UNIVERSITÄT LEIPZIG
INSTITUT FÜR THEORETISCHE PHYSIK
Quantenmechanik II

Übungsblatt 4
*Solutions*

12. + 13. **Störung eines zwei-niveau Systems**

Die allgemeine Formel der Störungstheorie für einen nicht-entarteten Zustand $\psi_i^0$ sind:

$$\psi_i^n = S\left[H'\psi_i^{n-1} - \sum_{k=1}^{n-1} E_i^k \psi_i^{n-k}\right] \tag{1}$$

$$E_i^n = \left(\psi_i^0, H'\,\psi_i^{n-1}\right), \tag{2}$$

wobei $\psi_i^k$ steht für die Korrektur $k$-ter Ordnung zu $\psi_i^0$, $E_i^k$ für die Korrektur $k$-ter Ordnung zur Energie $E_i^0$ und

$$S = \frac{P_\perp}{E_i^0 - H_0} = \sum_{j\neq i} \frac{|\psi_j^0\rangle\langle\psi_j^0|}{E_i^0 - E_j^0}$$

wobei $P_\perp$ ist der Projektor auf dem zu $\psi_i^0$ orthogonalen Raum. Speziell, im unseren Fall gibt es zwei Zustände:

$$|0\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \qquad \text{zur Energie } E_0^0 = -1$$

$$|1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \qquad \text{zur Energie } E_1^0 = 1$$

Die Strategie zur Berechnung der Korrekturen ist: $\psi^0 \to E^1 \to \psi^1 \to E^2 \to \psi^2 \to E^3 \to \ldots$. Wir haben $H' = \lambda\sigma_1$, und nehmen $\psi^0 = \psi_0^0$. Damit finden wir

$$S = -\frac{1}{2}|1\rangle\langle 1|$$

und

$$E^1 = (\psi^0, H'\psi^0) = 0, \tag{3}$$
$$\psi^1 = S[\lambda\sigma_1|0\rangle - E^1\psi^0] = -\frac{\lambda}{2}|1\rangle, \tag{4}$$
$$E^2 = (\psi^0, H'\psi^1) = -\frac{\lambda^2}{2}, \tag{5}$$
$$\psi^2 = S\left[\lambda\sigma_1(-\lambda/2)|1\rangle - E^2\psi^0 - E^1\psi^1\right] = 0, \tag{6}$$
$$E^3 = 0, \tag{7}$$
$$\psi^3 = S\left[\lambda\sigma_1\psi^2 - E^3\psi^0 - E^2\psi^1 - E^1\psi^2\right] = -SE^2\psi^1 = \frac{\lambda^3}{8}|1\rangle, \tag{8}$$
$$E^4 = \frac{\lambda^4}{8}. \tag{9}$$

Kurz:

$$\psi = |0\rangle + \left(-\frac{\lambda}{2} + \frac{\lambda^3}{8}\right)|1\rangle,$$
$$E = -1 - \frac{\lambda^2}{2} + \frac{\lambda^4}{8}.$$

Die Wellenfunktion $\psi$ ist noch nicht normiert.

Das Problem lässt sich offensichtlich auch exakt lösen, wir finden

$$E_{ex} = -\sqrt{1+\lambda^2},$$

$$\psi_{ex} = |0\rangle + \frac{1+E}{\lambda}|1\rangle.$$

Man sieht leicht, dass die Störungstheoretische Ergebnisse einfach Taylor-Entwicklungen der exakten Lösungen sind. Um die normerte Wellenfunktion $\tilde{\psi} = Z^{1/2}(\lambda)\psi$ zu bestimmen berechnen wir induktiv die Normierungs-Funktion $Z(\lambda)$. Aus

$$Z(\lambda)\,(\psi,\psi) = 1$$

und $Z = \sum_{k=0}^{\infty} z_n\lambda^n$, mit $z_0 = 1$ folgt die Relation

$$z_N + \sum_{k=0}^{N-1} z_k \sum_{n,m}^{n+m=N-k} (\psi^m, \psi^n) = 0.$$

Wir finden $z_1 = 0$,

$$z_2 + z_0(\psi^1, \psi^1) = 0.$$

also $z_2 = -\frac{1}{4}$. Weiterhin $z_3 = 0$ und

$$z_4 + z_0[(\psi^3, \psi^1) + (\psi^1, \psi^3)] + z_2[(\psi^1, \psi^1)] = 0,$$

also $z_4 = \frac{3}{16}$. Damit können wir leicht verifizieren, dass die Hellmann-Feynman Formel erfüllt ist (bis auf $O(\lambda^4)$:

$$\langle\tilde{\psi}, \sigma_1\tilde{\psi}\rangle = -\lambda + \frac{\lambda^3}{2} = \frac{dE}{d\lambda}.$$

Für exakte Lösungen gilt

$$Z(\lambda) = \frac{\lambda^2}{\lambda^2 + (1+E)^2},$$

und mit

$$\langle\tilde{\psi}_{ex}, \sigma_1\tilde{\psi}_{ex}\rangle = \frac{2\lambda(1+E)}{\lambda^2 + (1+E)^2}$$

ist die Hellmann-Feynman Formel auch exakt erfüllt.

14. **Wechselwirkung von Elektronen in 1D**

Zunächst aus der Taylor-Entwicklung von $-e^2(R+y-x)^{-1}$ erhalten wir

$$-\frac{e^2}{x_2 - x_1} = -\frac{e^2}{R} - e^2\frac{(x-y)}{R^2} - e^2\frac{(x-y)^2}{R^3} + O\left(\frac{(|x|+|y|)^3}{R^4}\right)$$

In der nullten Ordnung ist der Grundzustand $\psi_0$ ein Tensorprodukt der Grundzustände der harmonischen Oszillatoren $\psi_0 = |0\rangle \otimes |0\rangle$. Im Gegensatz zum dreidimensionalen Fall verschwindet die Korrektur zur Energie $W_1$ erster Ordnung (in $e^2$) nicht[1]. Sie ist einfach zu berechnen:

$$W_1 = -\frac{e^2}{R^3}\left(\psi_0, (x-y)^2\psi_0\right) = -\frac{e^2}{2R^3}\Big(\psi_0, (a-b)(a^* - b^*)\,\psi_0\Big) = -\frac{e^2}{R^3}$$

Die Kraft $F = -\partial_R(W_1) = 3e^2R^{-4}$ ist positiv, d.h. anziehend.

[1] In der klassischen Rechnung von Fritz London es ist wichtig zu erkennen, dass nicht nur der Erwartungswert des führenden Entwicklungsglieds $\vec{r}_1 \cdot \vec{r}_2/R^3 - 3(\vec{r}_1 \cdot \vec{R})(\vec{r}_2 \cdot \vec{R})/R^5$, sonder auch die Erwartungswerte der Glieder höheren Ordnung verschwinden.