Übung 1. *[Brillouin-Wigner Störungstheorie]*

Gegeben sei der Hamiltonoperator eines 3-Zustandssystems als reelle Matrix

$$H = H_0 + \lambda V = \begin{pmatrix} \epsilon_1 + \lambda V_1 & 0 & 0 \\ 0 & \epsilon_2 + \lambda V_2 & \lambda V_{23} \\ 0 & \lambda V_{23} & \epsilon_3 + \lambda V_3 \end{pmatrix}$$

a) *Finde die exakten Lösungen für die Energie-Eigenwerte E_N und -Eigenzustände $|N\rangle$ des Systems.*

b) *Betrachte den Spezialfall $\epsilon_3 = -\epsilon_2 \equiv -\epsilon$, $V_2 = -V_3 = -2\epsilon$ mit $\epsilon > 0$ und gib den Verlauf von $E_N(\lambda)$, $0 \leq \lambda \leq 1$, für $V_{23} = 0$ und $V_{23} = \epsilon$ an. Kann es zu Überschneidungen $[E_N(\lambda) = E_{N'}(\lambda)]$ für bestimmte λ kommen?*

c) *Berechne die Energie-Eigenwerte des durch λV gestörten Systems mit Hilfe der Brillouin-Wigner-Störungstheorie. Berücksichtige die ersten beiden Korrekturen.*
Welche Form muss die Störung V haben, damit die Störungsreihe abbricht, d.h. nur endlich viele Terme besitzt. Stimmt in diesem Fall das Ergebnis aus der Störungstheorie mit dem exakten Ergebnis aus a) überein?

d) *Bestimme für $\epsilon_2 = \epsilon_3$ und $V_2 = V_3 = 0$ die Zustandskorrekturen $|N\rangle^{(1)}$ in der B.W. Störungstheorie. Wie sind die $|N\rangle^{(1)}$ normiert?*

e) *Ermittle die Energiekorrekturen in 1. und 2. Ordnung mittels Rayleigh-Schrödinger- bzw. entarteter Störungsrechnung. Vergleiche mit den Ergebnissen aus a) und c).*

Lösung.

a) Die Energieeigenwerte werden aus dem charakteristischen Polynom mittels $|H - E \cdot \mathbb{1}_3| = 0$ berechnet. Dies liefert

$$E_1 = \epsilon_1 + \lambda V_1,\ E_{2/3} = \frac{\epsilon_2 + \lambda V_2 + \epsilon_3 + \lambda V_3}{2} \pm \sqrt{\frac{(\epsilon_2 + \lambda V_2 - (\epsilon_3 + \lambda V_3))^2}{4} + \lambda^2 V_{23}^2} \quad \text{(L.1)}$$

Die Eigenvektoren sind

$$|1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix},\ |2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ \frac{E_2 - (\epsilon_2 + \lambda V_2)}{\lambda V_{23}} \end{pmatrix},\ |3\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ \frac{E_3 - (\epsilon_2 + \lambda V_2)}{\lambda V_{23}} \end{pmatrix}. \quad \text{(L.2)}$$

b) Wir benutzen das Resultat aus a) und setzen die Werte von ϵ_i und V_i ein:

(i) $V_{23} = 0$:

Die Energie $E_{2/3}$ sind

$$E_{2/3} = \frac{\epsilon - 2\epsilon\lambda - \epsilon + 2\epsilon\lambda}{2} \pm \left| \frac{\epsilon - 2\epsilon\lambda + \epsilon - 2\epsilon\lambda}{2} \right| = \pm\epsilon\, |1 - 2\lambda| \quad \text{(L.3)}$$

Die Eigenbasis ist bereits diagonal:

$$E_1 = \epsilon_1 + \lambda V_1,\ |1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix},\ E_2 = \epsilon|1 - 2\lambda|,\ |2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix},\ E_3 = -\epsilon|1 - 2\lambda|,\ |3\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Man sieht, dass für $\lambda = \frac{1}{2}$ eine Entartung von E_2 und E_3 vorliegt (beide Energien sind Null). Ob es Entartungen mit E_1 gibt, hängt vom Wert von ϵ_1 ab. Möglich sind 2, einer, oder kein Schnittpunkt mit den anderen Energieverläufen.

(ii) $V_{23} = \epsilon$:

Die Energien sind in diesem Fall

$$E_2 = \epsilon\sqrt{1 - 2\lambda + 5\lambda^2}, \; E_3 = -\epsilon\sqrt{1 - 2\lambda + 5\lambda^2} \tag{L.4}$$

In diesem Fall gibt es keine Entartung zwischen E_2 und E_3, für die Entartung mit E_1 gibt es wieder maximal zwei Entartungen.

c) Die Brillouin-Wigner-Näherung bis zu beliebiger Ordnung $j+1$ ist gegeben durch

$$\begin{aligned} E_n = \epsilon_n + \langle n|\lambda V|n\rangle + \lambda^2 \sum_{m_1 \neq n} \frac{|\langle n|V|m\rangle|^2}{E_n - \epsilon_m} \\ + \ldots + \lambda^{j+1} \sum_{m_1 \neq n} \ldots \sum_{m_j \neq n} \frac{\langle n|V|m_1\rangle\langle m_1|V|m_2\rangle \ldots \langle m_j|V|n\rangle}{(E_n - \epsilon_{m_1})(E_n - \epsilon_{m_2})\ldots(E_n - \epsilon_{m_j})}, \end{aligned} \tag{L.5}$$

wobei die Zustandsvektoren die Eigenvektoren zum ungestörten System sind, d.h.

$$|1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \; |2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \; |3\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \tag{L.6}$$

Die benötigten Matrixelemente sind

$$\begin{aligned} \langle k|V|k\rangle &= V_k \text{ für } k = 1,2,3, \\ \langle 1|V|m\rangle &= \langle m|V|1\rangle = 0 \text{ für } m \neq 1, \\ \langle 2|V|3\rangle &= \langle 3|V|2\rangle = V_{23}. \end{aligned} \tag{L.7}$$

Die Energieverschiebung für den Zustand $n = 1$ ist somit $E_1 = \epsilon_1 + \lambda V_1$ und es gibt keine höheren Korrekturen, da alle relevanten Matrixelemente verschwinden. Das Ergebnis stimmt mit dem exakten Ergebnis aus Teil a) überein.
Für $n = 2$ gilt

$$\begin{aligned} E_2 &= \epsilon_2 + \lambda V_2 + \lambda^2 \frac{\langle 2|V|3\rangle\langle 3|V|2\rangle}{(E_2 - \epsilon_3)} + \ldots + \lambda^{j+1} \frac{\langle 2|V|3\rangle \overbrace{\langle 3|V|3\rangle \ldots \langle 3|V|3\rangle}^{j-1 \text{ Terme}} \langle 3|V|2\rangle}{(E_2 - \epsilon_3)^j} \\ &= \epsilon_2 + \lambda V_2 + \lambda^2 \frac{V_{23}^2}{(E_2 - \epsilon_3)} + \ldots + \lambda^{j+1} \frac{V_{23}^2 V_3^{j-1}}{(E_2 - \epsilon_3)^j}, \end{aligned} \tag{L.8}$$

wobei verwendet wurde, dass nur im Fall $m_1 = m_2 = \ldots = m_j$ ein nicht-verschwindender Beitrag vorliegt. In Analogie gilt für $n = 3$

$$E_3 = \epsilon_3 + \lambda V_3 + \lambda^2 \frac{V_{23}^2}{E_3 - \epsilon_2} + \ldots + \lambda^{j+1} \frac{V_{23}^2 V_2^{j-1}}{(E_3 - \epsilon_2)^j}. \tag{L.9}$$

Die Störungsreihe bricht somit in zwei Fällen ab. Im Fall $V_{23} = 0$ verschwinden alle Korrekturen jenseits der ersten Ordnung und es gilt

$$E_k^{\mathrm{BW}} = \epsilon_k + \lambda V_k \text{ für } k = 1,2,3. \tag{L.10}$$

In diesem Fall stimmt also die Näherung mit dem exakten Ergebnis überein.
Für $V_2 = V_3 = 0$ bricht die Störungsreihe ebenfall ab. In diesem Fall sind die Energiekorrekturen gegeben durch

$$
\begin{aligned}
E_1^{\mathrm{BW}} &= \epsilon_1 + \lambda V_1, \\
E_2^{\mathrm{BW}} &= \epsilon_2 + \lambda^2 \frac{V_{23}^2}{E_2^{\mathrm{BW}} - \epsilon_3} \Rightarrow E_2^{\mathrm{BW}} = \frac{\epsilon_1 + \epsilon_2}{2} + \sqrt{\frac{(\epsilon_2 - \epsilon_3)^2}{4} + \lambda^2 V_{23}^2}, \\
E_3^{\mathrm{BW}} &= \epsilon_3 + \lambda^2 \frac{V_{23}^2}{E_3^{\mathrm{BW}} - \epsilon_2} \Rightarrow E_3^{\mathrm{BW}} = \frac{\epsilon_1 + \epsilon_2}{2} - \sqrt{\frac{(\epsilon_2 - \epsilon_3)^2}{4} + \lambda^2 V_{23}^2},
\end{aligned}
\tag{L.11}
$$

wobei wir beim Lösen der quadratischen Gleichungen die Lösungen verwendet haben, die mit den exakten Lösungen aus Teil a) (für $V_2 = V_3 = 0$) übereinstimmen.
Im allgemeinen Fall ist die Energiekorrektur für $n = 2$ bis zur zweiten Ordnung gegeben durch

$$
E_2^{\mathrm{BW}} = \epsilon_2 + \lambda V_2 + \lambda^2 \frac{1}{E_2^{\mathrm{BW}} - \epsilon_3} V_{23}^2 \tag{L.12}
$$

$$
\Rightarrow E_2^{\mathrm{BW}} = \frac{\epsilon_2 + \lambda V_2 + \epsilon_3}{2} + \sqrt{\frac{(\epsilon_2 + \lambda V_2 + \epsilon_3)^2}{4} - \epsilon_2\epsilon_3 - \lambda V_2 \epsilon_3 + \lambda^2 V_{23}^2} \tag{L.13}
$$

$$
\tag{L.14}
$$

und analog für $n = 3$

$$
E_3^{\mathrm{BW}} = \frac{\epsilon_3 + \lambda V_3 + \epsilon_2}{2} - \sqrt{\frac{(\epsilon_3 + \lambda V_3 + \epsilon_2)^2}{4} - \epsilon_2\epsilon_3 - \lambda V_3 \epsilon_2 + \lambda^2 V_{23}^2}. \tag{L.15}
$$

d) Die Zustandskorrekturen in der B.W. Störungstheorie sind in erster Ordnung durch

$$
|N\rangle^{(1)} = |n\rangle + (E_N - H_0)^{-1} Q_n \lambda V |n\rangle \tag{L.16}
$$

gegeben, wobei

$$
E_1 = \epsilon_1 + \lambda V_1 \tag{L.17}
$$

$$
E_2 = \epsilon + |\lambda V_{23}| \tag{L.18}
$$

$$
E_3 = \epsilon - |\lambda V_{23}|. \tag{L.19}
$$

Wir erhalten daher

$$
|1\rangle^{(1)} = |1_0\rangle + 0 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \tag{L.20}
$$

$$
|2\rangle^{(1)} = |2_0\rangle + \sum_m \frac{1}{E_n - \epsilon_m} \langle m|\lambda V|n\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \frac{1}{E_2 - \epsilon_3} \lambda V_{23} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ \operatorname{sgn}(\lambda V_{23}) \end{pmatrix} \tag{L.21}
$$

$$
|3\rangle^{(1)} = \begin{pmatrix} 0 \\ -\operatorname{sgn}(\lambda V_{23}) \\ 1 \end{pmatrix} \tag{L.22}
$$

Durch die Normierung bekommen $|2\rangle$ und $|3\rangle$ noch den Vorfaktor $\frac{1}{\sqrt{2}}$.

e) In der Rayleigh-Schrödinger Störungstheorie gilt in 1.Ordnung:

$$E_n^{(1)} = \epsilon_n + \langle n|\lambda V|n\rangle = \epsilon_n + \lambda V_n$$

Für $N = 1$ exakt, für $N = 2, 3$ nur als Näherung. Für die Korrekturen in der 2.Ordnung müssen wir hingegen auf die Entartung achten:

(i) ϵ_n paarweise verschieden (nicht entartet):

Die Korrektur zur Energie ist

$$E_n^{(2)} = \epsilon_n + \lambda V_n + \sum_{m\neq n} \frac{1}{\epsilon_n - \epsilon_m} |\langle m|\lambda V|n\rangle|^2$$

und das ergibt

$$\begin{aligned} \Rightarrow E_1^{(2)} &= \epsilon_1 + \lambda V_1 \quad \mathit{exakt} && \text{(L.23)} \\ E_2^{(2)} &= \epsilon_2 + \lambda V_2 + \frac{1}{\epsilon_2 - \epsilon_3}\lambda^2 V_{23}^2 && \text{(L.24)} \\ E_3^{(2)} &= \epsilon_3 + \lambda V_3 + \frac{1}{\epsilon_2 - \epsilon_3}\lambda^2 V_{23}^2 && \text{(L.25)} \\ & && \text{(L.26)} \end{aligned}$$

Entwickelt man die Lösungen aus Teil a) und c) bis $\mathcal{O}(\lambda^2)$, so findet man das gleiche Ergebnis. Allerdings divergieren die Näherungslösungen wenn $\epsilon_2 = \epsilon_3$ im Widerspruch zu den exakten Lösungen und B.W.-Lösungen.

(ii) Entartung:

Im entarteten Fall sind die Energiekorrekturen in erster Ordnung durch die Eigenwerte von V gegeben. Man findet

$$\begin{aligned} E_1^{(1)} &= \epsilon_1 + \lambda V_1, \\ E_2^{(1)} &= \epsilon_2 + \frac{1}{2}\lambda\left(V_2 + V_3 + \sqrt{(V_2 - V_3)^2 + 4V_{23}^2}\right), \\ E_3^{(1)} &= \epsilon_3 + \frac{1}{2}\lambda\left(V_2 + V_3 - \sqrt{(V_2 - V_3)^2 + 4V_{23}^2}\right). \end{aligned} \tag{L.27}$$

In diesem Fall verschwinden die Korrekturen 2. Ordnung, da nach dem Diagonalisieren des entarteten Unterraums kein Zustand in der Summe $\sum_{m\neq n} |\langle m|V|n\rangle|^2$ beiträgt.

Die Energiekorrekturen erster Ordnung stimmen mit dem exakten Ergebnis aus Teil a) für $\epsilon_2 = \epsilon_3$ überein.

Übung 2. *[WKB-Methode]*

Bestimme mit Hilfe der WKB-Methode die Transmissionswahrscheinlichkeit T für ein Teilchen mit Energie $E < V_0$ durch den parabolischen Potentialwall,

$$V(x) = \begin{cases} V_0\left(1 - \frac{x^2}{x_0^2}\right), & |x| < x_0, \\ 0, & |x| \geq x_0. \end{cases} \tag{1}$$

Lösung. In der WKB-Näherung ist die Transmissionswahrscheinlichkeit gegeben durch

$$T \approx \exp\left\{-\frac{2}{\hbar}\int_{x_1}^{x_2} dx\,\sqrt{2m\,(V(x)-E)}\right\}\,. \tag{L.28}$$

Die Integralgrenzen x_1 und x_2 markieren den "verbotenen" Bereich mit $E < V(x)$ und sind gegeben durch

$$x_1 = -\gamma x_0\,, \quad x_2 = \gamma x_0\,, \tag{L.29}$$

mit $\gamma \equiv \sqrt{\frac{V_0-E}{V_0}}$.

Wir finden damit für die Transmissionswahrscheinlichkeit

$$\begin{aligned}
T &\approx \exp\left\{-\frac{2}{\hbar}\int_{x_1}^{x_2} dx\,\sqrt{2m\left(V_0\left(1-\frac{x^2}{x_0^2}\right)-E\right)}\right\} && \text{(L.30)}\\
&= \exp\left\{-\frac{2}{\hbar}\sqrt{2mV_0}\gamma\int_{-\gamma x_0}^{\gamma x_0} dx\,\sqrt{1-\left(\frac{x}{\gamma x_0}\right)^2}\right\} && \text{(L.31)}\\
&= \exp\left\{-\frac{2}{\hbar}\sqrt{2mV_0}\gamma^2 x_0\int_{-\pi/2}^{\pi/2} d\phi\cos\phi\sqrt{1-\sin^2\phi}\right\} && \text{(L.32)}\\
&= \exp\left\{-\frac{2}{\hbar}\sqrt{2mV_0}\gamma^2 x_0\int_{-\pi/2}^{\pi/2} d\phi\cos^2\phi\right\} && \text{(L.33)}\\
&= \exp\left\{-\frac{2}{\hbar}\sqrt{2mV_0}\gamma^2 x_0\frac{\pi}{2}\right\}\,, && \text{(L.34)}
\end{aligned}$$

wobei wir im Integral $\frac{x}{\gamma x_0} = \sin\phi$ substituiert haben.

Übung 3. *[Variationsverfahren]*

Sei $|\phi\rangle$ ein beliebiger Zustand. Zeige, dass das Energiefunktional,

$$\langle H\rangle_\phi = \frac{\langle\phi|H|\phi\rangle}{\langle\phi|\phi\rangle} \tag{2}$$

eine obere Schranke für die Grundzustandsenergie E_0 des Hamiltonians H liefert,

$$\langle H\rangle_\phi \geq E_0\,. \tag{3}$$

Wann gilt Gleichheit in (3)?

Lösung. Wir entwickeln $|\phi\rangle$ in der Energie-Eigenbasis von H,

$$|\phi\rangle = \sum_{k=0}^{\infty}|k\rangle\langle k|\phi\rangle\,, \tag{L.35}$$

wobei

$$H|k\rangle = E_k|k\rangle\,. \tag{L.36}$$

Wir setzten dies nun in das Energiefunktional (2) ein und benutzten $E_k = E_k - E_0 + E_0$,

$$\langle H \rangle_\phi = \frac{\sum_{k=0} |\langle k|\phi\rangle|^2 E_k}{\sum_{k=0} |\langle k|\phi\rangle|^2} \tag{L.37}$$

$$= \frac{\sum_{k=1} |\langle k|\phi\rangle|^2 (E_k - E_0)}{\sum_{k=0} |\langle k|\phi\rangle|^2} + E_0 \tag{L.38}$$

$$\geq E_0 \,, \tag{L.39}$$

wobei wir im letzten Schritt verwendet haben, dass $E_k > E_0$ für $k \neq 0$.

Gleichheit in (3) gilt genau dann, wenn $|\phi\rangle$ mit dem Grundzustand $|0\rangle$ übereinstimmt, d.h. wenn alle Koeffizienten $\langle k|\phi\rangle$, $k \neq 0$, verschwinden.