Klausur

06.07.10 (Di) H0105 Hauptgebäude

7^{30} pünktlich!

Online-Anmeldung:
30.06. 0^{00}h
– 04.07 23^{59} h

Nachklausur: 14.07. (Mittwoch)
7^{30}, H 3503

Stoff: Übungsaufgaben, Grundgleichungen und wichtige Definitionen

plus:
Stoff der VL dieser Woche (Störungstheorie)
und der letzten Woche ($\underline{B}$-Feld)

Kriterien für das Bestehen: Teilnahme an der
50% in der Klausur. Nachklausur ist möglich $\geq 35\%$

VII. Näherungsverfahren

VII.1. Zeitunabhängige Störungstheorie

geeignet für Fragestellungen, bei denen der Hamiltonoperator $\hat{H}$ aufgespalten werden kann in einen „ungestörten" Anteil $\hat{H}_0$ und eine „Störung" $\hat{H}_1$

also: $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1$ ..

hier: Fokus auf zeitunabhängige Probleme

Voraussetzungen: – Eigenwertproblem zu $\hat{H}_0$ exakt lösbar

– Störung klein

gesucht: $\boxed{\hat{H}|n\rangle = E_n|n\rangle}$ mit $\hat{H}_0|n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)}|n^{(0)}\rangle$

bekannt

Störung: $\hat{H}_1 = \lambda \hat{V}$ „Störoperator" (zeitunabhängig)

„Störparameter"

Annahme: $\lambda \ll 1$

Nun muß unterschieden werden, ob man ein nicht-entartetes oder ein entartetes Energieniveau $\underbrace{}_{E_n^{(0)}}$ betrachtet!

VII.1.1. Störung eines nicht entarteten Niveaus

Idee: Entwicklung der Energien und Zustände in Potenzen des Störparameters λ

$$E_n = E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \ldots$$

$$|n\rangle = |n^{(0)}\rangle + \lambda|n^{(1)}\rangle + \lambda^2|n^{(2)}\rangle + \ldots$$

mit $E_n^{(\alpha)}$, $|n^{(\alpha)}\rangle$ mit $\alpha \geq 1$

„Korrekturterme der Ordnung α"

$\lambda \ll 1$: Reihen können nach wenigen Termen abgebrochen werden!

<u>Konstruktion der Korrekturterme:</u>

$$\hat{H}|n\rangle \stackrel{!}{=} E_n|n\rangle \quad \text{mit } \hat{H} = \hat{H}_0 + \lambda\hat{V}$$

$$\Rightarrow (\hat{H}_0 + \lambda\hat{V})\left(|n^{(0)}\rangle + \lambda|n^{(1)}\rangle + \lambda^2|n^{(2)}\rangle + \ldots\ldots\right)$$
$$= \left(E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \ldots\ldots\right)\left(|n^{(0)}\rangle + \lambda|n^{(1)}\rangle + \lambda^2|n^{(2)}\rangle + \ldots\ldots\right)$$

Beide Seiten der Gleichung werden nach Potenzen von λ sortiert.

$$\hat{H}_0|n^{(0)}\rangle + \lambda\left(\hat{V}|n^{(0)}\rangle + \hat{H}_0|n^{(1)}\rangle\right) + \lambda^2\left(\hat{V}|n^{(1)}\rangle + \hat{H}_0|n^{(2)}\rangle\right) + \mathcal{O}(\lambda^3)$$

$$= E_n^{(0)}|n^{(0)}\rangle + \lambda\left(E_n^{(1)}|n^{(0)}\rangle + E_n^{(0)}|n^{(1)}\rangle\right) + \lambda^2\left(E_n^{(2)}|n^{(0)}\rangle + E_n^{(1)}|n^{(1)}\rangle + E_n^{(0)}|n^{(2)}\rangle\right) + \mathcal{O}(\lambda^3)$$

Betrachte getrennt die einzelnen Ordnungen und fordere, dass die Koeffizienten jeweils gleich sind

Nullte Ordnung ($\alpha = 0$)

$$\hat{H}_0 |n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)} |n^{(0)}\rangle$$

Zeitunabhängige SG des ungestörten Problems! $\Longrightarrow$ nichts Neues

Für $\lambda \Longrightarrow 0$ erhält man also die alten Energie und Zustände
— Konsistent mit unserem Ansatz für $\hat{H}$

Erste Ordnung ($\alpha = 1$)

$$\hat{V}|n^{(0)}\rangle + \hat{H}_0 |n^{(1)}\rangle \overset{!}{=} E_n^{(1)} |n^{(0)}\rangle + E_n^{(0)} |n^{(1)}\rangle$$

$$\Leftrightarrow (\hat{H}_0 - E_n^{(0)}) |n^{(1)}\rangle = (E_n^{(1)} - \hat{V}) |n^{(0)}\rangle$$

analog zweite Ordnung ($\alpha = 2$)

$$(\hat{H}_0 - E_n^{(0)}) |n^{(2)}\rangle = E_n^{(2)} |n^{(0)}\rangle + (E_n^{(1)} - \hat{V}) |n^{(1)}\rangle$$

$\vdots$

explizite Ausdrücke für die Korrekturterme:

$$\alpha = 1 \; : \boxed{(\hat{H}_0 - E_n^{(0)})|n^{(1)}\rangle = (E_n^{(1)} - \hat{V})|n^{(0)}\rangle} \; \circledast$$

entwickle die $|n^{(1)}\rangle$ nach den EZ des ungestörten Problems

$$|n^{(1)}\rangle = \hat{1}|n^{(1)}\rangle$$

$$= \sum_{k^0} |k^{(0)}\rangle \overbrace{\langle k^{(0)}|n^{(1)}\rangle}^{\text{Entwicklungskoeffizienten}}$$

EZ des ungestörten Problems

Einsetzen in $\circledast$

$$(\hat{H}_0 - E_n^{(0)}) \sum_{k^{(0)}} |k^{(0)}\rangle\langle k^{(0)}|n^{(1)}\rangle$$

$$= (E_n^{(1)} - \hat{V})|n^{(0)}\rangle$$

multipliziere von links mit $\langle m^{(0)}|$

(EZ des ungestörten Problems)

$$\Rightarrow \sum_{k^{(0)}} \Big(\underbrace{\langle m^{(0)}|\overbrace{\hat{H}_0|k^{(0)}\rangle}^{E_k^{(0)}|k^{(0)}\rangle}}_{E_k^{(0)}\langle m^{(0)}|k^{(0)}\rangle} - E_n^0 \underbrace{\langle m^{(0)}|k^{(0)}\rangle}_{\delta_{m,k}} \Big) \langle k^{(0)}|n^{(1)}\rangle$$

$$= E_n^{(1)} \underbrace{\langle m^{(0)}|n^{(0)}\rangle}_{\delta_{m,n}} - \langle m^{(0)}|\hat{V}|n^{(0)}\rangle$$

Annahme: Die EZ des ungestörten Problems sind orthonormiert

$$\Rightarrow \sum_{k^{(0)}} \left(E_k^{(0)} \delta_{mk} - E_n^{(0)} \delta_{mk} \right) \langle k^{(0)} | n^{(1)} \rangle = E_n^{(1)} \delta_{mn} - \langle m^{(0)} | \hat{V} | n^{(0)} \rangle$$

$$\Leftrightarrow \left(E_m^{(0)} - E_n^{(0)} \right) \langle m^{(0)} | n^{(1)} \rangle = E_n^{(1)} \delta_{mn} - \langle m^{(0)} | \hat{V} | n^{(0)} \rangle$$

Fallunterscheidung:

$m=n$ $\qquad 0 = E_n^{(1)} - \langle n^{(0)} | \hat{V} | n^{(0)} \rangle$

$$\Rightarrow \boxed{E_n^{(1)} = \langle n^{(0)} | \hat{V} | n^{(0)} \rangle}$$

Die Energiekorrektur 1. Ordnung entspricht dem Erwartungswert des Störoperators im entsprechenden ungestörten Zustand!

$m \neq n$: $\qquad \left(E_m^{(0)} - E_n^{(0)} \right) \langle m^{(0)} | n^{(1)} \rangle = - \langle m^{(0)} | \hat{V} | n^{(0)} \rangle$

$$\Rightarrow \langle m^{(0)}|n^{(1)}\rangle = \frac{\langle m^{(0)}|\hat{V}|n^{(0)}\rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \quad (**)$$

Erinnerung: Unser Ansatz für $|n^{(1)}\rangle$ war gewesen

$$|n^{(1)}\rangle = \sum_{k^{(0)}} |k^{(0)}\rangle\langle k^{(0)}|n^{(1)}\rangle$$

Einsetzen von (**)

$$\Rightarrow |n^{(1)}\rangle = \sum_{k\neq n} |k^{(0)}\rangle \frac{\langle k^{(0)}|\hat{V}|n^{(0)}\rangle}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}$$

Zusammenfassend 1. Ordnung Störungstheorie (nicht-entartet)

$$E_n = E^{(0)} + \underbrace{\lambda \langle n^{(0)}|\hat{V}|n^{(0)}\rangle}_{\langle n^{(0)}|\hat{H}_1|n^{(0)}\rangle}$$

$$|n\rangle = |n^{(0)}\rangle + \lambda \sum_{k\neq n} |k^{(0)}\rangle \frac{\langle k^{(0)}|\hat{V}|n^{(0)}\rangle}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}$$

<u>man sieht:</u>

- Es war wichtig, nicht-entartete EW vorauszusetzen, sonst gäbe es im Ausdruck für die Zustände divergierende Terme! (in denen der Nenner Null wird)

- Durch die Störung werden verschiedene EZ des ungestörten Problems linear kombiniert

Dabei haben Zustände $|k^{(0)}\rangle$ mit Energien dicht an $E_n^{(0)}$ besonders hohes Gewicht

---

Analoges Vorgehen für die höheren Ordnungen!

Energiekorrektur 2. Ordnung

$$E_n^{(2)} = \sum_{k \neq n} \frac{|\langle k^{(0)}|\hat{V}|n^{(0)}\rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}$$

wichtig für nicht ganz so kleine Störungen sowie für Fälle, in denen die Korrekturterme erster Ordnung verschwinden!

VII.1.2. Zeitunabhängige Störungsrechnung für entartete Zustände

Annahme: Zum Energieniveau $E_n^{(0)}$ des ungestörten Systems gehören s unabhängige EZ

$$\hat{H}_0 |n^{(0)}, \alpha\rangle = E_n^{(0)} |n^{(0)}, \alpha\rangle$$

mit $\alpha = 1, \dots, s$

„s-fache Entartung"

und $\langle n^{(0)}, \alpha | m^{(0)}, \beta\rangle = \delta_{nm} \delta_{\alpha\beta}$

Eine äußere Störung hebt die Entartung typischerweise (jedenfalls partiell) auf.

Andererseits soll in der Störungstheorie für $\lambda \to 0$ wieder „richtige" Zustand aus dem Eigenraum zu $E_n^{(0)}$ herauskommen

~~D.h.~~ es ergibt sich ~~folgende~~ Frage: Was ist der Zustand $|n^{(0)}\rangle$ in der Störungsentwicklung $|n\rangle = |n^{(0)}\rangle + \lambda |n^{(1)}\rangle + \dots$

Lösung:

Man macht für $|n^{(0)}\rangle$ den folgenden Ansatz:

$$\underbrace{|n^{(0)}\rangle} = \sum_{\alpha=1}^{s} c_\alpha \underbrace{|n^{(0)},\alpha\rangle}_{\text{EZ zum Eigenwert } E_n^{(0)}}$$

Größe, mit der man die Störungstheorie macht!

Entwicklungskoeffizient