Aufgabe 17

Hamiltonoperator und Bekannte Lösungen

$$\hat{\mathrm{H}} = \underbrace{\frac{\hat{\mathrm{p}}^2}{2m} + A\hat{\mathrm{x}}^2}_{\hat{\mathrm{H}}_0} + \underbrace{B\hat{\mathrm{x}}^4}_{\hat{\mathrm{H}}_1}, \quad \omega = \sqrt{\frac{2A}{m}} \tag{1}$$

Die Lösungen von $\hat{\mathrm{H}}_0$ sind bekannt und lauten:

$$\psi_n(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x\right) e^{-\frac{1}{2}\frac{m\omega}{\hbar}x^2}, \quad E_n = \hbar\omega(n+1/2) \tag{2}$$

Auf- und Absteigeoperatoren

Nutze Konzept der Auf- und Absteigeoperatoren:

$$a^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(\hat{\mathrm{x}} - \frac{i}{m\omega}\hat{\mathrm{p}}\right), \quad a = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(\hat{\mathrm{x}} + \frac{i}{m\omega}\hat{\mathrm{p}}\right) \tag{3}$$

$$a^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle, \quad a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle \tag{4}$$

Für diese gelten außerdem: $aa^\dagger = a^\dagger a + 1 = n + 1$
Entsprechend lässt sich x^4 darstellen als:

$$x^4 = \frac{1}{4\xi^4}\left(a^\dagger + a\right)^4, \qquad \xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \tag{5}$$

ausmultipliziert ergibt sich:

$$x^4 = \frac{1}{4\xi^4}\left[3(2N^2+2N+1) + 2a(2N+1)a + 2a^\dagger(2N+1)a^\dagger + a^4 + a^{\dagger 4}\right] \tag{6}$$

formale Störungstheorie

Die korrigierten Energieniveaus einer kleinen Störung $\lambda\hat{\mathrm{W}}$ ergeben sich formal zu:

$$E_n = E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \dots \tag{7}$$

Dabei ist $E_n^{(0)}$ das bereits bekannte Energieniveau. Die $E_n^{(i)}$ ergeben sich zu:

$$E_n^{(i)} = \langle n|\hat{\mathrm{W}}|\psi_n^{(k-1)}\rangle \tag{8}$$

Dabei ergibt sich $\psi_n^{(k)}$ zu (Entwicklung nach vollständigem Orthonormalsystem):

$$|\psi_n^{(k)}\rangle = \sum_{m\neq n} \frac{\langle m|\hat{\mathrm{V}}|\psi_n^{(k)}\rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}|n\rangle \tag{9}$$

Dies ermöglicht die Störungsrechnung zweiter Ordnung:

$$E_n^{(2)} = \sum_{m\neq n}\frac{|V_{nm}|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}, \qquad V_{nm} = \langle n|\hat{\mathrm{V}}|m\rangle \tag{10}$$

Anwendung auf anharmonischen Oszillator

Die Energiekorrektur erster Ordnung lässt sich sofort ausrechnen (N sei Operator, n der Eigenwert):

$$E_n^{(1)} = \langle n \left| \hat{\mathrm{x}}^4 \right| n \rangle = \frac{1}{4\xi^4} \langle n \left| 3(2N^2 + 2N + 1) + 2a(2N+1)a + 2a^\dagger(2N+1)a^\dagger + a^4 + a^{\dagger 4} \right| n \rangle \tag{11}$$

$$= \frac{1}{4\xi^4} \langle n \left| 3(2N^2 + 2N + 1) \right| n \rangle \tag{12}$$

$$= \frac{3(2n^2 + 2n + 1)}{4\xi^4} \tag{13}$$

Für die Störungsrechnung zweiter Ordnung nach Gleichung 10 ist aus Gleichung 6 folgend nur relevant ($V_{n,n}$ verschwindet nicht nach Gleichung 6, jedoch wird es bei der Summation ausgenommen) :

$$V_{n,n\pm 2},\ V_{n,n\pm 4}, \qquad V = x^4 \tag{14}$$

Dabei gilt $V_{n,m} = V_{m,n}$ (siehe Gleichung 6; Symmetrie von $a^\dagger, a$). Konkret:

$$V_{n,n+2} = \sqrt{n+1}\, 2(2(N+1)+1)\, \sqrt{n+2} = 2(2N+3)\sqrt{(n+1)(n+2)} \tag{15}$$

$$V_{n,n+4} = \sqrt{(n+4)(n+3)(n+2)(n+1)} \tag{16}$$

Die entsprechenden Matrixelemente mit $n-2, n-4$ ergeben sich durch die Umbenennung von $n \to n' - 2$ und $V_{n,m} = V_{m,n}$

Außerdem gilt für $E_n^{(0)} - E_m^{(0)} = (n-m)\hbar\omega$.

Somit folgt:

$$4\xi^4 E_n^{(2)} = \frac{|2(2n+3)\sqrt{(n+1)(n+2)}|^2}{-2} + \frac{|\sqrt{(n+4)(n+3)(n+2)(n+1)}|^2}{-4} \tag{17}$$

$$\frac{|2(2(n-2)+3)\sqrt{((n-2)+1)((n-2)+2)}|^2}{2} \tag{18}$$

$$+ \frac{|\sqrt{((n-4)+4)((n-4)+3)((n-4)+2)((n-4)+1)}|^2}{4} \tag{19}$$

$$= \frac{|2(2n+3)\sqrt{(n+1)(n+2)}|^2}{-2} + \frac{|\sqrt{(n+4)(n+3)(n+2)(n+1)}|^2}{-4} \tag{20}$$

$$\frac{|2(2n-1)\sqrt{(n-1)n}|^2}{2} + \frac{|\sqrt{n(n-1)(n-2)(n-3)}|^2}{4} \tag{21}$$

$$= \frac{1}{2}\left[-4(4n^2 + 12n + 9)(n+1)(n+2) + 4(4n^2 - 4n + 1)(n-1)(n)\right] \tag{22}$$

$$+ \frac{1}{4}\left[-(n+4)(n+3)(n+2)(n+1) + n(n-1)(n-2)(n-3)\right] \tag{23}$$

$$= \frac{1}{2}\left[-72 - 208n - 192n^2 - 128n^3\right] \tag{24}$$

$$+ \frac{1}{4}\left[-24 - 56n - 24n^2 - 16n^3\right] \tag{25}$$

$$= -42 - 118n - 102n^2 - 68n^3 \tag{26}$$

Es folgt:

$$E_n^{(2)} = -\frac{42 + 118n + 102n^2 + 68n^3}{4\xi^4} \tag{27}$$