Lösungen zur Quantentheorie 1, Sommersemester 2023

Dr. J. M. Link, Prof. Dr. C. Timm Blatt 12

Präsenzübungen

Aufgabe 1:

(a) In der Eigenbasis von J_z gilt

$$J_x = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{2} & 0 \\ \sqrt{2} & 0 & \sqrt{2} \\ 0 & \sqrt{2} & 0 \end{pmatrix},$$
$$J_x^2 = \hbar^2 \begin{pmatrix} 1/2 & 0 & 1/2 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1/2 & 0 & 1/2 \end{pmatrix}.$$

Die Eigenvektoren und Eigenwerte des Hamilton-Operators $H = -KJ_x^2$ sind daher

$$|v_1^{(0)}\rangle = \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ 0 \\ 1/\sqrt{2} \end{pmatrix} \quad \text{zu} \quad E_1^{(0)} = -\hbar^2 K,$$
$$|v_2^{(0)}\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{zu} \quad E_2^{(0)} = -\hbar^2 K,$$
$$|v_3^{(0)}\rangle = \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ 0 \\ -1/\sqrt{2} \end{pmatrix} \quad \text{zu} \quad E_3^{(0)} = 0.$$

Das Grundzustand ist zweifach entartet: Die Eigenvektoren $|v_1\rangle$ und $|v_2\rangle$ gehören beide zur Grundzustandsenergie $-\hbar^2 K$.

(b) Die Störmatrix ist

$$\begin{pmatrix} \langle v_1^{(0)}|H_1|v_1^{(0)}\rangle & \langle v_1^{(0)}|H_1|v_2^{(0)}\rangle \\ \langle v_2^{(0)}|H_1|v_1^{(0)}\rangle & \langle v_2^{(0)}|H_1|v_2^{(0)}\rangle \end{pmatrix} = -B \begin{pmatrix} \langle v_1^{(0)}|J_x|v_1^{(0)}\rangle & \langle v_1^{(0)}|J_x|v_2^{(0)}\rangle \\ \langle v_2^{(0)}|J_x|v_1^{(0)}\rangle & \langle v_2^{(0)}|J_x|v_2^{(0)}\rangle \end{pmatrix} = -B\hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix},$$

Die Eigenvektoren der Störmatrix sind

$$|\tilde{v}_1^{(0)}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|v_1^{(0)}\rangle + |v_2^{(0)}\rangle),$$
$$|\tilde{v}_2^{(0)}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|v_1^{(0)}\rangle - |v_2^{(0)}\rangle).$$

Diese bilden also die „richtige“ Basis.

In der ursprünglichen (J_z-) Basis lauten die neuen Basisvektoren

$$|\tilde{v}_1^{(0)}\rangle = \begin{pmatrix} 1/2 \\ 1/\sqrt{2} \\ 1/2 \end{pmatrix},$$
$$|\tilde{v}_2^{(0)}\rangle = \begin{pmatrix} 1/2 \\ -1/\sqrt{2} \\ 1/2 \end{pmatrix}.$$

Für den Grundzustand $|\tilde{v}_1^{(0)}\rangle$ ist die Energiekorrektur erster Ordnung

$$E_1^{(1)} = \langle \tilde{v}_1^{(0)} | H_1 | \tilde{v}_1^{(0)} \rangle = -B\hbar$$

und für den Grundzustand $|\tilde{v}_2^{(0)}\rangle$:

$$E_2^{(1)} = \langle \tilde{v}_2^{(0)} | H_1 | \tilde{v}_2^{(0)} \rangle = +B\hbar.$$

Die Entartung wird also aufgehoben.

(c) Die Energiekorrekturen zweiter Ordnung für die Grundzustände sind

$$\begin{aligned} E_1^{(2)} &= \frac{|\langle \tilde{v}_1^{(0)} | H_1 | v_3^{(0)} \rangle|^2}{-\hbar^2 K} = 0, \\ E_2^{(2)} &= \frac{|\langle \tilde{v}_2^{(0)} | H_1 | v_3^{(0)} \rangle|^2}{-\hbar^2 K} = 0. \end{aligned}$$

(d) Der Hamilton-Operator ist

$$H = H_0 + H_1 = -K J_x^2 - B J_x,$$

also ein Polynom von J_x. Es folgt: Wenn $|v\rangle$ Eigenvektor von J_x mit Eigenwert λ ist, dann ist $|v\rangle$ auch Eigenvektor des Hamilton-Operators mit Eigenwert $-K\lambda^2 - B\lambda$. Die Vektoren $|\tilde{v}_{1,2}^{(0)}\rangle$ aus Teil (b) und $|\tilde{v}_3^{(0)}\rangle \equiv |v_3^{(0)}\rangle$ sind Eigenvektoren von J_x:

$$\begin{aligned} J_x |\tilde{v}_1^{(0)}\rangle &= \hbar\, |\tilde{v}_1^{(0)}\rangle, \\ J_x |\tilde{v}_2^{(0)}\rangle &= -\hbar\, |\tilde{v}_2^{(0)}\rangle, \\ J_x |\tilde{v}_3^{(0)}\rangle &= 0\, |\tilde{v}_3^{(0)}\rangle \end{aligned}$$

und damit

$$\begin{aligned} H |\tilde{v}_1^{(0)}\rangle &= (-K\hbar^2 - B\hbar)\, |\tilde{v}_1^{(0)}\rangle, \\ H |\tilde{v}_2^{(0)}\rangle &= (-K\hbar^2 + B\hbar)\, |\tilde{v}_2^{(0)}\rangle, \\ H |\tilde{v}_3^{(0)}\rangle &= 0\, |\tilde{v}_3^{(0)}\rangle. \end{aligned}$$

Die exakte Lösung und die Näherungslösung sind in diesem Fall identisch. Die Ursache ist, dass H_0 und H_1 eine gemeinsame Eigenbasis haben.

(e) Für $H_1 = -BJ_z$ lautet die Störmatrix

$$-B \begin{pmatrix} \langle v_1^{(0)} | J_z | v_1^{(0)} \rangle & \langle v_1^{(0)} | J_z | v_2^{(0)} \rangle \\ \langle v_2^{(0)} | J_z | v_1^{(0)} \rangle & \langle v_2^{(0)} | J_z | v_2^{(0)} \rangle \end{pmatrix} = -B\hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix},$$

sie hat offensichtlich den zweifach entarteten Eigenwert Null. Die Energiekorrekturen erster Ordnung verschwinden also und die Entartung wird in erster Ordnung nicht aufgehoben. Man muss zu höherer Ordnung gehen, um die richtige Basis zu bestimmen.

Bemerkung: Die Eigenenergien lassen sich exakt bestimmen (Eigenwerte einer 3×3-Matrix), sie lauten

$$\begin{aligned} E_1 &= -\frac{\hbar^2 K}{2} - \frac{\hbar}{2}\sqrt{\hbar^2 K^2 + B^2}, \\ E_2 &= -\hbar^2 K, \\ E_3 &= -\frac{\hbar^2 K}{2} + \frac{\hbar}{2}\sqrt{\hbar^2 K^2 + B^2}. \end{aligned}$$

Entwicklung für kleine B (also kleine H_1) ergibt

$$\begin{aligned}
E_1 &\cong -\hbar^2 K - \frac{B^2}{4K} + \mathcal{O}(B^4), \\
E_2 &= -\hbar^2 K, \\
E_3 &\cong \frac{B^2}{4K} + \mathcal{O}(B^4).
\end{aligned}$$

Wir sehen, dass die Aufspaltung der im ungestörten System entarteten Eigenenergie *quadratisch* von der Störung abhängt. Daher erwarten wir, dass die Entartung erst in zweiter Ordnung der Störungstheorie aufgehoben wird.

Hausaufgaben

Aufgabe 2:

(a) Die Korrekturen erster Ordnung sind

$$E_n^{(1)} = \int_{-L/2}^{L/2} dx\, \psi_n^*(x) H_1(x) \psi_n(x) = \int_{-L/2}^{L/2} dx\, |\psi_n(x)|^2\, H_1(x). \tag{1}$$

Die Eigenfunktionen des Kastenpotentials sind abwechselnd gerade und ungerade Funktionen unter Inversion. Das Betragsquadrat $|\psi_n(x)|^2$ ist in beiden Fällen gerade. Da $H_1(x)$ ungerade ist, ist der volle Integrand ungerade. Da er über ein symmetrisches Intervall $[-L/2, L/2]$ integriert wird, ergibt sich Null.

(b) Die Korrektoren erster Ordnung verschwinden wegen (a). Für die Korrekturen zweiter Ordnung benötigen wir die Matrixelemente

$$\langle \psi_m | \hat{H}_1 | \psi_n \rangle = a \int_{-L/2}^{L/2} dx\, \psi_m^*(x) \sin \frac{2\pi x}{L}\, \psi_n(x). \tag{2}$$

$H_1(x) = a \sin(2\pi x/L)$ ist ungerade. Damit das Integral nicht verschwindet, muss das Produkt $\psi_m^*(x)\psi_n(x)$ ebenfalls ungerade sein. Dafür muss m ungerade und n gerade sein oder umgekehrt. Wir betrachten den ersten Fall, der zweite die analog. Dann ist

$$\begin{aligned}
\langle \psi_m | \hat{H}_1 | \psi_n \rangle &= \frac{2a}{L} \int_{-L/2}^{L/2} dx\, \cos \frac{m\pi x}{L} \sin \frac{2\pi x}{L} \sin \frac{n\pi x}{L} \\
&= \frac{a}{2\pi} \left[-\frac{\sin \frac{(m+2+n)\pi x}{L}}{m+2+n} - \frac{\sin \frac{(m-2-n)\pi x}{L}}{m-2-n} + \frac{\sin \frac{(m-2+n)\pi x}{L}}{m-2+n} + \frac{\sin \frac{(m+2-n)\pi x}{L}}{m+2-n} \right]_{-L/2}^{L/2} \\
&= \frac{a}{\pi} \left(-\frac{\sin \frac{(m+2+n)\pi}{2}}{m+2+n} - \frac{\sin \frac{(m-2-n)\pi}{2}}{m-2-n} + \frac{\sin \frac{(m-2+n)\pi}{2}}{m-2+n} + \frac{\sin \frac{(m+2-n)\pi}{2}}{m+2-n} \right).
\end{aligned} \tag{3}$$

Mit $\sin(\alpha \pm \pi) = -\sin\alpha$ erhalten wir

$$\begin{aligned}
\ldots &= \frac{a}{\pi} \left(\frac{\sin \frac{(m+n)\pi}{2}}{m+2+n} + \frac{\sin \frac{(m-n)\pi}{2}}{m-2-n} - \frac{\sin \frac{(m+n)\pi}{2}}{m-2+n} - \frac{\sin \frac{(m-n)\pi}{2}}{m+2-n} \right) \\
&= \frac{a}{\pi} \left(-4 \frac{\sin \frac{(m+n)\pi}{2}}{(m+n)^2 - 4} + 4 \frac{\sin \frac{(m-n)\pi}{2}}{(m-n)^2 - 4} \right) \\
&= -\frac{4a}{\pi} \left(\frac{(-1)^{(m+n-1)/2}}{(m+n)^2 - 4} - \frac{(-1)^{(m-n-1)/2}}{(m-n)^2 - 4} \right).
\end{aligned} \tag{4}$$

$m+n$ ist ungerade, so dass die Nenner nie verschwinden können. Da speziell m ungerade und n gerade ist, erhalten wir

$$\begin{aligned}
\ldots &= (-1)^{(m+1)/2}\,\frac{4a}{\pi}\left(\frac{(-1)^{n/2}}{(m+n)^2-4}-\frac{(-1)^{-n/2}}{(m-n)^2-4}\right)\\
&= (-1)^{(m+1)/2}\,(-1)^{n/2}\,\frac{4a}{\pi}\left(\frac{1}{(m+n)^2-4}-\frac{1}{(m-n)^2-4}\right)\\
&= (-1)^{(m+n+1)/2}\,\frac{4a}{\pi}\left(\frac{1}{(m+n)^2-4}-\frac{1}{(m-n)^2-4}\right). \qquad (5)
\end{aligned}$$

Das Ergebnis ist symmetrisch in m und n. Für m gerade und n ungerade erhalten wir dasselbe.

Die ungestörten Eigenenergien sind

$$E_n^{(0)} = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ML^2}\,n^2. \qquad (6)$$

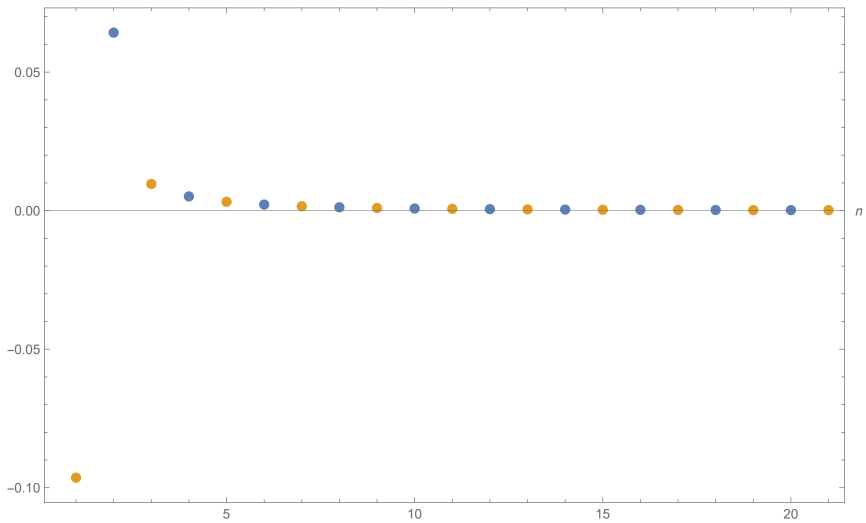
Die Energiekorrekturen zweiter Ordnung sind daher

$$E_n^{(2)} = \sum_m \frac{|\langle\psi_n^{(0)}|\hat{H}_1|\psi_m^{(0)}\rangle|^2}{E_n^{(0)}-E_m^{(0)}}, \qquad (7)$$

wobei die Summe für n ungerade (gerade) über alle geraden (ungeraden) m läuft. Wir finden

$$E_n^{(2)} = \frac{32a^2ML^2}{\pi^4\hbar^2}\sum_m \frac{1}{n^2-m^2}\left(\frac{1}{(m+n)^2-4}-\frac{1}{(m-n)^2-4}\right)^2 \qquad (8)$$

Die Reihe kann durch sog. Hurwitz-Lerch-Φ-Funktionen ausgedrückt werden, was jedoch nicht viel nützt. Mit Hilfe z. B. von Mathematica kann man für jedes n die Reihe geschlossen berechnen. Die folgende Abbildung zeigt die ersten 20 Werte. Insbesondere erkennen wir, dass die Korrektur zweiter Ordnung zur Grundzustandsenergie negativ ist, wie in der Vorlesung allgemein gezeigt wurde.



Aufgabe 3:

Im klassisch erlaubten Bereich gilt

$$\begin{aligned}
\psi(x) &= \frac{\psi_+}{\sqrt{k(x)}}\exp\left(i\int_{x_+}^{x}dx'k(x')\right)+\frac{\psi_-}{\sqrt{k(x)}}\exp\left(-i\int_{x_-}^{x}dx'k(x')\right),\\
k(x) &= \frac{1}{\hbar}\sqrt{2mE} = \text{const}\\
\Rightarrow\quad \psi(x) &= A\exp\left(i\sqrt{2mE}\,x/\hbar\right)+B\exp\left(-i\sqrt{2mE}\,x/\hbar\right)
\end{aligned}$$

mit $A = (\psi_+/\sqrt{k})\, e^{-ikx_+}$ und $B = (\psi_-/\sqrt{k})\, e^{ikx_-}$.

In den klassisch verbotenen Bereichen gilt

$$
\begin{aligned}
\psi(x) &= \frac{\tilde{\psi}_+}{\sqrt{\kappa(x)}} \exp\left(-\int_{\tilde{x}_+}^{x} dx'\,\kappa(x')\right) + \frac{\tilde{\psi}_-}{\sqrt{\kappa(x)}} \exp\left(+\int_{\tilde{x}_-}^{x} dx'\,\kappa(x')\right), \\
\kappa(x) &= \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(V-E)} = \text{const} \\
\Rightarrow \quad \psi(x) &= C \exp\left(-\sqrt{2m(V-E)}\, x/\hbar\right) + D \exp\left(\sqrt{2m(V-E)}\, x/\hbar\right)
\end{aligned}
$$

mit $C = (\tilde{\psi}_+/\sqrt{\kappa})\, e^{\kappa\tilde{x}_+}$ und $D = (\tilde{\psi}_-/\sqrt{\kappa})\, e^{-\kappa\tilde{x}_-}$.

In den beiden klassisch erlaubten Bereichen sind die Koeffizienten unterschiedlich. Insbesondere im linken klassisch erlaubten Bereich sind die Koeffizienten A und B endlich und unterschiedlich ($A \neq B$), während im rechten erlaubten Bereich $B = 0$ ist, da in diesem Bereich nur eine nach links laufende Welle zu finden ist.

Die Lösungen sind mit dem Ansatz aus der exakten Lösung identisch. Daher folgt bei Berücksichtigung der Stetigkeitsbedingungen bei $x = \pm L/2$ die exakte Lösung.