Universität Oldenburg
Institut für Physik

Oldenburg, den 2. Juli 2019

Übungen zur Vorlesung *Quantenmechanik*

(SoSe 2019, Übungsblatt 13)

`https://uol.de/condmat/teaching/qm/`

Abgabe: Dienstag, 9. Juli bis 10:15 Uhr (*vor* der Vorlesung)

45) **Rayleigh–Schrödinger-Störungsrechnung**

Benutzen Sie den in der Vorlesung besprochenen Algorithmus der Rayleigh–Schrödinger-Störungstheorie, um die Energieeigenwerte eines „gestörten“ Hamiltonoperators

$$H = H_0 + \lambda V$$

in *dritter* Ordnung von V anzugeben. Dabei seien die diskreten Eigenwerte ε_n des „ungestörten“ Problems

$$H_0|n\rangle = \varepsilon_n|n\rangle$$

nicht entartet. **(3P)**

46) **Zur „Renormierung“ der störungstheoretischen Wellenfunktion**

Betrachten Sie noch einmal den bereits in Aufgabe 44 behandelten harmonischen Oszillator mit äußerer Kraft,

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 - Fx \; ,$$

und zeigen Sie, dass die im Sinne der Wahrscheinlichkeitsinterpretation korrekt normierten, störungstheoretisch konstruierten Eigenfunktionen in zweiter Ordnung von F mit den exakten Eigenfunktionen

$$|N\rangle = \exp\left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\frac{F}{m\omega^2}\,p\right)|n\rangle$$

übereinstimmen. **(3P)**

47) **Der Stark-Effekt beim Wasserstoffatom**

Bringt man ein Wasserstoffatom in ein homogenes, in z-Richtung orientiertes elektrisches Feld der Stärke $\mathcal{E}$, so lautet der Hamiltonoperator

$$H = \frac{p^2}{2m} - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{r} + e\mathcal{E}z \; .$$

a) Erklären Sie, warum für ein Wasserstoffatom im Grundzustand kein linearer Stark-Effekt (d.h. keine Verschiebung der Grundzustandsenergie in erster Ordnung von $\mathcal{E}$) auftritt.

b) Betrachten Sie nun die vier Zustände $|2s_0\rangle$, $|2p_1\rangle$, $|2p_0\rangle$, $|2p_{-1}\rangle$ zur Hauptquantenzahl $n = 2$. Zeigen Sie, dass die beiden Zustände $|2s_0\rangle$ und $|2p_0\rangle$ einen linearen Stark-Effekt zeigen, dessen Größe bestimmt wird durch die Eigenwerte der 2×2-Matrix

$$\begin{pmatrix} 0 & \langle 2p_0|e\mathcal{E}z|2s_0\rangle \\ \langle 2s_0|e\mathcal{E}z|2p_0\rangle & 0 \end{pmatrix} .$$

<u>Hinweis:</u> Überzeugen Sie sich zunächst, dass Matrixelemente der Störung zwischen Zuständen mit verschiedenen Eigenwerten von L_z verschwinden, da der Störoperator mit L_z kommutiert.

c) Werten Sie das benötigte Matrixelement aus und berechnen Sie die Größe der „Aufspaltung" der Niveaus mit $n = 2$ in erster Ordnung von $\mathcal{E}$. **(4P)**

48*) **Der anharmonische Oszillator: Störungsrechnung vs. Variationsverfahren**

Ein eindimensionaler anharmonischer Oszillator werde beschrieben durch den Hamilton-operator

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 + \lambda\frac{m^2\omega^3}{\hbar}x^4$$

mit einer dimensionslosen, positiven Konstanten λ.

a) Fassen Sie den quartischen Term als „Störung" auf und berechnen Sie die Matrixelemente des Störoperators in der Basis der Eigenfunktionen des harmonischen Oszillators, den man für $\lambda = 0$ erhält.

b) Benutzen Sie die Rayleigh–Schrödinger-Störungsrechnung *formal* (d.h. ohne zu hinterfragen, ob diese Störungsrechnung hier mathematisch gerechtfertigt ist) zur Berechnung der Energieeigenwerte des anharmonischen Oszillators in zweiter Ordnung von λ.

c) Wie beurteilen Sie die Aussagekraft der Störungstheorie für betragsmäßig kleine, *negative* Werte von λ? Wie groß ist der Konvergenzradius der Störungsreihe? Vergleichen Sie die Größen der Korrekturen zur Grundzustandsenergie in erster und zweiter Ordnung.

d) Benutzen Sie die Versuchsfunktionen $u_\alpha(x) = \exp(-\alpha\, m\omega x^2/\hbar)$ mit $\alpha > 0$, um die Grundzustandsenergie des anharmonischen Oszillators für den Parameter $\lambda = 1/10$ mit Hilfe des Ritzschen Variationsverfahrens numerisch abzuschätzen. Vergleichen Sie Ihr Resultat mit dem exakten Wert, $E_0 = 0.559146\,\hbar\omega$ für $\lambda = 1/10$, sowie mit den Ergebnissen der Störungsrechnung in erster und zweiter Ordnung. Überrascht? **(+10P)**

<u>Hinweis:</u> Die Minimierung des Rayleigh-Quotienten führt auf eine kubische Gleichung vom Typ $y^3 + 3py + 2q = 0$. Diese Gleichung besitzt für $p^3 + q^2 > 0$ genau eine reelle Lösung, nämlich

$$y = -\frac{2\sqrt{-p}}{\sin(2\psi)} \quad , \quad \text{wobei} \quad \tan(\psi) = \left(\tan\frac{\varphi}{2}\right)^{1/3} \quad \text{mit} \quad \sin(\varphi) = \frac{\sqrt{-p^3}}{q} .$$