UNIVERSITÄT LEIPZIG, ITP

Quantenmechanik II, WS2009/2010

Übungsblatt 8: Musterlösungen

Aufgabe 21)

In dieser Musterlösung betrachten wir ausschließlich die beiden entarteten Niveaus, denn nur im diesen Fall ist die Betrachtung nicht-trivial. Aus den Formeln der Störungstheorie (s. Aufgabe 17) folgt zunächst

$$(PVP - E_I^1)\psi_I^0 = 0.$$

Der Operator PVP hat aber im unseren Fall ein entartetes Spektrum. Wegen[1]

$$Q\psi_I^1 = -\frac{Q}{H_0 - E_I^0}\, VP\psi_I^0 \tag{1}$$

aus $P(V - E_I^1)\psi_I^1 = E_I^2\psi_I^0$ folgt die Grundgleichung, aus der die ψ_I^0 sowie E_I^2 bestimmt werden können,

$$\big(-PV\frac{Q}{H_0 - E_I^0}VP - E_I^2\,\big)\psi_I^0 = 0. \tag{2}$$

Per Annahme ist das Spektrum des oben auftretenden Operator nicht mehr entartet d.h. der Operator

$$W_I = -PV\frac{Q}{H_0 - E_I^0}VP - E_I^2 P$$

ist in dem zu ψ_I^0 orthogonalen Unterraum von $P\mathcal{H}$ invertierbar, und "vernichtet" den Vektor[2] ψ_I^0. Sobald ψ_I^0 aus der Gleichung (2) bestimmt sind, können $Q\psi_I^1$ aus (1) berechnet werden. Es ist nur noch nötig die in $P\mathcal{H}$ liegende Anteile von ψ_I^1 zu bestimmen. (Per Annahme gilt bereits $(\psi_I^1, \psi_I^0) = 0$.) Sei $P_{I'}$ der Projektor auf den zu ψ_I^0 orthogonalen Unterraum von $P\mathcal{H}$,

$$P_{I'} = P - P_I.$$

Wir projizieren die "λ^3-Gleichung" auf $P_{I'}\mathcal{H}$,

$$P_{I'}(V - E_I^1)\psi_I^2 = E_I^2 P_{I'}\psi_I^i.$$

[1] Analog gilt:

$$Q\psi_I^2 = -\frac{Q}{H_0 - E_I^0}\,(V - E_I^1)\psi_I^1.$$

[2] In der Basis der Vektoren ψ_J^0 ist der Operator W_I diagonal mit den Elementen $E_J^2 - E_I^2$ auf der Diagonale.

Nun $\psi_I^2 = P\psi_I^2 + Q\psi_I^2$ und damit

$$-P_{I'}V\frac{Q}{H_0 - E_I^0}\,VP_{I'}\psi_I^1 - P_{I'}V\frac{Q}{H_0 - E_I^0}\,(V - E_I^1)Q\psi_I^1 = E_I^2 P_{I'}\psi_I^1.$$

Dies kann zu

$$W_I\psi_I^1 = P_{I'}V\frac{Q}{H_0 - E_I^0}\,(V - E_I^1)Q\psi_I^1$$

umgeformt werden. Wegen

$$W^{-1} = \sum_{I'} \frac{|\psi_{I'}\rangle\langle\psi_{I'}|}{E_{I'}^2 - E_I^2}$$

gilt

$$P_{I'}\psi_I^1 = \frac{1}{W}\,P_{I'}V\frac{Q}{H_0 - E_I^0}\,(V - E_I^1)Q\psi_I^1 = -\frac{1}{W}\,P_{I'}V\frac{Q}{H_0 - E_I^0}\,(V - E_I^1)\frac{Q}{H_0 - E_I^0}VP\psi_I^0.$$

Im unseren konkreten Fall nehmen wir eine (beliebige, bequeme) Basis der Raume $P\mathcal{H}$ (zu $E_I^0 = 1$)

$$|1\rangle = (1,0,0), \qquad |2\rangle = (0,1,0)$$

und

$$|3\rangle = (0,0,1),$$

und finden $P = |1\rangle\langle 1| + |2\rangle\langle 2|$,

$$PVP = \mathrm{diag}(1,1,0).$$

Es gilt

$$-PV\frac{Q}{H_0 - E_1^0}VP = -|1\rangle\langle 1|.$$

Die Vektoren $|1\rangle$, $|2\rangle$ sind also (zufällig) Eigenvektoren von $-PV\frac{Q}{H_0-E_1^0}VP$; d.h. $|1\rangle = \psi_1^0$, $E_1^2 = -1$, $|2\rangle = \psi_2^0$, $E_2^2 = 0$. Wegen $\langle 3|V|1\rangle = 1$ gilt

$$Q\psi_1^1 = -\frac{|3\rangle\langle 3|}{2-1}\,V\psi_1^0 = -|3\rangle,$$

und, wegen $\langle 3|V|2\rangle = 0$

$$Q\psi_2^1 = 0.$$

Schließlich

$$P_{1'}\psi_1^1 = \frac{|2\rangle\langle 2|}{E_2^2 - E_1^2}\,V\frac{|3\rangle\langle 3|}{2-1}\,(V-1)Q\psi_1^1 = 0,$$

(wegen $\langle 2|V|3\rangle = 0$) und

$$P_{2'}\psi_2^1 = \frac{|1\rangle\langle 1|}{E_1^2 - E_2^2}\,V\frac{|3\rangle\langle 3|}{2-1}\,(V-1)Q\psi_2^1 = 0,$$

(wegen $Q\psi_2^1 = 0$.) Insgesamt

$$E_1 = 1 + \lambda - \lambda^2 + O(\lambda^3), \qquad \psi_1 = |1\rangle - \lambda|3\rangle + O(\lambda^2)$$

$$E_2 = 1 + \lambda + O(\lambda^3), \qquad \psi_2 = |2\rangle + O(\lambda^2)$$

Eine exakte Lösung des Problems kann natürlich auch bestimmt werden. Gesucht sind Eigenvektoren und Eigenwerte der Matrix

$$H = \begin{pmatrix} 1+\lambda & 0 & \lambda \\ 0 & 1+\lambda & 0 \\ \lambda & 0 & 2-\lambda \end{pmatrix}.$$

Es gibt drei Eigenwerte, $\kappa_2 = 1+\lambda$ (exakt), und

$$\kappa_{1/3} = \tfrac{3}{2} \pm \tfrac{1}{2}\sqrt{1+4\lambda+8\lambda^2},$$

d.h.

$$\kappa_1 = 1+\lambda-\lambda^2+O(\lambda^3)$$

$$\kappa_3 = 2-\lambda+\lambda^2+O(\lambda^3)$$

Der dem Eigenwert κ_2 entsprechende Eigenvector ist $\chi_2 = (0,1,0)$ (exakt). Der dem κ_1 entsprechende Eigenvector χ_1 muss zu χ_2 orthogonal sein (also im nullten Ordnung $\chi_1^0 = (1,0,0)$). Wird die störungstheoretische Normierungsbedingung verwendet (Korrekturen immer orthogonal zum Vektor der nullten Ordnung, χ_1^0), so erhalten wir

$$\chi_1 = \bigl(1, 0, -\lambda-2\lambda^2+O(\lambda^3)\bigr),$$

und mit den identischen Bedingungen

$$\chi_3 = \bigl(\lambda+2\lambda^2+O(\lambda^3), 0, 1\bigr).$$

Es ist evident, dass störungstheoretisch bestimmten E_1 und ψ_1 den κ_1 und χ_1 entsprechen, sowie $E_2 \leftrightarrow \kappa_2$, $\psi_2 \leftrightarrow \kappa_2$.