Prof.Dr. H.Lenske
Dr. U.Badarch
Dipl.-Phys. M.Strecker
Institut für Theoretische Physik I

Übungsblatt Nr. 10

Präsenzaufgaben am 20.06.11, Hausaufgaben zum 27.06.11

Minitest 6:

Sei

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix}$$

mit $a_{ij} \in \mathbb{C}$.

M1) Welche Bedingungen müssen erfüllt sein für $A = A^\dagger$?

M2) Berechnen Sie den hermiteschen und den anti-hermiteschen Anteil von A.

M3) Berechnen Sie die Spur $\mathrm{Sp}(A)$.

Präsenzaufgabe 12:

Gegeben sei der Hamiltonoperator des linearen harmonischen Oszillators

$$H_0 = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$$

zu welchem eine Störung

$$H_1 = \lambda \frac{m^2\omega^2}{\hbar} x^4$$

hinzutritt. Der Hamiltonoperator des anharmonischen Oszillators ist dann gegeben als $H = H_0 + H_1$. Berechnen Sie die Energiekorrekturen dieses anharmonischen Oszillators, die von H_1 herrühren.
(Hinweis: Günstig ist die Verwendung der Besetzungszahldarstellung.)

Präsenzaufgabe 13:

Gegeben sei nochmals der Hamiltonoperator des linearen harmonischen Oszillators

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$$

Für den Grundzustand sei eine Testfunktion

$$\psi_a(x) = \begin{cases} (a^2 - x^2)^2 & |x| \leq a \\ 0 & \text{sonst,} \end{cases}$$

die von einem Parameter a abhängt, gegeben.

Berechnen Sie eine Abschätzung für die Grundzustandsenergie gemäß

$$E' = \frac{\langle \psi_a(x)|H|\psi_a(x)\rangle}{\langle \psi_a(x)|\psi_a(x)\rangle}$$

und optimieren Sie den Parameter a, indem Sie E' nach a ableiten. Berechnen Sie E' für den optimalen Parameter und vergleichen Sie mit der exakten Grundzustandsenergie.

Hausaufgabe 19: (6 P.)
Ein Teilchen bewegt sich in einer Dimension in dem gestörten Oszillator-Potential

$$V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 + cx^3$$

a) Welche Parität hat das Störpotential $V_s(x) = cx^3$? Was folgt daraus für die Matrixelemente?

b) Berechnen Sie die Energieeigenwerte in erster Ordnung Störungstheorie.

c) Berechnen Sie die Energieeigenwerte in zweiter Ordnung Störungstheorie.

(Hinweis: Stellen Sie die Ortskoordinate durch die Operatoren a und $a^\dagger$ dar.)

Hausaufgabe 20: (6 P.)
Ein neutrales Wasserstoffatom mit einem Elektron wird durch den Hamiltonoperator

$$H = -\frac{\hbar}{2m}\vec{\nabla}^2 - \hbar c \alpha_f \frac{1}{r}$$

beschrieben, wobei der Atomkern (Proton mit $M \gg m_e$) als unendlich schwer angenommen wird. Die Feinstrukturkonstante ist $\alpha_f = \frac{e^2}{\hbar c}\frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \sim \frac{1}{137.0381}$; $\hbar c = 1.9732 \cdot 10^3\,\mathrm{eV}\mathring{\mathrm{A}}$ und $m = 5.11 \cdot 10^5$ eV. ($1\mathring{\mathrm{A}} = 10^{-10}$ m).

a) Berechnen Sie mit dem Ritz'schen Variationsverfahren die Grundzustandsenergie mit der Testfunktion $\varphi(r) = Ae^{-\mu r}$.

Die Konstante μ ist ein Variationsparameter. Berechnen Sie die Normierungskonstante A. Vergleichen Sie das Ergebnis mit dem experimentellen Wert $E_0 = -13.606$ eV.

b) Berechnen Sie mit der Testfunktion den mittleren quadratischen Radius

$$\langle r^2\rangle = \int d^3r \frac{\varphi^*(r) r^2 \varphi(r)}{\langle\varphi|\varphi\rangle}$$

Vergleichen Sie das Ergebis mit dem Bohrschen Radius $a_B = 0.5298\,\mathring{\mathrm{A}}$.

Hausaufgabe 21: (3 P.)
Zeigen Sie die folgenden Eigenschaften der Spur einer Matrix:

a) Sp(A)+Sp(B) =Sp($A + B$)

b) Sp(AB) =Sp(BA)

c) Die Spur ist invariant unter unitären Transformationen, d.h. mit $\Omega = U^\dagger AU$ gilt Sp(Ω) =Sp(A).

Blatt 10 Theo 4 Julian Bergmann

15/15

H 19

a) $V_s(-x) = c(-x)^3 = -cx^3 = -V_s(x) \Rightarrow$ neg. Parität

$\Rightarrow$ Diagonalelemente d. Matrixdarstellung $= 0$. ✓

b) $E_n^{(1)} = \langle n | V_s(x) | n\rangle = c\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}^3 \langle n | (a+a^+)^3 | n\rangle$

$= c\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}^3 \langle n | aaa + aaa^+ + aa^+a + aa^+a^+ + a^+aa + a^+aa^+ + a^+a^+a + a^+a^+a^+ | n\rangle$

$\langle n|n'\rangle = \delta_{nn'} \Rightarrow$ nur gleiche Anzahl v. a, a^+ in Summand $\neq 0$

$= 0$ ✓

c) $E_n^{(2)} = \sum_{m\neq n} \frac{|\langle m^{(0)} | V_s(x) | n^{(0)}\rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} = \sum_{m\neq n} \frac{|\langle m^{(0)} | c\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}^3 (a+a^+)^3 | n^{(0)}\rangle|^2}{\omega\hbar(n^{(0)} - m^{(0)})}$

$= \sum_{m\neq n} \frac{c\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}^3}{\omega\hbar(n-m)} \cdot |\langle m | aaa + aaa^+ + aa^+a + aa^+a^+ + a^+aa + a^+aa^+ + a^+a^+a + a^+a^+a^+ | n\rangle|^2$

$= \sum_{m\neq n} \frac{c\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}^3}{\omega\hbar(n-m)} \cdot |\langle m|\sqrt{n}\sqrt{n-1}\sqrt{n-2}|n-3\rangle + \langle m|\sqrt{n}(n+1)|n-1\rangle + \langle m|n\sqrt{n}|n-1\rangle$

$+ \langle m|(n+2)\sqrt{n+1}|n+1\rangle + \langle m|\sqrt{n}(n-1)|n-1\rangle + \langle m|(n+1)\sqrt{n+1}|n+1\rangle + \langle m|n\sqrt{n+1}|n+1\rangle$

$+ \langle m|\sqrt{n+1}\sqrt{n+2}\sqrt{n+3}|n+3\rangle |^2$

$= \sum_{m\neq n} \frac{c\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}^3}{\omega\hbar(n-m)} \cdot |\sqrt{n}\sqrt{n-1}\sqrt{n-2}\,\delta_{m,n-3} + \sqrt{n}(n+1)\,\delta_{m,n-1} + n\sqrt{n}\,\delta_{m,n-1}$

$+ (n+2)\sqrt{n+1}\,\delta_{m,n+1} + \sqrt{n}(n-1)\,\delta_{m,n-1} + (n+1)\sqrt{n+1}\,\delta_{m,n+1}$

$+ n\sqrt{n+1}\,\delta_{m,n+1} + \sqrt{n+1}\sqrt{n+2}\sqrt{n+3}\,\delta_{m,n+3} |^2$

$= \sum_{m\neq n} \frac{c^2\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}^6}{\omega\hbar(n-m)} \left(n(n-1)(n-2)\,\delta_{m,n-3} + 9n^2 n\,\delta_{m,n-1} + 9(n+1)^2(n+1)\,\delta_{m,n+1} \right.$

$\left. + (n+1)(n+2)(n+3)\,\delta_{m,n+3} \right)$

$= \frac{c^2\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}^6}{\omega\hbar}\left(\frac{1}{3} n(n-1)(n-2) + \frac{1}{1}\cdot 9n^3 + \frac{1}{-1}\, 9(n+1)^3 + \frac{1}{-3}(n+1)(n+2)(n+3) \right)$

$= \frac{1}{\omega\hbar}\left(\frac{1}{3}(n^3 - 3n^2 + 2n) + 9n^3 - 9(n^3 + 2n^2 + n + n^2 + 2n + 1) \right.$

$\left. - \frac{1}{3}(n^3 + 5n^2 + 6n + n^2 + 5n + 6) \right) \cdot c^2\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}^6$

$= \frac{1}{\omega\hbar}\left(-30n^2 - 30n - 11\right) \cdot c^2\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}^6$

$= -\frac{c^2\hbar^2}{8m^3\omega^4}(30n^2 + 30n + 11)$ ✓

$\varepsilon_n = E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} = \hbar\omega(n+\frac{1}{2})\lambda - \frac{c^2\hbar^2}{8m^3\omega^4}(30n^2 + 30n + 11)\lambda^2$ ✓

H 20

a) $E(\mu) = \frac{\langle\varphi|H|\varphi\rangle}{\langle\varphi|\varphi\rangle}$

$\langle\varphi|H|\varphi\rangle = \int_0^\infty\int_0^\pi\int_0^{2\pi} A^2 e^{-\mu r}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\vec{\nabla}^2 e^{-\mu r}\right) - \hbar c\alpha_f \frac{1}{r} e^{-\mu r}\right)\overbrace{r^2\sin(\vartheta)}\, d\varphi\, d\vartheta\, dr$

$= \int_0^\infty\int_0^\pi\int_0^{2\pi} A^2 e^{-\mu r} r^2 \sin\vartheta \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r^2}\left(\frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} e^{-\mu r}\right) - \hbar c\alpha_f \frac{1}{r} e^{-\mu r}\right) d\varphi\, d\vartheta\, dr$

$= \iiint A^2 e^{-\mu r} r^2 \sin\vartheta \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r^2}\left(-2r\mu e^{-\mu r} + r^2\mu^2 e^{-\mu r}\right) - \hbar c\alpha_f \frac{1}{r} e^{-\mu r}\right) d\varphi\, d\vartheta\, dr$

$= 4\pi \int_0^\infty A^2 e^{-2\mu r}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}(r^2\mu^2 - 2r\mu) - \hbar c\alpha_f r\right) dr$

$= 4\pi A^2 \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\mu^2 \frac{2!}{(2\mu)^3} - 2\mu\frac{1!}{(2\mu)^2}\right) - \hbar c\alpha_f \frac{1!}{(2\mu)^2} \right]$

$$\langle\varphi|\varphi\rangle = A^2\int_0^\infty\int_0^\pi\int_0^{2\pi} e^{-2\mu r} r^2 \sin(\vartheta)\, d\varphi\, d\vartheta\, dr$$

$$= 4\pi A^2 \int_0^\infty r^2 e^{-2\mu r}\, dr = 4\pi A^2 \frac{2!}{(2\mu)^3} = A^2\pi\cdot\frac{1}{\mu^3}$$

$$\Rightarrow E(\mu) = \frac{4\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{1}{4\mu}-\frac{1}{2\mu}\right)-\hbar c\alpha_f\frac{1}{4\mu^2}\right)}{\frac{1}{\mu^3}}$$

$$= \frac{\hbar^2}{2m}\mu^2 - \hbar c\alpha_f\mu$$

$$E'(\mu_0) = 2\frac{\hbar^2}{2m}\mu_0 - \hbar c\alpha_f \overset{!}{=} 0 \quad\Rightarrow\quad \mu_0 = \frac{\hbar c\alpha_f}{\frac{\hbar^2}{m}} = \frac{1}{\hbar}c\alpha_f m \quad ✓$$

$$E(\mu_0) = \frac{1}{2}mc^2\alpha_f^2 - c^2\alpha_f^2 m = -\frac{1}{2}mc^2\alpha_f^2 = -13{,}606\,\text{eV} \quad \hat{=}\ E_0$$

$$\langle\varphi|\varphi\rangle \overset{!}{=} 1 = A^2\pi\cdot\frac{1}{\mu^3} \quad\Rightarrow A = \sqrt{\frac{\mu^3}{\pi}} \xrightarrow{\mu=\mu_0} \sqrt{\frac{1}{\pi}\frac{1}{\hbar^3}c^3\alpha_f^3 m^3} = 1{,}466\cdot 10^{15} \quad ✓$$

b) $$\langle r^2\rangle = \int_0^\infty\int_0^\pi\int_0^{2\pi}\frac{\mu^3}{\pi}e^{-2\mu r}\, r^2\, \overbrace{r^2\sin(\vartheta)}\, d\varphi\, d\vartheta\, dr = 4\pi\frac{\mu^3}{\pi}\int_0^\infty e^{-2\mu r} r^4\, dr = 4\mu^3\frac{4!}{(2\mu)^5}$$

$$= \frac{3}{\mu^2} \xrightarrow{\mu=\mu_0} = 3\hbar^2\cdot\frac{1}{c\alpha_f m} = 8{,}4\cdot 10^{-21}\,\text{m}^2$$

$$\sqrt{\langle r^2\rangle} = 9{,}166\cdot 10^{-11}\,\text{m} = 0{,}9166\,\text{Å} > 0{,}5298\,\text{Å} = a_B \quad ✓$$

$$\frac{0{,}5298}{0{,}9166} = 57{,}8\,\% \qquad \text{bzw.} \qquad \frac{0{,}9166-0{,}5298}{0{,}9166} = 42{,}2\,\%$$

H 21

a) $$Sp(A)+Sp(B) = \left(\sum_{i=1}^n a_{ii}\right)+\left(\sum_{i=1}^n b_{ii}\right) = \sum_{i=1}^n (a_{ii}+b_{ii}) = Sp(A+B)$$

b) $$Sp(AB) = \sum_{i=1}^n\sum_{j=1}^m a_{ij}b_{ji} = \sum_{i=1}^n\sum_{j=1}^m b_{ji}a_{ij} = \sum_{j=1}^m\sum_{i=1}^n b_{ji}a_{ij} = Sp(BA) \quad ✓$$

c) $$Sp(\mathcal{A}) = \sum_{i=1}^n\sum_{j=1}^n\sum_{k=1}^n u^+_{ij}a_{jk}u_{ki} \overset{b)}{=} \sum_{j=1}^n\sum_{k=1}^n\underbrace{\left(\sum_{i=1}^n u_{ki}u^+_{ij}\right)}_{\delta_{kj}}a_{jk} = \sum_{j=1}^n a_{jj} = Sp(A) \quad ✓$$