Quantenmechanik II
FSU Jena - WS 2009/2010
Übungsserie 09 - Lösungen

Stilianos Louca

February 13, 2010

Aufgabe 17

Erinnerung

Gegeben sei der Hamiltonian $\hat{H}_0$ mit den (orthonormierten) Eigenvektoren $\{|E_i\rangle\}_{i\in I}$ und zugehörigen Eigenwerten $\{E_i\}_{i\in I}$, dazu herausgegriffen der nicht-entartete Eigenwert E_a mit Eigenvektor $|E_a\rangle$. Für die *gestörte* Hamiltonian-Familie

$$\hat{H} = \hat{H}(\lambda) = \hat{H}_0 + \lambda\hat{W}$$

parametrisiert durch $\lambda \in \mathbb{R}$, seien gesucht die Eigenwerte $E(\lambda)$ bzw. Energieniveaus $|E(\lambda)\rangle$ die mit $\lambda \to 0$ gegen E_a bzw. $|E_a\rangle$ streben. Entwickelt man

$$E(\lambda) = E_a + \sum_{n=1}^{\infty} \lambda^n \mathcal{E}_n$$

$$|E(\lambda)\rangle = |E_a\rangle + \sum_{n=1}^{\infty} \lambda^n |\mathcal{E}_n\rangle$$

mit den zu bestimmenden Koeffizienten $\mathcal{E}_n \in \mathbb{R},\ |\mathcal{E}_n\rangle$, so erhält man unter Voraussetzung $\langle E_a | E(\lambda)\rangle = 1$

$$\mathcal{E}_n = \langle E_a| W |\mathcal{E}_{n-1}\rangle$$

$$|\mathcal{E}_n\rangle = \sum_{i\neq a} \frac{|E_i\rangle}{E_a - E_i} \cdot \langle E_i| \left[(\hat{W} - \mathcal{E}_1)|\mathcal{E}_{n-1}\rangle - \mathcal{E}_2 |\mathcal{E}_{n-2}\rangle - \cdots - \mathcal{E}_{n-1}|\mathcal{E}_1\rangle\right]$$

Speziell ergibt sich $E(\lambda)$ zur 2. Ordnung in λ als

$$E(\lambda) = E_a + \lambda \langle E_a| \hat{W} |E_a\rangle + \lambda^2 \langle E_a| \hat{W} |\mathcal{E}_1\rangle + \mathcal{O}(\lambda^3) \tag{0.1}$$

wobei

$$|\mathcal{E}_1\rangle = \sum_{i\neq a} \frac{|E_i\rangle}{E_a - E_i} \cdot \langle E_i| \hat{W} |E_a\rangle \tag{0.2}$$

Energieniveaus des eindimensionalen, harmonischen Oszillators

Die Energieniveaus des Hamiltonian

$$\hat{H}_0 := \frac{\hat{p}^2}{2m} + A\hat{x}^2 \quad , \quad A > 0$$

sind gegeben durch

$$E_n = \hbar\omega \cdot \left(n + \tfrac{1}{2}\right) \quad , \quad n \in \mathbb{N}_0,\ \omega := \sqrt{\frac{2A}{m}} \tag{0.3}$$

mit zugehörigen Eigenvektoren

$$|E_n\rangle(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \cdot H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \cdot x\right) \cdot \exp\left[-\frac{m\omega}{2\hbar} \cdot x^2\right] \quad , \quad x \in \mathbb{R} \tag{0.4}$$

wobei

$$H_n(x) := (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2} \quad , \quad n \in \mathbb{N}_0,\ x \in \mathbb{R} \tag{0.5}$$

die hermiteschen Polynome sind.

Bemerkungen zu den Hermite-Polynomen

Die Hermite-Polynome erfüllen die Orthogonalitätsrelation

$$\int\limits_{\mathbb{R}} H_n(x) \cdot H_\varkappa(x) \cdot e^{-x^2}\ dx = 2^n \cdot n! \cdot \sqrt{\pi} \cdot \delta_{n,\varkappa} \quad , \quad n, \varkappa \in \mathbb{N}_0 \tag{0.6}$$

so dass insbesondere die $|E_n\rangle$ orthonormal sind. Durch die Rekursionsformel

$$u \cdot H_n(u) = n \cdot H_{n-1}(u) + \frac{1}{2} H_{n+1}(u) \quad , \quad n \in \mathbb{N}_0 \tag{0.7}$$

lässt sich ferner zeigen:

$$\begin{aligned} u^4 \cdot H_n(u) = & \underbrace{n(n-1)(n-2)(n-3)}_{=:\alpha_n} \cdot H_{n-4}(u) + \underbrace{n(n-1)(2n-1)}_{=:\beta_n} \cdot H_{n-2}(u) \\ & + \underbrace{\frac{3}{4}\left[2n(n+1)+1\right]}_{=:\gamma_n} \cdot H_n(u) + \underbrace{\frac{1}{4}(2n+3)}_{=:\delta_n} \cdot H_{n+2}(u) + \underbrace{\frac{1}{16}}_{=:\varepsilon_n} \cdot H_{n+4}(u) \end{aligned} \tag{0.8}$$

Energieniveaus des eindimensionalen, anharmonischen Oszillators

Betrachten den gestörten Hamiltonian

$$\hat{H} = \hat{H}(B) = \hat{H}_0 + B \cdot \hat{x}^4$$

parametrisiert durch den Entwicklungsparameter $B > 0$ und berechnen hinsichtlich (0.2) die Matrixelemente

$$\begin{aligned} \langle E_n| \hat{x}^4 |E_\varkappa\rangle &= \sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}} \cdot \frac{1}{\sqrt{2^n 2^\varkappa n! \varkappa!}} \cdot \int\limits_{\mathbb{R}} x^4 \cdot H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \cdot x\right) \cdot H_\varkappa\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \cdot x\right) \cdot \exp\left[-\frac{m\omega}{\hbar} \cdot x^2\right]\ dx \\ &= \left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^2 \cdot \frac{1}{\sqrt{\pi 2^n 2^\varkappa n! \varkappa!}} \cdot \int\limits_{\mathbb{R}} u^4 \cdot H_n(u) \cdot H_\varkappa(u) \cdot e^{-u^2}\ du \\ &\overset{\substack{(0.8) \\ \&(0.6)}}{=} \left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^2 \cdot \sqrt{\frac{2^\varkappa \cdot \varkappa!}{2^n \cdot n!}} \cdot \left[\alpha_n \cdot \delta_{n-4,\varkappa} + \beta_n \cdot \delta_{n-2,\varkappa} + \gamma_n \cdot \delta_{n,\varkappa} + \delta_n \cdot \delta_{n+2,\varkappa} + \varepsilon_n \cdot \delta_{n+4,\varkappa}\right] \end{aligned} \tag{0.9}$$

Gesucht sei nun der Eigenwert $E_\varkappa(B)$ bzw. Eigenzustand $|E_\varkappa(B)\rangle$ der für $B \to 0$ gegen $E_\varkappa$ bzw. $|E_\varkappa\rangle$ strebt. Gemäß (0.2) ergibt sich $|E_\varkappa(B)\rangle$ zur 1. Ordnung in B als

$$|E_\varkappa(B)\rangle = |E_\varkappa\rangle + B\,|\mathcal{E}_{\varkappa,1}\rangle + \mathcal{O}(B^2)$$

wobei[1]

$$|\mathcal{E}_{\varkappa,1}\rangle = \sum_{n\neq\varkappa} \frac{|E_n\rangle}{E_\varkappa - E_n} \cdot \langle E_n|\,\hat{x}^4\,|E_\varkappa\rangle$$

$$= \frac{1}{\hbar\omega}\left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^2 \sum_{n\neq\varkappa} \frac{|E_n\rangle}{\varkappa - n}\sqrt{\frac{2^\varkappa \varkappa!}{2^n n!}} \cdot [\alpha_n\delta_{n,\varkappa+4} + \beta_n\delta_{n,\varkappa+2} + \gamma_n\delta_{n,\varkappa} + \delta_n\delta_{n,\varkappa-2} + \varepsilon_n\delta_{n,\varkappa-4}]$$

$$= \frac{1}{\hbar\omega}\left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^2 \cdot \left[\frac{\alpha_{\varkappa+4}}{-4}\sqrt{\frac{\varkappa!}{2^4(\varkappa+4)!}}\,|E_{\varkappa+4}\rangle + \frac{\beta_{\varkappa+2}}{-2}\sqrt{\frac{\varkappa!}{2^2(\varkappa+2)!}}\,|E_{\varkappa+2}\rangle\right.$$

$$\left. + \frac{\delta_{\varkappa-2}}{2}\sqrt{\frac{2^2\varkappa!}{(\varkappa-2)!}}\,|E_{\varkappa-2}\rangle + \frac{\varepsilon_{\varkappa-4}}{4}\sqrt{\frac{2^4\varkappa!}{(\varkappa-4)!}}\,|E_{\varkappa-4}\rangle\right]$$

$$= \frac{1}{\hbar\omega}\left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^2 \cdot \left[-\frac{1}{16}\sqrt{\frac{(\varkappa+4)!}{\varkappa!}}\,|E_{\varkappa+4}\rangle - \frac{(2\varkappa+3)}{4}\sqrt{\frac{(\varkappa+2)!}{\varkappa!}}\,|E_{\varkappa+2}\rangle\right.$$

$$\left. + \frac{(2\varkappa-1)}{4}\sqrt{\varkappa(\varkappa-1)}\,|E_{\varkappa-2}\rangle + \frac{1}{16}\sqrt{\frac{\varkappa!}{(\varkappa-4)!}}\,|E_{\varkappa-4}\rangle\right]$$

[1] Es sei gesetzt: $|E_k\rangle := 0$ für $k < 0$.

Entsprechend (0.1) erhält man die Energie $E_\varkappa(B)$ zur 2. Ordnung in B:

$$E_\varkappa(B) = E_\varkappa + B \cdot \underbrace{\langle E_\varkappa | \hat{x}^4 | E_\varkappa \rangle}_{\left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^2 \cdot \gamma_\varkappa} + B \langle E_\varkappa | B\hat{x}^4 | \mathcal{E}_{\varkappa,1} \rangle + \mathcal{O}(B^3)$$

$$= E_\varkappa + \frac{3B}{4} \cdot \left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^2 \left[2\varkappa^2 + 2\varkappa + 1\right]$$

$$+ \frac{B^2}{\hbar\omega}\left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^2 \cdot \left[-\frac{1}{16}\sqrt{\frac{(\varkappa+4)!}{\varkappa!}} \langle E_\varkappa | \hat{x}^4 | E_{\varkappa+4} \rangle - \frac{(2\varkappa+3)}{4}\sqrt{\frac{(\varkappa+2)!}{\varkappa!}} \langle E_\varkappa | \hat{x}^4 | E_{\varkappa+2} \rangle \right.$$

$$\left. + \frac{(2\varkappa-1)}{4}\sqrt{\varkappa(\varkappa-1)} \langle E_\varkappa | \hat{x}^4 | E_{\varkappa-2} \rangle + \frac{1}{16}\sqrt{\frac{\varkappa!}{(\varkappa-4)!}} \langle E_\varkappa | \hat{x}^4 | E_{\varkappa-4} \rangle \right] + \mathcal{O}(B^3)$$

$$= E_\varkappa + \frac{3B}{4} \cdot \left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^2 \left[2\varkappa^2 + 2\varkappa + 1\right]$$

$$+ \frac{B^2}{\hbar\omega}\left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^4 \cdot \left[-\frac{1}{2^6}\frac{(\varkappa+4)!}{\varkappa!} - \frac{(2\varkappa+3)^2}{2^3}\frac{(\varkappa+2)!}{\varkappa!} \right.$$

$$\left. + \frac{(2\varkappa-1)^2}{2^3}\varkappa(\varkappa-1) + \frac{1}{2^6}\frac{\varkappa!}{(\varkappa-4)!} \right] + \mathcal{O}(B^3)$$

$$= E_\varkappa + \frac{3B}{4} \cdot \left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^2 \left[2\varkappa^2 + 2\varkappa + 1\right]$$

$$+ \frac{B^2}{\hbar\omega}\left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^4 \cdot \left[-\frac{(\varkappa+1)(\varkappa+2)}{2^6}\left(33\varkappa^2 + 103\varkappa + 84\right) \right.$$

$$\left. + \frac{(2\varkappa-1)^2}{2^3}\varkappa(\varkappa-1) + \frac{1}{2^6}\frac{\varkappa!}{(\varkappa-4)!} \right] + \mathcal{O}(B^3)$$

$$= E_\varkappa + \frac{3B}{4} \cdot \left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^2 \left[2\varkappa^2 + 2\varkappa + 1\right] - \frac{1}{8} \cdot \frac{B^2}{\hbar\omega}\left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^4 \cdot \left[34\varkappa^3 + 51\varkappa^2 + 59\varkappa + 21\right]$$

Speziell ergibt sich der *gestörte* Grundzustand $E_0(B)$ gemäß

$$\boxed{E_0(B) = E_0 + \frac{3B}{4} \cdot \left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^2 - \frac{21}{8} \cdot \frac{B^2}{\hbar\omega}\left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^4}$$

Bemerkungen zur Gültigkeit der Näherung

Da alle Energieeigenwerte $E_\varkappa$ von $\hat{H}_0$ isoliert sind, bliebe zu klären ob der Abstand benachbarter Energieniveaus auch *groß genug* ist, sprich ob

$$|E_\varkappa(B) - E_\varkappa| \ll |E_\varkappa - E_{\varkappa\pm1}|$$

bzw.

$$\frac{3B}{4}\left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^2\left[2\varkappa^2+2\varkappa+1\right]\ll\hbar\omega$$

Äquivalent dazu ist

$$B\ll\frac{m^2\omega^3}{\hbar\cdot\max^2\{1,\varkappa\}}$$

bzw.

$$\boxed{B\ll\frac{\sqrt{m}\cdot A^{\frac{3}{2}}}{\hbar\cdot\max^2\{1,\varkappa\}}}$$

Alternative Berechnung der Matrixelemente

Die Matrixelemente (0.9) können auch alternativ mit Hilfe der Darstellung

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

durch die Vernichtungs- & Erzeugungsoperatoren $\hat{a},\hat{a}^\dagger$ und den bekannten Beziehungen

$$\hat{a}\,|E_n\rangle=\sqrt{n}\,|E_{n-1}\rangle\quad,\quad\hat{a}^\dagger\,|E_n\rangle=\sqrt{n+1}\,|E_{n+1}\rangle\quad,\quad\left[\hat{a},\hat{a}^\dagger\right]=1$$

hergeleitet werden. Tatsächlich, folgt aus

$$\hat{x}^4=\left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^2\left[\hat{a}^4+(\hat{a}^\dagger)^4+6(\hat{a}^\dagger)^2+6\hat{a}^2+6(\hat{a}^\dagger)^2\hat{a}^2+12\hat{a}^\dagger\hat{a}+4\hat{a}^\dagger a^3+4(\hat{a}^\dagger)^3\hat{a}+3\right]$$

das Matrixelement

$$\langle E_n|\,\hat{x}^4\,|E_\varkappa\rangle=\left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^2\cdot\left[\sqrt{\frac{\varkappa!}{(\varkappa-4)!}}\cdot\delta_{n,\varkappa-4}+2(2\varkappa-1)\sqrt{\frac{\varkappa!}{(\varkappa-2)!}}\cdot\delta_{n,\varkappa-2}+3\left[2n^2+2n+1\right]\cdot\delta_{n,\varkappa}\right.$$

$$\left.+2(2\varkappa+3)\sqrt{\frac{(\varkappa+2)!}{\varkappa!}}\cdot\delta_{n,\varkappa+2}+\sqrt{\frac{(\varkappa+4)!}{\varkappa!}}\cdot\delta_{n,\varkappa+4}\right]\quad,\quad n,\varkappa\in\mathbb{N}_0$$