

# Ferienkurs Quantenmechanik - Lösungen

## Sommersemester 2014

Fabian Jerzembeck und Christian Kathan

Fakultät für Physik

Technische Universität München

10. September 2014

## 1 Elektromagnetische Felder

### 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  $\Psi$  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  $\Phi$  als auch das Vektorpotential  $\vec{A}$  reell sind. Ferner werden die beiden Formulierungen

der Schrödingergleichung verwendet werden, um die zeitlichen Ableitungen der Wellenfunktion  $\Psi$  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  $\Lambda$  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 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  $H_{\text{int}}$  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  $\vec{p} \cdot (\vec{B} \times \vec{r}) = \vec{B} \cdot (\vec{r} \times \vec{p})$  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  $\sigma_z$  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  $m_s = \pm 1/2$ .

## 2 WKB-Näherung

### Aufgabe 3 (\*)

Bestimmen Sie das asymptotische Verhalten der WKB-Wellenfunktion tief im klassisch verbotenen Bereich, also im Grenzfall  $x \rightarrow \infty$ , für das lineare Potential  $V(x) = F \cdot x$  mit  $F > 0$ .

LÖSUNGSIDEE: Die angegebenen Potentiale in den allgemeinen Ausdruck für eine exponentiell abfallende WKB-Wellenfunktion

$$u(x) = N \frac{1}{\sqrt{\kappa(x)}} \exp\left(-\int_{x_0}^x \kappa(x') dx'\right)$$

mit

$$\kappa = \sqrt{2m \frac{V(x) - E}{\hbar^2}}$$

einsetzen und die sich ergebenden Integrale auswerten.

### Lösung:

Für das lineare Potential  $V(x) = F \cdot x$  mit  $F > 0$  ergibt die Auswertung des Integrals<sup>1</sup>:

$$-\frac{\sqrt{2m}}{\hbar} \int_{x_0}^x \sqrt{F \cdot x' - E} dx' = -\frac{\sqrt{2m}}{\hbar} \frac{2}{3F} (Fx - E)^{3/2}$$

<sup>1</sup>Eine Änderung der unteren Integrationsgrenze  $x_0$  liefert lediglich einen konstanten Faktor, der durch die Normierungskonstante  $N$  kompensiert werden kann. Deswegen sei der Einfachheit halber hier und im Folgenden angenommen, dass  $x_0$  so gewählt ist, dass die Stammfunktion von  $\kappa$  bei  $x_0$  verschwindet, sodass die untere Integralgrenze keinen Beitrag liefert.

Die WKB-Wellenfunktion lautet folglich:

$$u(x) = N \frac{1}{(2m(Fx - E)/\hbar^2)^{1/4}} \exp\left(-\frac{2\sqrt{2m}}{3\hbar F} (Fx - E)^{3/2}\right)$$

$$\propto \frac{1}{x^{1/4}} \exp\left(-\frac{2\sqrt{2m}}{3\hbar F} (Fx)^{3/2}\right)$$

**Aufgabe 4 (\*\*)**

Die WKB-Näherung ist ein Näherungsverfahren für eindimensionale Probleme. Sie kann aber auch auf Probleme erweitert werden, die in Produktwellen zerfallen.

- (1) Wie lautet die Schrödinger-Gleichung für eine Radialwelle in einem kugelsymmetrischen Potential  $V(r)$ ?
- (2) Wie lautet die Quantisierungsbedingung (WKB-Gleichung) für den Radialwellenanteil?
- (3) Benutzen Sie ihre Ergebnisse, um die Energieniveaus von Wasserstoff in der WKB-Näherung zu berechnen. Vergleichen Sie ihr Ergebnis für  $n \gg 1/2$  und  $n \gg l$  mit den exakten Bohr-Niveaus

$$E_n = -\left(\frac{m}{2\hbar^2} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\right)^2\right) \frac{1}{n^2}$$

Hinweis:  $\int_a^b \frac{dx}{x} \sqrt{(x-a)(b-x)} = \frac{\pi}{2}(\sqrt{b} - \sqrt{a})^2$

**Lösung:**

1) Die Schrödinger-Gleichung für den Radialwellenanteil lautet

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial r^2} + V(r) + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2} \right] \Psi_n(r) = E_n \Psi_n(r)$$

Mit dem sog. 'Zentrifugalterm'

2) Wir können nun die Quantisierungsbedingung für keine harte Wand einsetzen, da wie wir gleich sehen werden i.A. zwei Wendepunkte haben. Bloß nicht den Zentrifugalterm vergessen!

$$\int_{r_1}^{r_2} \sqrt{2m(E - V(r) - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2})} dr = \hbar\pi(n - 1/2)$$

3) Hier setzen wir das Coulomb-Potential ein

$$\int_{r_1}^{r_2} \sqrt{2m\left(E - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m r^2}\right)} dr = \hbar\pi(n - 1/2)$$

Mit den folgenden Ersetzungen wird es übersichtlicher

$$A = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 E} \quad B = -\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m E}$$

Das Integral wird zu

$$\sqrt{2mE} \int_{r_1}^{r_2} \sqrt{1 - \frac{A}{r} + \frac{B}{r^2}} dr$$

Versuchen wir dies auf die Form des Hinweises zu bringen

$$\sqrt{2mE} \int_{r_1}^{r_2} \frac{\sqrt{r^2 A r + B}}{r} dr = \sqrt{-2mE} \int_{r_1}^{r_2} \frac{\sqrt{(r-r_1)(r_2-r)}}{r} dr$$

Mit  $A = r_1 + r_2$  und  $B = r_1 r_2$ . Einsetzen des Hinweises

$$\begin{aligned} \sqrt{2mE} \frac{\pi}{2} (\sqrt{r_2} - \sqrt{r_1})^2 &= \sqrt{2mE} \frac{\pi}{2} (r_1 + r_2 - 2\sqrt{r_1 r_2}) = \\ &= \sqrt{2mE} \frac{\pi}{2} (A - 2\sqrt{B}) = \sqrt{2mE} \frac{\pi}{2} \left(-\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 E} - 2\sqrt{-\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m E}}\right) = (n - 1/2)\hbar\pi \end{aligned}$$

Umstellen nach  $E_n$  ergibt

$$E_n = \frac{-(m/2\hbar^2)(e^2/4\pi\epsilon_0)^2}{[n - 1/2 + \sqrt{l(l+1)}]^2} = \frac{-E_{Ryd}}{[n - 1/2 + \sqrt{l(l+1)}]^2}$$

Für große  $n \gg 1/2, n \gg l$  ist das Ergebnis äquivalent zu den Bohr-Niveaus

$$E_{Bohr} = \frac{E_{Ryd}}{n^2}$$

### 3 Variationsmethode

#### Aufgabe 5 (\*)

Benutzen Sie das Variationsverfahren zur Abschätzung der Grundzustandsenergie des linearen harmonischen Oszillators mit Hilfe des Ansatzes:

$$\phi(q) = \frac{1}{\alpha^2 + q^2}$$

Formeln:

$$\int_0^\infty \frac{dq}{(\alpha^2 + q^2)^2} = \frac{\pi}{4\alpha^3}; \quad \int_0^\infty dq \frac{q^2}{(\alpha^2 + q^2)^2} = \frac{\pi}{4\alpha},$$

$$\int_0^\infty \frac{dq}{(\alpha^2 + q^2)^3} = \frac{3\pi}{16\alpha^5}; \quad \int_0^\infty dq \frac{q^2}{(\alpha^2 + q^2)^4} = \frac{\pi}{32\alpha^5}.$$

**Lösung:**

$$\langle \Phi | \hat{\mathcal{H}} | \Phi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dq \Phi^*(q) \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d}{dq^2} + 1/2m\omega^2 q^2 \right) \Phi(q),$$

$$\frac{d}{dq^2} \Phi(q) = \frac{d}{dq} \frac{-2q}{(\alpha^2 + q^2)^2} = \frac{-2}{(\alpha^2 + q^2)^2} + \frac{8q^2}{(\alpha^2 + q^2)^3}$$

Zu berechnen ist somit

$$\begin{aligned} \langle \Phi | \hat{\mathcal{H}} | \Phi \rangle &= \frac{\hbar^2}{m} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dq}{(\alpha^2 + q^2)^3} - \frac{4\hbar^2}{m} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{q^2 dq}{(\alpha^2 + q^2)^4} + 1/2m\omega^2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{q^2 dq}{(\alpha^2 + q^2)^2} = \\ &= 2 \frac{\hbar^2}{m} \frac{3\pi}{16\alpha^5} - \frac{8\hbar^2}{m} \frac{\pi}{32\alpha^5} + m\omega \frac{\pi}{4\alpha} = \frac{\pi\hbar^2}{8m\alpha^5} + \frac{\pi m\omega^2}{4\alpha} \end{aligned}$$

Ferner ist noch zu bestimmen

$$\langle \Phi | \Phi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dq}{(\alpha^2 + q^2)^2} = \frac{\pi}{2\alpha^3}$$

Damit lautet das Energiefunktional:

$$\langle H \rangle_\Phi = \frac{\hbar^2}{4m\alpha^2} + 1/2m\omega^2 \alpha^2$$

Extremalbedingung

$$0 = \frac{\partial}{\partial \alpha} \langle H \rangle_{\Phi} = -\frac{\hbar^2}{2m\alpha^3} + m\omega^2\alpha$$

$$\Rightarrow (\alpha^*)^4 = \frac{\hbar^2}{2m^2\omega^2}$$

Dies ergibt:

$$\langle H \rangle_{\Phi^*} = \frac{\sqrt{2}\hbar\omega}{2} > E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}$$

**Aufgabe 6** (\*)

Gegeben Sei ein Teilchen in einem Potentialkasten mit unendlich hohen Wänden und der Breite  $L$ .

Als Versuchswellenfunktion sei

$$\psi(x) = A \begin{cases} L - |x| & \text{für } |x| < L \\ 0 & \text{für } |x| > L \end{cases} \quad (1)$$

gegeben.

1. Bestimmen Sie die Normierungskonstante  $A$ .
2. Schätzen Sie die Grundzustandsenergie ab und vergleichen sie es mit dem exakten Resultat  $E_0 = \frac{\pi^2\hbar^2}{8mL^2}$ .

**Lösung:**

1. Es muss  $\langle \psi | \psi \rangle = 1$  gelten:

$$A^2 \left[ \int_{-L}^0 (L+x)^2 dx + \int_0^L (L-x)^2 dx \right] \stackrel{!}{=} 1$$

$$A^2 \left( \left[ \frac{1}{3}(L+x)^3 \right]_{-L}^0 + \left[ \frac{1}{3}(L-x)^3 \right]_0^L \right) = 1$$

$$\Rightarrow A = \underline{\underline{\sqrt{\frac{3}{2L^3}}}}$$



2. Die Grundzustandsenergie schätzen wir  $\tilde{A}\frac{1}{4}$ ber  $E_0 = \langle \psi | H | \psi \rangle$  ab. Dazu ben $\tilde{A}\frac{1}{4}$ tigen wir die 1. und 2. Ableitung der Wellenfunktion:

$$\psi'(x) = \begin{cases} A & \text{für } -L < x < 0 \\ -A & \text{für } 0 < x < L \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (2)$$

$$\psi''(x) = A\delta(x+L) - 2A\delta(x) + A\delta(x-L) \quad (3)$$

Man hat es bei der 1. Ableitung mit 3 Unstetigkeitsstellen zu tun. Dabei hat die Ableitung jeweils einen Sprung. Die Ableitung eines "Sprungs" entspricht aber gerade einer Delta-Funktion.

Dies liefert:

$$\begin{aligned} E_0 &= \langle \psi | H | \psi \rangle = \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \right) \int_{-L}^L dx \psi(x) \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) \\ &= -\frac{A\hbar^2}{2m} \int_{-L}^L dx \psi(x) [\delta(x+L) - 2\delta(x) + \delta(x-L)] \\ &= \frac{A^2 L \hbar^2}{m} \\ &= \frac{3\hbar^2}{2mL^2} \end{aligned}$$

Vergleichen wir das mit dem exakten Ergebnis ( $E_0 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{8mL^2}$ ), so sehen wir, dass die durch Variationsrechnung bestimmte Grundzustandsenergie etwas gr $\tilde{A}\frac{1}{4}$ ÄYer als die exakte Energie ist, was mit dem Ritzschen Prinzip  $\tilde{A}\frac{1}{4}$ bereinstimmt.

## 4 Störungstheorie

### Aufgabe 7 (\*\*)

Berechnen Sie zu erster Ordnung in  $\lambda$  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 8** (\*\*\*)

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 9 (\*\*\*)**

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.

**Aufgabe 10** (\*\*)

Ein starrer Rotator mit dem Trägheitsmoment  $I$  werde durch den Hamiltonoperator

$$\hat{\mathcal{H}}_0 = \frac{1}{2 \cdot I} \vec{L}^2$$

beschrieben, wobei  $\vec{L}$  der Drehimpulsoperator ist.

1. Welche Werte kann die Energie des Systems annehmen und wie ist der Entartungsgrad der Energieeigenwerte?
2. Der Rotator besitze nun ein magnetisches Dipolmoment  $\vec{\mu}$ . In einem äußeren Magnetfeld  $\vec{B}$  führt das zu einem Wechselwirkungsterm

$$\hat{\mathcal{H}}_1 = -\vec{\mu} \cdot \vec{B} = -\mu B \cos \theta$$

$\hat{\mathcal{H}}_1$  soll als Störung behandelt werden. Berechnen Sie die erste nicht verschwindende Korrektur für die Grundzustandsenergie des Rotators.

**Hinweis:** Es gilt für die Kugelflächenfunktionen  $Y_{lm}(\theta, \phi)$  :  $Y_{00} = \sqrt{\frac{1}{4\pi}}$  und  $Y_{10} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta$

Drücken Sie  $\hat{\mathcal{H}}_1$  durch die Kugelflächenfunktionen aus und verwenden Sie die Orthogonalitätsrelation.

**Lösung:**

1. Es gilt die Schrödinger-Gleichung:

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{H}}_0 \psi &= E \psi \\ \frac{1}{2 \cdot I} \vec{L}^2 \psi &= E \psi \\ \frac{1}{2 \cdot I} \vec{L}^2 Y_{lm} &= E Y_{lm} \\ \frac{\hbar^2}{2 \cdot I} l(l+1) Y_{lm} &= E Y_{lm} \\ E &= \underline{\underline{\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2I}}} \end{aligned}$$

Die Entartung ist  $(2l+1)$ -fach.

2. Im Grundzustand gilt  $l = 0$  und der Grundzustand ist somit nicht entartet. Die Energiekorrektur lässt sich folglich mit Hilfe nicht-entarteter Störungsrechnung durchführen.

$$E_n^1 = \langle n^0 | \hat{\mathcal{H}}_1 | n^0 \rangle \quad (4)$$

$$\hat{\mathcal{H}}_1 = -\sqrt{\frac{4\pi}{3}} \mu B Y_{10} \quad (5)$$

Damit gilt für die erste Energiekorrektur:

$$E_n^{(1)} = \langle n^0 | \hat{\mathcal{H}}_1 | n^0 \rangle \quad (6)$$

$$E_0^{(1)} = \left\langle Y_{00} \left| -\sqrt{\frac{4\pi}{3}} \mu B Y_{10} \right| Y_{00} \right\rangle \quad (7)$$

$$= \underline{\underline{0}} \quad (8)$$

Da die erste Energiekorrektur verschwindet, ist die zweite Energiekorrektur zu berechnen:

$$\begin{aligned} E_n^{(2)} &= \sum_{m \neq n} \frac{|\langle m^0 | \hat{\mathcal{H}}_1 | n^0 \rangle|^2}{E_n^0 - E_m^0} \\ E_0^{(2)} &= \sum_{l=1}^{\infty} \sum_{m=-l}^l \frac{|\langle Y_{lm} | -\sqrt{\frac{4\pi}{3}} \mu B Y_{10} | Y_{00} \rangle|^2}{E_0 - E_l} \\ &= \frac{|\langle Y_{10} | -\sqrt{\frac{4\pi}{3}} \mu B Y_{10} | Y_{00} \rangle|^2}{E_0 - E_1} \\ &= \frac{\frac{4\pi}{3} \mu^2 B^2 Y_{00}^2}{\frac{-\hbar^2}{I}} \\ &= \underline{\underline{-\frac{\mu^2 B^2 I}{3\hbar^2}}} \end{aligned}$$