

LÖSUNGSVORSCHLAG ZUM ÜBUNGSBLATT NR.3

Aufgabe 7

a.)

Wir betrachten im Folgenden Spin-1/2-Systeme. Der Hilbertraum $\mathcal{H}_{1/2}$ eines einzelnen Spinoperators (also S_x , S_y oder S_z) ist zweidimensional, weil seine Zustände von einer zweidimensionalen Basis aufgespannt werden. Gewöhnlich benutzt man dazu die Eigenzustände von S_z :

$$|+\rangle = \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |-\rangle = \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (1)$$

Bei dem in der Aufgabe angegebenen System handelt es sich um ein Zwei-Spin-System, das aus zwei Spin-1/2-Teilchen besteht. Dessen Hilbertraum ist ein Produktraum aus zwei Spin-1/2-Systemen

$$\mathcal{H}_{1/2,1/2} = \mathcal{H}_{1/2} \otimes \mathcal{H}_{1/2}, \quad (2)$$

und somit vierdimensional. Man benötigt also eine Basis aus vier Zuständen, um ihn aufspannen zu können. Dies sind die Produktzustände

$$|+, +\rangle = |+\rangle \otimes |+\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (3)$$

$$|+, -\rangle = |+\rangle \otimes |-\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (4)$$

$$|-, +\rangle = |-\rangle \otimes |+\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (5)$$

und

$$|-, -\rangle = |-\rangle \otimes |-\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (6)$$

Der Hamiltonoperator operiert auf diesem vierdimensionalen Raum und ist gegeben durch:

$$H = -J(S_{x,1}S_{x,2} + S_{y,1}S_{y,2} + S_{z,1}S_{z,2}). \quad (7)$$

Es ist bei Rechnungen immer geschickt, die Operatoren $S_{n,x}$ bzw. $S_{n,y}$ (hier für $n = 1, 2$) durch entsprechende Auf- und Absteigeoperatoren auszudrücken:

$$S_{n,x} = \frac{1}{2}(S_{n,+} + S_{n,-}), \quad S_{n,y} = \frac{1}{2i}(S_{n,+} - S_{n,-}). \quad (8)$$

Damit können wir den Hamiltonoperator wie folgt umschreiben:

$$\begin{aligned} H &= -J \left[\frac{1}{4}(S_{+,1} + S_{-,1})(S_{+,2} + S_{-,2}) - \frac{1}{4}(S_{+,1} - S_{-,1})(S_{+,2} - S_{-,2}) + S_{z,1}S_{z,2} \right] = \\ &= -\frac{J}{4} [S_{+,1}S_{+,2} + S_{+,1}S_{-,2} + S_{-,1}S_{+,2} + S_{-,1}S_{-,2} \\ &\quad - S_{+,1}S_{+,2} + S_{+,1}S_{-,2} + S_{-,1}S_{+,2} - S_{-,1}S_{-,2} + 4S_{z,1}S_{z,2}] = \\ &= -\frac{J}{2} [S_{+,1}S_{-,2} + S_{-,1}S_{+,2} + 2S_{z,1}S_{z,2}]. \end{aligned} \quad (9)$$

Wir berechnen nun die einzelnen Matrixelemente des Hamiltonoperators. Für Auf- und Absteigeoperatoren gilt im Allgemeinen, wenn man diese auf einen Gesamtdrehimpulseigenzustand $|j, m\rangle$ anwendet:

$$J_{\pm}|j, m\rangle = \hbar\sqrt{j(j+1) - m(m\pm 1)}|j, m\pm 1\rangle, \quad (10)$$

wobei j die Gesamtdrehimpulsquantenzahl und $m \in \{-j, -j+1, \dots, +j\}$ die magnetische Drehimpulsquantenzahl ist. Speziell für Spin-1/2 (mit verschwindendem Drehimpuls) gilt:

$$S_+|+\rangle = S_+ \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle = 0, \quad S_-|-\rangle = S_- \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle = \hbar \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle = \hbar|+\rangle, \quad (11a)$$

$$S_-|+\rangle = S_- \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle = \hbar \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle = \hbar|-\rangle, \quad S_+|-\rangle = S_+ \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle = 0. \quad (11b)$$

$S_{1,+}$, $S_{2,+}$, $S_{1,-}$, $S_{2,-}$, $S_{1,z}$ und $S_{2,z}$ sind 4×4 -Matrizen, wobei der erste Index angibt, auf welchen zweidimensionalen Unterraum die Matrix wirkt. Eine solche Matrix lässt sich somit in verschiedene Blöcke aufteilen. Im Wesentlichen gilt:

$$S_{1,+} = S_+ \otimes \mathbb{1}_2, \quad S_{2,+} = \mathbb{1}_2 \otimes S_+, \quad S_{1,-} = S_- \otimes \mathbb{1}_2, \quad (12a)$$

$$S_{2,-} = \mathbb{1}_2 \otimes S_-, \quad S_{1,z} = S_z \otimes \mathbb{1}_2, \quad S_{2,z} = \mathbb{1}_2 \otimes S_z. \quad (12b)$$

Die Matrix links von „ \otimes “ wirkt auf den Unterraum des ersten Spins (also den ersten beiden Komponenten eines Zustandes $|\bullet, \bullet\rangle$) und die Matrix rechts von „ \otimes “ wirkt auf den den des zweiten Spins (also die letzten beiden Komponenten eines Zustandes $|\bullet, \bullet\rangle$). Beispielsweise gilt dann:

$$\begin{aligned} \langle +, - | S_{z,1} S_{z,2} | +, - \rangle &= \langle +, - | (S_z \otimes \mathbb{1}_2)(\mathbb{1}_2 \otimes S_z) | +, - \rangle = \langle +, - | \frac{\hbar}{2} \cdot \left(-\frac{\hbar}{2} \right) | +, - \rangle = \\ &= -\frac{\hbar^2}{4} \langle +, - | +, - \rangle = -\frac{\hbar^2}{4}. \end{aligned} \quad (13)$$

Wir berechnen die Darstellung des Hamiltonoperators in der Basis $\{|+, +\rangle, |+, -\rangle, |-, +\rangle, |-, -\rangle\}$. Dazu werten wir die einzelnen Matrixelemente aus:

$$\begin{aligned} H_{11} &= \langle +, + | H | +, + \rangle = \\ &= -\frac{J}{2} \left\{ \underbrace{\langle +, + | S_{+1} S_{-2} | +, + \rangle}_{=0} + \underbrace{\langle +, + | S_{-1} S_{+2} | +, + \rangle}_{=0} + 2 \underbrace{\langle +, + | S_{z,1} S_{z,2} | +, + \rangle}_{=-\frac{\hbar^2}{4}} \right\} = -\frac{J\hbar^2}{4}. \end{aligned} \quad (14)$$

$$\begin{aligned} H_{12} &= \langle +, + | H | +, - \rangle = \\ &= -\frac{J}{2} \left\{ \underbrace{\langle +, + | S_{+1} S_{-2} | +, - \rangle}_{=0} + \underbrace{\langle +, + | S_{-1} S_{+2} | +, - \rangle}_{=0} + 2 \underbrace{\langle +, + | S_{z,1} S_{z,2} | +, - \rangle}_{=0} \right\} = 0. \end{aligned} \quad (15)$$

$$\begin{aligned} H_{13} &= \langle +, + | H | -, + \rangle = \\ &= -\frac{J}{2} \left\{ \underbrace{\langle +, + | S_{+1} S_{-2} | -, + \rangle}_{=0} + \underbrace{\langle +, + | S_{-1} S_{+2} | -, + \rangle}_{=0} + 2 \underbrace{\langle +, + | S_{z,1} S_{z,2} | -, + \rangle}_{=0} \right\} = 0. \end{aligned} \quad (16)$$

$$\begin{aligned} H_{14} &= \langle +, + | H | -, - \rangle = \\ &= -\frac{J}{2} \left\{ \underbrace{\langle +, + | S_{+1} S_{-2} | -, - \rangle}_{=0} + \underbrace{\langle +, + | S_{-1} S_{+2} | -, - \rangle}_{=0} + 2 \underbrace{\langle +, + | S_{z,1} S_{z,2} | -, - \rangle}_{=0} \right\} = 0. \end{aligned} \quad (17)$$

$$\begin{aligned} H_{22} &= \langle +, - | H | +, - \rangle = \\ &= -\frac{J}{2} \left\{ \underbrace{\langle +, - | S_{+1} S_{-2} | +, - \rangle}_{=0} + \underbrace{\langle +, - | S_{-1} S_{+2} | +, - \rangle}_{=0} + 2 \underbrace{\langle +, - | S_{z,1} S_{z,2} | +, - \rangle}_{=-\frac{\hbar^2}{4}} \right\} = \frac{J\hbar^2}{4}. \end{aligned} \quad (18)$$

$$\begin{aligned}
H_{23} &= \langle +, - | H | -, + \rangle = \\
&= -\frac{J}{2} \left\{ \underbrace{\langle +, - | S_{+1} S_{-2} | -, + \rangle}_{=\hbar^2} + \underbrace{\langle +, - | S_{-,1} S_{+2} | -, + \rangle}_{=0} + 2 \underbrace{\langle +, - | S_{z,1} S_{z,2} | -, + \rangle}_{=0} \right\} = -\frac{J\hbar^2}{2}. \quad (19)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
H_{24} &= \langle +, - | H | -, - \rangle = \\
&= -\frac{J}{2} \left\{ \underbrace{\langle +, - | S_{+1} S_{-2} | -, - \rangle}_{=0} + \underbrace{\langle +, - | S_{-,1} S_{+2} | -, - \rangle}_{=0} + 2 \underbrace{\langle +, - | S_{z,1} S_{z,2} | -, - \rangle}_{=0} \right\} = 0. \quad (20)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
H_{33} &= \langle -, + | H | -, + \rangle = \\
&= -\frac{J}{2} \left\{ \underbrace{\langle -, + | S_{+1} S_{-2} | -, + \rangle}_{=0} + \underbrace{\langle -, + | S_{-,1} S_{+2} | -, + \rangle}_{=0} + 2 \underbrace{\langle -, + | S_{z,1} S_{z,2} | -, + \rangle}_{=-\frac{\hbar^2}{4}} \right\} = \frac{J\hbar^2}{2}. \quad (21)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
H_{34} &= \langle -, + | H | -, - \rangle = \\
&= -\frac{J}{2} \left\{ \underbrace{\langle -, + | S_{+1} S_{-2} | -, - \rangle}_{=0} + \underbrace{\langle -, + | S_{-,1} S_{+2} | -, - \rangle}_{=0} + 2 \underbrace{\langle -, + | S_{z,1} S_{z,2} | -, - \rangle}_{=0} \right\} = 0. \quad (22)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
H_{44} &= \langle -, - | H | -, - \rangle = \\
&= -\frac{J}{2} \left\{ \underbrace{\langle -, - | S_{+1} S_{-2} | -, - \rangle}_{=0} + \underbrace{\langle -, - | S_{-,1} S_{+2} | -, - \rangle}_{=0} + 2 \underbrace{\langle -, - | S_{z,1} S_{z,2} | -, - \rangle}_{=-\frac{\hbar^2}{4}} \right\} = -\frac{J\hbar^2}{4}. \quad (23)
\end{aligned}$$

Da H hermitesch ist, folgen die an der Hauptdiagonalen gespiegelten Elemente durch komplexe Konjugation aus den obigen. Da diese alle reell sind, folgt:

$$\boxed{H = -\frac{J\hbar^2}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & 0 \\ 0 & 2 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}}. \quad (24)$$

b.)

Zu bestimmen sind Eigenwerte und Eigenvektoren der Matrix

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & 0 \\ 0 & 2 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (25)$$

Da die Matrix schon blockdiagonal ist, müssen nur die Eigenwerte und Eigenvektoren der 2×2 -Untermatrix

$$\begin{pmatrix} -1 & 2 \\ 2 & -1 \end{pmatrix}, \quad (26)$$

bestimmt werden. Die Eigenwerte sind 1 und -3 und die zugehörigen normierten Eigenvektoren

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}. \quad (27)$$

Die restlichen beiden Eigenwerte lassen sich von der Diagonalen von A direkt ablesen: diese sind gleich 1. Damit sind die Energieniveaus

$$E^{(1)} = E^{(2)} = E^{(3)} = -\frac{J\hbar^2}{4}, \quad E^{(4)} = \frac{3J\hbar^2}{4}, \quad (28)$$

und Energieeigenzustände gegeben durch:

$$\mathbf{e}^{(1)} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = |+, +\rangle, \quad \mathbf{e}^{(2)} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (29a)$$

$$\mathbf{e}^{(3)} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+, -\rangle + |-, +\rangle), \quad \mathbf{e}^{(4)} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+, -\rangle - |-, +\rangle). \quad (29b)$$

Die ersten drei Zustände gehören zur Energie $-\hbar^2 J/4$, welche somit dreifach entartet ist. Man bezeichnet diese Zustände auch als Triplet-Zustände. Diese Zustände sind symmetrisch bezüglich Vertauschen der beiden Spins. Der vierte Eigenzustand gehört zur Energie $3\hbar^2 J/4$; diese ist also einfach entartet. Der vierte Zustand verhält sich asymmetrisch, wenn die beiden Spins vertauscht werden. (Es ergibt sich derselbe Zustand, jedoch mit einem zusätzlichen Minuszeichen als Vorfaktor.) Entartung ist immer die Folge der Invarianz eines physikalischen Systems unter einer Transformation (Symmetrie). Die Transformation hier ist eine Drehung in jeweils beiden zweidimensionalen Spin-Unterräumen, welche durch die Liegruppe

$$SU(2) \otimes SU(2), \quad SU(2) \in \exp \left(i \sum_{a=1}^3 \frac{\sigma^a}{2} \theta^a \right), \quad (30)$$

beschrieben werden, wobei σ^1, σ^2 und σ^3 die Paulimatrizen und θ^a (für $a = 1, 2, 3$) reelle Parameter (Eulerwinkel) sind. Diese Darstellung mit den Paulimatrizen ist die sogenannte Spin-1/2-Darstellung der $SU(2)$. Der Produktraum der beiden Räume $\mathcal{H}^{(j_1)}$ und $\mathcal{H}^{(j_2)}$ (in denen Zustände mit Gesamtdrehimpuls j_1 bzw. j_2 gegeben sind) zerfällt in eine direkte Summe von irreduziblen Darstellungen. Im Allgemeinen gilt für beliebige Drehimpulse:

$$j_1 \otimes j_2 = (j_1 + j_2) \oplus (j_1 + j_2 - 1) \oplus \dots \oplus |j_1 - j_2|. \quad (31)$$

In diesem Falle mit $j_1 = j_2 = 1/2$ gilt

$$\frac{1}{2} \otimes \frac{1}{2} = 1 \oplus 0. \quad (32)$$

Diese Schreibweise bedeutet, dass der vierdimensionale Produktraum $\mathcal{H}_{1/2} \otimes \mathcal{H}_{1/2}$ (der durch die vierdimensionalen Zustände $|+, +\rangle, |+, -\rangle, |-, +\rangle$ und $|-, -\rangle$ aufgespannt wird) zerfällt in eine direkte Summe von irreduziblen Darstellungen. (Das sind im Wesentlichen Unterräume, die unter sich selbst transformieren. Durch $SU(2)$ -Transformationen kommt man aus einem solchen Unterraum nicht heraus.) Es gibt dann also eine Spin-1-Darstellung der Dimension 3, welche von den Triplet-Zuständen

$$|+, +\rangle = |1, 1\rangle, \quad |-, -\rangle = |1, -1\rangle, \quad \frac{1}{\sqrt{2}}(|+, -\rangle + |-, +\rangle) = |1, 0\rangle, \quad (33)$$

aufgespannt werden und eine Spin-0-Darstellung der Dimension 1, welche vom Singulett-Zustand

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(|+, -\rangle - |-, +\rangle) = |0, 0\rangle, \quad (34)$$

aufgespannt wird. Hierbei sind $|\bullet, \circ\rangle$ Zustände, bei denen \bullet für den gesamten Spin steht und \circ für die Spineinstellung. Der Entartungsgrad hängt mit der Dimensionalität der jeweiligen Räume zusammen.

Aufgabe 8

Das ungestörte Problem ist charakterisiert durch die zeitunabhängige Schrödingergleichung, also das Eigenwertproblem des Hamiltonoperators:

$$H_0 |n_0\rangle = E_n^{(0)} |n_0\rangle, \quad (35)$$

wobei $|n_0\rangle$ die ungestörten Zustände sind und $E_n^{(0)}$ die ungestörten Energieniveaus zu den Zuständen $|n_0\rangle$. Die Energien $E_n^{(0)}$ und Zustände $|n_0\rangle$ werden als bekannt vorausgesetzt; wir nehmen also an, dass das ungestörte

System, welches durch H_0 charakterisiert ist, bereits gelöst wurde. Dann wird eine Störung eingeschaltet, die durch einen Operator der Form λV beschrieben wird. Hierbei ist V der eigentliche Störoperator (das Potential) und λ ein Parameter, der charakteristisch für die Größe der Störung ist. Das gestörte Problem lautet somit:

$$(H_0 + \lambda V)|n\rangle = E_n|n\rangle, \quad (36)$$

wobei $|n\rangle$ die gestörten Eigenzustände des Operators $H_0 + \lambda V$ sind und E_n die zugehörigen Energieniveaus. Im Allgemeinen lässt sich dieses Problem nicht analytisch lösen und man ist darauf angewiesen, dass der Störparameter klein ist. Dann lässt sich eine sogenannte Störungsrechnung durchführen. Dabei nimmt man an, dass sich die Zustände $|n\rangle$ und Energien E_n nach dem Parameter λ entwickeln lassen in der Form

$$|n\rangle = |n_0\rangle + \lambda|n_1\rangle + \lambda^2|n_2\rangle + \lambda^3|n_3\rangle + \dots, \quad (37)$$

und

$$E_n = E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \lambda^3 E_n^{(3)} + \dots. \quad (38)$$

Diese Entwicklungen setzen wir oben ein und erhalten:

$$\begin{aligned} (H_0 + \lambda V) [|n_0\rangle + \lambda|n_1\rangle + \lambda^2|n_2\rangle + \lambda^3|n_3\rangle + \dots] = \\ = \left(E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \lambda^3 E_n^{(3)} + \dots \right) [|n_0\rangle + \lambda|n_1\rangle + \lambda^2|n_2\rangle + \lambda^3|n_3\rangle + \dots]. \end{aligned} \quad (39)$$

Das Ganze wird nun nach Potenzen von λ sortiert. Sammelt man alle Terme $\sim \lambda$, so führt dies auf

$$\lambda(H_0|n_1\rangle + V|n_0\rangle) = E_n^{(0)}|n_1\rangle + E_n^{(1)}|n_0\rangle = 0. \quad (40)$$

Eine weitere Bedingung ist, dass der Zustand des gestörten Problems, also $|n\rangle$, normiert sein soll:

$$\begin{aligned} \langle n|n\rangle = (\langle n_0| + \lambda\langle n_1| + \lambda^2\langle n_2| + \lambda^3\langle n_3| + \dots) (|n_0\rangle + \lambda|n_1\rangle + \lambda^2|n_2\rangle + \lambda^3|n_3\rangle + \dots) = \\ = \langle n_0|n_0\rangle + \lambda(\langle n_0|n_1\rangle + \langle n_1|n_0\rangle) + \lambda^2(\langle n_0|n_2\rangle + \langle n_1|n_1\rangle + \langle n_2|n_0\rangle) + \dots \stackrel{!}{=} 1. \end{aligned} \quad (41)$$

Daraus folgt also

$$\langle n_0|n_1\rangle + \langle n_1|n_0\rangle = \langle n_0|n_1\rangle + \langle n_0|n_1\rangle^* = 2\text{Re}(\langle n_0|n_1\rangle) \stackrel{!}{=} 0. \quad (42)$$

Betrachtet werden muss also nun:

$$H_0|n_1\rangle + V|n_0\rangle = E_n^{(0)}|n_1\rangle + E_n^{(1)}|n_0\rangle. \quad (43)$$

Hier multiplizieren wir von links mit $\langle n_0|$ und verwenden $\langle n_0|H_0 = E_n^{(0)}\langle n_0|$:

$$E_n^{(0)}\langle n_0|n_1\rangle + \langle n_0|V|n_0\rangle = E_n^{(0)}\langle n_0|n_1\rangle + E_n^{(1)}\langle n_0|n_0\rangle, \quad (44)$$

woraus sich

$$\boxed{E_n^{(1)} = \langle n_0|V|n_0\rangle}, \quad (45)$$

ergibt. Die gestörten Eigenzustände in erster Ordnung in λ erhalten wir, indem wir von links mit $\langle k_0| \neq \langle n_0|$ multiplizieren:

$$E_k^{(0)}\langle k_0|n_1\rangle + \langle k_0|V|n_0\rangle = E_n^{(0)}\langle k_0|n_1\rangle + E_n^{(1)}\langle k_0|n_0\rangle, \quad (46)$$

woraus sich dann

$$\langle k_0|n_1\rangle = \frac{\langle k_0|V|n_0\rangle}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}, \quad (47)$$

ergibt. Das sind gerade die Entwicklungskoeffizienten einer Entwicklung von $|n_1\rangle$ nach den Eigenvektoren $|k_0\rangle$, wobei $n \neq k$ ist. Allgemein gilt also:

$$|n_1\rangle = \sum_{k \neq n} |k_0\rangle \langle k_0|n_1\rangle = \boxed{\sum_{k \neq n} \frac{\langle k_0|V|n_0\rangle}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} |k_0\rangle}. \quad (48)$$

Die Energiekorrekturen zweiter Ordnung folgen aus der Bedingung, dass der Koeffizient $\sim \lambda^2$ verschwinden muss:

$$H_0|n_2\rangle + V|n_1\rangle = E_n^{(0)}|n_2\rangle + E_n^{(1)}|n_1\rangle + E_n^{(2)}|n_0\rangle. \quad (49)$$

Wir multiplizieren von links mit $\langle n_0|$ und erhalten:

$$E_n^{(0)}\langle n_0|n_2\rangle + \langle n_0|V|n_1\rangle = E_n^{(0)}\langle n_0|n_2\rangle + E_n^{(1)}\langle n_0|n_1\rangle + E_n^{(2)}\langle n_0|n_0\rangle, \quad (50)$$

und daraus folgt

$$\begin{aligned} E_n^{(2)} &= \langle n_0|V|n_1\rangle = \langle n_0|V \left(\sum_{k \neq n} \frac{\langle k_0|V|n_0\rangle}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} |k_0\rangle \right) = \sum_{k \neq n} \frac{\langle n_0|V|k_0\rangle \langle k_0|V|n_0\rangle}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} = \\ &= \boxed{\sum_{k \neq n} \frac{|\langle k_0|V|n_0\rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}}. \end{aligned} \quad (51)$$

a.)

Um die gestörten Energieniveaus in zweiter Ordnung zu erhalten, müssen wir mit $\langle k_0|$ (für $k \neq n$) durchmultiplizieren:

$$\langle k_0|H_0|n_2\rangle + \langle k_0|V|n_1\rangle = E_n^{(0)}\langle k_0|n_2\rangle + E_n^{(1)}\langle k_0|n_1\rangle + E_n^{(2)}\langle k_0|n_0\rangle. \quad (52)$$

Bei einem hermiteschen Operator sind die Eigenvektoren zu verschiedenen Eigenwerten orthogonal zueinander. Also gilt $\langle k_0|n_0\rangle = \delta_{kn} = 0$ und es folgt weiter:

$$\langle k_0|V|n_1\rangle = (E_n^{(0)} - E_k^{(0)})\langle k_0|n_2\rangle + E_n^{(1)}\langle k_0|n_1\rangle. \quad (53)$$

Das kann nach $\langle k_0|n_2\rangle$ aufgelöst werden. Weiterhin benötigen wird dann die Zustandskorrektur 1.Ordnung $|n_1\rangle$, die wir jedoch zuvor schon ausgerechnet haben. Damit gilt:

$$\begin{aligned} \langle k_0|n_2\rangle &= \frac{1}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} \left(\langle k_0|V|n_1\rangle - E_n^{(1)}\langle k_0|n_1\rangle \right) = \\ &= \frac{1}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} \left[\sum_{m \neq n} \left(\frac{\langle m_0|V|n_0\rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \langle k_0|V|m_0\rangle \right) - \langle n_0|V|n_0\rangle \frac{\langle k_0|V|n_0\rangle}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} \right]. \end{aligned} \quad (54)$$

Wir entwickeln die Zustandskorrekturen 2.Ordnung nach den bekannten Energieeigenzuständen des ungestörten Systems:

$$|n_2\rangle = \sum_k |k_0\rangle \langle k_0|n_2\rangle = \sum_{k \neq n} |k_0\rangle \langle k_0|n_2\rangle + |n_0\rangle \langle n_0|n_2\rangle. \quad (55)$$

$\langle k_0|n_2\rangle$ haben wir schon berechnet. Wir benötigen also noch $\langle n_0|n_2\rangle$ und das folgt aus der Normierungsbedingung $\langle n|n\rangle = 1$ (und zwar aus dem Term $\sim \lambda^2$):

$$\langle n_2|n_0\rangle + \langle n_1|n_1\rangle + \langle n_0|n_2\rangle = 0, \quad (56)$$

also

$$\langle n_0|n_2\rangle + \langle n_2|n_0\rangle^* + \langle n_1|n_1\rangle = 2\text{Re}(\langle n_0|n_2\rangle) + \langle n_1|n_1\rangle = 0. \quad (57)$$

Somit gilt:

$$\langle n_0|n_2\rangle = -\frac{1}{2}\langle n_1|n_1\rangle = -\frac{1}{2} \sum_{m, k \neq n} \frac{\langle n_0|V|m_0\rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \frac{\langle k_0|V|n_0\rangle}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} \langle m_0|k_0\rangle = -\frac{1}{2} \sum_{k \neq n} \frac{|\langle n_0|V|k_0\rangle|^2}{(E_n^{(0)} - E_k^{(0)})^2}. \quad (58)$$

Damit müssen wir jetzt nur noch einsetzen und erhalten das Endergebnis:

$$\boxed{|n_2\rangle = \sum_{m, k \neq 0} \left[\frac{\langle k_0|V|m_0\rangle \langle m_0|V|n_0\rangle}{(E_n^{(0)} - E_m^{(0)})(E_n^{(0)} - E_k^{(0)})} |k_0\rangle - \sum_{k \neq n} \left[\frac{\langle n_0|V|n_0\rangle \langle k_0|V|n_0\rangle}{(E_n^{(0)} - E_k^{(0)})^2} |k_0\rangle \right. \right.} \quad (59)$$

$$\left. \left. - \frac{1}{2} \sum_{k \neq n} \left[\frac{|\langle n_0|V|k_0\rangle|^2}{(E_n^{(0)} - E_k^{(0)})^2} |n_0\rangle \right] \right. \right.$$

b.)

Siehe Musterlösung :-)

Aufgabe 9

Bei einem Hamiltonoperator, der nur \mathbf{L}^2 enthält, tritt eine $(2l + 1)$ -fache Entartung der Energie auf. Die Entartung kommt zustande von der großen Symmetrie des Hamiltonoperators bezüglich Drehungen (Transformationen unter der Drehgruppe $SO(3)$) und der Transformation $\mathbf{L} \mapsto -\mathbf{L}$.

a.)

Da $[L^2, L_z] = 0$ ist, besitzen die Operatoren L^2 und L_z einen gemeinsamen Satz von Eigenzuständen, nämlich $|l, m\rangle$, wobei $\langle r|l, m\rangle = Y_l^m(\vartheta, \varphi)$ die Kugelflächenfunktionen sind. Damit erhalten wir sofort die Energieniveaus, indem wir dem Hamiltonoperator auf diese Zustände $|l, m\rangle$ anwenden und beachten, dass

$$L^2|l, m\rangle = \hbar l(l+1)|l, m\rangle, \quad L_z|l, m\rangle = m\hbar|l, m\rangle, \quad (59)$$

gilt:

$$\boxed{E_{l,m}^{(0)} = a\hbar^2 l(l+1) + b\hbar^2 m^2.} \quad (60)$$

Zustände $|l, 0\rangle$ ($m = 0$) sind einfach entartet. Die restlichen Zustände $|l, m\rangle$ mit $m \neq 0$ sind doppelt entartet, weil m quadratisch vorkommt. Die Zustände $|l, m\rangle$ und $|l, -m\rangle$ besitzen also dieselbe Energie. Hier wird die Entartung teilweise aufgehoben, weil durch L_z^2 ein symmetriebrechender Term eingeführt wird. H ist jetzt nur noch invariant bezüglich Drehungen in der x - y -Ebene (Drehgruppe $SO(2)$) und unter $\mathcal{L} \mapsto -\mathcal{L}$.

b.)

Siehe Musterlösung :-)

c.)

Im Allgemeinen betrachtet man ein Energieniveau $E_n^{(0)}$, das f -fach entartet ist, zum dem also die Energieeigenzustände $|\phi_{n_a}\rangle$ gehören mit $a = 1, 2, \dots, f$. Um die Energiekorrekturen erster Ordnung und die Eigenzustände nullter Ordnung zu erhalten, muss man für die entarteten Zustände die Matrix

$$\widehat{V} = \begin{pmatrix} V_{11} & V_{12} & \dots & V_{1f} \\ V_{21} & V_{22} & \dots & V_{2f} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ V_{f1} & V_{f2} & \dots & V_{ff} \end{pmatrix}, \quad (61)$$

mit den Matrixelementen $V_{\alpha\beta} = \langle \phi_{n_\alpha} | \widehat{V} | \phi_{n_\beta} \rangle$ betrachten und diese diagonalisieren. Die Eigenwerte sind die Energiekorrekturen erster Ordnung und die Eigenzustände sind die zugehörigen Eigenzustände nullter Ordnung. Durch eine beliebig kleine Störung mischen also die entarteten Eigenzustände sofort.

Hier sind die zu untersuchenden Matrixelemente gegeben durch $\langle l, m' | cL_y^2 | l, m'' \rangle$. Für $m' \neq \pm 1$ und $m'' \neq \pm 1$ verschwinden die Nichtdiagonalelemente. Die Matrix muss also nicht diagonalisiert werden und es folgen die Energiekorrekturen erster Ordnung:

$$\langle l, m' | cL_y^2 | l, m' \rangle = \frac{c}{2} [l(l+1) - m'^2] \hbar^2. \quad (62)$$

Für $m' = \pm 1$ und $m'' = \pm 1$ sieht die Matrix folgendermaßen aus:

$$\widehat{V} = \frac{1}{4} \hbar^2 c^2 \begin{pmatrix} 2[l(l+1) - 1] & -l(l+1) \\ -l(l+1) & 2[l(l+1) - 1] \end{pmatrix}. \quad (63)$$

Diagonalisierung der Matrix führt auf:

$$\widehat{V}' = \frac{1}{4} \hbar^2 c^2 \begin{pmatrix} 3l(l+1) - 2 & 0 \\ 0 & l(l+1) - 2 \end{pmatrix}. \quad (64)$$

Die Energiekorrekturen 1.Ordnung sind also gegeben durch

$$\boxed{E_{l,m=1}^{(1)} = \frac{c}{4}\hbar^2[3l(l+1) - 2], \quad E_{l,m=-1}^{(1)} = \frac{c}{4}\hbar^2[l(l+1) - 2],} \quad (65)$$

und die zugehörigen normierten Eigenzustände nullter Ordnung lauten:

$$\mathbf{e}^{(1)} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1, 1\rangle + |1, -1\rangle), \quad \mathbf{e}^{(2)} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1, 1\rangle - |1, -1\rangle). \quad (66)$$

Wohlmerkt handelt es sich hierbei um Eigenzustände nullter Ordnung (!) Störungstheorie, was man daran sehen kann, dass diese nicht vom Parameter c abhängen, durch den die Störung charakterisiert ist. Die Eigenzustände des ungestörten Systems mischen also bei einer beliebig kleinen Störung bereits miteinander. Wir erkennen, dass die Entartung für $m = \pm 1$ in erster Ordnung Störungstheorie aufgehoben wird. (Für Zustände mit $m \neq \pm 1$ passiert dies erst auf m -ter Ordnung Störungstheorie.) Dies liegt daran, dass die Symmetrie des Hamiltonoperators durch den Störterm weiter gebrochen wird. Hier liegt nur noch die Symmetrie bezüglich der Transformation $\mathbf{L} \mapsto -\mathbf{L}$ vor.