Stationärer, entarteter Fall

19.1.10

E_n sei zweifach entartet mit den Zust. $|n\rangle, |m\rangle$

$$\Psi_0 = a_n |n\rangle + a_m |m\rangle .$$

(Der Eigenraum zu E_n wird von $|n\rangle, |m\rangle$ aufgesp.)

(λ^0) : $(H_0 - E_0)\Psi_0 = 0$ gilt weiterhin.

(λ^1) : $(H_0 - E_0)\Psi_1 = (E_1 - H')\Psi_0$

(λ^2) : $(H_0 - E_0)\Psi_2$

Wir ~~mult~~ wenden $\langle m|$, $\langle n|$ auf (λ^1) an:

$$\underbrace{\langle m| H_0 - E_0 |\Psi_1\rangle}_{0} = \langle m| E_1 - H' |\Psi_0\rangle$$

$$= E_1 \underbrace{\langle m|\Psi_0\rangle}_{a_m} - a_n \langle m|H'|n\rangle - a_m \langle m|H'|m\rangle$$

$$\Rightarrow \quad E_1 a_m = a_n \langle m|H'|n\rangle + a_m \langle m|H'|m\rangle$$

Analog mit $\langle n|$ auf (λ^1) angew.

$$\Rightarrow \quad E_1 a_n = a_n \langle n|H'|n\rangle + a_m \langle n|H'|m\rangle$$

In Matrixform sind diese Gl.:

$$\begin{pmatrix} \langle n|H'|n\rangle & \langle n|H'|m\rangle \\ \langle m|H'|n\rangle & \langle m|H'|m\rangle \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} a_n \\ a_m \end{pmatrix} = E_1 \cdot \begin{pmatrix} a_n \\ a_m \end{pmatrix}$$

$$P \cdot H' \cdot P \cdot \Psi_0 = E_1 P \Psi_0$$

wobei P der Projektor ist, der auf den UR span$(|n\rangle, |m\rangle)$ projiziert: $P = |n\rangle\langle n| + |m\rangle\langle m|$.

Wir finden zwei Lösungen E_1^+, Ψ_0^+, E_1^-, Ψ_0^-

Falls $E_1^+ \neq E_1^-$ haben wir in 1. Ordnung einen nicht-entarteten Fall: Die Entartung ist aufgehoben; die höheren Ordnungen erfolgen analog zum nicht entarteten Falle

Falls $E_1^+ \neq E_1^-$ Theo

~~Bei~~ Wir wenden $\langle l|$ auf (λ^1) an, wobei $l \neq n,m$:

$$\langle l| H_0 - E_0 |\psi_1^\pm\rangle = \langle l| E_1^\pm - H' |\psi_0^\pm\rangle \qquad 19.1.'10$$

$$(\varepsilon_l - E_0)\langle l|\psi_1^\pm\rangle = E_1^\pm \langle l|\psi_0^\pm\rangle - \langle l|H'|\psi_0^\pm\rangle$$

Mit dem ~~o~~ orthogonalen Projektor Q, der auf $\mathrm{span}(|n\rangle,|m\rangle)^\perp$ projiziert ($Q = \mathbb{1} - P = \mathbb{1} - |n\rangle\langle n| - |m\rangle\langle m| = \sum_{l\neq n,m} |l\rangle\langle l|$)

Wir verw. Q, weil $\psi_0^+ \perp \psi_1^+$, jedoch $\psi_0^- \perp \psi_1^-$ nicht unbedingt gilt; dazu haben wir zu wenige Freiheitsgrade.

Q sorgt dafür, dass sich bel. keinen Anteil in $\mathrm{span}(|n\rangle,|m\rangle)$ hat:

$$|Q\psi_1^\pm\rangle = \sum_{l\neq n,m} \frac{\langle l|H'|\psi_0^\pm\rangle}{\varepsilon - \varepsilon_l}|l\rangle \qquad (+)$$

aus (λ^2) folgt analog wie nicht entarteter Theorie

$$E_2^\pm = \sum_{l\neq n,m}\frac{|\langle l|H'|\psi_0^\pm\rangle|^2}{\varepsilon-\varepsilon_l}$$

In Projektorenschreibw. ist (+):

$$Q|\psi_1^\pm\rangle = Q\frac{1}{\varepsilon - H_0} Q H' P|\psi_0^\pm\rangle$$

Falls $E_1^+ = E_1^-$ (Aufhebung der Entartung in 2. Ordnung)

$$E_1^+ = E_1^- = \varepsilon' \quad , \quad |\psi_0\rangle = a_n|n\rangle + a_m|m\rangle$$

Durch Entartung ist

$$\langle n|H'|m\rangle = \varepsilon'\cdot\delta_{nm}$$

Mit unserem nicht näher spezifizierten Ansatz $|\psi_0\rangle$ erh. wir

$$|Q\psi_1\rangle = \sum_{l\neq n,m}\frac{a_m\langle l|H'|m\rangle + a_n\langle l|H'|n\rangle}{\varepsilon'-\varepsilon_l}|l\rangle$$

Da $|m\rangle$ ~~Eigen~~ Eigenzust. von H_0, E_0 ist, gilt ($\langle m|$ auf (λ^2)):

$$0 = \langle m|H_0 - E_0|\psi_2\rangle = \langle m|E_1 - H'|\psi_1\rangle + E_2\langle m|\psi_0\rangle$$

Wir zerlegen ψ_1 in $|\psi_1\rangle = Q|\psi_1\rangle + P|\psi_1\rangle$

$$0 = \langle m|E_1 - H'|Q\psi_1\rangle + \underbrace{\langle m|E_1 - H'|P\psi_1\rangle}_{0} + E_2\langle m|\psi_0\rangle$$

Da $|P\psi_n\rangle$ Eigenzust. von H', E_n ist ~~...~~, gilt

19.1.10 $E_n |P\psi_n\rangle = H' |P\psi_n\rangle$.

$$0 = -\sum_{l\neq n,m} \frac{a_n \langle l|H'|n\rangle}{\varepsilon' - \varepsilon_l}\langle m|H'|l\rangle - \sum_{l\neq n,m}\frac{a_m\langle l|H'|m\rangle}{\varepsilon'-\varepsilon_l}\langle m|H'|l\rangle + a_m E_2$$

Analog

$$0 = -\sum_{l\neq n,m} \frac{a_n\langle l|H'|n\rangle}{\varepsilon'-\varepsilon_l}\langle n|H'|l\rangle - \sum_{l\neq n,m}\frac{a_m\langle l|H'|m\rangle}{\varepsilon'-\varepsilon_l}\langle n|H'|l\rangle + a_n E_2$$

$$\begin{pmatrix} \varepsilon_n' & \delta' \\ \delta'^* & \varepsilon_m' \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} a_n \\ a_m \end{pmatrix} = E_2 \begin{pmatrix} a_n \\ a_m \end{pmatrix}$$

Mit $\varepsilon_n' = \sum_{l\neq n,m} |\langle n|H'|l\rangle|^2/(\varepsilon'-\varepsilon_l)$

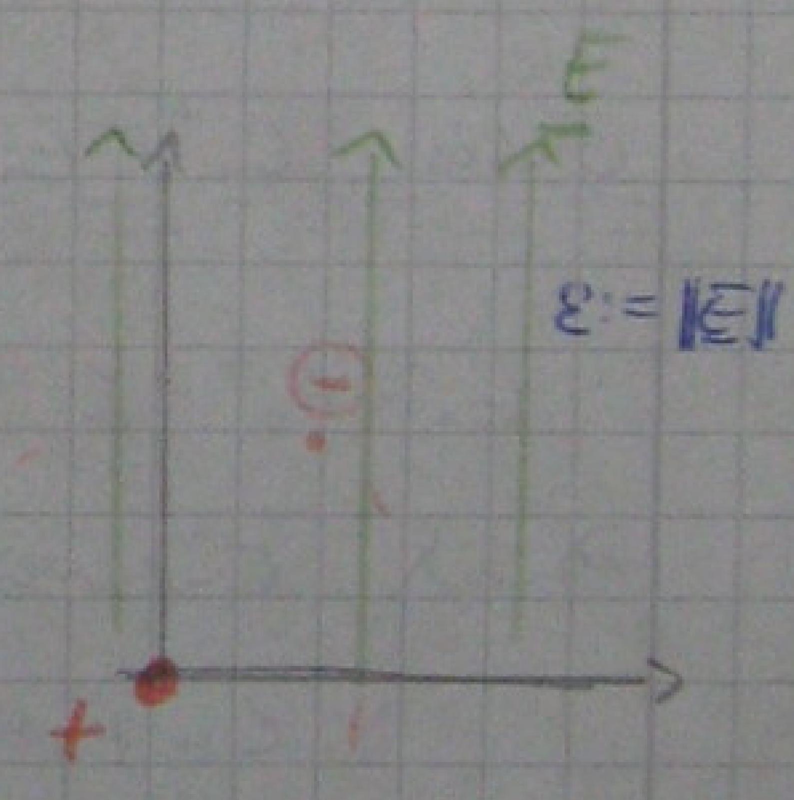
$\delta' = \sum_{l\neq m} \langle n|H|l\rangle\langle l|H'|m\rangle/(\varepsilon'-\varepsilon_l)$

In Projektor-Schreibw.

$$PH'Q\frac{1}{\varepsilon - H_0} QH' P\psi_0 = E_2 P\psi_0$$

Beispiel:

(1) Stark-Effekt im H-Atom



An das H-Atom wird ein $\underline{E}$-Feld gelegt.

Wir betr. $n = 2$ mit

$|2,0,0\rangle$, $|2,1,0\rangle$, $|2,1,-1\rangle$, $|2,1,1\rangle$

⇝ 4-fache Entartung (Entart. n^2)

Das ext. el. Feld wechselwirkt mit $H' = \underline{E}\,\underline{d}$

($\underline{d}$ ist Dipolmoment):

$H' = \underline{E}\,\underline{d} = \varepsilon d_z$ da $\underline{E} = \varepsilon\, \underline{e}_z$

$H' = \varepsilon \cdot e \cdot z$

Als Symmetrie erhalten wir Rotationssym. bzgl. d. z-Achse:

$[H', L_z] = 0$ also $[H, L_z] = 0$

Theo

19.1.10

Damit:

$$0 = \langle \alpha, m | [H' L_z] | \beta, m' \rangle$$
$$= \langle \alpha, m | H' L_z | \beta m' \rangle - \langle \alpha, m | L_z H' | \beta m' \rangle$$
$$= m' \langle \alpha m | H' | \beta m' \rangle - m \langle \alpha m | H' | \beta m' \rangle$$
$$= (m' - m) \langle \alpha m | H' | \beta m' \rangle$$

Für $m \neq m'$ folgt damit:

$$\langle \alpha m | H' | \beta m' \rangle = 0 \quad \text{für } m \neq m'$$

~~Es~~ Es wechselwirken nur Zst. mit gleichem m.

Eine weitere Symmetrie ist die Parität:

$$P z = - z P$$

$|2,1,0\rangle$ hat Parität -1

$|2,0,0\rangle$ " 1

$z|2,0,0\rangle$ " -1

$\langle 200 | z | 200 \rangle = 0$

↳ die Diagonale verschw.

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & \delta & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ \delta^* & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} a_{200} \\ a_{21-1} \\ a_{210} \\ a_{211} \end{pmatrix} = E_1 \begin{pmatrix} a_{200} \\ a_{21-1} \\ a_{210} \\ a_{211} \end{pmatrix}$$

$\Rightarrow \quad \delta = \langle 200 | H' | 210 \rangle$

- $E_1 = 0 \qquad |2,1,1\rangle, \; |2,1,-1\rangle$
- $E_1 = \delta \qquad (|2,0,0\rangle + |2,1,0\rangle)/\sqrt{2}$
- $E_1 = -\delta \qquad (|200\rangle - |210\rangle)/\sqrt{2}$

e^- schwirrt im xy-Ebene; es bemerkt nichts vom E-Feld

← e^- zeigt nach oben, rotiert um z-Achse (braucht mehr Energie)

↑ e^- zeigt nach unten, rotiert um z-Achse.

Wir ber. δ in Ortskoord.:

$$\delta = \langle 2,0,0 | E e z | 2,1,0 \rangle \qquad (\text{hier } z \text{ in } z = r\cos\vartheta)$$

$$= \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} d\vartheta \int_0^{r} dr \, \sin\vartheta \, r^2 \, \psi^*_{200}(r,\varphi,\vartheta) \cdot \psi_{210}(r,\varphi,\vartheta) \, E e r \cos\vartheta$$

Hilfe:

$$\psi_{200} = Y_{00}(\varphi,\vartheta) \cdot R_{20}(r), \quad Y_{00} = 1/\sqrt{4\pi}, \quad R_{20} \sim 2\kappa^{3/2}(1-\kappa r)\, e^{-\kappa r} \qquad \kappa = \frac{1}{2a_B}$$

$$\psi_{210} = Y_{10}(\varphi,\vartheta)\, R_{21}(r), \quad Y_{10} = \sqrt{3}\cos\vartheta / \sqrt{4\pi}, \quad R_{21} \sim \frac{(2\kappa)^{3/2}}{\sqrt{3}} \kappa r \, e^{-\kappa r}$$

19.1.'10

$$\delta = \varepsilon e \frac{1}{4\pi} 2\pi \underbrace{\int_{-1}^{1} dz\, z^2}_{2/3} \int_0^\infty dr \; r\, r^2\, 4\kappa^3 (1-\kappa r)\, \kappa r\, e^{-2\kappa r} \qquad y = 2\kappa r$$

$$= \frac{\varepsilon \cdot e}{3} \frac{1}{\kappa} 4 \int_0^\infty dy \; \frac{y^4 e^{-y}}{2^5} - \frac{y^5 e^{-y}}{2^6}$$

$$= \frac{\varepsilon e}{3} \cdot \cancel{\frac{1}{\kappa}} 2a_B\, 4 \underbrace{\left(\frac{24}{32} - \frac{120}{64} \right)}_{-9/8} = -3\, \varepsilon e\, a_B$$