1. Man berechne mit dem RITZschen Variationsverfahren näherungsweise die Grundzustandsenergie eines harmonischen Oszillators mit der folgenden Versuchswellenfunktion

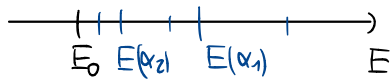
$$\varphi(x) = \begin{cases} A\left(1 - \dfrac{|x|}{a}\right) & |x| < a \\ 0 & |x| > a \end{cases}$$

Hinweis: Verwenden Sie partielle Integration, um die Unendlichkeit der 2. Ableitung der Versuchswellenfunktion an der Stelle $x = 0$ zu "umgehen".

Ritzsches Variationsverfahren

Idee: Die Grundzustandsenergie E_0 eines beliebigen Hamiltonoperators kann nach oben abgeschätzt werden durch

$$E_0 \leq \frac{\langle \psi_\alpha | H | \psi_\alpha \rangle}{\langle \psi_\alpha | \psi_\alpha \rangle} \equiv E(\alpha),$$



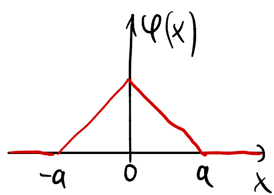
wobei $|\psi_\alpha\rangle$ ein beliebiger Testzustand ist, der parametrisch von α abhängt.

$\Rightarrow$ Ziel: Minimiere $E(\alpha)$, um E_0 abzuschätzen

$\rightarrow$ je allgemeiner d. Ansatz f. $|\psi_\alpha\rangle$ ist, desto besser ist die Abschätzung

Hier: harmonischer Oszillator

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 \hat{x}^2 \equiv \hat{T} + \hat{V}$$



Zunächst normieren wir die Testfunktion $|\varphi\rangle$:

$$1 \overset{!}{=} \langle \varphi | \varphi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, \varphi_A(x)^* \varphi_A(x)$$

$$\overset{\text{Symmetrie}}{=} 2 \int_0^\infty dx\, \varphi_A(x)^2 = 2A^2 \int_0^a dx \left(1 - \frac{x}{a}\right)^2$$

$$= 2A^2 \; \frac{1}{3} \left(1-\frac{x}{a}\right)^3 (-a)\Big|_0^a$$

$$= \frac{2}{3} A^2 a \quad \Rightarrow \quad A = \sqrt{\frac{3}{2a}} \text{ oBdA}$$

$\Rightarrow$ es verbleibt ein Parameter : a.

$$\varphi_a(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{3}{2a}} \left(1 - \frac{|x|}{a}\right) & \text{f. } |x| \leq a \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

$$\Rightarrow \langle \hat{T} \rangle_a = \int_{-\infty}^{\infty} dx \; \varphi_a(x) \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\right) \varphi_a(x)$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m} \int_{-a}^{a} dx \; \varphi_a(x) \frac{d^2}{dx^2} \varphi_a(x)$$

Problem: φ_a ist bei $x=0$ nicht differenzierbar.

ABER: für alle $x \neq 0$:

Für $0 < x < a$:

$$\frac{d}{dx}\varphi_a(x) = \sqrt{\frac{3}{2a}} \frac{d}{dx}\left(1-\frac{x}{a}\right) = \left(-\frac{1}{a}\right) \cdot \sqrt{\frac{3}{2a}}$$

Für $-a < x < 0$:

$$\frac{d}{dx}\varphi_a(x) = \frac{d}{dx}\left(1+\frac{x}{a}\right) = \frac{1}{a} \cdot \sqrt{\frac{3}{2a}} = -\varphi_a(-x)$$

$\Rightarrow$ φ_a' ist antisymmetrisch

Nutze jetzt partielle Integration

$$\langle \hat{T} \rangle_a = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\underbrace{\varphi_a(x)\,\varphi_a'(x)\Big|_{-a}^{a}}_{=0} - \int_{-a}^{a} dx \left(\varphi_a'(x)\right)^2 \right)$$

$$\overset{\text{Symmetrie}}{=} +\frac{\hbar^2}{2m}\, 2 \int_{0}^{a} dx \left(\varphi_a'(x)\right)^2$$

← $x=0$ ist eine Nullmenge bzgl. des Integrationsmaßes → trägt nicht bei

$$= \frac{\hbar^2}{m} \int_0^a dx\, \frac{3}{2a^3} = \frac{\hbar^2}{2m}\,\frac{3}{a^2}$$

$$\langle \hat{V} \rangle_a = \frac{1}{2} m\omega^2 \int_{-a}^{a} dx\, x^2\, \varphi_a(x)^2$$

$$\overset{\text{Symm.}}{=} m\omega^2 \int_0^a dx\, x^2 \left(1-\frac{x}{a}\right)^2 \frac{3}{2a}$$

$$= \frac{m\omega^2 a^2}{20}$$

$$\Rightarrow \quad E(a^2) = \langle \hat{T}\rangle_a + \langle \hat{V}\rangle_a = \frac{\hbar^2}{2m}\,\frac{3}{a^2} + \frac{m\omega^2 a^2}{20}$$

Minimiere bzgl. a^2

$$\frac{dE}{da^2} = -\frac{\hbar^2}{2m}\,\frac{3}{(a^2)^2} + \frac{m\omega^2}{20} = 0$$

$$\Leftrightarrow \quad a^2 = \sqrt{30}\,\frac{\hbar}{m\omega}$$

$$\Rightarrow \quad E_{min} = \frac{\sqrt{30}}{10}\,\hbar\omega \simeq 0{,}548\,\hbar\omega > \frac{1}{2}\hbar\omega = E_0$$

3. Ein eindimensionaler harmonischer Oszillator (Eigenfrequenz ω) befinde sich zur Zeit $t = -\infty$ im Grundzustand $|u_0\rangle$. Zu diesem Zeitpunkt wird die pulsförmige Störung

$$V(t) = -V_0 \, \mathrm{e}^{-\alpha t^2} \, (\hat{b} + \hat{b}^\dagger) \qquad (V_0, \alpha > 0, \text{ const.})$$

eingeschaltet (mit $\hat{b}^\dagger, \hat{b}$ - Erzeugungungs- bzw. Vernichtungsoperatoren; α-const.)
Finden Sie in *erster* Ordnung der zeitabhängigen Störungstheorie für $t \to \infty$:

a) die Übergangswahrscheinlichkeiten $w_{0\to n}$ in Zustände $|u_n\rangle$ (des ungestörten Oszillators; $n \neq 0$)

b) die Verweilwahrscheinlichkeit $w_{0\to 0}$ des Oszillators im Grundzustand.
Hinweis: Lösen Sie diese Teilaufgabe, ohne auf die zweite Ordnung Störungstheorie zurückzugreifen!

Zeitabhängige Störung theorie

Betrachte zeitabh. Störung $\hat{V}(t)$: $\hat{H}(t) = \hat{H}_0 + \hat{V}(t)$

ZASG bzgl. $\hat{H}_0$ sei gelöst:

$i\hbar \partial_t |u_n(t)\rangle = \hat{H}_0 |u_n(t)\rangle$ mit $\hat{H}_0 |u_n(t_0)\rangle = E_n |u_n(t_0)\rangle$

$$\Rightarrow \quad |u_n(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} E_n (t-t_0)} |u_n(t_0)\rangle$$
$$= e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 (t-t_0)} |u_n(t_0)\rangle$$
$$\equiv U_0(t, t_0) |u_n(t_0)\rangle$$ $\rightarrow$ Zustand u_n bleibt erhalten

Nun betrachte ZASG bzgl. $\hat{H}(t)$ und die Störung sei zu $t = t_0$ eingeschalten worden und System werde in Zustand $|u_n(t_0)\rangle$ präpariert:

$$i\hbar \partial_t |u_n(t)\rangle = \hat{H}(t) |u_n(t)\rangle$$

$\Rightarrow$ bei $t > t_0$ ist Zustand in Überlagerung aus Eigenzuständen von H_0

$$|u_n(t)\rangle = \sum_m c_m(t)\,|u_m(t_0)\rangle$$

Mit Übergangs-WS:

$$W_{n\to m}(t) = |c_m(t)|^2 = |\langle u_m(t_0)|u_n(t)\rangle|^2 \qquad (*)$$

Wechselwirkungsbild:

$$|\psi(t)\rangle = \underset{\substack{\uparrow\\ \text{bekannt}}}{\hat{U}_0(t,t_0)}\,|\psi^w(t)\rangle \Leftrightarrow |\psi^w(t)\rangle = \hat{U}_0(t_0,t)\,|\psi(t)\rangle$$

führt auf neue ZASG bzgl. $\hat{V}(t)$:

$$i\hbar\,\partial_t|\psi^w(t)\rangle = \hat{V}^w(t)\,|\psi^w(t)\rangle, \quad \hat{V}^w(t) = \hat{U}_0(t,t_0)^\dagger\,\hat{V}(t)\,\hat{U}_0(t,t_0)$$

mit Zeitentwicklungsoperator

$$|\psi^w(t)\rangle = \hat{U}^w(t,t_0)\,|\psi^w(t_0)\rangle$$

In 1. Ordnung Störungstheorie

$$U^w(t,t_0) \simeq \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} dt'\,\hat{V}^w(t')$$

Damit wird $(*)$ zu

$$W_{m\to n}(t) = |\langle u_n(t_0)|\,\hat{U}_0(t,t_0)\,|u_m^w(t)\rangle|^2 = |\langle u_n^w(t)\,|u_m^w(t)\rangle|^2$$

Hier ist: $H_0 = \hbar\omega\left(\hat b^\dagger \hat b + \frac{1}{2}\right)$, $\hat V = -V_0\, e^{-\alpha t^2}\left(\hat b + \hat b^\dagger\right)$

$t_0 = -\infty$, $|u_m(t_0)\rangle = |0\rangle$

Suche WS: $W_{0\to n}(t)$.

In 1. Ordnung Störungstheorie ist

$$|u_m^\omega(t)\rangle = U^\omega(t,t_0)\,|u_m^\omega(t_0)\rangle \underset{\uparrow}{=} U^\omega(t,t_0)\,|u_m(t_0)\rangle$$

$$|u_m(t_0)\rangle = \hat U(t_0,t_0)\,|u_m^\omega(t_0)\rangle = |u_m^\omega(t_0)\rangle$$

$$\simeq |u_m(t_0)\rangle - \frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} dt'\; e^{\frac{i}{\hbar}H_0(t'-t_0)}\, \hat V(t')\, e^{-\frac{i}{\hbar}H_0(t'-t_0)} \underbrace{|u_m(t_0)\rangle}_{=|0\rangle}$$

$$= |0\rangle + \frac{i}{\hbar}V_0 \int_{-\infty}^{t} dt'\; e^{-\alpha t'^2}\, e^{-\frac{i}{\hbar}E_0(t'-t_0)}\, \underbrace{e^{\frac{i}{\hbar}\hat H_0(t'-t_0)}\underbrace{\left(\hat b + \hat b^\dagger\right)|0\rangle}_{=|1\rangle}}_{=e^{\frac{i}{\hbar}E_1(t'-t_0)}|1\rangle}$$

$$= |0\rangle + \frac{i}{\hbar}V_0\, e^{\frac{i}{\hbar}t_0\overbrace{(E_0-E_1)}^{=-\hbar\omega}} \int_{-\infty}^{t} dt'\; e^{-\alpha t'^2 + \frac{i}{\hbar}t'\overbrace{(E_1-E_0)}^{=\hbar\omega}}\,|1\rangle$$

$$= |0\rangle + \frac{i}{\hbar}V_0\, e^{-i\omega t_0}\int_{-\infty}^{t} dt'\, e^{-\alpha t'^2 + i\omega t'}\,|1\rangle$$

Damit

$$W_{0\to n}(t) = \left|\langle u_n(t_0)|\, e^{-\frac{i}{\hbar}\hat H_0(t-t_0)}\, |u_0^\omega(t)\rangle\right|^2$$

$$= \underbrace{\left|e^{-\frac{i}{\hbar}E_n(t-t_0)}\right|^2}_{=1}\, \left|\langle n|u_0^\omega(t)\rangle\right|^2$$

$$\ldots = \left| \delta_{0n} + \frac{i}{\hbar} V_0 e^{-i\omega t_0} \int_{-\infty}^{t} dt' e^{-\alpha t'^2 + i\omega t'} \delta_{n1} \right|^2$$

$$= \delta_{0n} + \frac{V_0^2}{\hbar^2} \underbrace{\left| e^{-i\omega t_0} \right|^2}_{=1} \left| \int_{-\infty}^{t} dt' e^{-\alpha t'^2 + i\omega t'} \right|^2 \delta_{n1}$$

Für $t \to \infty$ ist das Integral:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dt' e^{-\alpha' t'^2 + i\omega t'} \underset{\substack{\uparrow \\ \text{Gaußintegral}}}{=} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} e^{-\frac{\omega^2}{4\alpha}}$$

$\Rightarrow$ Für $n \neq 0$

$$W_{0\to n}(t \to \infty) \cong \frac{V_0^2}{\hbar^2} \delta_{n1} \frac{\pi}{\alpha} e^{-\frac{\omega^2}{2\alpha}}$$

also nur Übergänge in ersten Angeregten Zustand

b) WS für Übergang $0 \to 0$ ist

$$W_{0\to 0} = 1 - \sum_{n=1}^{\infty} W_{0\to n}$$

$$= 1 - \left(\frac{V_0}{\hbar}\right)^2 \frac{\pi}{\alpha} e^{-\frac{\omega^2}{2\alpha}}$$