

Theoretische Physik III - Quantenmechanik (SoSe 2017) -

Übungsblatt 08 (20 Punkte)

Ausgabe 08.06.17 – Abgabe 20.06.17 – Besprechung n.V.

Aufgaben mit Sternchen sind Klausurisomorph

Die ersten beiden Aufgaben sind den sog. *asymptotischen Methoden* gewidmet. Theoretische Physik ohne asymptotische Methoden ist wie Experimentalphysik ohne Pizza im Labor. Schlicht undenkbar ...

Unter einer asymptotischen Entwicklung einer Funktion $f(x)$ zum Entwicklungspunkt x_0 versteht man die Darstellung der Funktion als nicht notwendigerweise konvergente Reihe von Funktionen $\varphi_m(x)$, $m = 1, 2, \dots$ (symbolisch $f(x) = \sum_{m=1}^{\infty} \varphi_m(x)$). Das heißt, die Folge der Partialsummen $S_n(x) := \sum_{m=1}^n \varphi_m(x)$ brauchen nicht unbedingt zu konvergieren, so eine Partialsumme sollten aber in der Nähe von x_0 eine gute Näherungen für den Funktionswert liefern. Präzisiert: sofern

$$f(x) = \sum_m^n \varphi_m(x) + o(\varphi_n(x)), \quad (1)$$

wobei o das Landausche “klein o ”, definiert $h(x) \in o(g(x)) \Leftrightarrow \lim_{x \rightarrow x_0} \left| \frac{h(x)}{g(x)} \right| = 0$, schreibt man $f \sim \sum_{m=1}^{\infty} \varphi_m(x)$ und nennt die rechte Seite die asymptotische Darstellung der Funktion $f(x)$ zum Entwicklungspunkt x_0 . Es gibt dann für jedes x aus dem Definitionsbe- reich von f eine Ordnung n , für die der Approximationsfehler $|f(x) - S_n(x)|$ am kleinsten ist. Hinzufügen weiterer Terme verschlechtert die Approximation. Die Ordnung der besten Approximation ist bei asymptotischen Entwicklungen umso größer, der Fehler i.A. umso kleiner, je näher x dem Entwicklungspunkt x_0 .

▷ Aufgabe 1 (Asymptotische Entwicklung) (8 Punkte)

Die kanonische Zustandssumme eines Teilchens im Potential $V(x) = \frac{x^2}{2} + \frac{g}{4}x^4$ (Skizze?) ist, nach Abspalten eines irrelevanten kinetischen Beitrags, gegeben durch das Integral

$$Z(g) = \int \frac{dx}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{x^2}{2} - \frac{g}{4}x^4}. \quad (2)$$

Offensichtlich konvergiert das Integral für $g \geq 0$, wohingegen es für $g < 0$ divergiert. Kurz: man erwartet, dass $Z(g)$ bei $g = 0$ nicht analytisch, dass also Null der Konvergenzradius einer Entwicklung nach Potenzen in g .

- (a) Starten Sie Ihren Computer, berechnen $Z(g)$ numerisch für das g -Intervall $[0, 1]$, und machen Sie einen hübschen Plot.
- (b) Entwickeln Sie nun $Z(g)$ in einer Potenzreihe in g ,

$$Z(g) = \sum_n g^n Z_n, \quad (3)$$

und bestätigen

$$g^n Z_n = \frac{(-g)^n (4n)!}{n! 16^n (2n)!} \underset{n \rightarrow \infty}{\sim} \frac{1}{\sqrt{n\pi}} \left(\frac{4gn}{e} \right)^n, \quad (4)$$

wobei sich das asymptotische Verhalten mittels Stirling'scher Formel ergibt.

- (c) Offensichtlich wachsen die Taylorkoeffizienten Z_n in (3) wie $n!$ – an Konvergenz der Reihe ist gar nicht zu denken, egal wie groß oder klein g . Trotzdem ist die Reihe nützlich. Bestätigen Sie, dass der verbleibene Fehler nach n Termen durch den $(n+1)$ -ten Term eingeschränkt wird,

$$R_n := \left| Z(g) - \sum_{m=0}^n g^m Z_m \right| \leq g^{n+1} |Z_{n+1}|, \quad (5)$$

und schließen Sie, dass es sich bei (3) in der Tat um eine asymptotische Darstellung der Funktion $Z(g)$ zum Entwicklungspunkt $g = 0$ handelt.

- (d) Die Restformel (5) besagt, dass die Approximation mit wachsendem n so lange besser wird, wie $g^n Z_n$ abnimmt. Zeigen Sie, dass der minimale Fehler auftritt für $n \sim \frac{1}{4g}$ und einen Wert hat $g^n Z_n|_{\min} \sim \sqrt{\frac{4g}{\pi}} e^{-\frac{1}{4g}}$.

Bemerkung: Die exponentielle Dämpfung mit der inversen Kopplungskonstanten – durchaus typisch für Störungstheorien – bedeutet, dass man trotz grundsätzlich divergenter Reihen für hinreichend kleine Kopplungskonstanten ein hohes Maß an Präzision erlangen kann. Die Quantenelektrodynamik (QED) profitiert hier von der “Kleinheit” der Feinstrukturkonstanten $\alpha \approx 1/137$. Alles in der QED wird in α entwickelt. Und das ist sicherlich eine asymptotische Entwicklung, schließlich wäre die Theorie für $\alpha < 0$ instabil (gleichnamige Ladungen zögen sich an), d.h. beim Entwicklungspunkt $\alpha = 0$ ist die QED nicht analytisch.

- (d) Zwar hat jede Funktion – sofern sie überhaupt eine asymptotische Entwicklung aufweist – genau eine solche. Allerdings können verschiedene Funktionen ein-und-dieselbe asymptotische Entwicklung aufweisen. Zeigen Sie, dass die durchaus unterschiedlichen Funktionen $Z(g)$ und $Z(g) + e^{-\frac{1}{g}}$ auf dem Halbstrahl $0 < g$ die gleiche asymptotische Entwicklung zum Entwicklungspunkt $g = 0$ aufweisen

Bemerkung: Diese Art Mehrdeutigkeit spielt insbesondere in der WKB-Näherung eine wichtige Rolle – Stichwort “Anschlussbedingungen”.

▷ **Aufgabe 2 (Stirlingsche Formel)** (5 Punkte)

Asymptotische Entwicklungen gewinnt man häufig bei der Auswertung von Integralen mit der sogenannten *Sattelpunktmethode*, im Englischen auch genannt *method of steepest descend* oder *stationary phase method*. Dazu das “kanonische” Beispiel.

Eine Integraldarstellung der Fakultät lautet bekanntlich (Beweis?)

$$N! = \int_0^\infty x^N e^{-x} dx \quad (6)$$

und für große N (so groß muss N gar nicht sein) gilt die leicht merkbare Formel $N! \approx N^N$, bzw etwas genauer

$$N! \approx \sqrt{2\pi N} N^N e^{-N} \text{ asymptotisch für } N \rightarrow \infty, \quad (7)$$

genannt *Stirlingsche Formel*.

Beweisen Sie (7), indem Sie von der Integraldarstellung (6) ausgehen, zunächst feststellen, dass der Integrand $f(x) = x^N e^{-x}$ ein scharf ausgeprägtes Maximum bei $\tilde{x} = N$, sich sodann die Identität $f(x) = e^{\ln f(x)}$ in Erinnerung rufen, und den Exponenten in einer Taylorreihe um die Stelle \tilde{x} herum entwickeln. Den quadratischen Term $\propto (x - \tilde{x})^2$ lassen Sie im Exponenten stehen (hach wie hübsch – mal wieder ein Gauss!), die Exponentialfunktion der Terme höherer Ordnung entwickeln Sie in einer gewöhnlichen Taylorreihe “nach unten”. Zu integrieren sind dann – Term für Term – Funktionen der Form “Potenz-mal-Gauss”. Solche Integrale können Sie berechnen (nachdem Sie mutig, aber mit Worten der Rechtfertigung, die Integrationsgrenzen ein wenig verschoben haben). Das ganze, was Sie erhalten, ist die Darstellung von $N!$ in einer asymptotischen Reihe. Warum asymptotisch?

Analysieren Sie mal den Integranden in (6) in der komplexen x -Ebenen – geht Ihnen ein Licht auf, warum die Sattelpunktmethode genau so bezeichnet wird? Das Rezept lautet: Integral in die Form $\int e^{F(x)} dx$ bringen (geht immer!), Extremum von F bestimmen, also x^* aufsuchen wo $F'|_{x=x^*} = 0$, F um x^* herum entwickeln, bei der zweiten Ordnung abbrechen (die erste Ordnung verschwindet!), und das verbleibende Gaussintegral ausführen. Natürlich sollte man sich davon überzeugen, dass der Abbruch irgendwie gerechtfertigt ist, etwa “höhere Terme liefern irrelevante Korrekturen”. Häufig ist $F \sim$ “irgendwas großes” dabei hilfreich. Die Sattelpunktmethode liefert i.A. eine asymptotischen Entwicklung. In der statistischen Physik ist sie *das* Arbeitspferd um Zustandssummen zu berechnen.

▷ **Aufgabe 3 (Hyperfeinstruktur)** (7 Punkte)

[Was die HFS ist, und wo sie herkommt, sollte man wissen ...]

In der Hyperfeinstruktur (HFS) wird die Wechselwirkung zwischen dem Elektronenspin und dem Protonenspin (Fall: atomarer Wasserstoff) berücksichtigt. Das magnetische Moment des Protons, $\vec{\mu}_p = \gamma_p \vec{s}_p$, $\gamma_p \approx 2,79 e_0/m_p$, erzeugt am Ort \vec{x} ein Magnetfeld

$$\vec{B}_p(\vec{x}) = -\frac{\mu_0}{4\pi r^3} \left(\vec{\mu}_p - 3 \frac{(\vec{\mu}_p \cdot \vec{x}) \vec{x}}{r^2} \right) + \frac{2\mu_0}{3} \vec{\mu}_p \delta(\vec{x}). \quad (8)$$

wobei angenommen wurde, dass das Proton im Ursprung plaziert ist, und $r = |\vec{x}|$.

Die Einstellenergie des magnetischen Moments des Elektrons, $\mu_e = -\gamma_e \vec{s}_e$, $\gamma_e = e_0/m_e$ (Annahmen: $g = 2$), lautet

$$\hat{H}_{\text{HFS}} = -\hat{\vec{\mu}}_e \cdot \vec{B}_p(\hat{\vec{q}}) \quad (9)$$

Um den Effekt auf den Grundzustand von Wasserstoff abzuschätzen behandeln wir \hat{H}_{HFS} hinsichtlich der Translationsfreiheitsgrade des Elektrons in erster Ordnung Störungstheorie, behalten aber die Spinfreiheitsgrade bei. Bei der Mittlung des Magnetfeldes über die Gewichtsfunktion $|\psi_{100}(\vec{x})|^2$ trägt nur der Kontaktterm bei (warum?), und daher

$$\hat{H}_{\text{HFS}} = -\frac{2\mu_0}{3} \hat{\vec{\mu}}_e \hat{\vec{\mu}}_p |\psi_{100}(0)|^2 = \frac{A}{\hbar^2} \hat{s}_e \cdot \hat{s}_p \quad (10)$$

worin

$$A = \frac{16}{3} \times 2,79 \frac{m_e}{m_p} \alpha^2 E_{\text{Ry}} \approx 5,87 \times 10^{-6} \text{eV}. \quad (11)$$

bzw $\nu = A/h \approx 1417\text{MHz}$ oder $\lambda = c/\nu \approx 21\text{cm}$.

- (a) Zeigen Sie dass der Hamiltonoperator (10) zu Eigenwerten und Eigenzuständen Anlass gibt

$$\begin{aligned} E_+ &= E_0 + A/4 && \text{im Triplet } |S = 1, M\rangle, M = -1, 0, 1, \\ E_- &= E_0 - 3A/4 && \text{im Singlet } |S = 0, M = 0\rangle. \end{aligned} \quad (12)$$

- (b) In einem äußeren Magnetfeld $\vec{B} = B\vec{e}_z$ spaltet das Triplet auf und das Singlet wird verschoben. Berechnen Sie – exakt! – diese Aufspaltung/Verschiebung als Funktion der Magnetfeldstärke (die Kopplung des Protonenspins an das Feld dürfen Sie dabei getrost vernachlässigen. Warum?). Machen Sie sich ein Bild (Energiewerte vs B), identifizieren das “Zeeman-Regime” kleiner Feldstärken und das Paschen-Back Regime großer Feldstärken.

Bemerkung: Die Hyperfeinstruktur im Grundzustand von atomarem Wasserstoff spielt in der Astrophysik eine wichtige Rolle (21cm-Linie), und wird gerne für Tests der allgemeinen Relativitätstheorie verwendet (gravitative Rotverschiebung). Der Hyperfeinübergang im Cs-133 Isotop dient der Definition der Sekunde: eine Sekunde sind genau 9 192 631 770 Perioden der entsprechenden Linie. Der Übergang ist übrigens äußerst schwach, da elektrisch Dipol-verboten, mit einer Lebensdauer $\sim 3,5 \times 10^{14} \text{sec} \sim 10^7 \text{Jahre}$ (aufgrund magnetischer Dipol- und elektrischer Quadrupolübergänge).

Im übrigen bezieht sich die Platte der Pionier 10 Mission, die die Nachricht von unserer Zivilisation ins All trägt, auf die Hyperfeinstruktur von atomarem Wasserstoff um eine Längen und Zeitskala zu kommunizieren ...