Aufgabe 1: Stern-Gerlach Experiment

Betrachten Sie ein neutrales Teilchen mit Spin 1/2 (z. B. ein Neuton) in einem inhomogenen Magnetfeld $\mathbf{B} = b(-x, 0, z)$.

a)[**1 P.**] Wie lautet der Hamilton-Operator des Neutrons?

Hinweis: Es besteht folgender Zusammenhang zwischen magnetischen Moment $\boldsymbol{\mu}_n$ des Neutrons und dessen Spin $\mathbf{S}$:

$$\boldsymbol{\mu}_n = g_n \frac{\mu_N}{\hbar} \mathbf{S},$$

wobei $g_n = -3.82608546 \pm 9 \cdot 10^{-6}$ und $\mu_N := \frac{e\hbar}{2m_p}$ das Kernmoment ist, m_p ist die Ruhemasse des Protons.

Lösung:

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} - g_n \frac{\mu_N}{\hbar} \mathbf{B} \cdot \mathbf{S} = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + g_n \frac{\mu_N}{2} b\sigma_1 x - g_n \frac{\mu_N}{2} b\sigma_3 z \quad \blacksquare$$

b)[**1 P.**] Formulieren Sie die Pauli-Gleichung.

Lösung:

$$|\psi(\mathbf{x}, t)\rangle := \begin{pmatrix} \psi_+(\mathbf{x}, t) \\ \psi_-(\mathbf{x}, t) \end{pmatrix}$$

Pauli-Gleichung:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \psi_+(\mathbf{x}, t) \\ \psi_-(\mathbf{x}, t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\frac{\hbar^2}{2m_0}\triangle & 0 \\ 0 & -\frac{\hbar^2}{2m_0}\triangle \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_+(\mathbf{x}, t) \\ \psi_-(\mathbf{x}, t) \end{pmatrix} - g_n \frac{\mu_N}{2} Bz\sigma_3 |\psi\rangle =$$

$$= \begin{pmatrix} -\frac{\hbar^2}{2m_0}\triangle & 0 \\ 0 & -\frac{\hbar^2}{2m_0}\triangle \end{pmatrix} |\psi\rangle - g_n \frac{\mu_N}{2} b \left(-x \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} + z \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \right) \begin{pmatrix} \psi_+(\mathbf{x}, t) \\ \psi_-(\mathbf{x}, t) \end{pmatrix} \quad \blacksquare$$

c)[**1 P.**] Betrachten Sie nun den Fall $x = 0$. Wie lauten die Schrödinger-Gleichungen für die Spinkomponenten $\psi_\pm(\mathbf{x}, t)$?

Lösung: Schrödinger-Gleichungen:

$$i\hbar\dot{\psi}_+(\mathbf{x}, t) = \frac{-\hbar^2}{2m} \triangle \psi_+(\mathbf{x}, t) - g_n \frac{\mu_N}{2} bz\psi_+(\mathbf{x}, t)$$
$$i\hbar\dot{\psi}_-(\mathbf{x}, t) = \frac{-\hbar^2}{2m} \triangle \psi_-(\mathbf{x}, t) + g_n \frac{\mu_N}{2} bz\psi_-(\mathbf{x}, t) \quad \blacksquare$$

d)[**2 P.**] Ein Separationsansatz führt auf die Schrödinger-Gleichung

$$i\hbar\dot{\varphi}_\pm = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \varphi_\pm \mp g_n \frac{\mu_N}{2} bz\varphi_\pm \tag{1}$$

Bestimmen Sie erst diesen Separationsansatz. Interpretieren Sie die Gleichung (1).

Lösung: Der Ansatz ist:

$$\psi_\pm(\mathbf{x},t) = e^{i(k_x x + k_y y)} e^{\frac{-i\hbar}{2m_0}(k_x^2+k_y^2)t}\varphi_\pm(z,t);$$

$$\begin{aligned}
\partial_t \psi_\pm &= \frac{-i\hbar}{2m_0}(k_x^2+k_y^2)\varphi_\pm(z,t)\exp() + \partial_t\varphi_\pm(z,t)\exp(); \\
\partial_x^2 \psi_\pm &= -k_x^2\varphi_\pm(z,t)\exp(); \\
\partial_y^2 \psi_\pm &= -k_y^2\varphi_\pm(z,t)\exp(); \\
\partial_z^2 \psi_\pm &= \partial_z^2\varphi_\pm(z,t)\exp();
\end{aligned}$$

Also, aus Gl. (1) folgt:

$$\frac{\hbar^2}{2m}(k_x^2+k_y^2)\varphi_\pm\exp() + i\hbar\partial_t\varphi_\pm\exp() = \frac{\hbar^2}{2m}(k_x^2+k_y^2)\varphi_\pm\exp() - \frac{\hbar^2}{2m}\partial_{zz}^2\varphi_\pm\exp() \mp$$

$$\mp g_n\frac{\mu_N}{2}b\cdot z\varphi_\pm\exp() \Leftrightarrow i\hbar\dot{\varphi}_\pm = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial z^2}\varphi_\pm \mp g_n\frac{\mu_N}{2}bz\varphi_\pm.$$

Man hat zwei entkoppelte SGL für $\varphi_\pm$, die die Bewegung eines Teilchens in den Potentiale $V_\pm(z) = \mp g_n\frac{\mu_N}{2}b\cdot z$ beschreiben $\blacksquare$.

e)**[3 P.]** Bestimmen Sie die zeitliche Entwicklung der Erwartungswerte

$$Z_\pm := \langle\varphi_\pm|z|\varphi_\pm\rangle \quad \text{und} \quad P_\pm := \langle\varphi_\pm|\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial z}|\varphi_\pm\rangle.$$

Welche Bewegung wird dadurch beschrieben?

Hinweis: Benutzen Sie das Ehrenfest'sche Theorem.

Lösung: Das Ehrenfest'sche-Theorem: Für einen beliebigen zeitunabängigen Operator A gilt:

$$\frac{d}{dt}\langle A\rangle = \frac{1}{i\hbar}\langle[A,H]\rangle.$$

Für $Z_\pm$:

$$\begin{aligned}
\dot{Z}_\pm : &= \frac{1}{i\hbar} < [z, H_\pm] > = \frac{1}{i\hbar} < [z, \frac{-\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial z^2} + V_\pm] > = \frac{1}{i\hbar} < [z, \frac{-\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial z^2}] > = \\
&= \frac{1}{i\hbar} < [z, \frac{p^2}{2m}] >
\end{aligned}$$

An der Stelle gibt es zwei Möglichkeiten. Entweder kommet in Erinnerung der Zusammenhang zwischen z und p^2, und zwar

$$[z,p^2] = ih\cdot 2\cdot p, \quad ([A,B^n] = inB^{n-1} \quad \text{falls} \quad [A,B] = i),$$

weil $[z,p] = ih$, oder muss man den Kommutator explizit ausrechnen, z.B,

$$\begin{aligned}
\frac{1}{i\hbar} < [z, \frac{p^2}{2m}] > &= \frac{i\hbar}{2m} < \varphi_\pm|[z, \frac{\partial^2}{\partial z^2}]|\varphi_\pm > = \frac{i\hbar}{2m_0}\int \varphi_\pm^* z\frac{\partial^2\varphi_\pm}{\partial z^2} - \frac{\partial^2\varphi_\pm^*}{\partial z^2}z\varphi_\pm = \cdots \\
&= \frac{-i\hbar}{2m}\int \varphi_\pm^*\frac{\partial\varphi_\pm}{\partial z} - \varphi_\pm\frac{\partial\varphi_\pm^*}{\partial z} = \frac{1}{m} < p > := \frac{1}{m}P_\pm.
\end{aligned}$$

Also,

$$m\dot{Z}_\pm = P_\pm.$$

Für $P_\pm$:

$$\begin{aligned}
\dot{P}_\pm &= \frac{1}{i\hbar}\langle[p, H_\pm]\rangle = \frac{1}{i\hbar}\langle[p, V_\pm(z)]\rangle, \quad [p, V_\pm] = \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dz}V_\pm(z) \\
\dot{P}_\pm &= -< \frac{d}{dz}V_\pm(z) >:=< F_\pm(z) >
\end{aligned}$$

Lässt sich nun der Erwartungswert der Funktion F der Position z durch die Funktion F des Erwartungswerts der Position z nähern, so erhlt man

$$\langle F_\pm(z)\rangle \approx F_\pm(\langle z\rangle) \qquad (*)$$

und somit

$$m\frac{d^2}{dt^2}\langle z\rangle = F_\pm(\langle z\rangle).$$

In Worten bedeutet dies, dass sich das Maximum der Aufenthaltswahrscheinlichkeit auf einer klassischen Bahn bewegt, d.h. der klassischen Bewegungsgleichung folgt. Das Ehrenfest-Theorem führt somit direkt auf eine Analogie der Quantenmechanik zur klassischen Mechanik - hier in Form des zweiten Newton'schen Gesetzes

$$m\frac{d^2}{dt^2}z = ma(z) = F(z).$$

Die Annahme (*) und damit auch die klassische Bewegungsgleichung für quantenmechanische Erwartungswerte gelten allerdings nur, falls die Kraft $F(z)$ eine lineare Funktion der Position z ist. Dies gilt für die einfachen Fälle des harmonischen Oszillators oder des freien Teilchens. Auerdem kann man sagen, dass (*) gilt, wenn die Breite der Aufenthaltswahrscheinlichkeit klein ist gegenüber der typischen Längenskala auf der die Kraft $F(z)$ variiert. In unserem Fall bekommt man

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt}\langle z_\pm\rangle &= \frac{\langle p_\pm\rangle}{m} \\
\frac{d}{dt}\langle p_\pm\rangle &= -< \frac{d}{dz}V_\pm(z) >= \pm g_n\frac{\mu_N}{2}b := C_\pm, \quad C_\pm = const.
\end{aligned}$$

Also in z-Richtung

$$< p >= C_\pm t \qquad < z >= \frac{C_\pm}{2m}t^2 \quad \blacksquare$$

Aufgabe 2: Spin-Bahn-Kopplung [12 P.]

Betrachten Sie zwei Drehimpulse $\mathbf{J}_1$ und $\mathbf{J}_2$, die zu einem Gesamtdrehimpuls $\mathbf{J} = \mathbf{J}_1 + \mathbf{J}_2$ koppeln ($j_1 = j_2 = 1$).

a)**[2 P.]** Wie lautet eine Basis des Produkraumes $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$?

Lösung:

Die Basis des Produktraumes $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ kann als Tensorprodukt aus den Basen der jeweiligen Teilsysteme 1 und 2 konstruiert werden:

$$|j_1, m_1; j_2, m_2\rangle = |j_1, m_1\rangle \otimes |j_2, m_2\rangle.$$

Insgesamt gibt es also $(2j_1 + 1)(2j_2 + 1) = 9$ Zustände:

$|11;11\rangle$, $|11;10\rangle$, $|11;1{-}1\rangle$, $|10;11\rangle$, $|10;10\rangle$, $|10;1{-}1\rangle$, $|1{-}1;11\rangle$, $|1{-}1;10\rangle$, $|1{-}1;1{-}1\rangle$. ■

b)**[2 P.]** Bestimmen Sie den Eigenvektor $|2,1,1,2\rangle$ zu den Operatoren $\mathbf{J}^2$, $\mathbf{J}_1^2$, $\mathbf{J}_2^2$, J_z.

Lösung: $j = 2$; $m = 2$:

$$|2,1,1,2\rangle = |1,1\rangle|1,1\rangle$$

c)**[2 P.]** Berechnen Sie die restlichen Eigenvektoren des Quintetts aus dem Unterraum $\mathcal{H}(j = 2)$ durch sukzessive Anwendung des Leiteroperators J_-.

Lösung:

Durch sukzessive Anwendung von

$$J_-|j, j_1, j_2, m\rangle \quad = \quad \hbar\sqrt{j(j+1) - m(m-1)}\,|j, j_1, j_2, m-1\rangle$$

lassen sich die restlichen vier Eigenvektoren $|2,1,1,m\rangle$ des Quintetts aus dem Unteraum $\mathcal{H}(j = 2)$ finden:

$$J_-|2,1,1,2\rangle \quad = \quad 2\hbar\,|2,1,1,1\rangle,$$

also

$$\begin{aligned}
|2,1,1,1\rangle &= \frac{1}{2\hbar}J_-|2,1,1,2\rangle = \frac{1}{2\hbar}(J_{1-} + J_{2-})|11;11\rangle \\
&= \frac{1}{2\hbar}[\hbar\sqrt{2}\,|10;11\rangle + \hbar\sqrt{2}\,|11;10\rangle] = \frac{1}{\sqrt{2}}[|10;11\rangle + |11;10\rangle].
\end{aligned}$$

So fortfahrend erhält man

$$\begin{aligned}
|2,1,1,0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{6}\hbar} J_-|2,1,1,1\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}\hbar}(J_{1-} + J_{2-})\frac{1}{\sqrt{2}}[|10;11\rangle + |11;10\rangle] \\
&= \frac{1}{\sqrt{6}}[|1-1;11\rangle + 2\,|10;10\rangle + |11;1-1\rangle] \\
|2,1,1,-1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{6}\hbar} J_-|2,1,1,0\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}\hbar}(J_{1-} + J_{2-})\frac{1}{\sqrt{6}}[|1-1;11\rangle + 2\,|10;10\rangle + |11;1-1\rangle] \\
&= \frac{1}{\sqrt{2}}[|1-1;10\rangle + |10;1-1\rangle] \\
|2,1,1,-2\rangle &= \frac{1}{2\hbar} J_-|2,1,1,-1\rangle = \frac{1}{2\hbar}(J_{1-} + J_{2-})\frac{1}{\sqrt{2}}[|1-1;10\rangle + |10;1-1\rangle] \\
&= |1-1;1-1\rangle. \quad \blacksquare
\end{aligned}$$

d)**[1 P.]** Bestimmen Sie den Eigenvektor $|1,1,1,1\rangle$.

Hinweis: Dieser Eigenvektor muss zu $|2,1,1,1\rangle$ orthogonal sein.

Lösung: Wegen $m = 1$ kommt eine Linearkombination nur aus den beiden Eigenvektoren $|0,1\rangle$ und $|1,0\rangle$ in Frage:

$$|1,1,1,1\rangle = \alpha|0,1\rangle + \beta|1,0\rangle.$$

Die Koeffizienten lassen sich aus zwei geigneten Bedingungen der Orthonormalität bis auf einen Phasenfaktor bestimmen:

$$\begin{aligned}
\langle 1,1,1,1|1,1,1,1\rangle &= |\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1 \\
\langle 2,1,1,1|1,1,1,1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha + \beta) = 0,
\end{aligned}$$

woraus sich $\alpha = -\beta = 1/\sqrt{2}$ ergibt

$$|1,1,1,1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}[|10;11\rangle - |11;10\rangle]. \quad \blacksquare$$

e)**[2 P.]** Bestimmen Sie nun die beiden fehlenden Eigenvektoren des Tripletts aus dem Unterraum $\mathcal{H}(j=1)$ durch sukzessive Anwendung des Operators J_-.

Lösung:

Die beiden fehlenden Eigenvektoren des Tripletts aus dem Unterraum $\mathcal{H}(j=1)$:

$$
\begin{aligned}
|1,1,1,0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}\hbar}J_-|1,1,1,1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}\hbar}(J_{1-}+J_{2-})\frac{1}{\sqrt{2}}[|10;11\rangle - |11;10\rangle] \\
&= \frac{1}{\sqrt{2}}[|1-1;11\rangle - |11;1-1\rangle] \\
|1,1,1,-1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}\hbar}J_-|1,1,1,0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}\hbar}(J_{1-}+J_{2-})\frac{1}{\sqrt{2}}[|1-1;11\rangle - |11;1-1\rangle] \\
&= \frac{1}{\sqrt{2}}[|1-1;10\rangle - |10;1-1\rangle] \quad \blacksquare
\end{aligned}
$$

f)**[1 P.]** Berechnen Sie den Eigenvektor $|0,1,1,0\rangle$ aus der Bedingung, dass er zu allen anderen Eigenvektoren $|j,1,1,m\rangle$ orthogonal ist.

Lösung:

Wegen $m=0$ kommt eine Linearkombination nur aus den drei Eigenvektoren $|1-1;11\rangle$, $|10;10\rangle$ und $|11;1-1\rangle$ in Frage:

$$|0,1,1,0\rangle = \alpha|1-1;11\rangle + \beta|10;10\rangle + \gamma|11;1-1\rangle.$$

Die Koeffizienten lassen sich aus drei geigneten Bedingungen der Orthonormalität bis auf einen Phasenfaktor ermitteln:

$$
\begin{aligned}
\langle 0,1,1,0|0,1,1,0\rangle &= |\alpha|^2+|\beta|^2+|\gamma|^2 = 1 \\
\langle 2,1,1,0|0,1,1,0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{6}}(\alpha+2\beta+\gamma) = 0 \\
\langle 1,1,1,0|0,1,1,0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha-\gamma) = 0,
\end{aligned}
$$

woraus sich $\alpha = -\beta = \gamma = 1/\sqrt{3}$ ergibt

$$|0,1,1,0\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}[|1-1;11\rangle - |10;10\rangle + |11;1-1\rangle].$$

g)**[2 P.]** Bestimmen Sie nun die Energieeigenwerte zum Hamiltonoperator

$$H = a\mathbf{J}_1\cdot\mathbf{J}_2 + \mu(J_{1z}+J_{2z}).$$

Lösung:

$$
\begin{aligned}
\mathbf{J}_1\cdot\mathbf{J}_2 &= \frac{1}{2}\big(\mathbf{J}^2-\mathbf{J}_1^2-\mathbf{J}_2^2\big), \quad J_{1z}+J_{2z}=J_z; \\
\mathbf{J}^2|j,j_1,j_2,m\rangle &= \hbar^2 j(j+1)\,|j,j_1,j_2,m\rangle \\
J_z|j,j_1,j_2,m\rangle &= \hbar m\,|j,j_1,j_2,m\rangle \\
\mathbf{J}_i^2|j,j_1,j_2,m\rangle &= \hbar^2 j_i(j_i+1)\,|j,j_1,j_2,m\rangle, \qquad (i=1,2).
\end{aligned}
$$

Energieeigenwerte:

$$E_{j11m} := E_{jm} = \frac{a\hbar^2}{2}\big[j(j+1) - j_1(j_1+1) - j_2(j_2+1)\big] + \mu\hbar m = \frac{a\hbar^2}{2}\big[j(j+1) - 4\big] + \mu\hbar m;$$
$$j = 0, 1, 2, \quad |m| \le j \quad \blacksquare$$

Aufgabe 3: Störungstheorie: Verschobener linearer Oszillator [7 P.]

Der Hamiltonoperator des ,,verschobenen" linearen harmonischen Oscillators besitzt die Form

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}x^2 - \gamma\sqrt{2m\hbar\omega^3}\,x$$

(γ dimensionslose reelle Konstante).

a)**[2 P.]** Wie lauten die exakten Eigenwerte $E_n(\gamma)$ und die exakten Eigenvektoren $|\psi_n(\gamma)\rangle$ von H?

Hinweis: Nehmen Sie an, dass die Lösung des Eigenwertproblems von ,,ungestörten" Oszillator bekannt ist. Benutzen Sie die Formeln:

$$H_0 = \big(b^\dagger b + \frac{1}{2}\big)\hbar\omega, \qquad E_n = \big(n + \frac{1}{2}\big)\hbar\omega, \quad n \in \mathbb{N}_0$$

$$\psi_n = \sqrt{\frac{\alpha}{2^n n! \sqrt{\pi}}}\exp\big(-\frac{(\alpha x)^2}{2}\big)H_n(\alpha x), \quad \alpha = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}.$$

b)**[1 P.]** Zeichnen Sie den Potentialverlauf und die Energieeigenwerte für den ,,ungestörten" Oszillator mit dem Potential $V(x) = m\omega^2 x^2/2$ und für den ,,verschobenen" Oszillator mit dem Potential $U(x,\gamma) = m\omega^2 x^2/2 - \gamma\sqrt{2m\hbar\omega^3}\,x$.

c)**[1 P.]** Für welche Werte des Parameters γ ist die Konvergenz einer störungstheoretischen Entwicklung für $E_n(\gamma)$ zu erwarten, wenn man $H_1 = -\gamma\sqrt{2m\hbar\omega^3}\,x$ als ,,Störung" ansieht?

d)**[3 P.]** Führen Sie die Berechnung der Eigenwerte $E_n(\gamma)$ von

$$H = H_0 + H_1, \qquad H_0 = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}x^2 \qquad H_1 = -\gamma\sqrt{2m\hbar\omega^3}\,x$$

in erster und zweiter Ordnung Störungstheorie durch.

Hinweis: Drücken Sie den Operator H_1 durch den Erzeugungsoperator $b^\dagger$ bzw. den Vernichtungsoperator b aus. Benutzen Sie die Formeln

$$x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(b^\dagger + b), \quad p = i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}(b^\dagger - b),$$

$$b|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle, \quad b^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle.$$

a) Mit Hilfe einer quadratischen Ergänzung lässt sich das Problem exakt lösen. Wie man leicht nachrechnet, entspricht der angegebene Hamiltonoperator identisch

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}\left(x - \gamma\sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}}\right)^2 - \gamma^2\hbar\omega. \tag{2}$$

An dieser Form erkennt man, dass bei dem “gestörten”Potential nach wie vor um ein quadratisches Potential handelt, welches lediglich in x-Richtung um $\gamma\sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}}$ verschoben ist und einen offset von $\gamma^2\hbar\omega$ hat. Folglich erhalten auch die Energieeigenwerte lediglich einen offset und man erhält

$$E_n(\gamma) = \hbar\omega(n + \frac{1}{2} - \gamma^2). \tag{3}$$

Die Ortsdarstellung $\langle x|\psi_n(\gamma)\rangle$ der Eigenfunktionen erhält man unter Berücksichtigung der Verschiebung der Ortskoordinate. Mit den Abkürzungen $\alpha := \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$ und $x_0 := \frac{\sqrt{2}\gamma}{\alpha}$ erhält man

$$\langle x|\psi_n(\gamma)\rangle = \sqrt{\frac{\alpha}{2^n\, n!\, \sqrt{\pi}}} \exp\left(-\frac{\alpha^2(x-x_0)^2}{2}\right) H_n(\alpha(x-x_0)), \tag{4}$$

hierbei bezeichnen $H_n(\alpha(x-x_0))$ die Hermite-Polynome n-ten Grades.

b) Siehe Fig. 1
c) Die Tatsache, dass in a) mit Hilfe einer Variablentransformation das Problem exakt gelöst werden konnte, legt nahe, dass eine störungstheoretische Entwicklung von $E_n(\gamma)$ für beliebige endliche Werte von γ konvergieren sollte.
Zusätzliche Beobachtung eines erfahrenen Störungstheoretikers zweiter Ordnung für den geneigten Leser: Beachtet man, dass es sich bei der in a) berechneten “gestörten” Energie $E_n(\gamma)$ um ein quadratisches Polynom in γ handelt, so lässt sich erahnen, dass die Energiekorrektur erster Ordnung verschwindet, die Korrektur zweiter Ordnung das exakte Ergebnis liefert, und alle höheren Ordnungen wiederum verschwinden.

c) Für die “gestörte” Gesamtenergie gilt

$$E_n(\gamma) = E_n^0 + \epsilon_n^{(1)}(\gamma) + \epsilon_n^{(2)}(\gamma) + \dots \tag{5}$$

mit

$$\epsilon_n^{(1)}(\gamma) = \langle n|H_1(\gamma)|n\rangle \tag{6}$$

und

$$\epsilon_n^{(2)}(\gamma) = \sum_{n\neq n'} \frac{|\langle n'|H_1(\gamma)|n\rangle|^2}{E_n^0 - E_{n'}^0}. \tag{7}$$

Unter Verwendung des Hinweises lässt sich die Störung mit Hilfe der Leiteroperatoren schreiben

$$H_1(\gamma) = -\gamma\sqrt{2m\hbar\omega^3} = -\gamma\hbar\omega(b^+ - b). \tag{8}$$

Für die Energiekorrektur erster Ordnung ergibt sich somit aufgrund der Orthogonalität der Eigenzustände $|n\rangle$

$$\epsilon_n^{(1)} = -\gamma\hbar\omega\left[\langle n|b^+|n\rangle + \langle n|b|n\rangle\right] = 0. \tag{9}$$

Bei Energiekorrektur zweiter Ordnung verschwinden - ebenfalls aufgrund der Orthogonalität der Eigenzustände - die meisten Summanden identisch. Beachtet man die Äquidistanz benachbarter Energieniveaus, so ergibt sich unmittelbar

$$\begin{aligned}\epsilon_n^{(2)}(\gamma) &= -\gamma^2\hbar\omega\left[|\langle n+1|b^+|n\rangle|^2 - |\langle n-1|b|n\rangle|^2\right] \\ &= -\gamma^2\hbar\omega(n+1-n) = -\gamma^2\hbar\omega. \end{aligned}\tag{10}$$

Insgesamt ergibt sich für die “gestörte” Gesamtenergie

$$E_n(\gamma) = -\gamma\hbar\omega(n + \frac{1}{2} - \gamma^2), \tag{11}$$

der erfahrene Störungstheoretiker hatte also wieder einmal recht.

Aufgabe 4: Rayleigh-Ritz'sches Variationsverfahren

Betrachten Sie das Energieeigenwertproblem beim Wasserstoffatom mit Drehimpulsquantenzahl $l = 0$.

a)**[1P.]** Geben Sie den Hamiltonoperator in Kugelkoordinaten an.

b)**[1P.]** Benützen Sie den Ansatz

$$\{R(r) = \sqrt{N} e^{-r/\rho},\ \rho > 0\}$$

für die Versuchsfunktionenschar. Bestimmen Sie zuerst die Normierungskonstante N.

Hinweis: Die niedrigste Kugelflächenfunktion Y_{00} ist duch

$$Y_{00} = (4\pi)^{-1/2}$$

gegeben.

c)**[2P.]** Berechnen Sie anschliessend den Erwartungswert

$$< \psi(r)|H|\psi(r) >= E(\rho) \tag{12}$$

als Funktion von ρ.

d)**[1P.]** Für welches $\rho = \rho_{min}$ wird $E(\rho)$ minimal?

e)**[2P.]** Bestimmen Sie die minimale Energie $E(\rho_{min})$. Wie gross ist die Rydbergkonstante?

Hinweis: Es gilt folgende Relation

$$\int_0^\infty dr r^m e^{-ar} = \frac{m!}{a^{m+1}}.$$

Lösung:

a)

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) - \frac{\gamma}{r} \quad \blacksquare$$

b)
Normierung:

$$\int |\psi(\mathbf{r})|^2 d^3\mathbf{r} = \int_0^\infty |R(r)^2| r^2 dr \int_0^{2\pi}\int_0^\pi \sin\theta |Y_{00}|^2 d\theta\, d\varphi =$$

$$= N\int_0^\infty r^2 e^{-2r/\rho} dr = 1 \Leftrightarrow N\frac{\rho^3}{4} = 1 \Leftrightarrow N = \frac{4}{\rho^3} \quad \blacksquare$$

c)

Energie-Wert:

$$E(\rho) = \langle\psi|H|\psi\rangle = \int_0^\infty r^2\Big\{-\frac{\hbar^2}{2m}Ne^{-r/\rho}\Big(\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\big(r^2\frac{\partial}{\partial r}e^{-r/\rho}\big)\Big) - N\frac{\gamma}{r}e^{-2r/\rho}\Big\}dr =$$
$$\int_0^\infty r^2\Big\{\frac{\hbar^2}{2m}\frac{N}{\rho}e^{-2r/\rho}\Big(\frac{1}{r^2}\big(2r - \frac{r^2}{\rho}\big)\Big) - N\frac{\gamma}{r}e^{-2r/\rho}\Big\}dr =$$
$$\frac{\hbar^2}{2m}\frac{2N}{\rho}\int re^{-2r/\rho}dr - \frac{\hbar^2}{2m}\frac{N}{\rho^2}\int r^2e^{-2r/\rho}dr - N\gamma\int re^{-2r/\rho}dr =$$
$$N\Big\{\frac{\hbar^2\rho}{4m} - \frac{\hbar^2\rho}{8m} - \gamma\frac{\rho^2}{4}\Big\} = \frac{\hbar^2}{2m\rho^2} - \frac{\gamma}{\rho}.$$

Also,

$$E(\rho) = \frac{\hbar^2}{2m\rho^2} - \frac{\gamma}{\rho} \qquad \blacksquare$$

d)

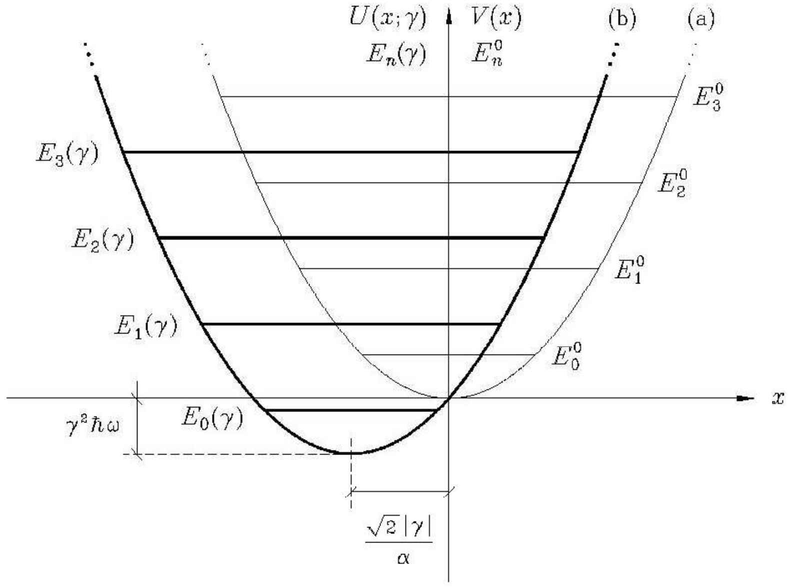
$$E'(\rho) = -\frac{2\hbar^2}{2m}\frac{1}{\rho^3} + \gamma\frac{1}{\rho^2} = 0 \Leftrightarrow \rho_{min} = \frac{\hbar^2}{m\gamma} \ \blacksquare$$

e)

$$E(\rho_{min}) = \frac{\hbar^2}{2m}\frac{m^2\gamma^2}{\hbar^4} - \frac{\gamma m\gamma}{\hbar^2} = -\frac{m\gamma^2}{2\hbar^2};$$
$$E_n = -R_H\frac{1}{n^2} \Rightarrow R_H = -E_1 = -E(\rho_{\min});$$

Die Rydbergkonstante ist

$$R_H = -E(\rho_{min}) = \frac{m\gamma^2}{2\hbar^2} \quad \blacksquare$$



$U(x;\gamma)$
$E_n(\gamma)$
$V(x)$
E_n^0
(b)
(a)
E_3^0
E_2^0
E_1^0
E_0^0
$E_3(\gamma)$
$E_2(\gamma)$
$E_1(\gamma)$
$E_0(\gamma)$
$\gamma^2\hbar\omega$
x
$\frac{\sqrt{2}\,|\gamma|}{\alpha}$

Abbildung 1: