Fortsetzung Näherungsverfahren

Variationsprinzip

Es gilt $\langle \phi(x) | \hat{H} \phi(x) \rangle \geq E_0$ für jede beliebige, normierte Testfunktion

Variationsrechnung:

Approximation der Wellenfunktion zu E_0

Ansatz: $\Psi_0(x) \approx \phi(x) = \sum_i c_i \cdot f_i(x, \alpha_i)$ allgemein

Speziell:

a) $\phi(x) = \sum_i c_i \cdot f_i(x)$ (lineare Variationsrechnung)

b) nicht-lineare Variationsrechnung

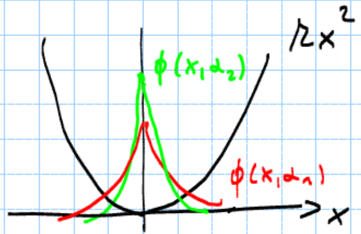
Ansatz $\phi(x) = c_0 \cdot f_0(x, \alpha)$

(Linearkombination $\sum_i c_i f_i(x, \alpha_i)$ abgeschnitten zu $c_0 \cdot f(x, \alpha_0)$)

$\rightarrow$ nur 2 unbekannte Parameter

Bsp.: harmonischer Oszillator

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + k x^2$$



x: Auslenkung aus der Ruhelage

2k: Federkonstante

Ansatz für Näherung z.B. $\phi(x) = c_0 \cdot e^{-\alpha \cdot |x|}$

Normierungskonstante N

unbekannter Parameter α

mit $0 \le x \le \infty$: $|x| > x$ $\rightarrow$ $\phi(x) = N \cdot e^{-\alpha \cdot x}$

$$\phi'(x) = -\alpha N e^{-\alpha x}$$

$$\phi''(x) = \alpha^2 N e^{-\alpha x}$$

Einsetzen in die Schrödingergleichung zeigt, dass $\phi(x)$

die Eigenwertgleichung <u>nicht</u> exakt lösen kann:

$$\hat{H}\,\phi(x) \stackrel{?}{=} E_n \cdot \phi(x) \qquad \text{für alle } x$$

$0 \leq x \leq \infty$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\alpha^2 \cancel{N e^{-\alpha x}} + \lambda x^2 \cancel{N e^{-\alpha x}} \stackrel{?}{=} E_n \cdot \cancel{N e^{-\alpha x}}$$

$$\underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m}\alpha^2 - E_n + \lambda x^2}_{\neq 0 \text{ für beliebige Werte von } x} \neq 0$$

$\Rightarrow$ nicht erfüllbar, d.h. Ansatz $\phi(x) = N e^{-\alpha\cdot|x|}$

kann die Schrödingergleichung nicht exakt lösen!

Näherungslösung: (nicht-lineares Variationsverfahren)

$$E_0 \simeq \min_{\alpha} \{ \langle \phi | H \phi \rangle \} \quad \text{mit der}$$

Nebenbedingung $\langle \phi | \phi \rangle = 1$ (Normierung)

Trick: berechne die Normierungskonstante N

als Funktion von α $\rightarrow$ $N(\alpha)$

-> die Nebenbedingung der Normierung kann über $N(\alpha)$ direkt in die Ansatzfunktion eingesetzt werden.

1. Normierung:

$$1 \overset{!}{=} \langle \phi | \phi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} |\phi|^2 \, dx = \int_{-\infty}^{\infty} N^2 e^{-\alpha \cdot |x| \cdot 2} \, dx$$

Trick: $\int_{-\infty}^{\infty} = \int_{-\infty}^{0} + \int_{0}^{\infty}$ und $\int_{-\infty}^{0} N^2 e^{-\alpha \cdot |x| \cdot 2} = \int_{0}^{\infty} N e^{-\alpha x \cdot 2}$

$$1 \overset{!}{=} \langle \phi | \phi \rangle = 2 \cdot \int_{0}^{\infty} N^2 e^{-2\alpha \cdot x} \, dx$$

$$= 2 N^2 \cdot \frac{-1}{2\alpha} e^{-2\alpha x} \Big|_{0}^{\infty}$$

$$= 2 N^2 \left(0 - \frac{-1}{2\alpha} \right) = \frac{N^2}{\alpha}$$

-> auflösen nach N liefert $N(\alpha) = \sqrt{\alpha}$

$\hookrightarrow \phi(x) = \sqrt{\alpha} \cdot e^{-\alpha|x|}$

α bleibt als letzter unbekannter Parameter, die Normierungsbedingung ist ab hier nun immer erfüllt.

2. Bestimme $\langle \phi | \hat{H} \phi \rangle = E(\alpha)$

$$E(\alpha) = \int_{-\infty}^{\infty} \sqrt{\alpha} \cdot e^{-\alpha|x|} \cdot \underbrace{\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + k x^2 \right)}_{\hat{H}} \underbrace{\sqrt{\alpha}\, e^{-\alpha|x|}}_{\phi(x,\alpha)} \, dx$$

$$= 2 \cdot \int_0^{\infty} \alpha \cdot e^{-\alpha x} \cdot \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + k x^2 \right) e^{-\alpha x} \, dx$$

$$= 2 \cdot \int_0^{\infty} \alpha \cdot e^{-\alpha x} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} (-\alpha)^2 e^{-\alpha x} + k x^2 e^{-\alpha x} \right) dx$$

$$= 2 \cdot \int_0^{\infty} \alpha \, e^{-2\alpha x} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \alpha^2 + k x^2 \right) dx$$

$$= \ldots = \frac{k}{4\alpha^2} - \frac{\hbar^2}{2m} \cdot \alpha = E(\alpha)$$

3. Minimum $E_0 \approx \min_{\alpha} \{ E(\alpha) \}$

(die Nebenbedingung $\langle \phi | \phi \rangle = 1$ ist bereits erfüllt)

$$E(\alpha) = \frac{\lambda}{4\alpha^2} - \frac{\hbar^2}{2m} \cdot \alpha$$

Minimum (Extremum) $\quad \frac{\partial}{\partial \alpha} E(\alpha) \stackrel{!}{=} 0$

$$0 = -2 \cdot \frac{\lambda}{4\alpha^3} - \frac{\hbar^2}{2m}$$

auflösen nach α:

$$\alpha = \pm \sqrt[3]{\frac{-\lambda m}{\hbar^2}}$$

$\rightarrow \alpha = \sqrt[3]{\frac{\lambda m}{\hbar^2}}$ liefert für den Ansatz $\phi(x) = N \cdot e^{-\alpha \cdot |x|}$

das Minimum für $E(\alpha)$, d.h. die

beste Näherungslösung (für diesen Ansatz)

$E_0 \simeq E\left(\alpha = \sqrt[3]{\frac{\lambda m}{\hbar^2}}\right)$ ist dann die jeweils bestmögliche Näherung für E_0.