

Theoretische Physik II: Quantenmechanik

Wintersemester 2021/22

Übungsblatt 14

Abgabe der mit (*) gekennzeichneten Aufgaben: Dienstag, 8. Februar, Anfang der Vorlesung

1. Februar 2022

Aufgabe P13: Zwei-Minuten-Fragen

1. Welche Eigenschaften besitzen die Wellenfunktionen von gebundenen im Vergleich zu nicht gebundenen Zuständen? Geben Sie ein Beispiel für einen nicht gebundenen Zustand an.
2. Wie unterscheiden sich die Korrekturen zur Energie in erster Ordnung Störungstheorie für einen nichtentarteten und einen entarteten Zustand? Und wie in zweiter Ordnung?
3. Was ist eine notwendige Bedingung, dass die Störungstheorie konvergiert? Ist es möglich, dass ein N -fach entarteter Zustand durch eine Störung mit einer gewissen Stärke $(N + 1)$ -fach entartet wird?
4. Welche Aussage lässt sich über die Zweite-Ordnungs-Korrektur zur Grundzustandsenergie machen? Gilt dies auch für einen entarteten Grundzustand?
5. Welche Kriterien bestimmen die Aufspaltung des Hamiltonoperators $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$ in den ungestörten Anteil \hat{H}_0 und in den Störungsterm \hat{V} ? Ist diese Aufspaltung eindeutig?

Aufgabe H40: Hellmann-Feynman-Theorem (*) (4 Punkte)

Betrachten Sie einen Hamiltonoperator $\hat{H}(\lambda)$, der von einem Parameter λ abhängt, mit Eigenzuständen

$$\hat{H}(\lambda)|\psi(\lambda)\rangle = E(\lambda)|\psi(\lambda)\rangle \quad \text{und} \quad \langle\psi(\lambda)|\psi(\lambda)\rangle = 1. \quad (1)$$

1. Zeigen Sie, dass das Hellmann-Feynman-Theorem gilt:

$$\frac{\partial E(\lambda)}{\partial \lambda} = \langle\psi(\lambda)|\frac{\partial \hat{H}(\lambda)}{\partial \lambda}|\psi(\lambda)\rangle. \quad (2)$$

LÖSUNG: Wir starten von der Eigenwertgleichung

$$\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle \quad (3)$$

und multiplizieren diese von links mit $\langle\psi|$

$$E = \langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle. \quad (4)$$

Nun führen wir die Ableitung nach λ aus:

$$\frac{\partial E}{\partial \lambda} = \frac{\partial}{\partial \lambda} (\langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle) \quad (5)$$

$$= \left(\frac{\partial}{\partial \lambda} \langle \psi | \right) \hat{H} | \psi \rangle + \langle \psi | \frac{\partial \hat{H}}{\partial \lambda} | \psi \rangle + \langle \psi | \hat{H} \left(\frac{\partial}{\partial \lambda} | \psi \rangle \right) . \quad (6)$$

Hierbei wurde die Produktregel verwendet, wir können weiter eine Eigenwertrelation ausführen:

$$\frac{\partial E}{\partial \lambda} = E \left(\frac{\partial}{\partial \lambda} \langle \psi | \right) | \psi \rangle + E \langle \psi | \left(\frac{\partial}{\partial \lambda} | \psi \rangle \right) + \langle \psi | \frac{\partial \hat{H}}{\partial \lambda} | \psi \rangle . \quad (7)$$

Die vorderen beiden Summanden kann man nun mit der Produktregel umschreiben zu

$$\frac{\partial E}{\partial \lambda} = E \frac{\partial}{\partial \lambda} (\langle \psi | \psi \rangle) + \langle \psi | \frac{\partial \hat{H}}{\partial \lambda} | \psi \rangle \quad (8)$$

$$= E \frac{\partial}{\partial \lambda} 1 + \langle \psi | \frac{\partial \hat{H}}{\partial \lambda} | \psi \rangle \quad (9)$$

$$= \langle \psi | \frac{\partial \hat{H}}{\partial \lambda} | \psi \rangle . \quad (10)$$

Dies ist gerade der gesuchte Ausdruck.

2. Verwenden Sie das Ergebnis aus 1., um die Energiekorrektur in erster Ordnung Störungstheorie herzuleiten.

HINWEIS: Nutzen Sie $\hat{H} = \hat{H}_0 + \lambda \hat{V}$.

LÖSUNG: Wir setzen für die Energie allgemein mit einer Taylor-Reihe an,

$$E = \sum_{n=0}^{\infty} \lambda^n E^{(n)} , \quad (11)$$

und verwenden den Hamiltonoperator aus dem Hinweis: $\hat{H} = \hat{H}_0 + \lambda \hat{V}$.

Beides setzen wir nun in das Hellmann-Feynman-Theorem ein:

$$\frac{\partial E}{\partial \lambda} = \langle \psi(\lambda) | \frac{\partial \hat{H}}{\partial \lambda} | \psi(\lambda) \rangle \quad (12)$$

$$\Leftrightarrow \frac{\partial}{\partial \lambda} \sum_{n=0}^{\infty} \lambda^n E^{(n)} = \langle \psi(\lambda) | \frac{\partial (\hat{H}_0 + \lambda \hat{V})}{\partial \lambda} | \psi(\lambda) \rangle \quad (13)$$

$$\Leftrightarrow \sum_{n=1}^{\infty} n \lambda^{(n-1)} E^{(n)} = \langle \psi(\lambda) | \hat{V} | \psi(\lambda) \rangle \quad (14)$$

Dies wird nun bei $\lambda = 0$ ausgewertet:

$$E^{(1)} = \langle \psi(0) | \hat{V} | \psi(0) \rangle , \quad (15)$$

wobei aus Gl. (1) (für $\lambda = 0$) folgt, dass $|\psi(0)\rangle$ Eigenzustand zu \hat{H}_0 ist.

Das Resultat entspricht der 1. Ordnung Energiekorrektur.

Aufgabe H41: Störungstheorie für den harmonischen Oszillator (*) (6 Punkte)

Betrachten Sie den folgenden Hamiltonoperator eines Teilchens der Masse m in einer Dimension in einem Oszillatorpotential plus zusätzlichem Störpotential V :

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}, \quad (16)$$

$$\hat{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2, \quad (17)$$

$$\hat{V} = \varepsilon(\hat{x}\hat{p} + \hat{p}\hat{x}). \quad (18)$$

1. Zeigen Sie, dass sich das Störpotential mithilfe der bekannten Leiteroperatoren schreiben lässt als

$$\hat{V} = \frac{\varepsilon\hbar}{i} (\hat{a}^2 - \hat{a}^{\dagger 2}). \quad (19)$$

LÖSUNG: Wir drücken die Operatoren \hat{x} und \hat{p} durch die in der Vorlesung eingeführten \hat{Q} und \hat{P} aus und erhalten

$$\hat{x}\hat{p} + \hat{p}\hat{x} = \hbar \left(\hat{Q}\hat{P} + \hat{P}\hat{Q} \right). \quad (20)$$

Diese können wir wiederum durch die Leiteroperatoren ausdrücken:

$$\hat{Q} = \frac{\hat{a} + \hat{a}^\dagger}{\sqrt{2}}, \quad \hat{P} = \frac{\hat{a} - \hat{a}^\dagger}{i\sqrt{2}} \quad (21)$$

Also:

$$\hat{V} = \frac{\varepsilon\hbar}{i} (\hat{a}^2 - \hat{a}^{\dagger 2}) \quad (22)$$

2. Berechnen Sie die Eigenwerte von \hat{H} in erster und zweiter Ordnung Störungstheorie.

LÖSUNG: Die Energie-Korrektur erster Ordnung ist leicht zu berechnen:

$$E_n^{(1)} = \langle n | \hat{V} | n \rangle = \frac{\varepsilon\hbar}{i} \langle n | \hat{a}^2 - \hat{a}^{\dagger 2} | n \rangle = 0. \quad (23)$$

Für die zweite Ordnung berechnet man

$$E_n^{(2)} = \sum_{m \neq n} \frac{|\langle n | \hat{V} | m \rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \quad (24)$$

$$= \sum_{m \neq n} \frac{\varepsilon^2 \hbar^2 \left| \sqrt{m(m-1)}\delta_{n(m-2)} - \sqrt{(m+1)(m+2)}\delta_{n(m+2)} \right|^2}{\hbar\omega(n-m)} \quad (25)$$

$$= \frac{\varepsilon^2 \hbar}{\omega} \left(\frac{(n+2)(n+1)}{-2} + \frac{(n-1)n}{2} \right) \quad (26)$$

$$= \frac{-2\varepsilon^2 \hbar}{\omega} \left(n + \frac{1}{2} \right). \quad (27)$$

Es ist anzumerken, dass das zweite Kronecker-Delta streng genommen für $n = 0$ und $n = 1$ verschwindet, allerdings sieht man leicht, dass dann auch der damit multiplizierte Wurzelausdruck und daher auch der zweite Summand in der Zeile darunter in eben diesen Fällen verschwindet. Somit brauchen wir keine Fallunterscheidung.

Damit sind die Energien in zweiter Ordnung Störungstheorie gegeben durch

$$E_n^{(0)} + E_n^{(1)} + E_n^{(2)} = \left(\hbar\omega - \frac{2\varepsilon^2\hbar}{\omega} \right) \left(n + \frac{1}{2} \right). \quad (28)$$

3. Bestimmen Sie die Korrektur zu den Eigenzuständen von \hat{H} in erster Ordnung Störungstheorie basierend auf den ungestörten Zuständen.

LÖSUNG: Für die Eigenvektoren erhält man:

$$|\psi_n^{(1)}\rangle = \sum_{m \neq n} \frac{\langle m | \hat{V} | n \rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} |m\rangle \quad (29)$$

$$= \sum_{m \neq n} \frac{\varepsilon\hbar \left(\sqrt{n(n-1)}\delta_{m(n-2)} - \sqrt{(n+1)(n+2)}\delta_{m(n+2)} \right)}{i\hbar\omega(n-m)} |m\rangle \quad (30)$$

$$= \frac{\varepsilon}{2i\omega} \left(\sqrt{n(n-1)}|n-2\rangle + \sqrt{(n+1)(n+2)}|n+2\rangle \right). \quad (31)$$

Hierbei ist zu beachten, dass der erste Summand nur für $n \geq 2$ existiert, das heißt, für den Fall $n < 2$ gilt:

$$|\psi_n^{(1)}\rangle = \frac{\varepsilon}{2i\omega} \sqrt{(n+1)(n+2)}|n+2\rangle. \quad (32)$$

Aufgabe H42: Atomkern-Korrektur zum Wasserstoffatom

Wir untersuchen die Korrektur zum Energiespektrum wasserstoffähnlicher Atome aufgrund der endlichen Größe des Atomkerns. (In der Vorlesung hatten wir angenommen, dass der Atomkern wie das Elektron punktförmig ist.) Wir beschreiben den Atomkern als eine homogen geladene Kugel mit Radius $R \approx 1.2A^{1/3}$ fm (A ist die Massenzahl). Das Potential wird damit

$$V_N(r) = -Z\alpha\hbar c \begin{cases} \frac{3R^2 - r^2}{2R^3} & r < R, \\ \frac{1}{r} & r > R. \end{cases} \quad (33)$$

Dieses Potential unterscheidet sich von dem Coulombpotential $V_C(r) = -\frac{Z\alpha\hbar c}{r}$ nur für $r < R$. Betrachten Sie die Differenz $\hat{V} = \hat{V}_N - \hat{V}_C$ als Störung, und berechnen Sie die Korrektur erster Ordnung zu dem Energiespektrum wasserstoffähnlicher Atome.

HINWEIS: Da $R \ll r_0$, wobei r_0 der Bohr-Radius ist, werden nur S -Wellen-Zustände beeinflusst und die Radialwellenfunktion $R_{n,l=0}$ kann für diese Abstände mit dem Wert am Ursprung genähert werden, $R_{n,l=0}^2 = 4Z^2/(r_0^3 n^3)$.

LÖSUNG: Wir berechnen die Korrektur in erster Ordnung durch

$$\begin{aligned}
 E_{n,l=0}^{(0)} = \langle n00 | \hat{V} | n00 \rangle &= \langle n00 | \hat{V}_N - \hat{V}_C | n00 \rangle \\
 &= -Z\alpha\hbar c \int_0^\infty dr r^2 \left(\frac{3R^2 - r^2}{2R^3} - \frac{1}{r} \right) \frac{4Z^2}{r_0^3 n^3} \Theta(R - r) \\
 &= -\frac{4Z^3 \alpha \hbar c}{r_0^3 n^3} \int_0^R dr \left(\frac{3r^2}{2R} - \frac{r^4}{2R^3} - r \right) \\
 &= -\frac{4Z^3 \alpha \hbar c}{r_0^3 n^3} \left(\frac{R^2}{2} - \frac{R^2}{10} - \frac{R^2}{2} \right) \\
 &= \frac{2Z^3 \alpha \hbar c R^2}{5r_0^3 n^3}. \tag{34}
 \end{aligned}$$

Hierbei haben wir wie schon auf dem letzten Übungsblatt ausgenutzt, dass wir ausschließlich über den Ort integrieren müssen, da der Winkelanteil auf 1 normiert ist und dass V_N und V_C für $r > R$ gleich sind.
