haben also ein hierarchisches System von Schrödinger-Glgn.

Lösung: bei $m=0$ anfangen, dann $m=1$, etc ...

$m=0$: $\hat{H}_0 |\psi_n\rangle^{(0)} = E_n^{(0)} |\psi_n\rangle^{(0)}$ ok (nach Voraussetzung)

$m=1$: $$\begin{cases} \hat{H}_0 |\psi_n\rangle^{(1)} + \hat{H}_1 |\psi_n\rangle^{(0)} = E_n^{(0)} |\psi_n\rangle^{(1)} + E_n^{(1)} |\psi_n\rangle^{(0)} \\ {}^{(0)}\langle \psi_n | \psi_n\rangle^{(1)} + {}^{(1)}\langle\psi_n|\psi_n\rangle^{(0)} = 0 \end{cases}$$

2. Glg $\Rightarrow$ $\langle\varphi_n|\psi_n\rangle^{(1)}$ ist rein imaginär.

1. Glg. von links mit $\langle\varphi_p|$ multiplizieren:

$$\Rightarrow (E_{0p} - E_{0n}) \langle\varphi_p|\psi_n\rangle^{(1)} + \langle\varphi_p|\hat{H}_1|\varphi_n\rangle = E_n^{(1)} \underbrace{\langle\varphi_p|\varphi_n\rangle}_{=\delta_{pn}}$$

$$\overset{p=n}{\Rightarrow} \quad E_n^{(1)} = \langle\varphi_n|\hat{H}_1|\varphi_n\rangle \quad \text{, also} \quad E_n \approx E_{0n} + \lambda\langle\varphi_n|\hat{H}_1|\varphi_n\rangle + \ldots$$

$$\overset{p\neq n}{\Rightarrow} \quad \langle\varphi_p|\psi_n\rangle^{(1)} = \frac{\langle\varphi_p|\hat{H}_1|\varphi_n\rangle}{E_{0n} - E_{0p}} \equiv c_{np}^{(1)} \qquad (p\neq n)$$

$\rightarrow$ dies sind die Entwicklungskoeffizienten von $|\psi_n\rangle^{(1)}$ in der Basis der ungestörten EZ:

$$|\psi_n\rangle^{(1)} = \sum_{p=0}^{\infty} |\varphi_p\rangle \underbrace{\langle\varphi_p|\psi_n\rangle^{(1)}}_{\equiv c_{np}^{(1)}} \equiv \sum_{p=0}^{\infty} c_{np}^{(1)} |\varphi_p\rangle$$

es fehlt aber noch $c_{nn}^{(1)}$: Normierungsbed. $\Rightarrow$ $\mathrm{Re}[c_{nn}^{(1)}] = 0$

also ist die Wellenfkt zu dieser Ordnung

$$|\psi_n\rangle \approx \big(1 + i\lambda\, \mathrm{Im}[c_{nn}^{(1)}]\big)|\varphi_n\rangle + \lambda \sum_{p\neq n} \frac{\langle\varphi_p|\hat{H}_1|\varphi_n\rangle}{E_{0n} - E_{0p}} |\varphi_p\rangle + O(\lambda^2)$$

noch frei wählbar. z.B. $=0$.

$m=2$: ... $E_n^{(2)} = \ldots$, $|\psi_n\rangle^{(2)} = \ldots$

usw.

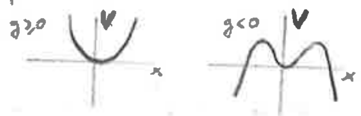
Bem • kann im Prinzip zu beliebigen höheren Ordnungen fortgesetzt werden

• Bsp: s. § 6.3

6.3 Anwendungen; anharmonischer Oszillator (+ Konvergenz der Stö.-Reihe)

Sei der (1d) anharmonische Oszillator definiert durch

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 \hat{x}^2 + g\, \frac{m^2\omega^3}{4\hbar}\, \hat{x}^4$$

()

uns interessieren dessen Eigenzustände und Energieniveaus

$$\hat{H}|\psi_n\rangle = E_n|\psi_n\rangle \;, \quad E_n = ? \qquad (|\psi_n\rangle = ?)$$

Benutzen wir zunächst das (Rayleigh-Ritz) Variationsprinzip (← Kap. 6.1)

→ obere Schranke für E_0

Vari.: $E_0 \leq \langle\varphi|\hat{H}|\varphi\rangle$ für beliebiges $|\varphi\rangle$ $(\langle\varphi|\varphi\rangle = 1)$

Ansatz für $|\varphi\rangle$: Grundzustand $|0\rangle$ des harmonischen Oszillators $\hat{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega_0^2 \hat{x}^2$ (← Kap. 3.6) mit Variationsparameter ω_0

$$E_0 \leq \langle 0|\hat{H}_0|0\rangle + \frac{1}{2} m(\omega^2-\omega_0^2)\langle 0|\hat{x}^2|0\rangle + g\frac{m^2\omega^3}{4\hbar}\langle 0|\hat{x}^4|0\rangle$$

benutze $\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_0}}\,(\hat{a}+\hat{a}^+)$

$$= \frac{\hbar\omega_0}{2} + \frac{1}{2} m(\omega^2-\omega_0^2)\frac{\hbar}{2m\omega_0}\langle 0|(\hat{a}+\hat{a}^+)^2|0\rangle + g\frac{m^2\omega^3}{4\hbar}\frac{\hbar^2}{4m^2\omega_0^2}\langle 0|(\hat{a}+\hat{a}^+)^4|0\rangle$$

benutze $\hat{a}^+|n\rangle = \sqrt{n+1}\,|n+1\rangle$, $\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}\,|n-1\rangle$

$$= \frac{\hbar\omega_0}{2} + \frac{\hbar(\omega^2-\omega_0^2)}{4\omega_0}\cdot \underset{(aa^+)}{1} + g\frac{\hbar\omega^3}{16\omega_0^2}\underset{(aaa^+a^+ \,+\, aa^+aa^+)}{(2\cdot 1 + 1\cdot 1)}$$

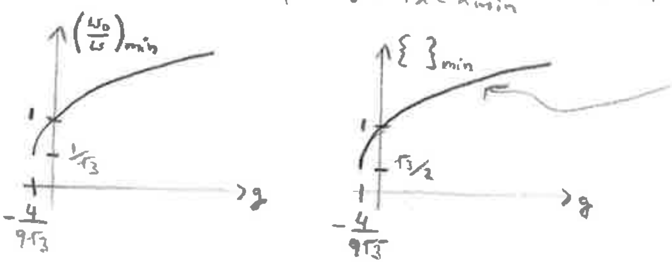
$$= \frac{\hbar\omega}{2}\left\{\frac{\omega_0}{\omega} + \frac{\omega^2-\omega_0^2}{2\omega\omega_0} + \frac{3g}{8}\frac{\omega^2}{\omega_0^2}\right\}$$

minimiere diesen Ausdruck in ω_0

Strategie: $\{\,\} \equiv f\left(\frac{\omega_0}{\omega}, g\right) \equiv f(x,g)$

$0 \overset{!}{=} \{\,\}' = \partial_x f(x,g)$ → kubische Glg ⇝ $x_{1/2/3}$. x_1 reell

$0 \overset{!}{<} \{\,\}'' = \partial_x^2 f(x,g)\big|_{x=x_{min}}$ ✓ ok für x_1

Ergebnis: 

obere Schranke für $E_0(g)$

$\{\,\}_{min} \approx 1 + \frac{3g}{8} - \frac{9g^2}{32} + O(g^3)$

Zwei Anwendungen der (Rayleigh-Schrödinger) <u>Störungstheorie</u> : (← Kap. 6.2)

<u>zum Aufwärmen</u>: Stö. funktioniert.

$$\text{Sei}\quad \hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2 + g\,\frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2$$

$$= \hat{H}_0 + g\,\hat{H}_1 \quad , \ |g| \ll 1 \ , \quad E_n = ?$$

↑ bekannt: harm. osz. (Kapitel 3)

$$\hat{H}_0 |n\rangle = E_{0n} |n\rangle \ , \quad E_{0n} = \hbar\omega\left(n+\tfrac{1}{2}\right)$$

(sehr dummes Bsp, denn wir kennen die <u>exakte</u> Lsg wegen $\hat{H} = \hat{H}_0 \big|_{\omega \to \sqrt{1+g}\,\omega}$)

Kapitel 6.2 : $\quad E_n = E_{0n} + \langle n | g\hat{H}_1 | n\rangle + \mathcal{O}(g^2)$

$\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\hat{a}+\hat{a}^+)$

$$= \hbar\omega\left(n+\tfrac{1}{2}\right) + g\,\tfrac{1}{2}m\omega^2\,\frac{\hbar}{2m\omega}\,\langle n|\underbrace{(\hat{a}+\hat{a}^+)^2}_{\hat{a}\hat{a}+\hat{a}\hat{a}^+ + \hat{a}^+\hat{a} + \hat{a}^+\hat{a}^+}|n\rangle + \mathcal{O}(g^2)$$

$\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}\,|n-1\rangle$
$\hat{a}^+|n\rangle = \sqrt{n+1}\,|n+1\rangle$
$\langle n|m\rangle = \delta_{n,m}$

$$= \hbar\omega\left(n+\tfrac{1}{2}\right) + \frac{g}{4}\hbar\omega\left(0 + (n+1) + n + 0\right) + \mathcal{O}(g^2)$$

$$= \hbar\omega\left(n+\tfrac{1}{2}\right)\left[1 + \frac{g}{2} + \mathcal{O}(g^2)\right]$$

(check : $\sqrt{1+g} \approx 1 + \frac{g}{2} + \mathcal{O}(g^2)$ ✓✓)

Nun wollen wir dieselbe Strategie für ein nicht exakt lösbares Problem anwenden: der <u>anharmonische Oszillator</u>

$$\text{Sei}\quad \hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2 + g\,\frac{m^2\omega^3}{4\hbar}\,\hat{x}^4$$

$$= \hat{H}_0 + g\,\hat{H}_1 \quad , \text{ mit } |g| \ll 1$$

Problem : $\quad \hat{H}|\psi_n\rangle = E_n|\psi_n\rangle \ , \quad E_n = ? \quad (|\psi_n\rangle = ?)$

Ansatz : $\quad |\psi_n\rangle = |n\rangle + \sum_{m=1}^{\infty} g^m |\psi_n\rangle^{(m)}$

$$E_n = E_{0n} + \sum_{m=1}^{\infty} g^m E_n^{(m)}$$

Wie oben schreiben wir $\hat{x}^4 \sim (\hat{a}+\hat{a}^+)^4$

$$\hat{H}_1 = \frac{m^2\omega^3}{4\hbar}\left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^2(\hat{a}+\hat{a}^+)^4$$

$$= \frac{\hbar\omega}{16}\Big[\hat{a}\hat{a}\hat{a}^+\hat{a}^+ + \hat{a}\hat{a}^+\hat{a}\hat{a}^+ + \hat{a}\hat{a}^+\hat{a}^+\hat{a} + \hat{a}^+\hat{a}\hat{a}\hat{a}^+ + \hat{a}^+\hat{a}\hat{a}^+\hat{a} + \hat{a}^+\hat{a}^+\hat{a}\hat{a} + \text{weitere Terme}\Big]$$

damit ist (analog zu oben, $\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}\,|n-1\rangle$ etc)

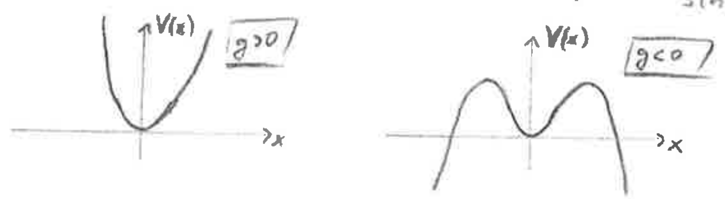
$$E_n^{(1)} = \langle n|\hat{H}_1|n\rangle$$
$$= \frac{\hbar\omega}{16}\left[(n+1)(n+2) + (n+1)^2 + n(n+1) + n(n+1) + n^2 + n(n-1) + 0\right]$$
$$= \frac{3}{8}\hbar\omega\left[n^2 + n + \frac{1}{2}\right]$$

$$\Rightarrow E_n = \hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)\left(1+\frac{3g}{8}\right) + \frac{3g}{8}\hbar\omega n^2 + O(g^2)$$

(wir könnten nun auch höhere Korrekturen, $g^2, g^3, \dots$ berechnen)

Bemerkungen:

- Konvergenz? Stö. scheint nur für tiefe E_n-Zustände zu funktionieren, für $|n\cdot g| \ll 1$
- für $g<0$, kann die Ordnung der E-Zustände ($E_0 \leq E_1 \leq \dots$) zerstört werden? $E_{n+1} \leq E_n$ für $g \leq -\frac{4}{3(n+1)}$



phys. Bild $\longrightarrow$ $g>0$: es existieren Bindungszustände

$g<0$: kein Grundzustand endlicher Energie!

Wellenpaket bei $x=0$ würde tunneln

- für E_0, alles klar: z.B. $|g| = 0.1 \Rightarrow 3\%$ Korrektur

Für präzisere Aussagen über Konvergenz brauchen wir sicherlich eine Berechnung der höheren Korrekturen.

(siehe z.B. Bender, Wu, Phys. Rev. D vol. 7 (1973) S. 1620, §6)

man kann das asymptotische Verhalten bestimmen.

Ergebnis (Zitat): für große m gilt

$$E_0^{(m)} = -\hbar\omega\left(\frac{6}{\pi^2}\right)^{1/2}\left(-\frac{3}{4}\right)^m \frac{\Gamma(m+\frac{1}{2})}{\Gamma(\frac{1}{2})}\left[1 - \frac{95}{72}\frac{1}{m} + O\left(\frac{1}{m^2}\right)\right]$$

((Gammafunktion: $\Gamma(n+1) = n!$ für $n \in \mathbb{N}$.

$\boxed{\Gamma(x+1) = x\cdot\Gamma(x)}$; $\Gamma(x) = \int_0^\infty dt\, t^{x-1} e^{-t}$ für $x \in \mathbb{R}^+$

$\Gamma(\frac{1}{2}) = \sqrt{\pi}$))