

Übungen zur Modernen Theoretischen Physik I SS 17

PROF. DR. JÖRG SCHMALIAN
MATTHIAS HECKER, MARKUS KLUGBlatt 12 (Lösung)
Abgabe: 17.07.2017, 12:00h, Bespr.: 19.07.2017

1. Gestörter zweidimensionaler harmonischer Oszillator (7 Punkte, schriftlich)

(a) (0,5 Punkte)

Dass $[\hat{H}_0, \hat{L}_z] = 0$ wurde bereits früher gezeigt. Mit $\hat{H}' = K \hat{x} \hat{y}$ lässt sich direkt zeigen, dass

$$[\hat{H}', \hat{L}_z] = K [\hat{x} \hat{y}, \hat{x} \hat{p}_y - \hat{y} \hat{p}_x] = K \hat{x} \underbrace{[\hat{y}, \hat{p}_y]}_{i\hbar} \hat{x} - K \hat{y} \underbrace{[\hat{x}, \hat{p}_x]}_{i\hbar} \hat{y} = K i\hbar (\hat{x}^2 - \hat{y}^2) \neq 0.$$

Eine Entartung hat immer mit einer Symmetrie im Hamilton-Operator zu tun. Wie auf Blatt 5 gezeigt wurde, war hier alleine die Rotationsymmetrie bezüglich \hat{L}_z verantwortlich für die Entartung. Diese Symmetrie ist nun gebrochen, und ergo sollte die Entartung mindestens teilweise aufgehoben sein. In der Tat ist sie bei diesem Problem komplett aufgehoben, womit wir Störungsrechnung auch in zweiter Ordnung betreiben können.

(b) (1 Punkt)

Die Matrixelemente lassen sich auch direkt berechnen. Wir erhalten

$$\begin{aligned} \langle n_x, n_y | \hat{H}' | n'_x, n'_y \rangle &= \kappa \langle n_x, n_y | \hat{a}_x \hat{a}_y + \hat{a}_x^\dagger \hat{a}_y + \hat{a}_x \hat{a}_y^\dagger + \hat{a}_x^\dagger \hat{a}_y^\dagger | n'_x, n'_y \rangle \\ &= \kappa \left(\sqrt{n'_x n'_y} \delta_{n_x, n'_x-1} \delta_{n_y, n'_y-1} + \sqrt{(n'_x+1) n'_y} \delta_{n_x, n'_x+1} \delta_{n_y, n'_y-1} \right. \\ &\quad \left. + \sqrt{n'_x (n'_y+1)} \delta_{n_x, n'_x-1} \delta_{n_y, n'_y+1} + \sqrt{(n'_x+1) (n'_y+1)} \delta_{n_x, n'_x+1} \delta_{n_y, n'_y+1} \right). \end{aligned} \quad (1)$$

Die Elemente sind reell, also gilt auch $\langle n_x, n_y | \hat{H}' | n'_x, n'_y \rangle = \langle n'_x, n'_y | \hat{H}' | n_x, n_y \rangle$. Diagonalelemente liefern also somit alle eine 0, genauso wie Zustände deren Anregungen sich um $\Delta n \geq 2$ unterscheiden. Zum Beispiel kann der Grundzustand nur durch den Zustand $|11\rangle$ korrigiert werden. (Dazu kommen wir in Teil e).)

(c) (1,5 Punkte)

Der zweifach entartete erste angeregte Zustand $E_1^{(0)} = 2\hbar\omega$ beinhaltet die Zustände $|10\rangle, |01\rangle$. Wir werden im Folgenden die Matrixelemente für \hat{H}' so abkürzen $\hat{H}'_{n_x n_y, n'_x n'_y} \equiv \langle n_x, n_y | \hat{H}' | n'_x, n'_y \rangle$. Wie man aus (1) direkt erkennt sind nur $\hat{H}'_{10,01} = \kappa$ von null verschieden. Wir berechnen also die Determinante

$$\begin{aligned} \begin{vmatrix} \hat{H}'_{10,10} - \epsilon & \hat{H}'_{10,01} \\ \hat{H}'_{01,10} & \hat{H}'_{01,01} - \epsilon \end{vmatrix} &= \begin{vmatrix} -\epsilon & \kappa \\ \kappa & -\epsilon \end{vmatrix} = \epsilon^2 - \kappa^2 \stackrel{!}{=} 0 \\ \rightarrow \epsilon_{1,2} &= \pm \kappa. \end{aligned}$$

Die dazugehörigen Eigenvektoren lauten (Man erinnere sich an den '-1 Trick' aus Mathe.)

$$\begin{aligned} \epsilon_1 = +\kappa : \quad & \begin{pmatrix} -\kappa & \kappa \\ \kappa & -\kappa \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \rightarrow |\tilde{\varphi}_{1a}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|10\rangle + |01\rangle) \\ \epsilon_2 = -\kappa : \quad & \begin{pmatrix} \kappa & \kappa \\ \kappa & \kappa \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \rightarrow |\tilde{\varphi}_{1b}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|10\rangle - |01\rangle) . \end{aligned}$$

Betrachten wir nun die Störentwicklung der Energie für diese beiden Zustände sehen wir

$$\begin{aligned} E_{1a} &= E_1^{(0)} + \overbrace{\langle \tilde{\varphi}_{1a} | \hat{H}' | \tilde{\varphi}_{1a} \rangle}^{\equiv \kappa} + \sum_{i \neq \tilde{\varphi}_{1(a,b)}} \frac{|\langle i | \hat{H}' | \tilde{\varphi}_{1a} \rangle|^2}{E_1^{(0)} - E_i^{(0)}} \\ E_{1b} &= E_1^{(0)} + \overbrace{\langle \tilde{\varphi}_{1b} | \hat{H}' | \tilde{\varphi}_{1b} \rangle}^{\equiv -\kappa} + \sum_{i \neq \tilde{\varphi}_{1(a,b)}} \frac{|\langle i | \hat{H}' | \tilde{\varphi}_{1b} \rangle|^2}{E_1^{(0)} - E_i^{(0)}} , \end{aligned}$$

dass die berechneten Eigenwerte genau den Energiekorrekturen erster Ordnung entsprechen (was man auch vorher schon wusste), also $E_{1a}^{(1)} = \kappa$ und $E_{1b}^{(1)} = -\kappa$.

Die Einschränkung in der Summation $i \neq \tilde{\varphi}_{1(a,b)}$ ist nicht ganz offensichtlich. Zunächst halten wir fest, dass dank der Diagonalisierung die Matrixelemente $\langle \tilde{\varphi}_{1b} | \hat{H}' | \tilde{\varphi}_{1a} \rangle = 0$ verschwinden; das macht allerdings auch der Nenner. (ohne Diagonalisierung wäre das Matrixelement endlich, und die Korrektur damit unphysikalisch singular.). Um zu verstehen wieso "0" hier weggelassen wird, schauen wir auf Gleichung (10.12) im Skript. Für das betrachtete Problem ist die Gleichung identisch gelöst, ohne eine Bedingung an c_{nm} zu stellen. c_{nm} ist also eine Konstante von der Ordnung $\mathcal{O}(1)$, und insbesondere unabhängig von λ bzw κ . Betrachtet man (10.10) sieht man, dass ein solches endliches c_{nm} den Zustand in führender Ordnung verändert, und insbesondere die Diagonalisierung wieder aufheben würde. Damit würde wieder ein singularer Term entstehen, und das wollen wir nicht. Ergo müssen diese Koeffizienten $c_{nm} = 0$ verschwinden.

Aus (1) sehen wir auch, dass es keine Korrektur zwischen dem Grundzustand $|00\rangle$ und den ersten angeregten Zuständen $|\tilde{\varphi}_{1(a,b)}\rangle$ gibt. Daher müssen wir den zweiten angeregten Zustand mit einbeziehen.

(d) (1,5 Punkte)

Nun wiederholen wir die Prozedur für den zweiten angeregten Zustand $E_2^{(0)} = 3\hbar\omega$, mit den Zuständen $|20\rangle, |11\rangle, |02\rangle$. Die von null verschiedenen Matrixelemente lauten $\hat{H}'_{20,11} = \hat{H}'_{02,11} = \sqrt{2}\kappa$. Die Determinante lautet (mit dem 3×3 Matrix-Determinanten 'Trick' der Diagonalen + + + - - -)

$$\begin{aligned} \begin{vmatrix} \hat{H}'_{20,20} - \epsilon & \hat{H}'_{20,11} & \hat{H}'_{20,02} \\ \hat{H}'_{11,20} & \hat{H}'_{11,11} - \epsilon & \hat{H}'_{11,02} \\ \hat{H}'_{02,20} & \hat{H}'_{02,11} & \hat{H}'_{02,02} - \epsilon \end{vmatrix} &= \begin{vmatrix} -\epsilon & \sqrt{2}\kappa & 0 \\ \sqrt{2}\kappa & -\epsilon & \sqrt{2}\kappa \\ 0 & \sqrt{2}\kappa & -\epsilon \end{vmatrix} = -\epsilon^3 + 2\epsilon 2\kappa^2 = -\epsilon(\epsilon^2 - 4\kappa^2) \stackrel{!}{=} 0 \\ &\rightarrow E_{2a}^{(1)} = 0 \quad E_{2b}^{(1)} = 2\kappa \quad E_{2c}^{(1)} = -2\kappa . \end{aligned}$$

Die dazugehörigen Eigenvektoren lauten (Man erinnere sich an den '-1 Trick' aus Mathe.)

$$\begin{aligned} E_{2a}^{(1)} = 0 : \quad & \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{2}\kappa & 0 \\ \sqrt{2}\kappa & 0 & \sqrt{2}\kappa \\ 0 & \sqrt{2}\kappa & 0 \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \rightarrow |\tilde{\varphi}_{2a}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|20\rangle - |02\rangle) \\ E_{2b}^{(1)} = 2\kappa : \quad & \begin{pmatrix} -2 & \sqrt{2} & 0 \\ \sqrt{2} & -2 & \sqrt{2} \\ 0 & \sqrt{2} & -2 \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} 1 & -\frac{1}{2}\sqrt{2} & 0 \\ 0 & -\frac{1}{2}\sqrt{2} & 1 \\ 0 & -\frac{1}{2}\sqrt{2} & 1 \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} 1 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & -\sqrt{2} \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \rightarrow |\tilde{\varphi}_{2b}\rangle = \frac{1}{2} (|20\rangle + \sqrt{2}|11\rangle + |02\rangle) \\ E_{2c}^{(1)} = -2\kappa : \quad & \begin{pmatrix} 2 & \sqrt{2} & 0 \\ \sqrt{2} & 2 & \sqrt{2} \\ 0 & \sqrt{2} & 2 \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} 1 & \frac{1}{2}\sqrt{2} & 0 \\ 0 & \frac{1}{2}\sqrt{2} & 1 \\ 0 & \frac{1}{2}\sqrt{2} & 1 \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} 1 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & \sqrt{2} \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \rightarrow |\tilde{\varphi}_{2c}\rangle = \frac{1}{2} (|20\rangle - \sqrt{2}|11\rangle + |02\rangle) . \end{aligned}$$

(e) (1,5 Punkte)

Wenden wir uns nun dem Grundzustand zu. Für die Energiekorrektur erhalten wir (nur $\langle 11|\hat{H}'|00\rangle = \kappa$ ist ungleich null.)

$$\begin{aligned} E_0 &= E_0^{(0)} + \underbrace{\langle 00|\hat{H}'|00\rangle}_{\equiv 0} + \sum_{i \neq |00\rangle} \frac{|\langle i|\hat{H}'|00\rangle|^2}{E_0^{(0)} - E_i^{(0)}} \\ &= \hbar\omega + \frac{\overbrace{|\langle \tilde{\varphi}_{2b}|\hat{H}'|00\rangle|^2}^{\kappa/\sqrt{2}}}{\hbar\omega - 3\hbar\omega} + \frac{\overbrace{|\langle \tilde{\varphi}_{2c}|\hat{H}'|00\rangle|^2}^{-\kappa/\sqrt{2}}}{\hbar\omega - 3\hbar\omega} \\ &= \hbar\omega - \frac{\kappa^2}{2\hbar\omega}, \end{aligned}$$

und für die Wellenfunktion

$$\begin{aligned} |\tilde{00}\rangle &= |00\rangle + \sum_{i \neq |00\rangle} \frac{\langle i|\hat{H}'|00\rangle}{E_0^{(0)} - E_i^{(0)}} |i\rangle = |00\rangle + \frac{\langle \tilde{\varphi}_{2b}|\hat{H}'|00\rangle}{\hbar\omega - 3\hbar\omega} |\tilde{\varphi}_{2b}\rangle + \frac{\langle \tilde{\varphi}_{2c}|\hat{H}'|00\rangle}{\hbar\omega - 3\hbar\omega} |\tilde{\varphi}_{2c}\rangle \\ &= |00\rangle - \frac{\kappa}{2\sqrt{2}\hbar\omega} (|\tilde{\varphi}_{2b}\rangle - |\tilde{\varphi}_{2c}\rangle) = |00\rangle - \frac{\kappa}{2\hbar\omega} |11\rangle. \end{aligned}$$

Dieses Ergebnis ist trotz der Annahme $n \leq 2$ exakt, da Matrixelemente mit höher angeregten Zuständen sowieso verschwinden würden. Für die ersten angeregten Zustände erhält man innerhalb der Annahme $n \leq 2$ keine zweite Ordnungs-Korrekturen. Erst die Zustände $n = 3$ würden das bewirken.

(f) (1 Punkt)

Im Rahmen unserer Annahme gibt es zwischen den Zuständen $|\tilde{\varphi}_{2x}\rangle$ und den anderen Zuständen nur ein nicht verschwindendes Matrixelement, nämlich $\langle 00|\hat{H}'|11\rangle = \kappa$. Damit erhalten wir die Energiekorrekturen

$$\begin{aligned} E_{2a} &= E_2^{(0)} + \underbrace{\langle \tilde{\varphi}_{2a}|\hat{H}'|\tilde{\varphi}_{2a}\rangle}_0 = 3\hbar\omega \\ E_{2b} &= E_2^{(0)} + \overbrace{\langle \tilde{\varphi}_{2b}|\hat{H}'|\tilde{\varphi}_{2b}\rangle}^{2\kappa} + \frac{\overbrace{|\langle 00|\hat{H}'|\tilde{\varphi}_{2b}\rangle|^2}^{\kappa/\sqrt{2}}}{3\hbar\omega - \hbar\omega} = 3\hbar\omega + 2\kappa + \frac{\kappa^2}{4\hbar\omega} \\ E_{2c} &= E_2^{(0)} + \overbrace{\langle \tilde{\varphi}_{2c}|\hat{H}'|\tilde{\varphi}_{2c}\rangle}^{-2\kappa} + \frac{\overbrace{|\langle 00|\hat{H}'|\tilde{\varphi}_{2c}\rangle|^2}^{-\kappa/\sqrt{2}}}{3\hbar\omega - \hbar\omega} = 3\hbar\omega - 2\kappa + \frac{\kappa^2}{4\hbar\omega}. \end{aligned}$$

Die Energien würden also durch die 2te Ordnungsterme angehoben. Tatsächlich passiert das Gegenteil, wenn man die Terme 5ter Ordnung noch miteinbezieht erhält man $E_{2a}^{(2)} = 0$, $E_{2(b,c)}^{(2)} = -\frac{\kappa^2}{\hbar\omega} \left(\frac{3}{2} - \sqrt{\frac{3}{2}} \right)$ Energieabsenkungen in 2ter Ordnung.

2. Zeeman-Aufspaltung (3 Punkte, mündlich)

(a) (1 Punkt)

Der Hamilton-Operator des reinen Wasserstoffatoms \hat{H}_0 vertauscht 'unter anderem' mit den folgenden Observablen

$$[\hat{H}_0, \vec{L}^2] = [\hat{H}_0, \vec{L}] = [\hat{H}_0, \vec{S}^2] = [\hat{H}_0, \vec{S}] = 0.$$

Es ist offensichtlich zu erkennen, dass der Zeeman-Term $\hat{H}' = \frac{\mu_B}{\hbar} B (\hat{L}_z + 2\hat{S}_z)$ nicht mehr mit $\hat{L}_{x,y}, \hat{S}_{x,y}$ kommutiert, also

$$[\hat{H}', \hat{L}_{x,y}] \neq 0 \quad [\hat{H}', \hat{S}_{x,y}] \neq 0.$$

Also kann der Zeeman-Term die Entartung durchaus (teilweise) aufheben.

- (b) (1 Punkt) Glücklicherweise ist der Zeeman-Term perfekt diagonal in der Basis des Wasserstoffatoms, womit die Lösung exakt angegeben werden kann. (Sobald Spin-Bahn-Kopplung berücksichtigt wird, muss man auch wieder auf den Apparat der Störungsrechnung zurückgreifen.) Es gilt

$$\hat{H}' |n, l, m_l, m_s\rangle = \mu_B B (m_l + 2m_s) |n, l, m_l, m_s\rangle,$$

und damit erhält man für die Energieniveaus

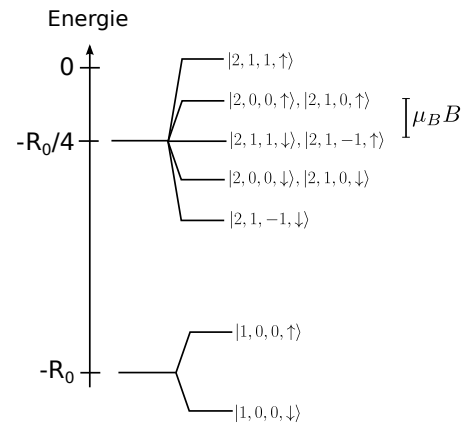
$$E_{n,l,m_l,m_s} = \langle n, l, m_l, m_s | \hat{H}_0 + \hat{H}' | n, l, m_l, m_s \rangle = -\frac{R_0}{n^2} + \mu_B B (m_l + 2m_s) \quad (2)$$

wobei R_0 die Rydberg-Energie ist.

- (c) (1 Punkt)

Für $n = 1$ und $n = 2$ haben wir insgesamt 10 mögliche Zustände mit Energien

$$\begin{aligned} E_{1,0,0,\uparrow} &= -R_0 + \mu_B B \\ E_{1,0,0,\downarrow} &= -R_0 - \mu_B B \\ E_{2,0,0,\uparrow} &= -R_0/4 + \mu_B B \\ E_{2,0,0,\downarrow} &= -R_0/4 - \mu_B B \\ E_{2,1,0,\uparrow} &= -R_0/4 + \mu_B B \\ E_{2,1,0,\downarrow} &= -R_0/4 - \mu_B B \\ E_{2,1,1,\uparrow} &= -R_0/4 + 2\mu_B B \\ E_{2,1,1,\downarrow} &= -R_0/4 \\ E_{2,1,-1,\uparrow} &= -R_0/4 \\ E_{2,1,-1,\downarrow} &= -R_0/4 - 2\mu_B B \end{aligned} \quad (3)$$



Die Zeeman-Aufspaltung kann man wie nebenstehend graphisch darstellen.

Wie zu vermuten war, hebt der Zeeman-Term die Entartung der Zustände teilweise auf.