

Moderne Theoretische Physik II (Quantenmechanik II und Statistik)

Institut für Theoretische Teilchenphysik

Prof. Dr. Matthias Steinhauser, Dr. Daniel Stremmer

WS 25/26 – Blatt 1

Besprechung: 04.11.2025

Aufgabe 1: Harmonischer Oszillator

Gehen Sie aus vom eindimensionalen harmonischen Oszillator als ungestörtem System:

$$H_0 = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$$

- a) Berechnen Sie Die Korrekturen zu den Energieniveaus in erster und zweiter Ordnung Störungstheorie für die Störung

$$H_1 = \lambda_1 x.$$

Vergleichen Sie mit der exakten Lösung.

Solution

Using the relation

$$\langle m|x|n\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\sqrt{n} \delta_{m,n-1} + \sqrt{n+1} \delta_{m,n+1}),$$

where we used

$$x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (a + a^\dagger), \quad a^\dagger |n\rangle = \sqrt{n+1} |n+1\rangle, \quad a |n\rangle = \sqrt{n} |n-1\rangle,$$

the first-order corrections to the energy eigenvalue $E_n^{(0)} = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})$ are given by

$$E_n^{(1)} = \lambda_1 \langle n|x|n\rangle = 0.$$

The second-order corrections are obtained by

$$E_n^{(2)} = \lambda_1^2 \sum_{m \neq n} \frac{|\langle m|x|n\rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} = -\frac{\lambda_1^2}{2m\omega^2}$$

Alternatively, the total Hamiltonian $H = H' + H_1$ can be written as

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 y^2 - \frac{\lambda_1^2}{2m\omega^2}, \quad \text{with} \quad y = x + \frac{\lambda_1}{m\omega^2},$$

so that the exact energy eigenvalues are given by

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) - \frac{\lambda_1^2}{2m\omega^2},$$

which coincides with the results from the perturbation theory.

b) Wiederholen Sie Aufgabenteil a) für die Störung

$$H_2 = \lambda_2 x^2.$$

Solution

Similarly, we have

$$\langle m|x^2|n\rangle = \frac{\hbar}{2m\omega} \left(\sqrt{n(n-1)}\delta_{m,n-2} + (2n+1)\delta_{m,n} + \sqrt{(n+1)(n+2)}\delta_{m,n+2} \right).$$

So that the energy corrections are given by

$$E_n^{(1)} = \lambda_2 \langle n|x^2|n\rangle = \hbar\omega \frac{\lambda_2}{m\omega^2} \left(n + \frac{1}{2} \right),$$

and

$$E_n^{(2)} = \lambda_2^2 \sum_{m \neq n} \frac{|\langle m|x^2|n\rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} = -\frac{1}{2} \hbar\omega \left(\frac{\lambda_2}{m\omega^2} \right)^2 \left(n + \frac{1}{2} \right)$$

The full Hamiltonian can be rewritten as

$$H_0 = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m \tilde{\omega}^2 x^2, \quad \text{with} \quad \tilde{\omega} = \sqrt{\omega^2 + \frac{2\lambda_2}{m}} = \omega \sqrt{1 + \frac{2\lambda_2}{m\omega^2}}.$$

The energy eigenvalues are then given by

$$E_n = \hbar\tilde{\omega} \left(n + \frac{1}{2} \right) = \hbar\omega \left(1 + \frac{\lambda_2}{m\omega^2} - \frac{1}{2} \left(\frac{\lambda_2}{m\omega^2} \right)^2 + \mathcal{O}(\lambda_2^3) \right) \left(n + \frac{1}{2} \right),$$

and expanding it recovers the first- and second-order energy corrections.

c) Berechnen Sie die Korrektur zur Grundzustandsenergie in erster und zweiter Ordnung Störungstheorie für die Störung

$$H_3 = \lambda_3 x^4.$$

Solution

Using the results from above we get

$$x^4 |0\rangle = x^2(x^2 |0\rangle) = \left(\frac{\hbar}{2m\omega} \right)^2 \left(3 |0\rangle + 6\sqrt{2} |2\rangle + 2\sqrt{6} |4\rangle \right),$$

and the energy corrections can be calculated as

$$E_0^{(1)} = \lambda_3 \langle 0|x^4|0\rangle = 3 \left(\frac{\hbar}{2m\omega} \right)^2,$$

and

$$E_0^{(2)} = \lambda_3^2 \sum_{m \neq 0} \frac{|\langle m|x^2|0\rangle|^2}{E_0^{(0)} - E_m^{(0)}} = -42 \frac{\lambda_3^2}{\hbar\omega} \left(\frac{\hbar}{2m\omega} \right)^4$$

Aufgabe 2: Zwei-Niveau-System

Gegeben sei der folgende Hamiltonoperator, welcher ein Zwei-Niveau beschreibt:

$$H = H_0 + H',$$

wobei

$$H_0 = \begin{pmatrix} E_1 & 0 \\ 0 & E_2 \end{pmatrix} \quad \text{mit} \quad E_1 \neq E_2$$

und

$$H' = \begin{pmatrix} 0 & V \\ V & 0 \end{pmatrix}.$$

Betrachten Sie H' als Störung zu H_0 und berechnen Sie in niedrigster nicht verschwindender Ordnung Störungstheorie die Energieeigenwerte von H . Was passiert im entarteten Fall $E_1 = E_2$?

Solution

The energy corrections are given by,

$$\begin{aligned} \tilde{E}_1 &= E_1 + \langle 1|H'|1\rangle + \frac{|\langle 1|H'|2\rangle|^2}{E_1 - E_2} = E_1 + \frac{V^2}{E_1 - E_2} \\ \tilde{E}_2 &= E_2 + \langle 2|H'|2\rangle + \frac{|\langle 1|H'|2\rangle|^2}{E_2 - E_1} = E_2 + \frac{V^2}{E_2 - E_1}, \end{aligned}$$

where the first non-vanishing contribution corresponds to the second order in perturbation theory.

In the degenerated case $E_1 = E_2 = E$, we have to find the eigenvalues of the following matrix to obtain the energy corrections:

$$\begin{pmatrix} 0 & V \\ V & 0 \end{pmatrix},$$

which are given by $\lambda_{\pm} = \pm V$, so that the energy corrections in first order of perturbation theory are given by

$$\tilde{E}_{\pm} = E \pm V.$$

Aufgabe 3: Wasserstoffatom

Betrachten Sie ein Elektron gebunden im Potential eines Wasserstoffatoms, das durch folgenden Hamiltonoperator beschrieben wird:

$$H = H_0 + \frac{e^2}{2m^2c^2} \frac{\vec{L} \cdot \vec{S}}{r^3},$$

wobei H_0 gegeben ist durch

$$H_0 = \frac{\vec{p}^2}{2m} - \frac{e^2}{r},$$

und der $\vec{L} \cdot \vec{S}$ -Term die Spin-Bahn Kopplung beschreibt.

Betrachten Sie den $\vec{L} \cdot \vec{S}$ -Term als Störung und berechnen Sie die Korrektur zur Eigenenergie in erster Ordnung Störungsrechnung. Verwenden Sie dazu die ungestörten Eigenfunktionen in der Basis, die durch $|j, m_j, l, s\rangle$ gegeben ist. Dabei sind $\hbar^2 j(j+1)$, $\hbar^2 l(l+1)$ und $\hbar^2 s(s+1)$ die Eigenwerte der Quadrate des Gesamtdrehimpuls, des Bahndrehimpuls und des Spins. $\hbar m_j$ ist der Eigenwert von J_z .

- a) Betrachten Sie zunächst nur den Winkelanteil der Störterms. In wieviele Niveaus spalten sich die Energien E_n für $n = 1, 2, 3$ auf?

Solution

The wavefunction of the hydrogen atom without spin-orbit coupling can be schematically written as $|n, l, m\rangle$ and we have the following relation $H_0 |n, l, m\rangle = E_n |n, l, m\rangle$, so that the eigen energies do not depend on l, m . Considering the eigen energy for a fixed value of n , we have $l = 0, 1, \dots, n-1$ with $-l \leq m \leq l$. So that in total the degeneracy of the eigen energy E_n is n^2 . Taking into account the spin of the electron, we write the wave functions as $|n, l, s, m, m_s\rangle$ with $s = 1/2$ and $m_s = \pm 1/2$, and the degeneracy increases to $2n^2$.

Introducing now the total angular momentum $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$, the scalar product can be written as

$$\vec{L} \cdot \vec{S} = \frac{1}{2} (\vec{J}^2 - \vec{L}^2 - \vec{S}^2).$$

In addition, we define new states $|n, j, l, s, m_j\rangle$ ($|l-s| \leq j \leq |l+s|$ and $-j \leq m_j \leq j$), which we decompose as $|n, l\rangle |j, l, s, m_j\rangle$, where $|n, l\rangle$ is the usual radial part of the eigen states of H_0 . The state $|j, l, s, m_j\rangle$ is obtained from the addition of the two angular momenta \vec{L} and \vec{S} and can be written as

$$|j, l, s, m_j\rangle = \sum_{m, m_s} \langle l, s, m, m_s | j, l, s, m_j \rangle |l, s, m, m_s\rangle,$$

where the coefficients are the standard Clebsch-Gordan coefficients. These new states are still eigen states of H_0 with $H_0 |n, j, l, s, m_j\rangle = E_n |n, j, l, s, m_j\rangle$, since the wave functions only depend on n and l . The degeneracy to the eigen energy E_n can be calculated as

$$\sum_{l=0}^{n-1} \sum_{j=l-1/2}^{l+1/2} 2 \left(j + \frac{1}{2} \right) = \sum_{l=0}^{n-1} \sum_{k=l}^{l+1} 2k = 2n^2,$$

where $2 \left(j + \frac{1}{2} \right)$ accounts for the degeneracy of m_j .

From the scalar product we know that energy corrections will depend j, l, s and not on m_j . Thus, it is expected that the energy E_n will split into $2(n-1)$ energy levels $E_{n,j,l,s}$, where this number is obtained from the upper sum by setting the degeneracy factor to 1 and by starting the first sum with 1 since for $l=0$ the term $\vec{L} \cdot \vec{S}$ directly vanishes and leads to the normal E_n .

- b) Betrachten Sie nun auch die r -Abhängigkeit des Störterms. Wie lautet die Korrektur erster Ordnung zu E_n aufgrund der Spin-Bahn-Kopplung?

Bei der Berechnung des Matrixelements bietet es sich an, eine Unterscheidung zwischen $l=0$ und $l \neq 0$ vorzunehmen.

Für den Radialanteil benötigen Sie das Matrixelement $\langle n, l | \frac{1}{r^3} | n, l \rangle$. Falls es Ihnen nicht

gelingt eine geschlossene Formel für beliebiges n herzuleiten, ist es ausreichend, die Fälle für $n \leq 3$ explizit zu betrachten.

Solution

In order to obtain the new energy levels to first order in perturbation theory we have to diagonalize the matrix

$$\langle n, l, s, m, m_s | V | n, l', s, m', m'_s \rangle,$$

where V is the perturbation term. Choosing the new basis from a), this matrix is directly diagonal:

$$\langle n, j, l, s, m_j | V | n, j', l', s, m'_j \rangle = \Delta E_{j,l,s} \delta_{jj'} \delta_{ll'} \delta_{mm'},$$

with

$$\Delta E_{j,l,s} = \frac{e^2 \hbar^2}{4m^2 c^2} (j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)) \langle n, l | \frac{1}{r^3} | n, l \rangle.$$

The remaining scalar product is given by

$$\langle n, l | \frac{1}{r^3} | n, l \rangle = \int_0^\infty dr \frac{u_{n,l}(r)^2}{r^3}$$

with

$$\frac{u_{n,l}(r)}{r} = \frac{1}{\sqrt{a_B^3}} \frac{2}{n^2} \sqrt{\frac{(n-l-1)!}{(n+l)!}} \left(\frac{2}{n a_B}\right)^l L_{n-l-1}^{2l+1} \left(\frac{2r}{n a_B}\right) \exp\left(-\frac{r}{n a_B}\right),$$

and

$$L_{n-l-1}^{2l+1}(x) = \sum_{k=0}^{n-l-1} \binom{n+l}{n-l-1-k} \frac{(-1)^k}{k!} x^k \quad \text{and} \quad a_B = \frac{\hbar^2}{m_e e^2}.$$

The exact result is given by

$$\langle n, l | \frac{1}{r^3} | n, l \rangle = \frac{1}{a_B^3 n^3} \frac{1}{l(l+\frac{1}{2})(l+1)} \quad (l \neq 0),$$

so that the energy corrections are obtained with

$$\Delta E_{j,l,s} = \frac{e^2 \hbar^2}{4m^2 c^2} \frac{(j(j+1) - l(l+1) - s(s+1))}{a_B^3 n^3 l(l+\frac{1}{2})(l+1)} \quad (l \neq 0).$$

Solution

Alternatively, it is possible to consider specific values of n . With $n = 3$ we have to consider the following wave function:

$$\begin{aligned}\frac{u_{2,1}(r)}{r} &= \frac{r e^{-\frac{r}{2a_B}}}{2\sqrt{6}a_B^{5/2}}, \\ \frac{u_{3,1}(r)}{r} &= \frac{2\sqrt{\frac{2}{3}}r e^{-\frac{r}{3a_B}}(6a_B - r)}{81a_B^{7/2}}, \\ \frac{u_{3,2}(r)}{r} &= \frac{2\sqrt{\frac{2}{15}}r^2 e^{-\frac{r}{3a_B}}}{81a_B^{7/2}}.\end{aligned}$$

The corresponding integrals then lead to

$$\begin{aligned}\langle 2, 1 | \frac{1}{r^3} | 2, 1 \rangle &= \frac{1}{24a_B^3}, \\ \langle 3, 1 | \frac{1}{r^3} | 3, 1 \rangle &= \frac{1}{81a_B^3}, \\ \langle 3, 2 | \frac{1}{r^3} | 3, 2 \rangle &= \frac{1}{405a_B^3}.\end{aligned}$$