

Musterlösung: Theorie D, Blatt 11

Aufgabe 1: Für die allgemeinen Formeln: siehe Formelsammlung.

a) Energiekorrektur des Grundzustands in 1. Ordnung:

$$\langle 0,0 | W | 0,0 \rangle = \alpha m \omega^2 \langle 0_x | x | 0_x \rangle \langle 0_y | y | 0_y \rangle = 0$$

da das in den Integralen auftretende Quadrat der Grundzustandswellenfunktion gerade unter Spiegelungen um die Achse ist, die Funktionen x , bzw. y aber nicht.

Für die Energiekorrektur 2. Ordnung brauchen wir:

$$E_{n,m} = \langle n, m | H_0 | n, m \rangle = \hbar \omega \left[\left(n + \frac{1}{2} \right) + \left(m + \frac{1}{2} \right) \right] \quad (1)$$

Weiter haben wir:

$$\begin{aligned} \langle a, b | W | c, d \rangle &= \alpha m \omega^2 \langle a_x | x | c_x \rangle \langle b_y | y | d_y \rangle \\ &= \alpha m \omega^2 \left(\delta_{c,a-1} \sqrt{\frac{c+1}{2\beta^2}} + \delta_{c,a+1} \sqrt{\frac{c}{2\beta^2}} \right) \left(\delta_{d,b-1} \sqrt{\frac{d+1}{2\beta^2}} + \delta_{d,b+1} \sqrt{\frac{d}{2\beta^2}} \right) \\ &= \frac{\alpha m \omega^2}{2\beta^2} \left(\delta_{c,a-1} \sqrt{c+1} + \delta_{c,a+1} \sqrt{c} \right) \left(\delta_{d,b-1} \sqrt{d+1} + \delta_{d,b+1} \sqrt{d} \right) \\ &= \frac{\alpha \hbar \omega}{2} \left(\delta_{c,a-1} \sqrt{c+1} + \delta_{c,a+1} \sqrt{c} \right) \left(\delta_{d,b-1} \sqrt{d+1} + \delta_{d,b+1} \sqrt{d} \right) \end{aligned} \quad (2)$$

d.h. nur Terme mit $a = c \pm 1$ und $b = d \pm 1$ haben nicht verschwindende Matrixelemente.

Die Energiekorrektur 2. Ordnung ergibt sich als:

$$\begin{aligned} E_{0,0}^{(2)} &= \sum_{a,b} \frac{|\langle 0,0 | W | a,b \rangle|^2}{E_{0,0} - E_{a,b}} \\ &= - \left(\frac{\alpha \hbar \omega}{2} \right)^2 \frac{1}{2\hbar\omega} = - \frac{\alpha^2}{8} \hbar \omega \end{aligned}$$

da nur die Terme mit $a = b = 1$ beitragen. Damit ist die Energiekorrektur für den Grundzustand der 2D Oszillators eine relativ einfache Verallgemeinerung des 1D Oszillators.

b) Wenn wir uns jetzt den beiden ersten angeregten Zuständen $|0,1\rangle, |1,0\rangle$ zuwenden, so finden wir für beide nach Gleichung (1) die gleiche Energie, d.h. die Zustände sind entartet. Deshalb müssen wir hier entartete Störungstheorie anwenden, die Energienenner in der 2. Ordnung würden sonst unendlich. Die Matrix W ist dann in diesem Unterraum:

$$\begin{aligned} W &= \begin{pmatrix} \langle 0,1 | W | 0,1 \rangle & \langle 0,1 | W | 1,0 \rangle \\ \langle 1,0 | W | 0,1 \rangle & \langle 1,0 | W | 1,0 \rangle \end{pmatrix} \\ &= \frac{\alpha \hbar \omega}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Dabei haben wir für die Diagonalelemente wieder ausgenutzt, dass die Störung ungerade unter den Transformationen $x \leftrightarrow -x$ und $y \leftrightarrow -y$, die Quadrate der Wellenfunktionen aber gerade. Für die Nebendiagonalelemente haben wir die Formel (2) benutzt. Die Eigenwerte

dieser Matrix sind: $E_{1,2}^{(1)} = \pm \frac{\alpha \hbar \omega}{2}$. Die Eigenvektoren sind $|\psi_{1,2}^{(0)}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|0,1\rangle \pm |1,0\rangle)$.

Was ist an diesem Ergebnis dramatisch anders als in Aufgabe (a)? In dieser Aufgabe war das einzige nicht-verschwindende Matrix-Element, das dann auch die erste Korrektur der Wellenfunktion generiert, proportional zu α . Folglich ist die Korrektur der Wellenfunktion auch eine kleine Störung in α . Das ist hier nicht der Fall: Hier hängt die korrigierte Wellenfunktion überhaupt nicht von α ab, die Veränderung der Wellenfunktionen zur Ausgangsbasis ist sehr groß, auch wenn die Veränderung der Energie klein ist. Die Interpretation dieses Ergebnisses ergibt sich aus:

c) Wenn wir das Potential in die Koordinaten $|\pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(x \pm y)$ umschreiben ergibt sich:

$$\frac{1}{2} m \omega^2 (x^2 + y^2) + \alpha m \omega x y = \frac{1}{2} m \omega^2 \left[(1+\alpha) \left(\frac{x+y}{\sqrt{2}} \right)^2 + (1-\alpha) \left(\frac{x-y}{\sqrt{2}} \right)^2 \right].$$

Auch die kinetische Energie kann man mit: $p_x^2 + p_y^2 = p_+^2 + p_-^2$ in die neuen Variablen umschreiben. Das gestörte Problem lässt sich also exakt lösen als harmonischer Oszillator mit geänderten Frequenzen: $\omega_{\pm} = \hbar \omega \sqrt{1 \pm \alpha} \approx \hbar \omega \left(1 \pm \frac{\alpha}{2} \right)$. In der Korrektur der Frequenzen erkennen wir in niedrigster Ordnung die Übereinstimmung mit dem in (b) in Störungstheorie erzielt Ergebnis. Auch die Wellenfunktionen in (b) entsprechen genau den Linearkombinationen der Koordinaten, die den klassischen Oszillator in Normalform bringen.

Betrachten wir einmal den Zustand $|0,1\rangle$ im ungestörten Potential, so entspricht er zwei „enkoppelten“, aber unterschiedlichen Bewegungen in x und y Richtung. Beide Bewegungen sind Eigenmodi des jeweiligen Potentials. Unter Einfluss einer auch nur kleinen Störung α , ändern sich jedoch die Eigenmodi des Systems nicht kontinuierlich. Unabhängig von der Größe von α sind die neuen Eigenmodi des klassischen Systems: $|\pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(x \pm y)$. Folglich löst die kleine Störung auch im Quantensystem eine drastische Veränderung in der Wellenfunktion aus. In diesem speziellen Fall, hängt diese Störung nicht einmal von α ab (das muss aber nicht so sein), folglich lässt sich die Änderung der Wellenfunktion auch nicht als Potenzreihe in α darstellen. Nur die Diagonalisierung von W im entarteten Unterraum „wählt die Basis“ in der der eine weitere Entwicklung der Wellenfunktionen Sinn macht.

Aufgabe 2:

a) Da die Eigenwerte von H_0 entartet sind, d.h. die Matrixdarstellung diagonal ist, reicht es W zu diagonalisieren. Nach Aufgabenstellung ist:

$$W = \begin{pmatrix} 0 & -\alpha & 0 \\ -\alpha & 0 & -\alpha \\ 0 & -\alpha & 0 \end{pmatrix},$$

d.h. die Eigenwerte ergeben sich aus:

$$\det \begin{pmatrix} -\lambda & -\alpha & 0 \\ -\alpha & -\lambda & -\alpha \\ 0 & -\alpha & -\lambda \end{pmatrix} = -\lambda^3 + 2\alpha^2\lambda = -\lambda(\lambda^2 - 2\alpha^2) = 0$$

zu:

$\lambda_1 = -\sqrt{2}\alpha$	$\lambda_2 = 0$	$\lambda_3 = \sqrt{2}\alpha$
$ \psi_1\rangle = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ \sqrt{2} \\ 1 \end{pmatrix}$	$ \psi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}$	$ \psi_3\rangle = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ -\sqrt{2} \\ 1 \end{pmatrix}$
$E_1 = E_0 - \sqrt{2}\alpha$	$E_2 = E_0$	$E_3 = E_0 + \sqrt{2}\alpha$

b) + c) Entwickeln wir $|\varphi_a\rangle$ in dieser neuen Basis,

$$\begin{aligned}
 |\varphi_a\rangle &= \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \\
 &= \langle\psi_1|\varphi_a\rangle|\psi_1\rangle + \langle\psi_2|\varphi_a\rangle|\psi_2\rangle + \langle\psi_3|\varphi_a\rangle|\psi_3\rangle \\
 &= \frac{1}{2}|\psi_1\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|\psi_2\rangle + \frac{1}{2}|\psi_3\rangle
 \end{aligned}$$

so erhalten wir für die Zeitentwicklung des Zustands,

$$\begin{aligned}
 |\varphi(t)\rangle &= e^{\left(\frac{-iHt}{\hbar}\right)}|\varphi_a\rangle \\
 &= \frac{1}{2}e^{\left(\frac{-iE_1t}{\hbar}\right)}|\psi_1\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}e^{\left(\frac{-iE_2t}{\hbar}\right)}|\psi_2\rangle + \frac{1}{2}e^{\left(\frac{-iE_3t}{\hbar}\right)}|\psi_3\rangle \\
 &= e^{\left(\frac{-iE_0t}{\hbar}\right)}\left(\frac{1}{2}e^{\left(\frac{i\sqrt{2}\alpha t}{\hbar}\right)}|\psi_1\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|\psi_2\rangle + \frac{1}{2}e^{\left(\frac{-i\sqrt{2}\alpha t}{\hbar}\right)}|\psi_3\rangle\right) \\
 &= e^{\left(\frac{-iE_0t}{\hbar}\right)}\begin{pmatrix} \frac{1}{4}e^{\left(\frac{i\sqrt{2}\alpha t}{\hbar}\right)} + \frac{1}{2} + \frac{1}{4}e^{\left(\frac{-i\sqrt{2}\alpha t}{\hbar}\right)} \\ \frac{1}{2\sqrt{2}}e^{\left(\frac{i\sqrt{2}\alpha t}{\hbar}\right)} - \frac{1}{2\sqrt{2}}e^{\left(\frac{-i\sqrt{2}\alpha t}{\hbar}\right)} \\ \frac{1}{4}e^{\left(\frac{i\sqrt{2}\alpha t}{\hbar}\right)} - \frac{1}{2} + \frac{1}{4}e^{\left(\frac{-i\sqrt{2}\alpha t}{\hbar}\right)} \end{pmatrix},
 \end{aligned}$$

wobei wir in der letzten Zeile einfach wieder die Komponenten der Eigenvektoren verwendet haben. Das lässt sich mit $\omega_\alpha = \frac{\sqrt{2}\alpha}{\hbar}$ vereinfachen zu:

$$|\varphi(t)\rangle = e^{\left(\frac{-iE_0t}{\hbar}\right)}\begin{pmatrix} \frac{1}{2} + \frac{1}{2}\cos(\omega_\alpha t) \\ \frac{i}{\sqrt{2}}\sin(\omega_\alpha t) \\ -\frac{1}{2} + \frac{1}{2}\cos(\omega_\alpha t) \end{pmatrix}.$$

Damit ergibt sich für die Wahrscheinlichkeiten der drei Zustände:

$$p_a(t) = |\langle \varphi_a | \varphi(t) \rangle|^2 = \frac{1}{4} + \frac{1}{2} \cos(\omega_\alpha t) + \frac{1}{4} \cos^2(\omega_\alpha t)$$

$$p_b(t) = |\langle \varphi_b | \varphi(t) \rangle|^2 = \frac{1}{2} \sin^2(\omega_\alpha t)$$

$$p_c(t) = |\langle \varphi_c | \varphi(t) \rangle|^2 = \frac{1}{4} - \frac{1}{2} \cos(\omega_\alpha t) + \frac{1}{4} \cos^2(\omega_\alpha t)$$

Diese Wahrscheinlichkeiten entsprechen genau den Wahrscheinlichkeiten, dass die Werte $-d$, 0 und d angenommen werden. Nur die erste und letzte Wahrscheinlichkeit kann 1 werden, und zwar gilt $p_a(t) = 1$ für $\omega_\alpha t = 2\pi n$ und $p_c(t) = 1$ für $\omega_\alpha t = 2\pi n + \pi$ wobei n jeweils ganzzahlig ist.

d) Allgemein gilt in der Eigenbasis:

$$\langle \psi(t) | D | \psi(t) \rangle = \sum_{n,m} \langle \psi_n | c_n^* c_m e^{\frac{i(E_n - E_m)t}{\hbar}} D | \psi_m \rangle.$$

Wir wenden zunächst D auf die Eigenzustände an:

$$D | \psi_1 \rangle = \frac{d}{2} \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad D | \psi_2 \rangle = \frac{d}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}, \quad \text{und} \quad | \psi_3 \rangle = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Daraus ergeben sich die Matrixelemente von D in der Eigenbasis:

$$\langle \psi_n | D | \psi_m \rangle = -\frac{d}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Daraus ergibt sich:

$$\langle \psi(t) | D | \psi(t) \rangle = -\frac{d}{\sqrt{2}} (c_1^* c_2 e^{-i\omega_\alpha t} + c_2^* c_1 e^{i\omega_\alpha t} + c_2^* c_3 e^{-i\omega_\alpha t} + c_3^* c_2 e^{i\omega_\alpha t}).$$