UNIVERSITÄT LEIPZIG, ITP

Quantenmechanik II, WS2009/2010

Übungsblatt 6: Musterlösungen

Aufgabe 16

Allgemein erfüllen in der Störungstheorie die Glieder bis zur Ordnung λ die Gleichung

$$(H_0 - E^0)\psi_I^1 + (V - E_I^1)\psi_I^0 = 0, \qquad I = 1,2$$

wobei $\lambda V = H'$. Nun ist in unserem Problem H_0 entartet (und zweidimensional), was zur Folge hat, dass $H_0 - E^0 \equiv 0$. Sei allgemein P_0 der Projektor auf den Unterraum zu E^0 (in dieser Aufgabe, $P = \mathbb{I}$). Dann folgt

$$P_0(V - E_I^1)P_0\psi_I^0 = (P_0 V P_0 - E_I^1)\psi_I^0,$$

d.h. die Korrekturen erster Ordnung zur Energie, E_I^1, sowie die zugehörige Vektoren (nullter Ordnung) ψ_I^0 sind aus dem Eigenwertproblem von $P_0 V P_0$ ($= V$, in dieser Aufgabe) zu bestimmen.

Wir finden,

$$\psi_1^0 = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \qquad E_1^1 = 1,$$
$$\psi_2^0 = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}, \qquad E_2^1 = -1.$$

Es ist zu bemerken, dass man schon von Anfang an die beiden Vektoren als Basis-Vektoren des Unterraumes zu E^0 benutzen konnte. Der H_0 würde sich bei einem Basiswechsel nicht ändern und H' würde diagonal, $H' =$diag$(\lambda, -\lambda)$. Dies bedeutet, dass mit ψ_I^0 und E_I^1 bereits die *komplette* Lösung, $\tilde{\psi}_I = \psi_I^0$, $\tilde{E}_I = E_0 + \lambda E_I^1$ bestimmt wurde.

Aufgabe 17

Allgemein gilt in der Störungstheorie:

$$(H_0 - E_I^0)\psi_1^1 + (V - E_I^1)\psi_I^0 = 0, \tag{1}$$
$$(H_0 - E_I^0)\psi_I^2 + (V - E_I^1)\psi_I^1 = E_I^2\psi_I^0, \tag{2}$$
$$(H_0 - E_I^0)\psi_I^3 + (V - E_I^1)\psi_I^2 = E_I^3\psi_I^0 + E_I^2\psi_I^1, \tag{3}$$

Sei $P = |\psi_1^0\rangle\langle\psi_1^0| + |\psi_2^0\rangle\langle\psi_2^0|$ der Projektor auf den zweidimensionalen Unterraum zu $E^0 = E$, $P_1 = |\psi_1^0\rangle\langle\psi_1^0|$ der Projektor auf ψ_1^0, $P_2 = |\psi_2^0\rangle\langle\psi_2^0|$ der Projektor auf ψ_2^0 und $Q = \mathbb{I} - P_3$ der Projektor auf den (eindimensionalen) Raum zu $E_0 = 2E$. Der hier relevante Hilbertraum $\mathcal{H} = \mathbb{C}^3$ zerfällt in einer natürlichen Weise auf $\mathcal{H} = P\mathcal{H} + Q\mathcal{H}$. Wir werden die Gleichungen (1-3) auf $P\mathcal{H}$ und $Q\mathcal{H}$ projizieren. Wegen der Entartung von H_0 verschwindet $P(H_0 - E)P$ auf $P\mathcal{H}$.

Per Annahme $\psi_I^0 \in P\mathcal{H}$ und $\psi_3^0 \in Q\mathcal{H}$. Projektion der Gl. (1) auf P führt auf

$$(PVP - E_I^1)\psi_I^0 = 0, \tag{4}$$

und wie in der Aufgabe 16 die (beiden) ψ_I^0 sind aus dem Eigenwertproblem (4), zusammen mit den zugehörigen E_I^1, zu bestimmen. Man muss beachten, dass $(V - E_I^1)\psi_I \neq 0$, sondern nur

$$(V - E_I^1)\psi_I^0 \in Q\mathcal{H}.$$

Zur Bestimmung von ψ_I^1 und E_I^2 projizieren wir die Gleichung (1) auf $Q\mathcal{H}$

$$Q(H_0 - E_I^0)\psi_I^1 = -QV\psi_I^0.$$

Auf $Q\mathcal{H}$ kann $H_0 - E_1^0$ invertiert werden (weil die Eigenwerte von H_0 in $Q\mathcal{H}$ per Annahme von E_I^0, $I = 1, 2$ verschieden sind). Dies führt auf

$$Q\psi_I^1 = -\frac{Q}{H_0 - E_I^0} V\psi_I^0 \equiv -|\psi_3^0\rangle \frac{\langle\psi_3^0|V|\psi_1^0\rangle}{E_3^0 - E_I^0},$$

was aus der Störungstheorie von nicht entarteten Niveaus bekannt ist. Wir wissen noch nicht was der Anteil von ψ_I^1 im $(P - P_I)\mathcal{H}$ ist. Wir wenden jetzt $P_I' = P - P_I$ auf die Gleichung (2) und, unter Berücksichtigung der Zerlegung $\psi_I^1 = P'\psi_I^1 + Q\psi_I^1$, finden

$$P'(V - E_I^1)P'\psi_I^1 = -P'VQ\psi_I^1,$$

(hier wurde auch $P'Q = 0$ verwendet). Nun kann $P'(V - E_I^1)P'$ invertiert werden, denn (per Annahme) V in $P\mathcal{H}$ nicht entartet ist. Dies führt auf

$$P'\psi_I^1 = -\frac{P'}{V - E_I^1} VQ\psi_I^1.$$

$Q\psi_I^1$ ist aber bekannt; wir finden schließlich

$$\psi_I^1 = \left(\mathbb{I} - P'\frac{1}{V - E_I^1}P'V\right) Q\psi_I^1.$$

Im Falle $I = 1$ dies bedeutet

$$\psi_1^1 = -\left(\mathbb{I} - \frac{|\psi_0^2\rangle\langle\psi_0^2|}{E_2^1 - E_1^1}V\right) \frac{|\psi_3^0\rangle\langle\psi_3^0|V|\psi_1^0\rangle}{E_3^0 - E_I^0}$$

und die Projektion von (2) auf P_I liefert

$$E_1^2 = -\langle\psi_1^0|V\frac{Q_0}{H_0 - E_1^0}V|\psi_1^0\rangle.$$

Man beachte, dass der letzte Faktor in ψ_1^1 auch vom ersten Ordnung ist (obwohl es zweimal V enthält).

Diese Formeln sind offensichtlich allgemein und können bei beliebiger Störung entarteter Niveaus verwendet werden (sobald die Entartung in erster Ordnung aufgehoben wird, d.h. $E_i^1 \neq E_j^1$ wenn $i \neq j$).

Im unseren, speziellen, Fall finden wir

$$\psi_1^0 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \qquad E_1^0 = E, \qquad E_1^1 = 1,$$

$$\psi_2^0 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix}, \qquad E_2^0 = E, \qquad E_2^1 = -1,$$

$$\psi_3^0 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \qquad E_3^0 = 2E, \qquad E_3^1 = -1,$$

und $\langle \psi_3^0 | V | \psi_1^0 \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} = \langle \psi_3^0 | V | \psi_2^0 \rangle$. Wir finden auch z.B.

$$(V - E_1^1)\psi_1^0 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \in Q\mathcal{H},$$

und

$$Q\psi_1^1 = -\frac{1}{2E - E} \frac{1}{\sqrt{2}} \psi_3^0,$$

$$P_2\psi_1^1 = -|\psi_2^0\rangle\langle\psi_2^0| \frac{1}{V - E_1^1} |\psi_2^0\rangle\langle\psi_2^0| V Q |\psi_1^1\rangle = -\frac{1}{E_2^1 - E_1^1} |\psi_2^0\rangle\langle\psi_2^0| V |\psi_3^0\rangle \frac{-1}{\sqrt{2}E} = -\frac{1}{4E} |\psi_2^0\rangle.$$

(wir nutzen hier die Dirac'sche Notation). Schließlich,

$$|\psi_1^1\rangle = -\frac{1}{E\sqrt{2}} |\psi_3^0\rangle - \frac{1}{4E} |\psi_2^0\rangle,$$

und

$$E_1^2 = -\langle \psi_1^0 | V | \psi_3^0 \rangle \langle \psi_3^0 | V | \psi_1^0 \rangle \cdot \frac{1}{E_3^0 - E_1^0} = -\frac{1}{2E}.$$

Setzen wir die entsprechenden Potenzen von λ ein, so erhalten wir

$$\tilde{\psi}_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} - \frac{\lambda}{E} \begin{pmatrix} 1/4 \\ -1/4 \\ 1/\sqrt{2} \end{pmatrix} + O(\lambda^2),$$

$$\tilde{E}_1 = E + \lambda - \frac{\lambda^2}{2E} + O(\lambda^3).$$

Aufgabe 16

Die ungestörten Eigenzustände sind

$$|m\rangle = \frac{e^{im\varphi}}{\sqrt{2\pi}},$$

mit $m \in \mathbb{Z}$ und $E_m = \beta m^2$, wobei $\beta = \frac{1}{2mR^2}$. Sei $\alpha = -eR\mathcal{E}/2$. Die ersten ungestörten angeregte Zustände $|1\rangle$, $|-1\rangle$ sind offensichtlich energetisch entartet. Überdies gilt:

$$\langle k|V|m\rangle = \alpha(\delta_{k,m-1} + \delta_{k,m+1})$$

und es ist leicht zu sehen, dass

$$P_a V P_a = 0$$

wobei P_a den Projektor auf den Unterraum $P_a\mathcal{H}$ der von $|1\rangle$ und $|-1\rangle$ aufgespannt wird, bezeichnet. Die Entartung wird also nicht in erster Ordnung aufgehoben, d.h. die Gleichung

$$(P_a V P_a - E^1)\psi = 0, \qquad \psi \in P_a\mathcal{H}$$

kann auf dem Unterraum $P_a\mathcal{H}$ von einer beliebigen Linearkombination von $|1\rangle$ und $|-1\rangle$ erfüllt werden. Nun kann die Gleichung der zweiten Ordnung der Störungstheorie

$$(H_0 - E_1^0)\psi_1^2 + (V - E^1)\psi_1^1 - E_1^2\psi_1^0 = 0,$$

auf $P_a\mathcal{H}$ projiziert werden. Wir erhalten

$$P_a(V - E^1)\psi_1^1 = E^2\psi_1^0.$$

Anderseits folgt aus der Gleichung der ersten Ordnung wie üblich

$$Q_a\psi_1^1 = -\frac{Q_a V}{H_0 - E_0}\psi_1^0$$

mit $Q_a = \mathbf{1} - P_a$, d.h. die Gleichung ersten Ordnung bestimmt die Funktion ψ_1^1 auf $Q_a\mathcal{H}$. Insgesamt folgt

$$P_a V \frac{Q_a}{E_0 - H_0} V P_a \psi_i^0 = E^2\psi_i^0$$

wobei $i = -1, 1$ da wir die gleiche Rechnung auch für die beiden ungestörten Zustände $\psi_{\pm 1}^0$ durchführen können (hier spielt der in $P_a\mathcal{H}$ liegende Anteil von ψ_i^0 keine Rolle, weil $P_a(V - E^1)P_a\psi$ verschwidtet wegen Entartung von E^1). Die obige Gleichung ist ein Eigenwertsproblem auf dem zweidimensionalen Raum $P_a\mathcal{H}$. Der Operator auf der linken Seite verschwindet nicht; wir finden

$$P_a V \frac{Q_a}{E_0 - H_0} V P_a = \frac{\alpha^2}{\beta}\begin{pmatrix} \frac{2}{3} & 1 \\ 1 & \frac{2}{3} \end{pmatrix}.$$

Die Eigenwerte dieser Matrix geben die Korrekturen zweiter Ordnung zu der ungestörten Energie $E^0 = \beta$ an. Sie sind

$$E_- = -\frac{\alpha^2}{3\beta}$$

und

$$E_+ = \frac{5\alpha^2}{3\beta}.$$

Diesen Energiekorrekturen entsprechen die Zustände

$$\psi_-^0 = \frac{\sin(\varphi)}{\sqrt{\pi}},$$

und

$$\psi_+^0 = \frac{\cos(\varphi)}{\sqrt{\pi}}.$$