Quantenmechanik II, Serie 1.

FS 2010

1. Die Abbildung Ad_H und ihre Inverse

Sei $\mathcal{B}(\mathcal{H})$ die C^*-Algebra der beschränkten Operatoren über einem Hilbertraum $\mathcal{H}$. Wir definieren die Unterräume $\mathcal{S} := \{A \in \mathcal{B}(\mathcal{H}) \,|\, A = A^*\}$ und $\mathcal{A} := \{A \in \mathcal{B}(\mathcal{H}) \,|\, A = -A^*\}$. In der Vorlesung wurde für $H \in \mathcal{S}$ der Operator

$$\mathrm{Ad}_H \,:\, \mathcal{B}(\mathcal{H}) \to \mathcal{B}(\mathcal{H})$$

durch

$$\mathrm{Ad}_H(A) := [H,\, A]$$

definiert.

i. Zeigen Sie, dass $\mathcal{B}(\mathcal{H}) = \mathcal{S} \oplus \mathcal{A}$ gilt. Zeigen Sie weiter, dass

$$\begin{aligned} \mathrm{Ad}_H \,&:\, \mathcal{S} \to \mathcal{A}\,, \\ \mathrm{Ad}_H \,&:\, \mathcal{A} \to \mathcal{S} \end{aligned}$$

gilt.

Sei nun $\Delta \subset \sigma(H)$ eine vom Rest des Spektrum isolierte Teilmenge des Spektrums von H. Weiter sei P_Δ der dazugehörige Spektralprojektor. Wir setzen $\overline{P_\Delta} := \mathbb{1} - P_\Delta$ und definieren für $A \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$

$$\begin{aligned} A_d &:= P_\Delta A P_\Delta + \overline{P_\Delta} A \overline{P_\Delta}\,, \\ A_{od} &:= P_\Delta A \overline{P_\Delta} + \overline{P_\Delta} A P_\Delta\,. \end{aligned}$$

Ähnlich wie oben induziert dies eine eindeutige Zerlegung von $\mathcal{B}(\mathcal{H}) = \mathcal{B}(\mathcal{H})_d \oplus \mathcal{B}(\mathcal{H})_{od}$.

ii. Zeigen Sie, dass

$$\begin{aligned} \mathrm{Ad}_{H_d} \,&:\, \mathcal{B}(\mathcal{H})_d \to \mathcal{B}(\mathcal{H})_d\,, \\ \mathrm{Ad}_{H_d} \,&:\, \mathcal{B}(\mathcal{H})_{od} \to \mathcal{B}(\mathcal{H})_{od}\,, \\ \mathrm{Ad}_{H_{od}} \,&:\, \mathcal{B}(\mathcal{H})_{od} \to \mathcal{B}(\mathcal{H})_d\,, \end{aligned} \tag{1}$$

gilt.

iii. Die Abbildung Ad_H hat im Allgemeinen keine Inverse, da Ad_H auf denjenigen Operatoren verschwindet, die mit H kommutieren. Falls jedoch $\mathrm{Ad}_{H_d}(A_{od}) \neq 0$, kann die Abbildung wegen (1) invertiert werden. Wir setzen

$$\mathrm{Ad}_{H_d}^{-1}(A_{od}) := \int\!\!\int \frac{1}{\lambda - \lambda'}\, \mathrm{d}E_{H_d}(\lambda) A_{od}\, \mathrm{d}E_{H_d}(\lambda')\,.$$

Zeigen Sie, dass diese Abbildung das Gewünschte leistet.

2. Projektionsmethode von Feshbach

i. Lesen Sie das Kapitel 7.2 im Skript: Die Projektionsmethode von Feshbach.

Ziel dieser Aufgabe ist, es die Gleichung (62) iterativ zu lösen. Sei f eine stetig differenzierbare reelle Funktion auf dem Interval $I := (x_0 - \delta,\, x_0 + \delta)$, $\delta > 0$. Falls die Gleichung $f(x) = 0$ genau eine Lösung auf dem Interval I hat, und falls f' nirgends gleich null ist, so kann die Lösung iterativ mit der Newton Methode gesucht werden. Sei

$$x_{n+1} := x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}\,, \tag{2}$$

dann konvergiert die Folge $\{x_n\}_{n\geq 0}$ gegen das gesuchte x. Die Konvergenzgeschwindigkeit ist unter obigen Annahmen mindestens quadratisch.

ii. Vergewissern Sie sich, dass Sie die Definition (2) verstehen, ohne die Konvergenzfrage zu diskutieren.

Sei nun E_0 ein isolierter, nicht entarteter Eigenwert zum Hamilton Operator H_0. Sei weiter $H := H_0 + \varepsilon V$, wobei V eine (Kato-) kleine Störung mit dem Störungsparameter ε. Weiter sei u der Eigenvektor zum Eigenwert E_0, i.e., $H_0 u = E_0 u$. Die Gleichung (62) im Skript lautet dann

$$E = E_0 + \varepsilon\langle u,\, Vu\rangle + \varepsilon^2\langle (1-P)Vu,\, \frac{1}{E - H_0 - \varepsilon V_\perp}(1-P)Vu\rangle\,. \tag{3}$$

iii. Zeigen Sie wie im Skript, dass diese Gleichung für E eine eindeutige Lösung hat für ε klein genug. Benutzen Sie nun das Newton-Verfahren, mit Startpunkt E_0, um diese Gleichung bis Ordnung ε^2 zu lösen. Dazu ist lediglich ein Iterationsschritt nötig. Um das Resultat in eine Potenzreihe in ε zu entwickeln, brauchen wir jedoch noch ein Werkzeug aus der Funktionalanalysis:

Seien A und B zwei lineare Operatoren auf dem Hilbertraum. Beweisen Sie die sogenannte zweite Resolventenformel: Sei z weder im Spektrum von A noch von B, dann gilt

$$\frac{1}{z-A} - \frac{1}{z-B} = \frac{1}{z-B}(A-B)\frac{1}{z-A}\,,$$

insofern die rechte Seite definiert ist. Folgern Sie daraus, dass–wenigstens formal–

$$\frac{1}{E - H_0 - \varepsilon V_\perp} = \frac{1}{E - H_0}\left(\mathbb{1} + \sum_{n=1}^{\infty}\left(\varepsilon V_\perp \frac{1}{E-H_0}\right)^n\right)$$

gilt. Dies ist eine sogenannte Neumann-Reihe in $\varepsilon V_\perp$.

Kombinieren Sie nun das Resultat aus dem Newton-Verfahren mit der Neumann-Entwicklung, um Gleichung (65) im Skipt zu erhalten.

iv. Eine Alternative zum Newton-Verfahren ist die folgende Methode: Wir entwickeln E in eine Potenzreihe in ε, d.h., wir schreiben $E = \sum_{i=0}^{\infty} E_i\varepsilon^i$. Somit können wir Gleichung (62) auch schreiben als

$$E = \sum_{i=0}^{\infty} E_i\varepsilon^i = E_0 + \varepsilon\langle u, Vu\rangle + \varepsilon^2\langle (1-P)Vu,\, \frac{1}{E_0 - H_0 - \varepsilon(V_\perp - \sum_{i=1}^{\infty} E_i\varepsilon^{i-1})}(1-P)Vu\rangle\,.$$

Durch Koeffizientenvergleich können nun die E_i systematisch bestimmt werden. Bestimmen Sie E_2 und E_3, indem Sie eine Neumann-Reihe in $\varepsilon(V_\perp - E_1 - \sum_{i=2}^{\infty} E_i\varepsilon^{i-1})$ ansetzen.

3. Das Doppeltopf-Potential

Wir betrachten den Doppeltopf- (double well potential) Hamiltonoperator

$$\widetilde{H} := -\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} - \frac{\omega^2}{2}x^2 + \frac{g}{4}x^4 \,. \tag{4}$$

Man beachte, dass dieser Operator für $g = 0$ weder demjenigen des harmonischen Oszillators entspricht, noch nach unten beschränkt ist, d.h. es gibt keinen Grundzustand. Sei deshalb $g > 0$, dann dominiert der x^4-Term für grosse x, und der Doppeltopf-Hamiltonoperator hat ein nichtleeres Punktspektrum. Eine störungstheoretische Behandlung des Problems ist wie folgt möglich. Wir reskalieren zuerst die Ortskoordinate $x \mapsto \omega^{-1/2}x$. Somit erhalten wir

$$\widetilde{H} = \omega\left(-\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} - \frac{1}{2}x^2 + \frac{g}{4\omega^3}x^4\right) , \tag{5}$$

Somit ist ω eine globale Konstante, und es genügt, die Terme in der Klammer zu untersuchen. Das Potential $\widetilde{V} := -\frac{1}{2}x^2 + \frac{g}{4\omega^3}x^4$ hat zwei Minima bei $\pm x = \pm\sqrt{\frac{\omega^3}{g}} =: \pm x_0$. Weiter ist es nützlich, das Potential umzudefinieren: Sei nun

$$V := -\frac{1}{2}x^2 + \frac{g}{4\omega^3}x^4 + \frac{\omega^3}{4g} = -\frac{1}{2}x^2 + \frac{1}{4x_0^2}x^4 + \frac{x_0^2}{4} , \tag{6}$$

dann gilt $V(\pm x_0) = 0$. Analog setzen wir $H := -\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + V$. Sei nun $V_\pm(y) := V(\pm x_0 + y)$, dann ist es nicht schwer nachzurechnen, dass

$$V_\pm(y) = y^2 \pm \frac{y^3}{x_0} + \frac{1}{4x_0^2}y^4 \,. \tag{7}$$

Die Potentiale $V_\pm$ sind also die Summe des Potentials eines harmonischen Oszillators und von Störtermen im Parameter x_0^{-1}. Sei nun

$$H_\pm := -\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}y^2} + V_\pm \,. \tag{8}$$

Die Eigenwerte $E_\pm(g,n)$ von $H_\pm$ sind für $x_0^{-1} \ll 1$ approximativ gegeben durch

$$E_\pm(g,n) = E_\pm^0(n) + x_0^{-1}E_\pm^1(n) + x_0^{-2}E_\pm^2(n) + O(x_0^{-3}) , \tag{9}$$

wobei n die Quantenzahl ist, welche die Eigenwerte des hamonischen Oszillators indiziert. Seien $\{\phi_n\}_{n\geq 0}$ die Eigenfunktionen des harmonischen Oszillators, also die Hermiteschen Funktionen.

i. Finden Sie Ausdrücke für $E_\pm^0(n)$, $E_\pm^1(n)$ und $E_\pm^2(n)$, ohne dabei die Integrale mit den Hermiteschen Funktionen explizit zu berechnen. Zeigen Sie weiter, dass $E_+^1(n) = E_-^1(n)$ und $E_+^2(n) = E_-^2(n)$ gilt.

Es ist nicht schwer zu zeigen, dass allgemein $E_+(n) = E_-(n)$ gilt.

ii. Diese störungstheoretische Untersuchung lässt vermuten, dass jedes Energieniveau zweifach entartet ist: Die Eigenfunktionen zu $E_\pm(n)$ werden um $\pm x_0$ konzentriert sein mit $E_+(n) = E_-(n)$. Weshalb kann diese Aussage nicht korrekt sein?

Seien nun $\phi_+(x) = \pi^{-1/4}\mathrm{e}^{-(x-x_0)^2/2}$ und $\phi_-(x) = \pi^{-1/4}\mathrm{e}^{-(x+x_0)^2/2}$ die Eigenfunktionen des Grundzustandes in nullter Ordnung.

iii. Argumentieren Sie, dass der approximative Grundzustand von H gleich $\frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_+ + \phi_-)$ ist.

iv. Wir versuchen nun, wenigstens heuristisch, die Energieaufspaltung zwischen $\frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_+ + \phi_-)$ und $\frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_+ - \phi_-)$ zu bestimmen. Seien $H_+^0 := -\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + (x - x_0)^2$, $H_-^0 := -\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + (x + x_0)^2$, $W_+ := \frac{1}{x_0}(x - x_0)^3 + \frac{1}{4x_0^2}(x - x_0)^4$ und $W_- := -\frac{1}{x_0}(x + x_0)^3 + \frac{1}{4x_0^2}(x + x_0)^4$, sodass $H = H_+^0 + W_+ = H_-^0 + W_-$ gilt. Indem wir Matrixelemente betrachten, erhalten wir:

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} \langle\phi_+, H\phi_+\rangle & \langle\phi_+, H\phi_-\rangle \\ \langle\phi_-, H\phi_+\rangle & \langle\phi_-, H\phi_-\rangle \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} \langle\phi_+, H_+^0\phi_+\rangle & \langle\phi_+, H_-^0\phi_-\rangle \\ \langle\phi_-, H_+^0\phi_+\rangle & \langle\phi_-, H_-^0\phi_-\rangle \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \langle\phi_+, W_+\phi_+\rangle & \langle\phi_+, W_-\phi_-\rangle \\ \langle\phi_-, W_+\phi_+\rangle & \langle\phi_-, W_-\phi_-\rangle \end{pmatrix} + O(\frac{1}{x_0^2}) \\ &= \begin{pmatrix} 1 + \delta_d & \delta_{od} \\ \delta_{od} & 1 + \delta_d \end{pmatrix} + O(\frac{1}{x_0^2}) , \end{aligned} \tag{10}$$

wobei nun δ_d und δ_{od} Korrekturterme sind:

$$\begin{aligned} \delta_d &= \langle\phi_+, W_+\phi_+\rangle \\ \delta_{od} &= \langle\phi_-, W_+\phi_+\rangle + \langle\phi_-, H_+^0\phi_+\rangle . \end{aligned}$$

Zeigen Sie, dass diese Korrekturterme der Ordnung $O(\mathrm{e}^{-a\omega^3/g})$, $a \simeq 1$, sind.

In der Tat kann man zeigen, dass δ_{od} negativ ist. Berechnen Sie nun die approximativen Energien des Grundzustandes $\frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_+ + \phi_-)$ und des ersten angeregten Zustandes $\frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_+ - \phi_-)$, indem Sie die Matrix (10) diagonalisieren.

Bekannt ist folgende Aussage: Sei $E(g, 0)$ die exakte Grundzustandsenergie des Hamiltonoperators $H = \frac{p^2}{2} + V$, dann gilt

$$E(g, 0) = E_+(g, 0) + \Delta(g, 0) ,$$

wobei $\Delta(g, 0)$ ein Fehlerterm mit der folgenden Eigenschaft ist: $\Delta(g, 0) \not\equiv 0$ ist eine unendlich oft differenzierbare Funktion in g, doch ihre Taylorreihe um $g = 0$ ist identisch null.

v. Geben Sie ein Beispiel einer Funktion, die glatt ist, jedoch eine verschwindenden Taylorreihe um null besitzt.

vi. Geben Sie eine qualitative Erklärung für den Term $\Delta(g, 0)$.