac{|\psi_L\rangle\langle\psi_L|}{E_G - E_L}$$

hier ist $P_\perp$ der Projektor auf den zu ψ_G^0 orthogonalen Raum. Speziell, im unseren Fall gibt es zwei ungestörten Energieniveaus:

$$\psi_G = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \qquad \text{zur Energie } E_G = -1$$

[4]Die Korrektur parallel zu ψ_G wird aus der Normierungsbedingung gewonnen.

$$\psi_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \qquad \text{zur Energie } E_1 = 1$$

Die Berechnung der Korrekturen zu ψ_G und E_G erfolgt sukzessiv: $\psi_G \to E_G^1 \to \psi_G^1 \to E_G^2 \to \psi_G^2 \to \ldots$. Im unseren Fall gibt es nur die ψ_1 "Richtung", die orthogonal zu ψ_G ist; alle Korrekturen zu ψ_G müssen also parallel zu ψ_1 sein. Mit $V = \sigma_1$ folgt

$$S = -\frac{1}{2}|\psi_1\rangle\langle\psi_1|.$$

Man sieht leicht, dass alle ungeraden Energie-Korrekturen E_G^{2k+1}, und alle geraden Wellenfunktionkorrekturen ψ_G^{2k} müssen verschwinden. Für die nichtverschwindenden Korrekturen finden wir sukzessiv:

$$\psi_G^1 = S[V\psi_G] = -\frac{1}{2}\,\psi_1, \tag{10}$$

$$E_G^2 = (\psi_G, V\psi_G^1) = -\frac{1}{2}, \tag{11}$$

$$\psi_G^3 = S\left[V\psi_G^2 - E_G^2\psi_G^1 - E_G^1\psi_G^2\right] = -SE_G^2\psi_G^1 = \frac{1}{8}\psi_1, \tag{12}$$

$$E_G^4 = \frac{1}{8}. \tag{13}$$

Kurz:

$$\tilde{\psi}_G = \psi_G + \left(-\frac{\lambda}{2} + \frac{\lambda^3}{8} + O(\lambda^5)\right)\psi_1,$$

$$\tilde{E}_G = -1 - \frac{\lambda^2}{2} + \frac{\lambda^4}{8} + O(\lambda^6),$$

wobei die oben gefundene gestörte Wellenfunktion $\tilde{\psi}_G$ noch nicht normiert ist.

𝔇as Problem lässt sich offensichtlich auch exakt lösen, wir finden

$$E_{ex} = -\sqrt{1+\lambda^2},$$

$$\psi_{ex} = \psi_G - \frac{\lambda}{1+\sqrt{1+\lambda^2}}\psi_1.$$

Man sieht leicht, dass die Störungstheoretische Ergebnisse einfach Taylor-Entwicklungen der exakten Lösungen sind, d.h. $\psi_{ex} = \tilde{\psi}_G$ (die beiden Funktionen sind durch $(\psi, \psi_G) = 1$ normiert). Um die normerte Wellenfunktion $\tilde{\Psi}_G = Z^{1/2}(\lambda)\tilde{\psi}_G$ zu bestimmen berechnen wir induktiv die Normierungs-Funktion $Z(\lambda)$. Die Bedingung

$$Z(\lambda)\left(\tilde{\psi}_G, \tilde{\psi}_G\right) = 1$$

zusammen mit dem Ansatz $Z = \sum_{k=0}^{\infty} z_n\lambda^n$, und $z_0 = 1$, lässt die z_n's bestimmen. Bis auf (einschließlich) Glieder vom Ordnung λ^4 folgt die Relation

$$(1 + \lambda z_1 + \lambda^2 z_2 + \lambda^3 z_3 + \lambda^4 z_4)\left[1 + \left(\frac{-\lambda}{2} + \frac{\lambda^3}{8}\right)^2\right] = 1$$

Wir finden sofort $z_1 = 0 = z_3$,

$$z_2 = -\frac{1}{4} \qquad z_4 = \frac{3}{16},$$

also

$$Z^{1/2} = 1 - \frac{\lambda^2}{8} + \frac{11\lambda^4}{128} + O(\lambda^6).$$

Die normierte gestörte Wellenfunktion ist gegeben durch

$$\tilde{\Psi}_G \approx Z^{1/2}\psi_G + Z^{1/2}\left(-\frac{\lambda}{2} + \frac{\lambda^3}{8}\right)\psi_1 \approx \left[1 - \frac{\lambda^2}{8} + \frac{11\lambda^4}{128}\right]\psi_G + \left[-\frac{\lambda}{2} + \frac{3\lambda^3}{16}\right]\psi_1$$

Die Hellmann-Feynman Formel, wegen der Äquivalenz von $\tilde{\psi}_G$ zu der exakten Lösung ψ_{ex}, wird auf dem Beispiel der exakten Lösung ψ_{ex} verifiziert. Für exakte Lösungen gilt

$$Z(\lambda) = \frac{(1+\mathcal{E})^2}{\lambda^2 + (1+\mathcal{E})^2}, \qquad \text{mit } \mathcal{E} = \sqrt{1+\lambda^2}$$

also

$$\Psi_{ex} = \frac{1}{\sqrt{\lambda^2 + (1+\mathcal{E})^2}}\left[(1+\mathcal{E})\psi_G - \lambda\psi_1\right].$$

Wegen $\frac{\partial H'}{\partial\lambda} = V$ finden wir[5]

$$(\Psi_{ex}, V\Psi_{ex}) = \frac{-2\lambda(1+\mathcal{E})}{\lambda^2 + (1+\mathcal{E})^2} = -\frac{\lambda}{\mathcal{E}} = \frac{\partial E_{ex}}{\partial\lambda}.$$

also die Hellmann-Feynman Formel is erfüllt.

[5]Beachte: $1 + \lambda^2 + \mathcal{E} = \mathcal{E}(1+\mathcal{E})$.