CWR VL 10

27 – 1 –
14 + ~~10~~

- Start Recording ✓
- Hiwi-Job Webpage FKT 2500,–
  → FHM kontaktieren
- Fragen?
- Flexnow: Anmeldung/Abmeldung
  wie für Klausuren
- AB HEUTE: Hörsaalgruppe A + B ✓
  → alle.

6) Anwendungen in der QM

$$\boxed{\begin{array}{ll} \bullet \text{ Jedes QM Problem} \longrightarrow & \text{Matrix-Vektor} \\ \hbar = 1 & \text{Problem} \\ & \text{abbildbar} \end{array}}$$

- Diskretisierung (PDEs) → Eigenwertproblem
- Variationelle Ansätze → endlich-dim. Problem (Ritz)
- Numerov-Verfahren + Verallg. Verlet) 1D Probleme
  Shooting-Method
- Zeitabhängigkeit: Elementar, $|\psi(t)\rangle = e^{-i\hat{H}t} |\psi(t=0)\rangle$

  $|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n e^{-iE_n t} |n\rangle$

6.1) Zeitunabhängige Probleme

$$\hat{H}\,|\psi\rangle = E\,|\psi\rangle \qquad (1)$$

Wellendarstellung

$$\left[\frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\vec{r})\right]\psi(\vec{r}) = E\,\psi(\vec{r}) \qquad \text{PDE} \quad (2)$$

$\rightarrow$ Eigenwertprobleme $\qquad \hat{p}_x \rightarrow \frac{\hbar}{i}\partial_x \quad ; \quad \hbar = 1, \; m = 1$

a) $\dim(\mathcal{H}) < \infty$ (Ensemble von Spins)

$\rightarrow$ b) abzählbar ∞ Dim (nur Bindungszustände)

c) kontinuierliches Spektrum (V endlich, fest
$\rightarrow$ Quantisierung)

6.2) Diskretisierung der PDE

Ortsdarstellung, 1D Problem; 1TL

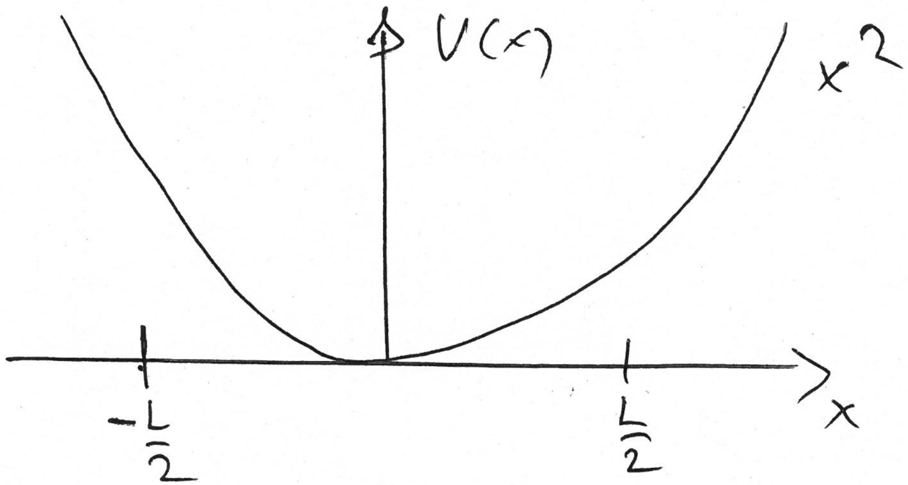
$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(x)$$

$$\Rightarrow \psi''(x) = \frac{2m}{-\hbar^2}\left(E - V(x)\right)\psi(x) \qquad \hbar = 1,\ m = 1$$

$$= -2\left(E - V(x)\right)\psi(x)$$

$x \in [0, L]$

ggf. erste Näherung



Differenzengleichung

$x_i = i \cdot \Delta x \;;\; i = 0, \ldots, N \;;\; L = N \Delta x$

$\Rightarrow N+1$ Stellen x_i $\qquad \Rightarrow N = \dfrac{L}{\Delta x}$

$$\Rightarrow \frac{\psi(x+\Delta x) + \psi(x-\Delta x) - 2\psi(x)}{(\Delta x)^2} = 2\left(E - V(x)\right)\psi(x)$$

Def:

$$\vec{\psi} = \begin{pmatrix} \psi(x_0) \\ \vdots \\ \vdots \\ \psi(x_N) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \psi_0 \\ \vdots \\ \vdots \\ \psi_N \end{pmatrix}$$

$\boxed{\dim \mathcal{H} = N+1}$

$= \dfrac{L}{\Delta x} + 1$

RB: offene Ränder (Bsp)

$\psi(x_{-1}) = 0 \;;\; \psi(x_{N+1}) = 0$

$\cancel{H = \vec{\psi}}$ $$\boxed{H\vec{\psi} = E\vec{\psi}}$$ N+1 dimensionales Eigenwertproblem.

Wie sieht H aus?

$$H_{i,i} = \frac{1}{(\Delta x)^2} + V(x_i)$$ diagonale M.el. (Matrixelemente)

$$H_{i,i+1} = -\frac{1}{2}\frac{1}{(\Delta x)^2} =: -t(\Delta x)$$

$$H = \begin{pmatrix} H_{0,0} & -t & & & 0 \\ -t & H_{1,1} & -t & & \\ & -t & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots \\ 0 & & & \ddots & H_{N,N} \end{pmatrix}$$

tridiagonal!

Warum:

- 1D
- RB
- Näherung für ψ''

H angegeben bez. Computational basis

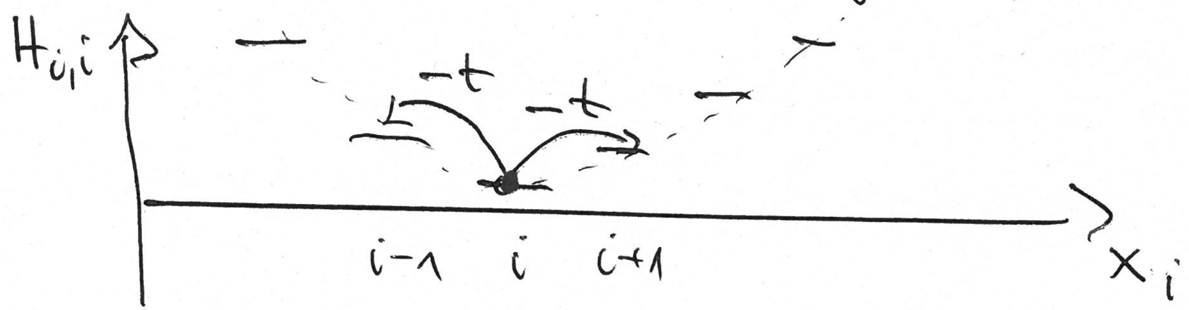
(ONB)

$$\vec{b}_i = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 1 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} \leftarrow \text{i-te Stelle}$$

Interpretation: $H\vec{b}_i \to H_{i,i}\vec{b}_i \; ; \; \underbrace{H_{i,i+1}\vec{b}_i}_{\vec{b}_{i+1}} \; ; \; \vec{b}_{i-1}$

Diskretisierung: Gitter

TL in $\vec{b}_i$: TL ist am Gitterplatz i (Breite Δx)



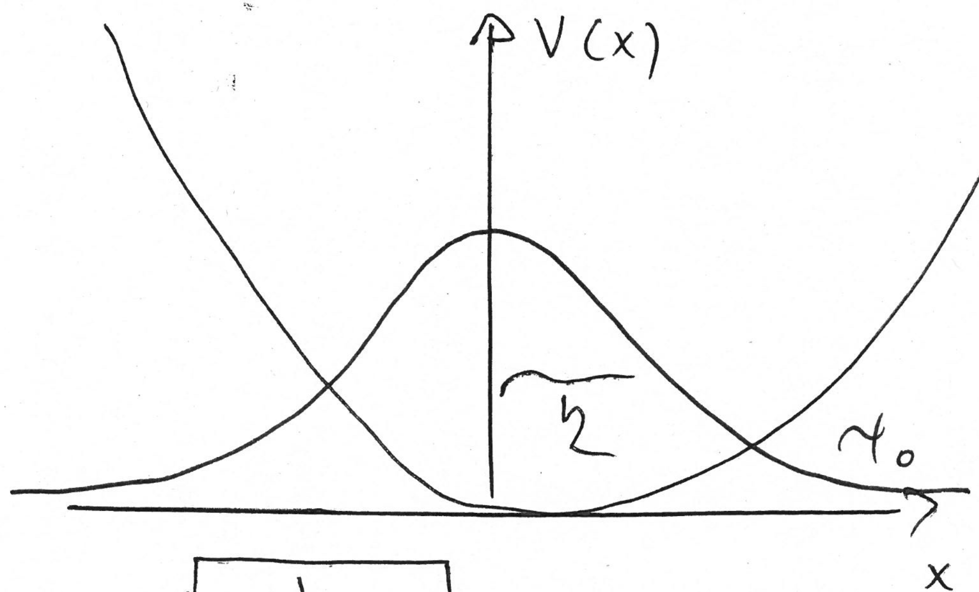
$V(x) \sim (x - x_i)^2$

t: Hüpfamplitude

→ Hüpfen des QM TL in diskrete Potential- -o- landschaft.

→ Künstliche Längenskalen: $\boxed{L, \Delta x}$

Beispiel: $V(x) \propto x^2$ harmonischer Oszillator



$\psi_0(x) \propto \exp\left(-\left(\frac{x}{\eta\,2}\right)^2\right)$

$[\eta] = m$

$V(x) = \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 ; \; \eta = \sqrt{\frac{\hbar}{\omega m}} = 1$

Numerik $\hbar = 1, m = 1, \omega = 1$

$$\boxed{\Delta x \ll \eta \ll L}$$

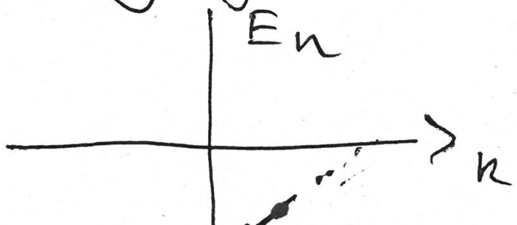
→ Niedrig-E Teil des Spektrums

≙ harmonische Oszillator

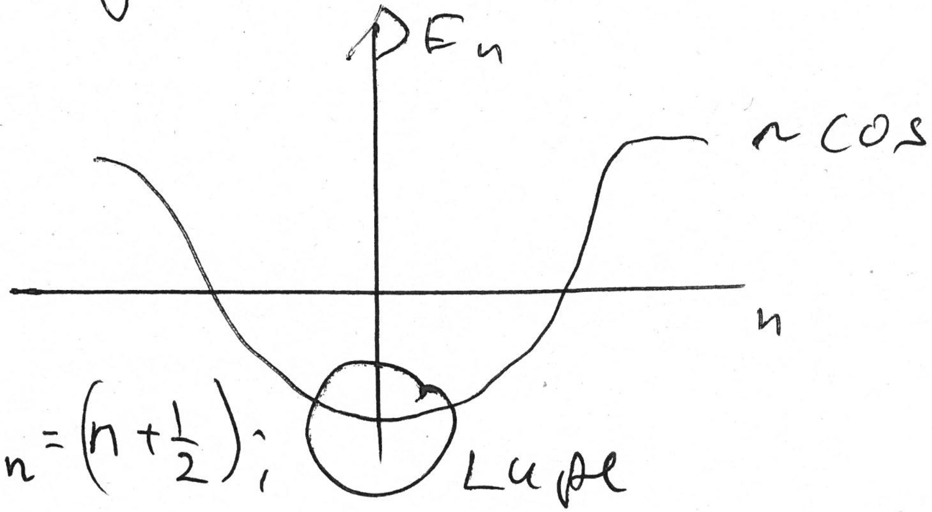
Hochenergieteil ≙ Gitterphysik

Lösung Gittermodell

Lupe



linear in n: $E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)$;



Numerisches Problem:

- Eigenwertgleichung (endlich-dim)

$$H \vec{\psi}_\alpha = E_\alpha \vec{\psi} \quad ; \quad \alpha = 0, \dots, N$$

- $\left.\begin{array}{l} L \to \infty \\ \Delta x \to 0 \end{array}\right\}$ korrekte Physik $\Rightarrow \left\{\begin{array}{l} \dfrac{L}{l_{char}} \gg 1 \\[2ex] \dfrac{\Delta x}{l_{char}} \ll 1 \end{array}\right.$

Eigenvektor: zu E_α

$\cancel{\vec{\psi}_0 = \sum \psi}$

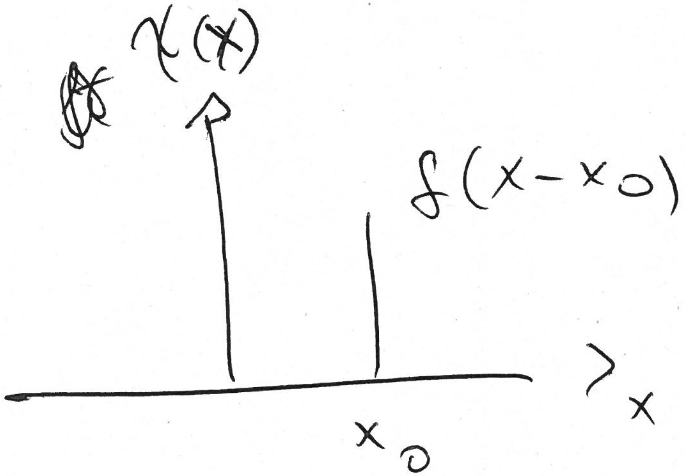
$$\vec{\psi}^\alpha = \sum_{i=0}^{N} \psi_i^\alpha \vec{b}_i \to \vec{\psi}^\alpha = \begin{pmatrix} \psi_0^\alpha \\ \vdots \\ \psi_N^\alpha \end{pmatrix}$$

Bedeutung von ψ_i^α ?

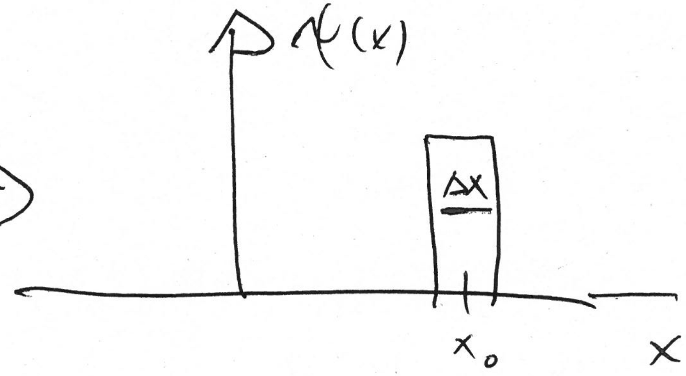
$$|\psi_\alpha(x)|^2 \longleftrightarrow |\psi_i^\alpha|^2$$

$$\downarrow$$

Wahrscheinlichkeit dafür, TL am Platz i zu finden



$\longrightarrow$



5.3) Variationeller Ansatz durch trunkierte Basissätze

α) Algebraisch,

Bsp: für Ritz'sche Variationsprinzip

$$\hat{H}\,|\psi_0\rangle = E_0\,|\psi_0\rangle$$

$|\psi_0\rangle$ nicht entartet!

$|\psi\rangle \neq |\psi_0\rangle$ (nicht parallel!) (falls Spektrum von unten beschränkt)

$$\underset{\text{Ritz}}{\Rightarrow} \quad \boxed{\frac{\langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle} \geq E_0}$$

$|\psi\rangle$ schlau raten!

(BCS theory, frakt. QHE, ...)

Numerisches Variationsprinzip.

$\rightsquigarrow$ endlich dim. Problem!

Ansatz: $|\psi_0\rangle \approx |\phi\rangle = \sum_{\alpha=1}^{N} a_\alpha |u_\alpha\rangle$

$N \ll \infty$ Näherung

a_α unbekannt.

wobei $\{|u_\alpha\rangle\}$: ONB im $\mathcal{H}$.

$\hookrightarrow \alpha = 1, \dots, \infty$ (für abzählbar-∞ $\mathcal{H}$)

$\rightarrow$ Entwicklung von $|\phi\rangle$ bez. endlich viele Basiszustände: $N \to \infty$: $|\phi\rangle \propto |\psi_0\rangle$

Mögliche Idee:

$$|\phi(\underset{\text{Parameter}}{v})\rangle \longrightarrow E(v) = \frac{\langle\phi|\hat{H}|\phi\rangle}{\langle\phi|\phi\rangle} \geq E_0$$

$\rightarrow$ best guess $\quad \min_v E(v) = E_{opt} \geq E_0$

Bei uns $\quad |\phi(a_1, \dots, a_N)\rangle$

$\rightarrow$ N Parameter a_α, $1, \dots, N$

$$\langle u_\alpha | u_\beta \rangle = \delta_{\alpha\beta}$$

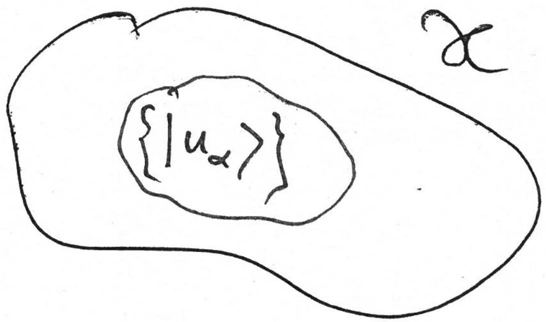
$\Rightarrow \quad H_{\alpha\beta} = \langle u_\alpha | \hat{H} | u_\beta \rangle$: Matrixelemente von $\hat{H}$ bez. auf $\{|u_\alpha\rangle\}$

$\rightarrow$ $N \times N$ Matrix $\rightarrow$ $\boxed{H\vec{a} = E^* \vec{a}}$

$\Rightarrow (*)$ $$\boxed{\sum_{\beta=1}^{N} H_{\alpha\beta}\, a_\beta = E^*\, a_\alpha}$$

Eigenwertgleichung im N dimensionalen Unterraum aufgespannt von $|u_\alpha\rangle$

$$\vec{a} = \begin{pmatrix} a_1 \\ \vdots \\ \vdots \\ a_N \end{pmatrix}$$



$\hookrightarrow$ $E_1^*, \ldots, E_N^*$: $\boxed{E_1^* \geq E_0}$

$\hookrightarrow$ best guess!

Herleitung Glg (*) von Seite 15 (nicht in VL präsentiert): Ansatz $|\phi\rangle = \sum_{\alpha=1}^{N} a_\alpha |u_\alpha\rangle$

$$\langle\phi|\hat{H}|\phi\rangle = \sum_{\alpha,\beta=1}^{N} \langle u_\beta|\hat{H}|u_\alpha\rangle\, a_\beta^* a_\alpha$$

$$\langle\phi|\phi\rangle = \sum_{\alpha,\beta=1}^{N} \langle u_\beta|u_\alpha\rangle\, a_\beta^* a_\alpha = \sum_{\alpha,\beta=1}^{N} a_\beta^* a_\alpha \delta_{\alpha,\beta} = \sum_{\alpha=1}^{N} |a_\alpha|^2$$

$$E^* = \frac{\langle\phi|\hat{H}|\phi\rangle}{\langle\phi|\phi\rangle} \Rightarrow \sum_{\alpha,\beta} a_\beta^* a_\alpha \overbrace{\langle u_\beta|\hat{H}|u_\alpha\rangle}^{=H_{\beta\alpha}} = E^* \sum_{\alpha=1}^{N} a_\alpha^* a_\alpha$$

Minimieren bezüglich Variation von a_β^*: $\partial_{a_\beta^*}$ auf beiden Seiten

$$\Rightarrow \boxed{\sum_{\alpha=1}^{N} H_{\beta\alpha} a_\alpha = E^* a_\beta} \Leftrightarrow \boxed{H\vec{a} = E^*\vec{a}}$$

Entscheidend (physikalische Intuition)

Wahl der Basis $\{|u_\alpha\rangle\}$!

Beispiel: $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}'$

Empirie: Physik Eigenschaften von $\hat{H}_0$ bleiben in Anwesenheit von $\hat{H}'$ erhalten.

Störung

$\hat{H}_0 |u_\alpha\rangle = E_\alpha |u_\alpha\rangle$

$|u_\alpha\rangle, E_\alpha$ bekannt

(ungestörte Problem)

$\hat{H}_0$: harmonische Oszillator

$\cancel{\hat{H}_0 \hat{H}_\alpha}$ $\quad E_\alpha = \alpha + \frac{1}{2}$.

$\hat{H}' = \lambda \hat{x}^4 ; \lambda > 0 ; \alpha = 0, 1, \ldots, \infty$

a) $\frac{1}{r}$.

b) x_i^2

c) $\hat{H} = \sum_i \frac{\hat{p}_i^2}{2m}$

NTL

Sortiere E_α:

A7 ~

$$E_0 < E_1 < E_2 < \ldots < E_{N-1}$$

$$|\phi\rangle = \sum_{\alpha=0}^{N-1} a_\alpha |u_\alpha\rangle$$

Eigenzustände von $\hat{H}_0$

Aufg:

- $H_{\alpha\beta}$ ausrechnen
- H auf endl.-dim Unterraum diagonalisieren
- Konvergenz bzt. N studieren. $E_0^*(N)$ vs N
- Vgl. mit Differenzenmethode.