Störungstheorie

$$\Delta E_n^{(1)} = \lambda \langle n | \hat{H}_1 | n \rangle$$

Beispiel: Anharmonisches Potential

$$\hat{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 \hat{x}^2 \qquad \text{(1D harmonische Oszillator)}$$

$$\lambda \hat{H}_1 = \lambda \frac{m^2 \omega^3}{\hbar} \hat{x}^4 \qquad \lambda \in \mathbb{R}$$

1te Ordnung:

$$\Delta E_n^{(1)} = \lambda \langle n | \hat{H}_1 | n \rangle$$

$$= \lambda \frac{m^2 \omega^3}{\hbar} \langle n | \hat{x}^4 | n \rangle$$

$$= \lambda \hbar \omega \langle n | (\hat{a} + \hat{a}^+)^4 | n \rangle$$

$$\uparrow$$

$$\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\hat{a} + \hat{a}^+), \quad \hat{a}^+ | n \rangle = \sqrt{n+1} \, | n+1 \rangle$$

$$a | n \rangle \overset{n \geq 1}{=} \sqrt{n} \, | n-1 \rangle$$

$$\rightarrow \langle n | (\hat{a} + \hat{a}^+)^4 | n \rangle = \langle n | (\hat{a}^2 \hat{a}^{+2} + \hat{a} \hat{a}^+ \hat{a} \hat{a}^+ + \hat{a} \hat{a}^+ \hat{a}^+ \hat{a} + \hat{a}^+ \hat{a} \hat{a} \hat{a}^+ + \hat{a}^+ \hat{a} \hat{a}^+ \hat{a} + \hat{a}^{+2} \hat{a}^2) | n \rangle$$

nur gleiche Anzahl von $\hat{a}$ und $\hat{a}^+$, da sonst kein Überlapp $\langle n|$ existiert.

Betrachte Terme einzeln:

$$\langle n|\hat{a}^2\hat{a}^{+2}|n\rangle = \langle n|\hat{a}^2\sqrt{(n+2)(n+1)}\,|n+2\rangle$$

$$= (n+2)(n+1)\underbrace{\langle n|n\rangle}_{=1}$$

$$\langle n|\hat{a}\hat{a}^+\hat{a}\hat{a}^+|n\rangle = (n+1)^2$$

$$\langle n|\hat{a}\hat{a}^+\hat{a}^+\hat{a}|n\rangle = n(n+1)$$

$$\langle n|\hat{a}^+\hat{a}\hat{a}\hat{a}^+|n\rangle = n(n+1)$$

$$\langle n|\hat{a}^+\hat{a}\hat{a}^+\hat{a}|n\rangle = n^2$$

$$\langle n|\hat{a}^{+2}\hat{a}^2|n\rangle = \langle n|\hat{a}^{+2}\sqrt{n(n-1)}\,|n-2\rangle$$

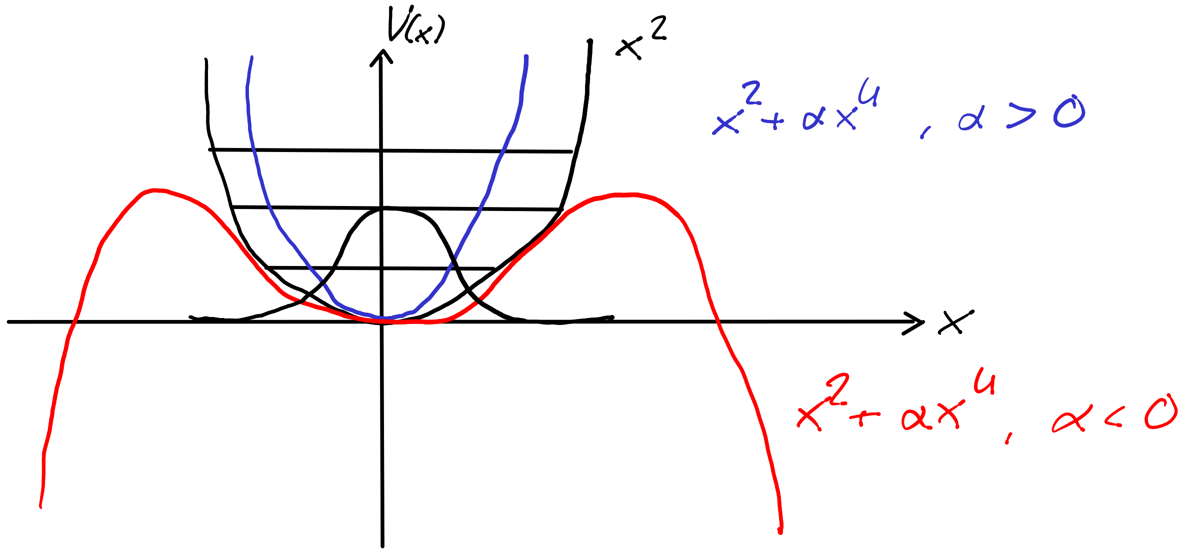
$$= n(n-1)$$

$$\langle n|(\hat{a}+\hat{a}^+)^4|n\rangle = 6n^2+6n+3$$

$$\Delta E_n^{(1)} = \frac{\lambda}{4}\hbar\omega\langle n|(\hat{a}+\hat{a}^+)^4|n\rangle = \frac{3}{4}\lambda\hbar\omega(2n^2+2n+1)$$

Wann ist das eine gute Approximation?

Brauchen: $\Delta E_n^{(1)} \ll E_n^{(0)}$ $\rightarrow$ gute Näherung für kleine n und λ, aber für große n konvergiert die Entwicklung nicht.



Der Term λx^4 ist nur klein, solange wir nahe an $x \simeq 0$ sind, d.h. solange der Zustand stark lokalisiert ist.

Dieses ist nur für niedrige Energien gegeben. Für $\lambda < 0$ existieren ungebundene Zustände.

Die Variationsmethode

Sei $|\psi\rangle$ ein beliebiger Zustand. $E = \langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle \geq E_0$ wobei E_0 die Grundzustandsenergie von $\hat{H}$ ist.

Bew: $|\psi\rangle = \sum_n c_n |n\rangle$ wobei $|n\rangle$ eine Orthonormierte Eigenbasis von $\hat{H}$ bilden.

$$(E - E_0) = \langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle - E_0 = \sum_{n',n} c^*_{n'} \langle n'|\hat{H} c_n |n\rangle - E_0$$

$$= \sum_{n,n'} c^*_{n'} c_n \langle n'| E_n | n\rangle - E_0$$

$$= \sum_n |c_n|^2 E_n - E_0 \underbrace{\sum_n |c_n|^2}_{=1}$$

$$= \sum_n \underbrace{(E_n - E_0)}_{\geq 0} \underbrace{|c_n|^2}_{\geq 0} \geq 0$$

Auf dieser Aussage beruht das Variationsprinzip für den Grundzustand:

i) Man macht einen Ansatz $|\psi_\alpha\rangle$ für den Zustand, der von Parametern $\alpha = (\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_m)$ abhängt.

ii) Die Parameter α werden variiert, um den minimalen Wert der Energie zu bestimmen

$$E(\alpha) = \langle \psi_\alpha | \hat{H} | \psi_\alpha \rangle$$

Damit erhält man eine obere Schranke für die Grundzustandsenergie. Die Qualität der Schranke hängt extrem stark von der "geratenen" Wellenfunktion α ab.

für höhere Energieniveaus:

i) wie oben

ii) Man bestimmt die Extrema von $E(\alpha)$, die dann Näherungen für die Energieniveaus sind.

Beispiel Variationsmethode

Ein Teilchen der Masse m bewegt sich in dem Potential

$$V(x) = V_0 \, x^\beta \qquad (1D)$$

$V_0 > 0$ gebundene Zustände

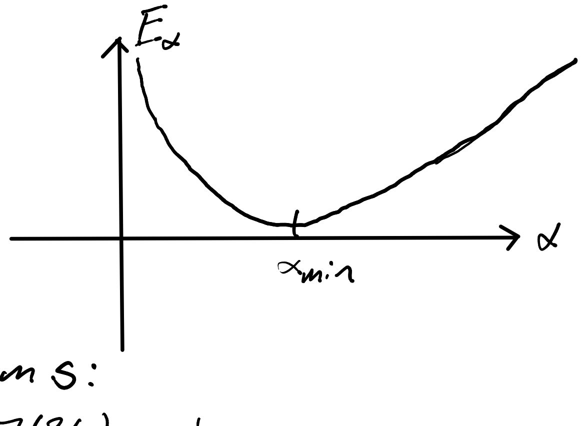
Ansatz: $\psi_\alpha(x) = \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{3/4} e^{-\alpha x^2/2}$ Gauß Funktion

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x})$$

$$E_\alpha = \langle \psi_\alpha | \hat{H} | \psi_\alpha \rangle \underset{\text{Rechnung}}{=} \frac{1}{2m} \underbrace{\left(\frac{3}{2} \alpha \hbar^2\right)}_{\langle \hat{p}^2 \rangle} + V_0 \underbrace{\left(\alpha^{-\beta/2} \frac{\Gamma(3/2 + \beta/2)}{\Gamma(3/2)}\right)}_{= \langle x^2 \rangle}$$

$\beta = 2$ (harmonischer Oszillator)

$$E_\alpha = \frac{3}{4m} \alpha \hbar^2 + V_0 \frac{1}{\alpha} \frac{\Gamma(5/2)}{\Gamma(3/2)}$$



Bestimmen des Minimums:

$$\frac{\partial E_\alpha}{\partial \alpha_0} = \frac{3\hbar^2}{4m} - \frac{V_0}{\alpha^2} \underbrace{\frac{\Gamma(3/2)}{\Gamma(3/2)}}_{3/2} \stackrel{!}{=} 0$$

$$\Rightarrow \alpha_0^2 = V_0 \, 3/2 \cdot 4/3 \, \frac{m}{\hbar^2}$$

$$V_0 = \frac{m\omega^2}{2} \nearrow = \frac{m^2\omega^2}{\hbar^2}$$

$$\rightarrow \alpha_0 = \frac{m\omega}{\hbar} = \frac{1}{a_{ho}^2}$$

Wir bekommen die exakte Lösung aber nur, da sie enthalten war im Ansatz.

XIV Addition von Drehimpulsen (Basdevant Chapt 13)

Wir haben in einer vorheigen Vorlesung 2 Teilchen mit Spin $1/2$ betrachtet. Wie addiert man diese Spins? Mehr Anwendungen Bahndrehimpulse, Spin und Bahndrehimpuls, ...

Wir betrachten 2 Teilchen mit $\hat{\vec{J}}_1$ und $\hat{\vec{J}}_2$ und den Hilbertraümen $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$. Wir hatten geschrieben, dass wir für jedes Teilchen eine gleichzeitige Basis von $\hat{\vec{J}}_i^2$ und $\hat{J}_{iz}$ konstruieren können $\{|j_i, m_i\rangle\}$, mit $\hat{\vec{J}}_i^2 |j_i, m_i\rangle = \hbar^2 j_i(j_i+1)|j_i m_i\rangle$

und $\hat{J}_{iz} |j_i, m_i\rangle = \hbar m_i |j_i, m_i\rangle$ mit $-j_i \leq m_i \leq j_i$

Wir definieren die Basis

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

Dann ist $\{|j_1, m_1 ; j_2, m_2\rangle\}$ eine Basis $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$

Wir definieren den Gesamtdrehimpulsoperator des Systems durch

$$\hat{\vec{J}} := \hat{\vec{J}}_1 + \hat{\vec{J}}_2 = \hat{\vec{J}}_1 \otimes \hat{I}_2 + \hat{I}_1 \otimes \hat{\vec{J}}_2$$

$\hat{I}_i$ ist die Identität in $\mathcal{H}_i$

Man kann zeigen, dass

$\hat{\vec{J}} \times \hat{\vec{J}} = i\hbar \hat{\vec{J}}$ Kommutatorrelation des Drehimpulsoperators

$$[\hat{\vec{J}}_1, \hat{\vec{J}}_2] = [\hat{\vec{J}}_1 \otimes \hat{I}_2, \hat{I}_1 \otimes \hat{\vec{J}}_2] = 0$$

Daher kann man eine gemeinsame Basis von $\hat{\vec{J}}^2$ und $\hat{J}_z$ konstruieren.

$\{|j,m\rangle\}$ wobei $\hat{\vec{J}}^2 |j,m\rangle = \hbar^2 j(j+1)|j,m\rangle$

$\hat{J}_z |j,m\rangle = \hbar m |j,m\rangle$

mit $-j \leq m \leq j$

Da $\mathcal{H}$ aber mehr Freiheitsgrade hat, suchen wir noch 2 Observablen, die mit $\hat{\vec{J}}^2$ und $\hat{J}_z$ vertauschen

Wir wählen $\hat{\vec{J}}_1^2$ und $\hat{\vec{J}}_2^2$

Die Observablen $\hat{\vec{J}}_1^2, \hat{\vec{J}}_2^2, \hat{\vec{J}}^2$ und $\hat{J}_z$ bilden

einen Satz vollständig kommutierender Observablen

Wir bezeichnen die Basis durch $\{|j_1, j_2, j, m\rangle\}$

Wir haben die Basistransformation durchgeführt.

$$|j_1 j_2, j, m\rangle = \sum_{m_1, m_2} C^{jm}_{j_1 m_1 j_2 m_2} |j_1 m_1, j_2 m_2\rangle$$

mit $C^{jm}_{j_1 m_1 j_2 m_2} = \langle j_1 m_1, j_2 m_2 | j_1 j_2; j m\rangle$

Diese Koeffizienten nennt man Clebsch-Gordon

-Koeffizienten

$$C^{jm}_{j_1 m_1 j_2 m_2} = (-1)^{j_1 - j_2 + m} \sqrt{2j+1} \underbrace{\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j \\ m_1 & m_2 & -m \end{pmatrix}}_{\text{Wigner-3j-Symbol}}$$

Sie sind Tabelliert oder in Mathematica.