[9] Zeitunabhängige Störungstheorie: Variationsverfahren

Variationsverfahren: Approximation der Grundzustandsenergie und des Grundzustandes

Beispiel 1: Betrachtet wird ein Spin–$\frac{1}{2}$–Teilchen dessen räumliche Freiheitsgrade nicht berücksichtigt werden. Der zugehörige Spinhilbertraum $\mathscr{H}_{\text{Spin}} = \mathbb{C}^2$ ist ein 2–dimensionaler komplexer Vektorraum, der mit dem üblichen Skalarprodukt ausgestattet ist. Der betrachtete Hamiltonoperator des Spin–$\frac{1}{2}$–Teilchens lautet

$$\boxed{\mathbf{H} = \frac{\hbar\omega}{\sqrt{3}}\big(\boldsymbol{\sigma}_x + \boldsymbol{\sigma}_y + \boldsymbol{\sigma}_z\big)}$$

wobei $\omega \in \mathbb{R}^+$ angenommen ist und $\boldsymbol{\sigma}_j$ mit $j = 1,2,3$ die Paulimatrizen sind. Verwende weiters die Definitionen $\mathbf{S}_j = \frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\sigma}_j$ mit $j = 1,2,3$ wobei $j = 1 = x$, $j = 2 = y$, $j = 3 = z$ bedeuten und als Orthonormalbasis die Eigenzustände $\{\,|\,m\rangle = |\,\frac{1}{2}, m\rangle\,; m = \pm\frac{1}{2} = \pm\}$ von $\mathbf{S}_z$.

$$\begin{array}{lclclcl}
\boldsymbol{\sigma}_x\,|\,+\rangle & = & (+1)\,|\,-\rangle & \qquad & \boldsymbol{\sigma}_x\,|\,-\rangle & = & (+1)\,|\,+\rangle \\
\boldsymbol{\sigma}_y\,|\,+\rangle & = & (+i)\,|\,-\rangle & & \boldsymbol{\sigma}_y\,|\,-\rangle & = & (-i)\,|\,+\rangle \\
\boldsymbol{\sigma}_z\,|\,+\rangle & = & (+1)\,|\,+\rangle & & \boldsymbol{\sigma}_z\,|\,-\rangle & = & (-1)\,|\,-\rangle
\end{array}$$

1. Bestimme die exakte Grundzustandsenergie E_0, ihre Entartung und den zugehörigen normierten Eigenvektor $|\,w_0\rangle$.

2. Betrachte die folgende Schar von Versuchsvektoren

$$\boxed{\big\{\,|\,u(\alpha)\rangle = |\,+\tfrac{1}{2}\rangle + e^{i\alpha}\,|\,-\tfrac{1}{2}\rangle : \alpha \in [0, 2\pi)\big\}}$$

   und wende das **Variationsverfahren** an um die Grundzustandsenergie und zugehörigen Eigenvektor zu approximieren.

3. Wie gross ist der Fehler zwischen der exakten und der approximierten Grundzustandsenergie?

4. Wie gross ist die Wahrscheinlichkeit dafür, dass man bei einer Messung der Energie des Spin–$\frac{1}{2}$–Teilchens den Messwert E_0 (exakte Grundzustandsenergie) findet, falls sich das Spin–$\frac{1}{2}$–Teilchen in jenem reinen Zustand befindet, der durch das Variationsverfahren bestimmt wurde.

[9] Zeitunabhängige Störungstheorie: Variationsverfahren

Variationsverfahren: Approximation der Grundzustandsenergie und des Grundzustandes

Beispiel 2: Betrachtet wird ein spinloses Teilchen der Masse m, dessen räumliche Freiheitsgrade auf eine Dimension beschränkt sind und das sich im folgenden Potential bewegt

$$V(x) \;=\; \begin{cases} \;\; fx & \ldots \quad x \geq 0 \\ +\infty & \ldots \quad x < 0 \end{cases}$$

wobei $f > 0$ eine positive reelle Konstante ist.
(siehe **Grau** V.7)

1. Wie lautet die zeitunabhängige Schrödingergleichung?

2. Kann die Grundzustandsenergie exakt bestimmt werden?

3. Betrachte die folgende Schar von Versuchsfunktionen

$$\boxed{\left\{ \mathbf{u}(x, \alpha) \;=\; x\, e^{-\alpha x} \;\middle|\; x \in \mathbb{R}_0^+ \;\; ; \; \alpha \in \mathbb{R}^+ \right\}}$$

   und wende das **Variationsverfahren** an um die Grundzustandsenergie und den zugehörigen Eigenvektor zu approximieren.

4. Warum sind diese Versuchsfunktionen geeignet, eine brauchbare Approximation für die Grundzustandsenergie zu liefern?

5. Anleitung: Verwende die Formel

$$\int_0^{+\infty} d\xi \; \xi^n \; e^{-p\xi} \;=\; \tfrac{n!}{p^{n+1}}$$

   wobei $p \in \mathbb{R}^+$ und $n \in \mathbb{Z}_0^+$ angenommen sind.