

Theoretische Physik 4 (Quantentheorie)

Sommersemester 2014

Lösungen zu Übungsblatt 11

Lösung 11.1: Zeitunabhängige Störungstheorie

Wir berechnen zunächst

$$E_0^{(1)} = \langle \phi_1 | \lambda H_1 | \phi_1 \rangle \quad (1)$$

$$= \lambda (2\pi)^{-1/2} \int d\xi e^{-\xi^2/4} \left(e^{-\xi^2/2} (1 - 2\xi^2) \right) e^{-\xi^2/4} \quad (2)$$

$$= \lambda (2\pi)^{-1/2} \int d\xi e^{-\xi^2} (1 - 2\xi^2) \quad (3)$$

$$= \lambda (2\pi)^{-1/2} \left(\sqrt{\pi} - 2 \frac{\sqrt{\pi}}{2} \right) \quad (4)$$

$$= 0, \quad (5)$$

und anschließend

$$E_0^{(2)} = \sum_{m \neq 0} \frac{|\langle \phi_0 | \lambda H_1 | \phi_m \rangle|^2}{E_0^{(0)} - E_m^{(0)}} = -\lambda^2 \sum_{m \neq 0} \frac{|\langle \phi_0 | H_1 | \phi_m \rangle|^2}{m\hbar\omega}, \quad (6)$$

wobei wir nur die Terme bis $m = 2$ auf der rechten Seite berücksichtigen. Es gilt

$$\langle \phi_0 | H_1 | \phi_1 \rangle = 0 \quad (7)$$

aus Symmetriegründen ($\xi \rightarrow -\xi$). Weiterhin berechnen wir

$$\langle \phi_0 | H_1 | \phi_2 \rangle = \int d\xi \overline{\phi_0(\xi)} e^{-\xi^2/2} (1 - 2\xi^2) \phi_2(\xi) \quad (8)$$

$$= \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \int d\xi e^{-\xi^2} (1 - 2\xi^2) (\xi^2 - 1) \quad (9)$$

$$= \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \int d\xi e^{-\xi^2} (\xi^2 - 2\xi^4) \quad (10)$$

$$= \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \left(\frac{\sqrt{\pi}}{2} - 2 \frac{3\sqrt{\pi}}{4} \right) \quad (11)$$

$$= -\frac{1}{2}. \quad (12)$$

Wir erhalten somit

$$E_0 \approx E_0^{(0)} + E_0^{(1)} + E_0^{(2)} \approx \frac{\hbar\omega}{2} - \frac{\lambda^2}{8\hbar\omega}. \quad (13)$$

Lösung 11.2: Baker-Campbell-Hausdorff-Formel

Im Folgenden werden wir die beiden Sachverhalte verwenden:

- (a) Wenn C mit $[C, B]$ kommutiert, so gilt $[C^n, B] = nC^{n-1}[C, B]$,
- (b) wenn C mit $[C, B]$ kommutiert, so gilt $[e^C, B] = e^C[C, B]$.

Beweis von (a) durch Induktion: für $n = 1$ ist die Aussage trivial. Es gilt

$$[C^{n+1}, B] = [CC^n, B] \quad (14)$$

$$= C[C^n, B] + [C, B]C^n \quad (15)$$

$$= CnC^{n-1}[C, B] + [C, B]C^n \quad (16)$$

$$= (n+1)C^n[C, B], \quad (17)$$

was die Induktionsbehauptung war. Beweis von (b) mithilfe (a):

$$[e^C, B] = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} [C^n, B] = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{(n-1)!} C^{n-1} [C, B] = e^C [C, B], \quad (18)$$

was zu zeigen war.

Wir betrachten nun die Funktionen

$$f_1(t) = e^{t(A+B)}, \quad (19)$$

$$f_2(t) = e^{tA} e^{tB} e^{-\frac{1}{2}t^2[A, B]} \quad (20)$$

für $t \in \mathbb{R}$ und zeigen die beiden Eigenschaften

- (i) $f_1(0) = f_2(0)$,
- (ii) $f_1(t)$ und $f_2(t)$ erfüllen die selbe Differentialgleichung

$$\frac{d}{dt} f_i(t) = A f_i(t) + f_i(t) B - t f_i(t) [A, B]. \quad (21)$$

Hieraus folgt $f_1(t) = f_2(t)$ für $t \in \mathbb{R}$ und insbesondere die Behauptung für $t = 1$.

Die Identität (i) offensichtlich. Bei (ii) gilt die Differentialgleichung offenbar für $f_2(t)$, da B mit $[A, B]$ kommutiert. Für $f_1(t)$ gilt andererseits

$$\frac{d}{dt} f_1(t) = (A + B) f_1(t). \quad (22)$$

Daher bleibt noch zu zeigen, dass

$$Bf_1(t) = f_1(t)B - tf_1(t)[A, B]. \quad (23)$$

Für $C = A + B$ folgt aus (b)

$$[e^{A+B}, B] = e^{A+B}[A + B, B] = e^{A+B}[A, B] \quad (24)$$

und mit der Substitution $A \mapsto tA$, $B \mapsto tB$ die Gleichung (23).

Lösung 11.3: Zwei-Elektronen-Atome

1. *Ordnung Störungstheorie.* Die Korrektur zur Grundzustandsenergie beträgt

$$E_0^{(1)} = \langle \psi_0^{(0)} | H_1 | \psi_0^{(0)} \rangle = \frac{e^2}{\pi^2 a^6} \int d^3 \mathbf{r}_1 \int d^3 \mathbf{r}_2 \frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} e^{-2(r_1 + r_2)/a}, \quad (25)$$

wobei $r_i = |\mathbf{r}_i|$ für $i = 1, 2$. Wir gehen zunächst zu dimensionslosen Variablen $\mathbf{k} = 2\mathbf{r}_1/a$ und $\boldsymbol{\ell} = 2\mathbf{r}_2/a$ über, sodass

$$E_0^{(1)} = \frac{e^2}{\pi^2 a^6} \left(\frac{a}{2}\right)^5 \int d^3 \mathbf{k} \int d^3 \boldsymbol{\ell} \frac{1}{|\mathbf{k} - \boldsymbol{\ell}|} e^{-k-\ell}. \quad (26)$$

Wir führen das innere Integral in Kugelkoordinaten $\boldsymbol{\ell} = (\ell \sin \theta \cos \phi, \ell \sin \theta \sin \phi, \ell \cos \theta)$ aus, wobei $\theta = 0$ der Richtung von $\mathbf{k}$ entspricht:

$$\mathcal{I}(\mathbf{k}) \equiv \int d^3 \boldsymbol{\ell} \frac{1}{|\mathbf{k} - \boldsymbol{\ell}|} e^{-k-\ell} \quad (27)$$

$$= \int_0^\infty d\ell \int_0^\pi d\theta \int_0^{2\pi} d\phi \frac{\ell^2 \sin \theta}{\sqrt{k^2 + \ell^2 - 2k\ell \cos \theta}} e^{-k-\ell} \quad (28)$$

$$= 2\pi \int_0^\infty d\ell \int_{-1}^1 dx \frac{\ell^2}{\sqrt{k^2 + \ell^2 - 2k\ell x}} e^{-k-\ell} \quad (29)$$

$$= 2\pi \int_0^\infty d\ell \left[\frac{-\ell}{k} \sqrt{k^2 + \ell^2 - 2k\ell x} \right]_{-1}^1 e^{-k-\ell} \quad (30)$$

$$= 2\pi \int_0^\infty d\ell \frac{\ell}{k} (k + \ell - |k - \ell|) e^{-k-\ell} \quad (31)$$

$$= 4\pi \left(\int_0^k d\ell \frac{\ell^2}{k} e^{-k-\ell} + \int_k^\infty d\ell \ell e^{-k-\ell} \right). \quad (32)$$

Die beiden Integrale lassen sich durch partielle Integration auswerten,

$$\int_0^k d\ell \ell^2 e^{-\ell} = -(k^2 + 2k + 2) e^{-k} + 2 \quad (33)$$

$$\int_k^\infty d\ell \ell e^{-\ell} = (k + 1) e^{-k}, \quad (34)$$

und wir erhalten somit

$$\mathcal{I}(\mathbf{k}) = 4\pi \left(-e^{-2k} - \frac{2}{k} e^{-2k} + \frac{2}{k} e^{-k} \right). \quad (35)$$

Als nächstes können wir das äußere Integral ausführen:

$$\int d^3\mathbf{k} \mathcal{I}(\mathbf{k}) = (4\pi)^2 \int_0^\infty dk k^2 \left(-e^{-2k} - \frac{2}{k} e^{-2k} + \frac{2}{k} e^{-k} \right) = \frac{5}{4} (4\pi)^2. \quad (36)$$

Das Ergebnis ist folglich

$$E_0^{(1)} = \frac{e^2}{\pi^2 a^6} \left(\frac{a}{2} \right)^5 \frac{5}{4} (4\pi)^2 = \frac{5}{8} \frac{e^2}{a} \quad (37)$$

und die Grundzustandsenergie beträgt

$$E_{\text{pert}} = E_0^{(0)} + E_0^{(1)} = -\mu(Z\alpha c)^2 + \frac{e^2}{a} = -\mu(Z\alpha c)^2 \left(1 - \frac{5}{8Z} \right). \quad (38)$$

mit $a = \hbar/(\mu Z\alpha c)$ und $\alpha = e^2/(\hbar c)$.

Variationsmethode. Um eine obere Schranke für die Grundzustandsenergie zu erhalten, wählen wir den Ansatz

$$\psi_a(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \phi_a(\mathbf{r}_1) \phi_a(\mathbf{r}_2) \quad (39)$$

mit

$$\phi_a(\mathbf{r}_1) = \sqrt{\frac{1}{\pi a^3}} e^{-r_1/a}, \quad (40)$$

wobei a als Variationsparameter aufgefasst wird. Es gilt

$$\langle \phi_a | \phi_a \rangle = \frac{1}{\pi a^3} \int d^3\mathbf{r} e^{-2r/a} = \frac{1}{\pi a^3} \left(\frac{a}{2} \right)^3 \int d^3\mathbf{k} e^{-k} = \frac{1}{8\pi} (4\pi) \int_0^\infty dk e^{-k} = 1 \quad (41)$$

und somit

$$\langle \psi_a | \psi_a \rangle = \int d^3\mathbf{r}_1 \int d^3\mathbf{r}_2 |\phi_a(\mathbf{r}_1)|^2 |\phi_a(\mathbf{r}_2)|^2 = \langle \phi_a | \phi_a \rangle^2 = 1. \quad (42)$$

Zunächst berechnen wir

$$-\frac{1}{2\mu} \langle \psi_a | \Delta_1 | \psi_a \rangle = -\frac{1}{2\mu} \langle \phi_a | \Delta | \phi_a \rangle \langle \phi_a | \phi_a \rangle \quad (43)$$

$$= -\frac{1}{2\mu} \frac{1}{\pi a^3} \int d^3 \mathbf{r} e^{-r/a} \Delta e^{-r/a}. \quad (44)$$

Mit

$$\Delta e^{-r/a} = \sum_{i=1}^3 \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} e^{-r/a} \quad (45)$$

$$= -\frac{1}{a} \sum_{i=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{x_i}{r} e^{-r/a} \right) \quad (46)$$

$$= -\frac{1}{a} e^{-r/a} \sum_{i=1}^3 \left(\frac{1}{r} - \frac{x_i^2}{r^3} - \frac{1}{a} \frac{x_i^2}{r^2} \right) \quad (47)$$

$$= -\frac{1}{a} e^{-r/a} \left(\frac{2}{r} - \frac{1}{a} \right) \quad (48)$$

ergibt sich

$$-\frac{1}{2\mu} \langle \psi_a | \Delta_1 | \psi_a \rangle = \frac{1}{2\mu \pi a^4} \int d^3 \mathbf{r} \left(\frac{2}{r} - \frac{1}{a} \right) e^{-2r/a} \quad (49)$$

$$= \frac{1}{2\mu \pi a^4} \left(\frac{a}{2} \right)^3 \int d^3 \mathbf{k} \left(\frac{4}{ak} - \frac{1}{a} \right) e^{-k} \quad (50)$$

$$= \frac{1}{4\mu a^2} \int_0^\infty dk (4k - k^2) e^{-k} \quad (51)$$

$$= \frac{1}{2\mu a^2}. \quad (52)$$

Als nächstes berechnen wir

$$-Ze^2 \langle \psi_a | \frac{1}{r_1} | \psi_a \rangle = -Ze^2 \frac{1}{\pi a^3} \int d^3 \mathbf{r} \frac{1}{r} e^{-2r/a} \quad (53)$$

$$= -Ze^2 \frac{1}{\pi a^3} \left(\frac{a}{2} \right)^2 \int d^3 \mathbf{k} \frac{1}{k} e^{-k} \quad (54)$$

$$= -Ze^2 \frac{1}{4\pi a} (4\pi) \int_0^\infty dk k e^{-k} \quad (55)$$

$$= -\frac{Ze^2}{a}. \quad (56)$$

Das Matricelement

$$\langle \psi_a | \frac{e^2}{r_{12}} | \psi_a \rangle = \frac{e^2}{\pi^2 a^6} \int d^3 \mathbf{r}_1 \int d^3 \mathbf{r}_2 \frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} e^{-2(r_1+r_2)/a} = \frac{5e^2}{8a} \quad (57)$$

haben wir bereits oben (siehe Gleichung (37)) berechnet. Wir erhalten somit

$$\frac{\langle \psi_a | H | \psi_a \rangle}{\langle \psi_a | \psi_a \rangle} = \sum_{i=1}^2 \langle \psi_a | -\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta_i - \frac{Ze^2}{r_i} | \psi_a \rangle + \langle \psi_a | \frac{e^2}{r_{12}} | \psi_a \rangle \quad (58)$$

$$= \frac{\hbar^2}{\mu a^2} - \frac{2Ze^2}{a} + \frac{5e^2}{8a} \quad (59)$$

$$= \mu(\alpha c)^2 Z' \left[Z' - 2Z + \frac{5}{8} \right] \quad (60)$$

wobei $e^2/a = \mu(\alpha c)^2 Z'$ mit $Z' = \hbar/(\mu a \alpha c)$ gilt. Die Minimierung dieses Ausdrucks

$$0 \stackrel{!}{=} \frac{\partial}{\partial a} \langle \psi_a | H | \psi_a \rangle = \frac{\partial Z'}{\partial a} \frac{\partial}{\partial Z'} \langle \psi_a | H | \psi_a \rangle \quad (61)$$

führt zu der Bedingung

$$0 = 2Z' - 2Z + \frac{5}{8} \quad (62)$$

und somit

$$Z' = Z - \frac{5}{16}. \quad (63)$$

Durch Einsetzen in (60) erhalten wir die obere Schranke für die Grundzustandsenergie

$$E_0 \leq E_{\text{var}} = \mu(\alpha c)^2 \left(Z - \frac{5}{16} \right) \left[\left(Z - \frac{5}{16} \right) - 2Z + \frac{5}{8} \right] \quad (64)$$

$$= -\mu(Z\alpha c)^2 \left(1 - \frac{5}{16Z} \right)^2. \quad (65)$$

Vergleich mit (38) ergibt

$$E_{\text{pert}} - E_{\text{var}} = -\mu(Z\alpha c)^2 \left\{ \left(1 - \frac{5}{8Z} \right) - \left(1 - \frac{5}{16Z} \right)^2 \right\} = \mu(\alpha c)^2 \frac{25}{256}, \quad (66)$$

was zu zeigen war.