

Aufgabe 1:

(a) Aufgabe 10-1 ①

$$|t_1+\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}; |t_1-\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}; |t_2+\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}; |t_2-\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$S_{t1} = \frac{1}{\hbar} [|t_1+\rangle\langle t_1+| + |t_1-\rangle\langle t_1-|] = \frac{1}{\hbar} \left[\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} (0010) + \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} (0001) \right] =$$

$$= \frac{1}{\hbar} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$S_{-1} = \frac{1}{\hbar} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}; S_{t2} = \frac{1}{\hbar} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; S_{-2} = \frac{1}{\hbar} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$S_{z1} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}; S_{z2} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$H = -J (S_{x1} S_{x2} + S_{y1} S_{y2} + S_{z1} S_{z2}) =$$

$$= -J \left[\frac{1}{2} (S_{t1} + S_{-1}) \frac{1}{2} (S_{t2} + S_{-2}) + \right.$$

$$\left. + \frac{i}{2} (-S_{t1} + S_{-1}) \cdot \frac{i}{2} (-S_{t2} + S_{-2}) + S_{z1} S_{z2} \right] =$$

$$S_+ = S_x + i S_y$$

$$S_- = S_x - i S_y$$

$$S_x = \frac{1}{2} (S_+ + S_-)$$

$$S_y = \frac{i}{2} (-S_+ + S_-)$$

$$= -J \left(\frac{1}{2} S_{-1} S_{t2} + \frac{1}{2} S_{t1} S_{-2} + S_{z1} S_{z2} \right)$$

$$= -J \left[\frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} + \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} + \right.$$

$$\left. + \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \right] =$$

$$= -J \frac{\hbar^2}{4} \left[2 \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} + 2 \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \right] \quad (2)$$

$$= -J \frac{\hbar^2}{4} \underbrace{\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & 0 \\ 0 & 2 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}}_A$$

(b) Eigenvalues of Matrix A:

$$\lambda_A^{(1)} = \lambda_A^{(2)} = \lambda_A^{(3)} = 1; \quad \lambda_A^{(4)} = -3$$

Eigenvalues of H:

$$\lambda_H^{(1)} = \lambda_H^{(2)} = \lambda_H^{(3)} = -\frac{\hbar^2 J}{4}; \quad \lambda_H^{(4)} = \frac{3\hbar^2 J}{4}$$

Eigenvectors:

$$e_H^{(1)} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}; \quad e_H^{(2)} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}; \quad e_H^{(3)} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}; \quad e_H^{(4)} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

(c) Note that $[\vec{S}_1, \vec{S}_2] = 0$.

$$\vec{S}^2 = (\vec{S}_1 + \vec{S}_2)^2 = \vec{S}_1^2 + \vec{S}_2^2 + 2\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 =$$

$$= \underbrace{\frac{3}{4}\hbar^2 + \frac{3}{4}\hbar^2}_{\text{just numbers}} - \frac{2}{J} H = \frac{3}{2}\hbar^2 - \frac{2}{J} H$$

Eigenvalues:

$$\lambda_{\vec{S}^2}^{(1)} = \lambda_{\vec{S}^2}^{(2)} = \lambda_{\vec{S}^2}^{(3)} = \frac{3}{2}\hbar^2 - \frac{2}{J} \left(-\frac{\hbar^2 J}{4}\right) = 2\hbar^2$$

$$\lambda_{\vec{S}^2}^{(4)} = \frac{3}{2}\hbar^2 - \frac{2}{J} \frac{3\hbar^2 J}{4} = 0$$

$$(d) S_z = S_{z1} + S_{z2} = \frac{\hbar}{2} \left[\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \right] = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$\text{Eigenvalues: } \lambda_{S_z}^{(1)} = \frac{\hbar}{2}; \quad \lambda_{S_z}^{(2)} = \lambda_{S_z}^{(3)} = 0; \quad \lambda_{S_z}^{(4)} = -\frac{\hbar}{2}$$

Aufgabe 2: Wir haben: $H = H_0 + \lambda W$ mit

$$H_0 |\varphi_n\rangle = E_n^{(0)} |\varphi_n\rangle \quad (\text{ungestörtes Problem}) \quad \text{und}$$

$$H |\psi_n\rangle = E_n |\psi_n\rangle \quad (\text{gestörtes Problem}).$$

Energie Korrekturen: $E_n^{(1)} = \langle \varphi_n | W | \varphi_n \rangle$ und $E_n^{(2)} = \sum_{k \neq n} \frac{|\langle \varphi_n | W | \varphi_k \rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}$.

Zustand in 1. Ordnung: $|\psi_n\rangle = |\varphi_n\rangle + \sum_{k \neq n} \frac{|\langle \varphi_n | W | \varphi_k \rangle|}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} |\varphi_k\rangle$.

Für das ungestörte Problem haben wir:

$$\langle x | \varphi_n \rangle = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\pi \frac{x}{a}\right)$$

$$E_n^{(0)} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m a^2} n^2$$

Das einzige Integral, das wir brauchen ist:

$$\begin{aligned} \langle \varphi_n | W | \varphi_k \rangle &= \frac{2V_0}{a} \int_0^a dx \sin\left(\pi \frac{x}{a}\right) \sin\left(k\pi \frac{x}{a}\right) \\ &= \frac{2V_0}{\pi} \int_0^{\gamma\pi} dz \sin(nz) \sin(kz) \\ &= \frac{\sin(n-k)\gamma\pi}{n-k} - \frac{\sin(n+k)\gamma\pi}{n+k} \end{aligned}$$

Für $n = k$ kann man direkt integrieren und erhält

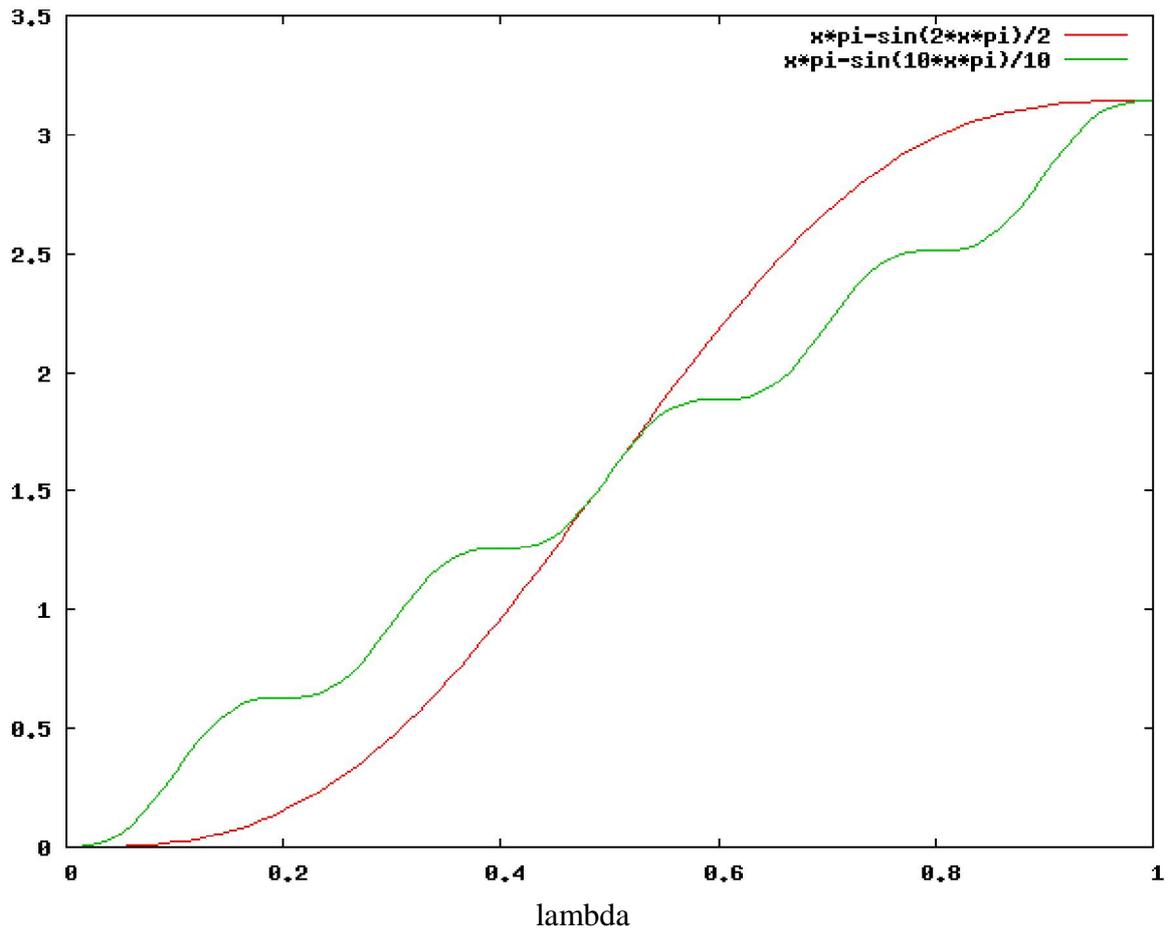
$$E_n^{(1)} = \frac{V_0}{\pi} \left[\gamma\pi - \frac{\sin(2n\gamma\pi)}{2n} \right]$$

Für $\gamma = \frac{1}{2}$ ergibt sich $E_n^{(1)} = \frac{V_0}{2}$ ansonsten hat man einen oszillierenden Verlauf, der mit

wachsendem n in der Frequenz ansteigt aber auch kleiner wird. Das macht Sinn, denn wenn Sie das ungestörte Potential als Nullpunkt auffassen, dann „wirkt“ ja gerade in der Hälfte des Potentialtopfs die Verschiebung V_0 . Hätte man $\gamma = 1$, so würde sich einfach das ganze Spektrum um V_0 nach oben verschieben.

Wenn man also $\gamma = 0$ kontinuierlich erhöht dann interpoliert die Energiekorrektur zwischen keiner Änderung (für $\gamma = 0$) hat man ja auch keine Störung unabhängig von V_0 . Was passiert nun für die Korrekturen angeregter Zustände: Auch hier „fühlt“ die Wellenfunktion in dem Bereich wo das Potential wirkt, die Störung. Für $\gamma = 1$ verschiebt man auch hier das Potential einfach um V_0 nach oben. Die höher angeregten Zustände oszillieren aber und damit schiebt man die Stufe der Störung als Funktion von γ also abwechselnd durch Gebiete hoher und niedriger Wahrscheinlichkeitsdichte. In letzteren „wirkt“ die Störung nicht (Beitrag zum Erwartungswert Null), d.h. die Energiekorrektur oszilliert. Je höher das n des angeregten Zustands, desto schneller oszilliert die Funktion, folglich wird die Energiekorrektur immer mehr proportional zu γ . Das ist im folgenden für 2 Beispiele skizziert.

Beispiel (in Einheiten von $\frac{V_0}{\pi}$) für $n=1$ und $n=5$



Für die 2. Ordnung ergibt sich für die Nenner:

$$E_n^{(0)} - E_k^{(0)} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} (n^2 - k^2)$$

Und damit für die Korrektur:

$$E_n^{(2)} = \sum_{k \neq n} \frac{\left(\frac{V_0}{\pi}\right)^2 \left[\frac{\sin((n-k)\gamma\pi)}{n-k} - \frac{\sin((n+k)\gamma\pi)}{n+k} \right]^2}{\frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} (n^2 - k^2)}$$

Wir betrachten nun den Spezialfall $n=1$ mit $\gamma = \frac{1}{2}$. Dann muss $k=2m$ sein für ganzzahliges m ,

sonst verschwindet das Matrixelement. Für $k=2m$ ergibt sich dann aber:

$$\frac{\sin((1-2m)\gamma\pi)}{1-2m} - \frac{\sin((1+2m)\gamma\pi)}{1+2m} = \frac{(-)^m}{1-2m} - \frac{(-)^m}{1+2m} = \frac{4m(-)^m}{1-4m^2}$$

Daraus ergibt sich:

$$E_1^{(2)} = \frac{2m\tilde{a}^2}{\hbar^2\pi^2} \left(\frac{V_0}{\pi}\right)^2 \sum_{\nu=1}^{\infty} \frac{16\nu^2}{(1-4\nu^2)^3} = -\frac{m\tilde{a}^2}{2\hbar^2\pi^2} \left(\frac{V_0}{\pi}\right)^2 \sum_{\nu=1}^{\infty} \frac{\nu^2}{\left[\nu^2 - \left(\frac{1}{2}\right)^2\right]^3}$$

Es gibt eine Formel (müssen die Studenten nicht wissen) um diese Konstante auszurechnen:

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{n^2}{\left[n^2 - a^2\right]^3} = \frac{\pi}{16a^3} \cot \pi a - \frac{\pi^2}{16a^2} \operatorname{cosec}^2(\pi a) (1 - 2\pi a \cot \pi a)$$

$$\approx 2.46 \text{ für } a = \frac{1}{2}$$

Entscheidend, ist dass die Energiekorrektur proportional zu V_0^2 ist, was man auch hätte raten können! Da die Korrektur insgesamt eine Energie sein muss, tritt der inverse charakteristische Niveauabstand als Vorfaktor auf. Das hätte man auch raten können!

Nach der Diskussion der Energiekorrektur erster Ordnung diskutieren wir nun noch das Verhalten für höher angeregte Zustände: Für $\gamma = \frac{1}{2}$ ergibt sich für

$$\Delta_n^{(2)} = \sum_{k \neq n} \frac{\left[\frac{\sin((n-k)\gamma\pi)}{n-k} - \frac{\sin((n+k)\gamma\pi)}{n+k} \right]^2}{(n^2 - k^2)}$$

N	$\Delta_n^{(2)}$
1	-2.467
2	1.851
3	-0.274
4	0.463
5	-0.099
6	0.206
7	-0.050
8	0.116
9	-0.030

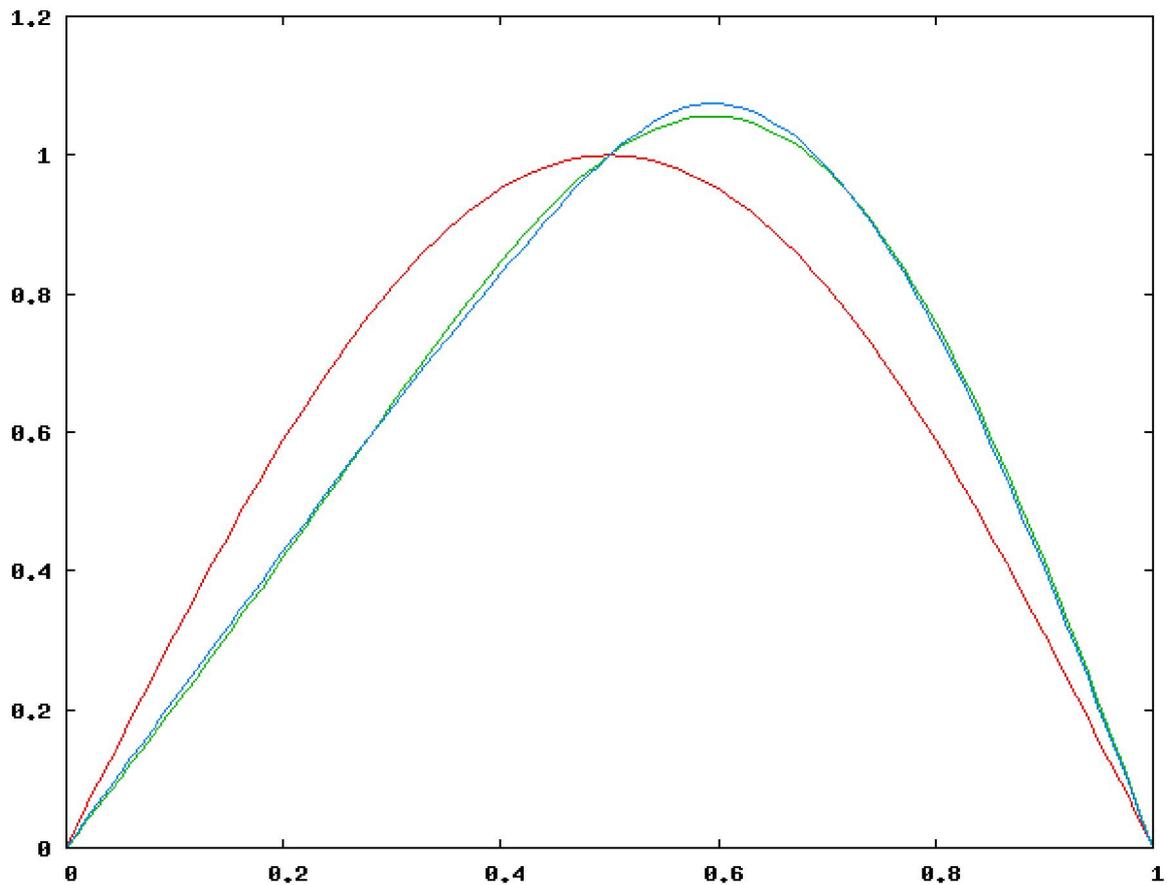
Also ebenfalls ein Abfall der Korrektur. Ähnlich wie bei der Korrektur 1. Ordnung sorgen hier die Oszillationen der Wellenfunktionen dafür, dass der relative Einfluss der Störung abnimmt.

Der Zustand bis 1. Ordnung ist analog:

$$|\psi_n\rangle = |\varphi_n\rangle + \sum_{k \neq n} \frac{\left(\frac{V_0}{\pi}\right) \left[\frac{\sin((n-k)\gamma\pi)}{n-k} - \frac{\sin((n+k)\gamma\pi)}{n+k} \right]}{\frac{\hbar^2\pi^2}{2m\tilde{a}^2} (n^2 - k^2)} |\varphi_k\rangle$$

$$= |\varphi_n\rangle + \left(\frac{V_0}{\pi}\right) \frac{2m\tilde{a}^2}{\hbar^2\pi^2} \sum_{k \neq n} \left(\frac{\sin((n-k)\gamma\pi)}{(n-k)^2(n+k)} - \frac{\sin((n+k)\gamma\pi)}{(n-k)^2(n+k)} \right) |\varphi_k\rangle$$

Was passiert also mit der Wellenfunktion? Intuitiv, „drückt“ die Störung die Wahrscheinlichkeitsdichte in den Bereich $x > \gamma$. Für $\gamma = \frac{1}{2}$ und $\left(\frac{V_0}{\pi}\right) \frac{2m\alpha^2}{\hbar^2 \pi^2} = 0.1$ ergibt sich für den Grundzustand folgendes Bild:



Die rote Kurve ist die ungestörte Wellenfunktion, die blaue Kurve der erste Beitrag in der Summe ($k=2$) und die grüne Kurve die vollständige Summierung. Wie erwartet wird die Wellenfunktion nach rechts gedrückt, wobei die Terme mit $n \approx k$ erwartungsgemäß den größten Einfluss haben.