Ludwig-Maximilians-Universität München, Department für Physik
Prof. Dr. D. Lüst

2. Übung zur Quantenmechanik II (T5)

(Abgabe 29.10.2007)

5. Aufgabe: Stark-Effekt

In der Vorlesung wurden der quadratische und der lineare Stark-Effekt besprochen. Diese Aufgabe soll einige der Lücken aus der Diskussion in der Vorlesung schließen.

a) Zum *quadratischen* Stark-Effekt: Die Verschiebung der Grundzustandsenergie bekommt ihren führenden Beitrag aus der 2. Ordnung Störungstheorie. Zur genauen Berechnung der Korrektur 2. Ordnung benötigt man die Matrixelemente $\langle nlm|\hat{z}|100\rangle$. Zeigen Sie, daß

$$\langle nlm|\hat{z}|100\rangle \sim \delta_{m,0}\delta_{l,1} f(n) \tag{1}$$

gilt. Dabei steht $f(n)$ für eine Funktion der Hauptquantenzahl n, die Sie nicht zu berechnen brauchen.

b) Zum *linearen* Stark-Effekt: Berechnen Sie die 4×4-Matrix M aus den Matrixelementen $\langle nl'm'|\hat{z}|nlm\rangle$ zwischen den ersten angeregten Zuständen $n = 2$, d.h. M hat die Matrixelemente $M_{ij} = \langle e_i|\hat{z}|e_j\rangle$, wobei $|e_1\rangle = |200\rangle$, $|e_2\rangle = |210\rangle$, $|e_3\rangle = |21-1\rangle$ und $|e_4\rangle = |211\rangle$ ist. Nutzen Sie dabei Ihre Kenntnisse aus Aufgabe 4 (d.h. daß $\langle nl'm'|\hat{z}|nlm\rangle$ verschwindet, wenn $m \neq m'$ oder wenn $l + l'$ gerade ist).

c) Berechnen Sie die Eigenvektoren und Eigenwerte von M.

(Hinweis: $\psi_{200} = A(r)\sqrt{2}(2 - \frac{r}{a_0})$, $\psi_{21-1} = A(r)\frac{r}{a_0}\sin(\theta)e^{-i\phi}$, $\psi_{210} = A(r)\sqrt{2}\frac{r}{a_0}\cos(\theta)$ und $\psi_{211} = -A(r)\frac{r}{a_0}\sin(\theta)e^{i\phi}$, mit $A(r) = e^{-\frac{r}{2a_0}}/(4\sqrt{4\pi a_0^3})$.)

6. Aufgabe: Externes homogenes Feld im Potentialtopf

Betrachten Sie einen eindimensionalen unendlich tiefen Potentialtopf mit dem Hamiltonoperator $\hat{H}_0 = \hat{p}^2/(2m) + V(\hat{x})$ mit $V(x) = 0$ für $x \in [0, L]$ und $V(x) = \infty$ sonst. Die Störung sei ein homogenes Feld $\hat{H}_1 = -F\hat{x}$. Berechnen Sie die Grundzustandsenergie von $\hat{H}_0 + \hat{H}_1$ bis zu zweiter Ordnung in F.

(Zur Erinnerung aus QM1: Die ungestörten Eigenzustände und -energien sind

$$\psi_n = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) , \quad n \geq 1 \tag{2}$$

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} n^2 . \tag{3}$$

Außerdem: Mit der Definition $S_n := \sum_{k=1}^{\infty} (4k^2 - 1)^{-n}$ gilt $S_1 = 1/2; S_2 = -1/2 + \pi^2/2^4; S_3 = 1/2 - 3\pi^2/2^6; S_4 = -1/2 + \pi^2(\pi^2 + 30)/(3 \cdot 2^8); S^5 = 1/2 - 5\pi^2(\pi^2 + 21)/(3 \cdot 2^{10})$.)

7. Aufgabe: Anharmonischer Oszillator

Betrachten Sie den Hamiltonoperator $\hat{H}_0$ eines harmonischen Oszillators und einen Störterm $\hat{V}$:

$$\hat{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega_0^2 \hat{x}^2}{2} \quad \text{und} \quad \hat{V} = \mu_1 \sqrt{\frac{m^3 \omega_0^5}{\hbar}} \hat{x}^3 + \mu_2 \frac{m^2 \omega_0^3}{\hbar} \hat{x}^4 , \tag{4}$$

mit $\mu_1 \in \mathbb{R}, \mu_2 \in \mathbb{R}_+$, die als klein angenommen werden, um die Anwendung der Störungstheorie zu rechtfertigen. Berechnen Sie in erster Ordnung Störungstheorie die Eigenwerte $E_n(\mu_1, \mu_2)$.

(Hinweis: Drücken Sie den Operator $\hat{V}$ durch Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren aus.)

8. Aufgabe: Ritz'sches Variationsverfahren

Einführung: Variationsverfahren für den Grundzustand beruhen auf der einfachen Ungleichung

$$E_0 \leq \frac{\langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle} \tag{5}$$

für die Energie des Grundzustands von $\hat{H}$, wobei $|\psi\rangle$ ein beliebiger, nicht notwendig normierter Zustand im Hilbertraum ist. Diese Ungleichung kann man leicht beweisen: Man entwickle $|\psi\rangle$ in eine orthonormierte Basis $\{|u_n\rangle\}$ von Eigenzuständen von $\hat{H}$, d.h. $|\psi\rangle = \sum_n |u_n\rangle\langle u_n|\psi\rangle$. Dann gilt

$$\frac{\langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle} = \frac{1}{\langle\psi|\psi\rangle} \sum_n E_n |\langle u_n|\psi\rangle|^2 \geq E_0 \frac{1}{\langle\psi|\psi\rangle} \sum_n |\langle u_n|\psi\rangle|^2 = E_0 . \tag{6}$$

Das Gleichheitszeichen in (5) gilt nur, wenn $|\psi\rangle$ der (oder ein) Grundzustand ist. Daher gilt

$$E_0 = \min \frac{\langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle} = \min_{\langle\psi|\psi\rangle = 1} \langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle . \tag{7}$$

Dies führt nun zu folgendem Näherungsverfahren: Man betrachtet das Funktional

$$F[\psi] := \frac{\langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle} \tag{8}$$

nur auf einem *Unterraum* des gesamten Hilbertraums und sucht innerhalb dieses Unterraumes nach dem Minimum für $F[\psi]$ (diesen Unterraum nennt man den Raum der Versuchszustände). Der so gefundene Zustand stellt eine Näherung für den Grundzustand dar, das Minimum von $F[\psi]$ in dem Unterraum eine Näherung für die Grundzustandsenergie. Dieses Verfahren wird als *Ritz'sches Variationsverfahren* bezeichnet. Wenn die Elemente des Unterraumes durch einen Parameter α parametrisiert sind, wird $F[\psi] = F(\alpha)$ und man kann das Minimum durch die Bedingung $\partial F(\alpha)/\partial\alpha = 0$ gewinnen (eine Verallgemeinerung auf eine Parametrisierung durch mehrere Parameter ist offensichtlich). Die Wahl der Versuchszustände erfordert in der Regel einige Intuition und Erfahrung, um eine gute Näherung für den Grundzustand und dessen Energie zu bekommen.

Aufgabe: Gegeben sei derselbe Hamiltonoperator wie in Aufgabe 7, mit $\mu_1 = 0$ und $\mu_2 = 1/10$, d.h.

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega_0^2\hat{x}^2}{2} + \frac{m^2\omega_0^3}{10\hbar}\hat{x}^4 \ . \tag{9}$$

Berechnen Sie die Grundzustandsenergie mit Hilfe des Ritz'schen Variationsverfahrens unter Verwendung der Versuchsfunktionen

$$\left\{\psi(x;\alpha) = e^{-\alpha\left(\frac{x}{x_0}\right)^2}, \alpha \in \mathbb{R}_+\right\} \tag{10}$$

mit α als Variationsparameter. Hierbei wurde die charakteristische Länge $x_0 = \sqrt{\hbar/(m\omega_0)}$ eingeführt. Warum ist diese Wahl der Versuchsfunktionen erfolgversprechend? Vergleichen Sie das Ergebnis mit dem aus Aufgabe 7. Der exakte Wert der Grundzustandsenergie beträgt übrigens $E_0 = 0,5591\,\hbar\omega_0$.

(Hinweis: Benutzen Sie die Formel

$$\int_0^\infty dx\, x^{2n} e^{-\beta x^2} = \frac{(2n)!}{2^{2n+1} n! \beta^n}\sqrt{\frac{\pi}{\beta}} \ , \quad \beta \in \mathbb{R}_+ \ , \quad n \in \mathbb{N}_0 \ . \tag{11}$$

Das Variationsverfahren sollte Sie auf eine Gleichung dritter Ordnung für α führen. Diese hat als einzige reelle Lösung $\alpha_0 = 0,6106$ (Zusatzaufgabe: Bestätigen Sie dies mit Hilfe von `Maple` oder `Mathematica`). Benutzen Sie diesen Wert, um die Grundzustandsenergie auszurechnen.)