Universität Bielefeld Fakultät für Physik	Theoretische Physik II SS 2020	Prof. Dr. Jürgen Schnack jschnack@uni-bielefeld.de

Aufgabenblatt 13: Abgabe 06.07.2020

13.1 Ritzsches Variationsverfahren

Der Hamiltonoperator eines eindimensionalen anharmonischen Oszillators habe die folgende Form:

$$\underset{\sim}{H} \quad = \quad \frac{\underset{\sim}{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}\ m\omega^2 \underset{\sim}{x}^2 + \lambda\, \underset{\sim}{x}^4 \ . \tag{1}$$

Bestimmen Sie approximativ die Grundzustandsenergie mit der Variationswellenfunktion

$$\phi(x) \quad = \quad c \exp\left\{-\alpha x^2\right\} \ , \tag{2}$$

die vom zu variierenden Parameter α abhängt.

a. Bestimmen Sie zuerst die Normierungskonstante.

b. Leiten Sie aus der notwendigen Bedingung die zu lösende Differentialgleichung ab.

c. Diese DGL kann man analytisch mittels Mathematica oder ähnlicher Programme lösen. Allerdings ist schwer zu sehen, welche die richtige Lösung ist.

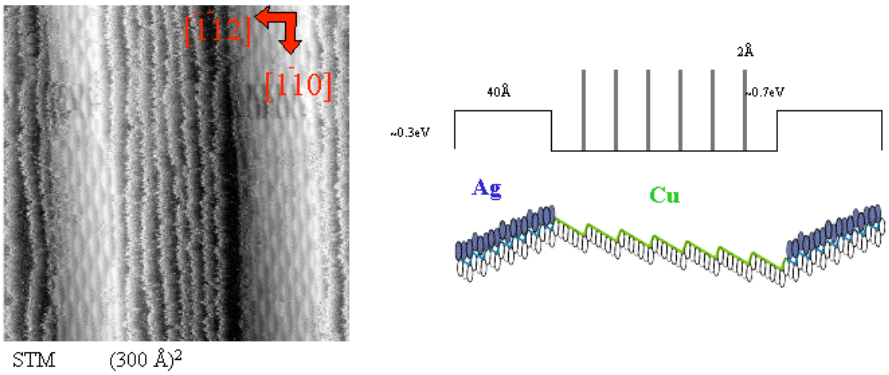
   `FullSimplify[Solve[a x^3 - b x - c == 0, x], Assumptions -> {a > 0, b > 0, c == 0}]` verrät Ihnen, welches die richtige Lösung ist.

d. Geben Sie α und die Energie formelmäßig an. Mathematica-Notebook wäre klasse.

e. Geben Sie an, gegen welchen Wert die Energie für $\lambda \to 0$ geht?

13.2 Potentialbarriere (Zusatzpunkte möglich)

Vorwort: In verschiedenen quantenmechanischen Systemen lassen sich quasi-eindimensionale Potentialtöpfe erzeugen. Ein Beispiel ist in der Graphik dargestellt. Sie zeigt links die Rastertunnelmikroskopaufnahme einer Silber-Kupfer-Silber-Oberfläche (Dissertation Andreas Bachmann, Universität Osnabrück, urn:nbn:de:gbv:700-2002111519), bei der die Silberstreifen wie unendlich hohe Potetialwände wirken. Die dazu senkrechten Komponenten der Wellenfunktion verhalten sich so, als sei das System eindimensional. Die Stufen der Kupferoberfläche wirken innerhalb des Potentialtopfes wie kleine Barrieren (rechter Teil der Graphik).



Problem: Wir reduzieren das physikalische Problem im folgenden auf das eines Teilchens, das zwischen zwei ideal reflektierenden Wänden eingesperrt ist, sich also in einem unendlich hohen Kastenpotential, d.h. im Intervall $[0, L]$, bewegt. Innerhalb des Kastenpotentials befinde sich eine Potentialbarriere. Das System wird durch den Hamiltonoperator $\underset{\sim}{H} = \underset{\sim}{T} + \underset{\sim}{V}$ beschrieben. Dabei ist $\underset{\sim}{V}$ das Potential der Barriere. Der Einfluß der unendlich hohen Potentialwände wird wie gehabt durch die Randbedingung $\langle\, 0 \,|\, \Psi \,\rangle = \langle\, L \,|\, \Psi \,\rangle = 0$ modelliert.
Zur physikalischen Beschreibung des Systems sind die Eigenwerte und Eigenvektoren von $\underset{\sim}{H}$

$$\underset{\sim}{H} \,|\, \phi_n \,\rangle \;\; = \;\; \left(\underset{\sim}{T} + \underset{\sim}{V}\right) \,|\, \phi_n \,\rangle = E_n \,|\, \phi_n \,\rangle \;. \tag{3}$$

nötig. Zur Lösung der Aufgabe geht man zweckmäßigerweise zu dimensionslosen Größen über, indem man alle Längen in Vielfachen von L und die Energien in Vielfachen von $\hbar^2/(2mL^2)$ angibt. Damit lautet die zeitunabhängige Schrödingergleichung

$$\langle\, \eta \,|\, \underset{\sim}{h} \,|\, \phi_n \,\rangle \;\; = \;\; \left(-\frac{\partial^2}{\partial\, \eta^2} \;+ v(\eta)\right) \langle\, \eta \,|\, \phi_n \,\rangle = \epsilon_n \langle\, \eta \,|\, \phi_n \,\rangle \;. \tag{4}$$

Dabei gilt

$$x = \eta L \;, \quad \underset{\sim}{h} = \frac{\underset{\sim}{H}}{\hbar^2/(2mL^2)} \;, \quad v(\eta) = \frac{V(\eta L)}{\hbar^2/(2mL^2)} \;, \quad \epsilon_n = \frac{E_n}{\hbar^2/(2mL^2)} \;. \tag{5}$$

Die Eigenwertgleichung (4) kann man im Allgemeinen nicht geschlossen lösen, d.h. man muß sie numerisch lösen.

Aufgabenstellung:
Machen Sie sich zuerst die dimensionslose Schrödingergleichung (4) klar. Die Eigenzustände des ungestörten Hamiltonoperators lauten in den dimensionslosen Größen

$$\langle \eta \,|\, \psi_n \rangle \;=\; \sqrt{2}\sin(n\pi\eta)\ . \tag{6}$$

Bestimmen Sie mit Hilfe des zur Verfügung gestellten Mathematica-Notebooks die Energieeigenwerte und die zugehörigen Eigenfunktionen des Grundzustandes sowie des ersten angeregten Zustandes mittels approximativer Diagonalisierung.
Die Potentialbarriere sei in unserem Fall durch

$$v(\eta) \;=\; \begin{cases} 50 & \text{für } 0.45 \le \eta \le 0.55 \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \tag{7}$$

gegeben.
Machen Sie sich dazu klar, wie der Hamiltonoperator mit Hilfe der ersten 20 Eigenzustände des ungestörten Kastenpotentials dargestellt wird. Bestimmen Sie dann die Eigenwerte und Eigenvektoren der Matrix $\langle \psi_m \,|\, \underset{\sim}{h} \,|\, \psi_n \rangle$ mit dem Notebook.

a. Erstellen Sie eine Tabelle, in der Sie die approximativen Grundzustandsenergien für die Potentialhöhen 50 und 100 für jeweils 20 bzw. 30 Basiszustände angeben (4 Punkte).

b. In einer Graphik des Notebooks wird die Grundzustandswellenfunktion ohne Potentialbarriere $\langle \eta \,|\, \psi_1 \rangle$ und die Grundzustandswellenfunktion mit Potentialbarriere $\langle \eta \,|\, \phi_1 \rangle$ dargestellt und in einer zweiten Graphik die entsprechenden Wellenfunktionen für die ersten angeregten Zustände.

   Warum wird der erste angeregte Zustand nicht so stark modifiziert wie der Grundzustand (1 Punkt)?

c. Wie würde die approximative Grundzustandsenergie in erster Ordnung Störungstheorie für die beiden Potentialhöhen lauten (2 Punkte)?

d. Begründen Sie, warum für eine feste Potentialhöhe die Approximationen der Grundzustandsenergien die folgende Relation erfüllen: E(1. Ordnung Störungstheorie) $>$ E(Approx. Diagonalisierung mit den untersten 20 Zuständen) $>$ E(Approx. Diagonalisierung mit den untersten 30 Zuständen). Dafür bekommen Sie 3 Extrapunkte!