

## Übungen zur Vorlesung *Quantenmechanik*

(SoSe 2013, Übungsblatt 13)

<http://www.condmat.uni-oldenburg.de/TeachingQM/QM.html>

**Abgabe:** Dienstag, 2. Juli bis 12:00 Uhr

### 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  $\varepsilon_n$  des „un-gestörten“ Problems

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

nicht entartet.

(2P)

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

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

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

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

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

übereinstimmen.

(2P)

### 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

$$H = \frac{p^2}{2m} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r} + e\mathcal{E}z.$$

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  $2 \times 2$ -Matrix

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

Hinweis: 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  $\mathcal{E}$ . (3P)

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

Ein eindimensionaler anharmonischer Oszillator werde beschrieben durch den Hamiltonoperator

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

mit einer dimensionslosen, positiven Konstanten  $\lambda$ .

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  $\lambda$ .

c) Wie beurteilen Sie die Aussagekraft der Störungstheorie für betragsmäßig kleine, *negative* Werte von  $\lambda$ ? 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? (3P)

Hinweis: 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

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