Übungen zur Modernen Theoretischen Physik I SS 17

PROF. DR. JÖRG SCHMALIAN
MATTHIAS HECKER, MARKUS KLUG

Blatt 11
Abgabe: 10.07.2017, 12:00h; Bespr.: 12.07.2017

---

1. Anharmonischer Oszillator (3 Punkte, schriftlich)

(a) Zuerst wird $\hat{x}$ durch $\hat{a}$ und $\hat{a}^\dagger$ ausgedrückt

$$\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left(\hat{a}^\dagger + \hat{a}\right)$$

Damit folgt

$$\hat{x}^2 = \frac{\hbar}{2m\omega}\left(\hat{a}^\dagger + \hat{a}\right)^2 = \frac{x_0^2}{2}\left(\hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a} + \hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}\hat{a}\right)$$

Die Auf- und Absteigeoperatoren erhöhen oder verringern den Index l. Es gilt

$$\begin{aligned}
\hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger|l\rangle &= \sqrt{l+1}\sqrt{l+2}|l+2\rangle \\
\hat{a}^\dagger\hat{a}|l\rangle &= l|l\rangle \\
\hat{a}\hat{a}^\dagger|l\rangle &= (l+1)\,|l\rangle \\
\hat{a}\hat{a}|l\rangle &= \sqrt{l}\sqrt{l-1}|l-2\rangle
\end{aligned}$$

Damit die Matrixelemente nicht verschwinden muss also gelten $\langle n|l\pm(0,2)\rangle = \delta_{n,(l\pm(0,2))}$. Daraus ergibt sich, dass nur Zustände mit $l = n, n\pm 2$ beitragen.

(b) Der Erwartungswert lässt sich durch das Einfügen von $\hat{1} = \sum_l |l\rangle\langle l|$ schreiben als

$$\begin{aligned}
\alpha\langle n|\hat{x}^4|n\rangle &= \alpha\sum_l \langle n|\hat{x}^2|l\rangle\langle l|\hat{x}^2|n\rangle \\
&= \alpha\sum_l |\langle n|\hat{x}^2|l\rangle|^2 \\
&= \frac{\alpha x_0^4}{4}\sum_l \Big((l+1)(l+2)\,|\langle n||l+2\rangle|^2 + (2l+1)^2\,|\langle n||l\rangle|^2 + l\,(l-1)\,|\langle n||l-2\rangle|^2\Big) \\
&= \frac{\alpha x_0^4}{4}\sum_l \Big((l+1)(l+2)\,\delta_{n,l+2} + (2l+1)^2\,\delta_{n,l} + l\,(l-1)\,\delta_{n,l-2}\Big) \\
&= \frac{\alpha x_0^4}{4}\Big((n-1)\,n + (2n+1)^2 + (n+2)(n+1)\Big) \\
&= \frac{\alpha x_0^4}{4}\left(3 + 6n + 6n^2\right)
\end{aligned}$$

Somit ergibt sich

$$E_n^{(1)} = \frac{\alpha x_0^4}{4}\left(3 + 6n + 6n^2\right)$$

(c) Man sieht, dass $E_n^{(1)}$ quadratisch mit n^2 wächst, wohingegen $E_n^{(0)}$ nur linear. Somit muss die Näherung für große n versagen. Man kann annehmen, dass der maximale Wert für n gegeben ist durch

$$E_{n_{\max}}^{(0)} \approx E_{n_{\max}}^{(1)}$$

für $n_{\max} \gg 1$. Somit gilt

$$\hbar\omega n_{\max} \approx \frac{\alpha x_0^4}{4} 6n_{\max}^2$$

woraus das Kriterium

$$n_{\max} \approx \frac{2}{3} \frac{\hbar\omega}{\alpha x_0^4}$$

folgt. Somit ist das Ergebnis der Störungsrechnung aussagekräftig für $n \ll n_{\max} \approx \frac{2}{3} \frac{\hbar\omega}{\alpha x_0^4}$.

2. Variationsprinzip (4 mündlich)

(a) Der ungestörte Hamiltonian in der Ortsbasis ist gegeben durch

$$\hat{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{m\omega^2}{2} \hat{x}^2$$

Als erstes wird die Normierungskonstante bestimmt. Man findet

$$\begin{aligned} 1 &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \, |\psi_{\text{trial}}(x)|^2 \\ &= |A|^2 \int dx \, e^{-bx^2} \\ &= |A|^2 \sqrt{\frac{\pi}{b}} \end{aligned}$$

woraus $A = \left(\frac{b}{\pi}\right)^{1/4}$ gewählt werden kann. Der Erwartungswert des kinetischen Teils ist

$$\begin{aligned} \langle \hat{T} \rangle &= -\frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\infty}^{\infty} dx \, \psi_{\text{trial}}(x) \frac{d^2}{dx^2} \psi_{\text{trial}}(x) \\ &= -A^2 \frac{\hbar^2}{2m} \int dx \, e^{-bx^2} \left(b^2 x^2 - b\right) \\ &= A^2 \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\sqrt{b\pi}}{2} = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{b}{2}. \end{aligned}$$

Für den Potentialterm erhält man

$$\begin{aligned} \langle \hat{V} \rangle &= A^2 \frac{m\omega^2}{2} \int dx \, \psi_{\text{trial}}(x) x^2 \psi_{\text{trial}}(x) \\ &= A^2 \frac{m\omega^2}{2} \int dx \, x^2 e^{-bx^2} \\ &= A^2 \frac{m\omega^2}{2} \frac{\sqrt{\pi}}{2b^{3/2}} = \frac{m\omega^2}{2} \frac{1}{2b}. \end{aligned}$$

Für den Störterm erhält man

$$\begin{aligned} \alpha \langle \hat{x}^4 \rangle &= \alpha \int dx \, \psi_{\text{trial}}(x) x^4 \psi_{\text{trial}}(x) \\ &= A^2 \alpha \int dx \, x^4 e^{-bx^2} \\ &= A^2 \frac{3\alpha}{4} \frac{\sqrt{\pi}}{b^{5/2}} = \frac{3\alpha}{4} \frac{1}{b^2}. \end{aligned}$$

Somit ist das Energiefunktional gegeben durch

$$E(b) = \frac{\hbar^2}{4m} b + \frac{m\omega^2}{4} \frac{1}{b} + \frac{3\alpha}{4} \frac{1}{b^2}.$$

(b) Die Variation nach b lautet

$$\frac{\partial E}{\partial b} = \frac{\hbar^2}{4m} - \frac{m\omega^2}{4} \frac{1}{b^2} - \frac{3\alpha}{2} \frac{1}{b^3},$$

das einer kubischen Gleichung von b entspricht. Mit der Forderung nach extremaler Energie erhält man

$$\tilde{\alpha} b_{\min}^3 - \beta b_{\min} - \gamma = 0$$

wobei $\tilde{\alpha} = \frac{\hbar^2}{4m}$, $\beta = \frac{m\omega^2}{4}$ und $\gamma = \frac{3}{2}\alpha$.

(c) Da man an einer Korrektur von E in erster Ordnung in α interessiert ist, macht man den Ansatz

$$b_{\text{min}} = b^{(0)}_{\text{min}} + \alpha b^{(1)}_{\text{min}} + \mathcal{O}(\alpha^2)$$

wobei $b^{(0)}_{\text{min}} \sim \mathcal{O}(1)$ und $\alpha b^{(1)}_{\text{min}} \sim \mathcal{O}(\alpha)$. Für den ersten Beitrag in nullter Ordnung erhält man

$$\begin{aligned} \tilde{\alpha}\left(b^{(0)}_{\text{min}}\right)^3 - \beta b^{(0)}_{\text{min}} &= 0 \\ b^{(0)}_{\text{min}} &= \sqrt{\frac{\beta}{\tilde{\alpha}}} = \frac{m\omega}{\hbar} = x_0^{-2} \end{aligned}$$

Fuer den zweiten Beitrag in erster Ordnung ergibt sich

$$\begin{aligned} \tilde{\alpha}\left(b^{(0)}_{\text{min}} + \alpha b^{(1)}_{\text{min}}\right)^3 - \beta\left(b^{(0)}_{\text{min}} + \alpha b^{(1)}_{\text{min}}\right) - \gamma &\approx \tilde{\alpha}\left(b^{(0)}_{\text{min}}\right)^3 - \beta b^{(0)}_{\text{min}} + 3\tilde{\alpha}\left(b^{(0)}_{\text{min}}\right)^2 \alpha b^{(1)}_{\text{min}} - \beta\alpha b^{(1)}_{\text{min}} - \gamma \\ &= \left(3\tilde{\alpha}\left(b^{(0)}_{\text{min}}\right)^2 - \beta\right)\alpha b^{(1)}_{\text{min}} - \gamma \\ &= 0 \end{aligned}$$

woraus

$$\alpha b^{(1)}_{\text{min}} = \frac{\gamma}{3\tilde{\alpha} b_0^2 - \beta} = \frac{3/2\alpha}{3\frac{m\omega^2}{4} - \frac{m\omega^2}{4}} = \frac{3\alpha}{m\omega^2}$$

folgt.

(d) Damit erhält man als Abschätzung für die Grundzustandsenergie

$$\begin{aligned} E_{\text{min}} &= \frac{\hbar^2}{4m}\left(b^{(0)}_{\text{min}} + \alpha b^{(1)}_{\text{min}}\right) + \frac{m\omega^2}{4}\frac{1}{b^{(0)}_{\text{min}} + \alpha b^{(1)}_{\text{min}}} + \frac{3\alpha}{4}\frac{1}{\left(b^{(0)}_{\text{min}} + \alpha b^{(1)}_{\text{min}}\right)^2} \\ &\approx \frac{\hbar^2}{4m}\left(b^{(0)}_{\text{min}} + \alpha b^{(1)}_{\text{min}}\right) + \frac{m\omega^2}{4}\left(\frac{1}{b^{(0)}_{\text{min}}} - \frac{\alpha b^{(1)}_{\text{min}}}{\left(b^{(0)}_{\text{min}}\right)^2}\right) + \alpha\frac{3}{4}\frac{1}{\left(b^{(0)}_{\text{min}}\right)^2} + \mathcal{O}(\alpha) \\ &= \frac{\hbar^2}{4m}\left(\frac{m\omega}{\hbar} + \frac{3\alpha}{m\omega^2}\right) + \frac{m\omega^2}{4}\left(\frac{\hbar}{m\omega} - \frac{\hbar^2}{m^2\omega^2}\frac{3\alpha}{m\omega^2}\right) + \alpha\frac{3}{4}\frac{\hbar^2}{m^2\omega^2} + \mathcal{O}(\alpha) \\ &= \frac{\hbar\omega}{2} + \frac{3\alpha\hbar^2}{4m^2\omega^2} - \frac{3}{4}\frac{\alpha\hbar^2}{m^2\omega^2} + \alpha\frac{3}{4}\frac{\hbar^2}{m^2\omega^2} + \mathcal{O}(\alpha) \\ &= \frac{\hbar\omega}{2} + 3\frac{\alpha x_0^4}{4} + \mathcal{O}(\alpha) \end{aligned}$$

welches dem Ergebnis der vorherigen Aufgabe fuer $n = 0$ entspricht. Das überrascht nicht weiter, da die Trial-Wellenfunktion gerade der Wellenfunktion des Grundzustandes des ungestörten Problems entspricht.

3. Stark-Effekt (3 Punkte, mündlich)

(a) Die Energiekorrektur in erster Ordnung Störungstheorie lautet

$$\begin{aligned} E_1^{(1)} &= \langle 100|\hat{V}|100\rangle \\ &= -eE\langle 100|\hat{z}|100\rangle \end{aligned}$$

Dass das Matrixelement verschwindet, lässt sich durch Betrachtung der Parität zeigen

$$\begin{aligned} \langle 100|\hat{z}|100\rangle &= \langle 100|\hat{\mathcal{P}}^\dagger\hat{\mathcal{P}}\hat{z}\hat{\mathcal{P}}^\dagger\hat{\mathcal{P}}|100\rangle \\ &= -\langle 100|\hat{z}|100\rangle \end{aligned}$$

welches nur von $\langle 100|\hat{z}|100\rangle = 0$ erfüllt werden kann.

(b) Die Auswahlregeln zur Berechnung von Matrixelement für Eigenzustände von Drehimpulsoperatoren lassen sich nur über komplexere Betrachtungen, wie zum Beispiel dem Wigner-Eckart Theorem, herleiten. Deswegen muss hier (leider) das explizite Integral betrachtet werden.
Bei der Berechnung der Matrixelemente wird verwendet, dass sich z durch Kugelflächenfunktionen $Y_{l,m}(\theta,\phi)$ darstellen lässt

$$z = r\cos\theta = \sqrt{\frac{4\pi}{3}}rY_{1,0}(\theta,\phi) = \sqrt{\frac{4\pi}{3}}rY^*_{1,0}(\theta,\phi)$$

Damit werden mit $\langle r\theta\phi|nml\rangle = u_{n,l}(r)Y_{l,m}(\theta,\phi)$ und $\langle r\theta\phi|100\rangle = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}u_{1,0}(r)$ die Matrixelemente zu

$$\langle 100|\hat{z}|nml\rangle = \int_0^\infty r^2dr\int_0^\pi \sin\theta d\theta\int_0^{2\pi} d\phi\frac{u^*_{1,0}(r)}{\sqrt{4\pi}}\sqrt{\frac{4\pi}{3}}rY^*_{1,0}(\theta,\phi)Y_{l,m}(\theta,\phi)u_{n,l}(r).$$

Betrachtet man den rein winkelabhängigen Teil findet man mit Verwendung der Orthogonalität der Kugelflächenfunktionen

$$\langle 100|\hat{z}|nml\rangle \sim \int_0^\pi \sin\theta d\theta\int_0^{2\pi} d\phi Y^*_{1,0}(\theta,\phi)Y_{l,m}(\theta,\phi) \sim \delta_{1,l}\delta_{0,m}$$

woraus $l=1$ und $m=0$ folgt.

(c) Die Energiekorrektur in zweiter Ordnung lautet

$$\begin{aligned} E_1^{(2)} &= e^2E^2\sum_{nml}\frac{|\langle 100|\hat{z}|nlm\rangle|^2}{E_1-E_n} \\ &\approx e^2E^2\frac{|\langle 100|\hat{z}|210\rangle|^2}{E_1-E_2} \end{aligned}$$

wobei sich auf Zustände mit $n=2$ beschränkt wird. Das Matrixelement ist

$$\begin{aligned} \langle 100|\hat{z}|210\rangle &= \int_0^\infty r^2dr\int_0^\pi \sin\theta d\theta\int_0^{2\pi} d\phi\frac{u^*_{1,0}(r)}{\sqrt{4\pi}}\sqrt{\frac{4\pi}{3}}rY^*_{1,0}(\theta,\phi)Y_{1,0}(\theta,\phi)u_{2,1}(r) \\ &= \int_0^\infty r^2dr\,\frac{2e^{-r/a_0}}{\sqrt{4\pi}a_0^{3/2}}\sqrt{\frac{4\pi}{3}}r\frac{1}{\sqrt{3}\,(2a_0)^{3/2}}\frac{r}{a_0}e^{-r/2a_0} \\ &= \frac{1}{3\sqrt{2}a_0^4}\int_0^\infty dr\,r^4e^{-3r/2a_0} \\ &= \frac{2^8}{3^5}\frac{a_0}{\sqrt{2}} \end{aligned}$$

wobei verwendet wurde, dass $\int_0^\pi \sin\theta d\theta\int_0^{2\pi} d\phi Y^*_{1,0}(\theta,\phi)Y_{1,0}(\theta,\phi) = 1$ und

$$\begin{aligned} u_{1,0}(r) &= \frac{2e^{-r/a_0}}{a_0^{3/2}} \\ u_{2,1}(r) &= \frac{1}{\sqrt{3}\,(2a_0)^{3/2}}\frac{r}{a_0}e^{-r/2a_0} \end{aligned}$$

Somit ist

$$E_1^{(2)} = e^2E^2\frac{2^{15}}{3^{10}}\frac{a_0^2}{E_1-E_2} = -e^2E^2\frac{2^{15}}{3^{10}}\frac{4}{3R_0}a_0^2 = -\frac{2^{18}}{3^{11}}a_0^3E^2$$

mit der Rydbergenergie $R_0 = \frac{\hbar^2}{2ma_0^2} = \frac{e^2}{2a_0}$.