## Übungsblatt 9: Termine: 17./ 19./ 20. Januar 2017 ( 24 P)

### Aufgabe 20 Störungstheorie in der QM ( 6P )

Arbeiten Sie die dieser Übung beigelegte Einführung in die QM-Störungstheorie sorgfältig durch. Sie dürfen selbstverständlich auch einschlägige Lehrbücher der QM zu dieser Thematik konsultieren.

Fassen Sie schriftlich die wichtigsten Tatsachen zur Störungstheorie so zusammen, dass Sie diese in einem Kurzvortrag an der Tafel präsentieren können. ( 6 P).

### Aufgabe 21: Elektrisches Feld in einem Quantenfilm (18P)

Elektronen seien in einem Quantenfilm entlang der x-Richtung zwischen $-L/2 \leq x \leq L/2$ zwischen unendlich hohen Potentialwällen "eingesperrt". L = 5 nm. Das Potential ist:

$$V_0(x) = \begin{cases} 0 & -\frac{L}{2} \leq x \leq \frac{L}{2} \\ +\infty & \text{sonst} \end{cases}$$

a) Berechnen Sie analytisch die 5 energetisch niedrigsten Eigenfunktionen und Eigenwerte (in eV). (2P)

b) Normieren Sie die Eigenfunktionen so, dass $\int_{-L/2}^{L/2} |\psi(x)|^2 dx = 1$ (2P)

c) Legen Sie ein elektrisches Feld $E_x = 2 \cdot 10^7$ V/m = 0.1V/5nm an. Wie lautet dann das Potential $V$(x)? Schreiben Sie es in der Form $V(x) = V_0(x)+V_1(x)$. Setzen Sie $V_1(x)$ so an, dass $V(0) = 0$ bleibt. (2P)

d) Skizzieren Sie dieses Potential (in eV). (2P)

e) Berechnen Sie die Energiekorrekturen der ersten 5 Eigenwerte in Störungstheorie erster Ordnung. D.h., berechnen Sie $E_n^1 = \int_{-L/2}^{L/2} \psi_n^*(x) \cdot V_1(x) \cdot \psi_n(x)\ dx$ für n=1..5.

Was fällt auf? (2P)

f) Berechnen Sie für den niedrigsten Eigenwert $E_1$ die Energiekorrekturen in Störungstheorie zweiter Ordnung durch die Kopplung an die 4 über ihm liegenden Zustände. (8P

# Quantenmechanische Störungstheorie



## Zeitunabhängige Störungstheorie im Schrödingerbild.

Im Schrödingerbild löst man die S.E. eines quantenmechanischen Systems und erhält die stationären Eigenzustände $|u_n\rangle$ und die zugehörigen Energieeigenwerte $E_n$. In der Dirac-Notation sieht das so aus:

$$\boxed{\hat{H}_0 | u_n^0\rangle = E_n^0 | u_n^0\rangle} \qquad \text{für } n = 1, 2, 3, \ldots$$

$\hat{H}_0$ ist der Hamilton-Operator. z.B. für ein Elektron im Potential $V(\underline{r})$ ist $\hat{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \underline{\nabla}^2 + V(\underline{r})$.

In einfachen Fällen kennt man die vollständige Lösung des Problems. Die einzelnen Zustände $|u_n^0\rangle$ bilden einen vollständigen Satz von Eigenzuständen und es gilt $E_i^0 \neq E_j^0$ für $i \neq j$.



Die Eigenzustände $|u_n^0\rangle$ bilden dann ein vollständiges, orthonormiertes Basissystem:

i) $\langle u_i^0 | u_j^0 \rangle = \delta_{ij}$ Die Zustände sind orthonormiert.

ii) Jeder Zustand $|a\rangle$ läßt sich als Linearkombination schreiben:

$$\boxed{|a\rangle = \sum_j a_j \cdot |u_j^0\rangle} \qquad a_j : \text{(komplexe) Entwicklungskoeffizienten}$$

Die Koeffizienten $a_j$ lassen sich leicht berechnen: $a_i = \langle u_i^0 | a \rangle$

$$\langle u_i^0 | a\rangle = \sum_j \langle u_i^0 | a_j | u_j^0\rangle = \sum_j a_j \cdot \langle u_i^0 | u_j^0\rangle = \sum_j a_j \cdot \delta_{ij} = a_i$$

Zur Herleitung der Störungstheorie führen folgende Überlegungen:

1) Das quantenmechanische Problem $\hat{H}_0 | u_n^0\rangle = E_n^0 | u_n^0\rangle$ sei gelöst.

2) Man sucht eine Lösung zu einem modifizierten Hamiltonoperator $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1$.

$$\boxed{\hat H = \hat H_0 + \hat H_1}$$

"ungestörter" Hamiltonoperator — "Störoperator"

Das Verfahren macht nur Sinn, wenn $\hat H_1$ 'klein' gegenüber $\hat H_0$ ist. Klein heißt hier, dass die Eigenwerte $E_n^0$ & die Eigenzustände $|u_n^0\rangle$ durch den 'Störoperator' $\hat H_1$ nur wenig geändert werden.

Besonders hilfreich ist das Verfahren, wenn sich das Problem des "vollen" Hamiltonoperators $\hat H$ nicht lösen läßt, aber man die Lösungen für $\hat H_0$ schon hat.

$$\boxed{\hat H |u_n\rangle = E_n |u_n\rangle} \qquad \boxed{(\hat H_0 + \hat H_1)|u_n\rangle = E_n |u_n\rangle}$$

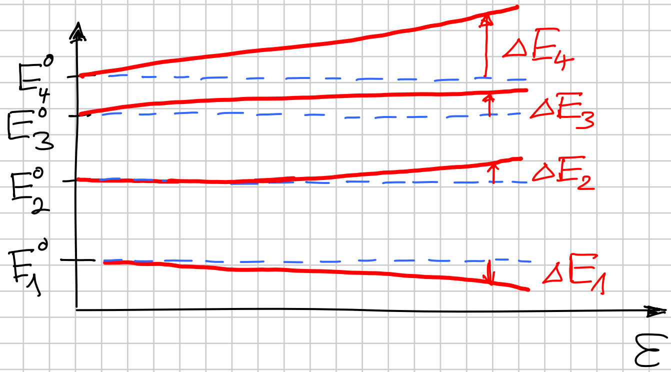
Für die formale Rechnung schreibt man: $\hat H_1 = \varepsilon \cdot \hat h_1$, $0 \le \varepsilon \le 1$

$\varepsilon$ stellt man sich als kleine Zahl $\varepsilon \ll 1$ vor.



Man stellt sich vor, daß sich die Eigenwerte $E_n$ als Funktion von $\varepsilon$ stetig & wenig ändern:

Man versucht jetzt, die Änderungen der Energieeigenwerte & die Änderungen der Eigenzustände zu berechnen.




Für die formale Rechnung führt man einen Parameter $\beta$ ein:

$\hat H = \hat H_0 + \beta \cdot \hat H_1$

$\beta = 0$: "Störung" ausgeschaltet

$\beta = 1$: "Störung" ist angeschaltet

Man entwickelt jetzt die Eigenwerte & die Eigenzustände nach Potenzen von $\beta$:

$$E_n = E_n^0 + \beta \cdot E_n^1 + \beta^2 \cdot E_n^2 + \beta^3 \cdot E_n^3 + \dots$$

$$|u_n\rangle = |u_n^0\rangle + \beta \cdot |u_n^1\rangle + \beta^2 |u_n^2\rangle + \beta^3 |u_n^3\rangle + \dots$$

$E_n^1$ ist die Korrektur zu 1. Ordnung, $E_n^2$ zu 2. Ordnung etc.

Man beachte: $E_n^2$, $|u_n^2\rangle$ bedeutet nicht Quadrat, $E_n^3$ nicht hoch 3 etc!

Man setzt die Entwicklung in die S.E. ein & ordnet dann das Ganze nach Potenzen von $\beta$:

$$\left(\hat{H}_0 + \beta \cdot \hat{H}_1\right) \cdot \left( |u_n^0\rangle + \beta \cdot |u_n^1\rangle + \beta^2 \cdot |u_n^2\rangle + \dots \right) =$$

$$\left(E_n^0 + \beta \cdot E_n^1 + \beta^2 E_n^2 + \dots\right) \cdot \left( |u_n^0\rangle + \beta |u_n^1\rangle + \beta^2 |u_n^2\rangle + \dots \right)$$

$\beta^0$: $\quad \hat{H}_0 \cdot |u_n^0\rangle = E_n^0 \cdot |u_n^0\rangle$ $\quad$ o.K., dies ist ja schon gelöst!

$\beta^1$: $\quad \hat{H}_0 |u_n^1\rangle + \hat{H}_1 |u_n^0\rangle = E_n^0 |u_n^1\rangle + E_n^1 \cdot |u_n^0\rangle$

$\beta^2$: $\quad \hat{H}_0 \cdot |u_n^2\rangle + \hat{H}_1 |u_n^1\rangle = E_n^0 |u_n^2\rangle + E_n^1 |u_n^1\rangle + E_n^2 |u_n^0\rangle$

Zuerst nimmt man sich die erste Ordnung $\propto \beta$ vor.
Hat man diese gelöst, dann kann man sich die zweite Ordnung $\propto \beta^2$ usw. vornehmen.



1. Ordnung in $\beta^1$: Entwicklung: $|u_n^1\rangle = \sum_j a_{nj} |u_j^0\rangle$

$$\underbrace{\hat{H}_0 \sum_j a_{nj} |u_j^0\rangle}_{} + \hat{H}_1 |u_n^0\rangle = E_n^0 \sum_j a_{nj} |u_n^0\rangle + E_n^1 |u_n^0\rangle$$

$$\sum_j a_{nj} E_j^0 |u_j^0\rangle + \hat{H}_1 |u_n^0\rangle = E_n^0 \cdot \sum_j a_{nj} |u_n^0\rangle + E_n^1 |u_n^0\rangle \qquad (A)$$

Man bildet jetzt das Skalarprodukt mit $\langle u_n^0|$ (von links!)

$$\sum_j a_{nj} E_j^0 \underbrace{\langle u_n^0 | u_j^0\rangle}_{=\delta_{nj}} + \langle u_n^0 | \hat{H}_1 | u_n^0\rangle = E_n^0 \sum_j a_{nj} \underbrace{\langle u_n^0 | u_n^0\rangle}_{1} + E_n^1 \underbrace{\langle u_n^0 | u_n^0\rangle}_{1}$$

$$\cancel{E_n^0 \cdot a_{nn}} + \langle u_n^0 | \hat{H}_1 | u_n^0\rangle = \cancel{E_n^0 \cdot a_{nn}} + E_n^1$$

$$\boxed{E_n^1 = \langle u_n^0 | \hat{H}_1 | u_n^0\rangle}$$

Dies sind die Energiekorrekt. in 1. Ordnung

"Matrixelement" der Störung $\hat{H}_1$

Die Entwicklungkoeffizienten $a_{nj}$ des Zustandes $|u_n^1\rangle$ kann man einfach bestimmen. Man geht von der Gleichung (A) nochmal aus:

$$\sum_j a_{nj} E_j^0 |u_j^0\rangle + \hat{H}_1 |u_n^0\rangle = E_n^0 \cdot \sum_j a_{nj} |u_n^0\rangle + E_n^1 |u_n^0\rangle$$

Diesmal bildet man das Skalarprodukt mit $\langle u_\ell^0|$, $\ell \neq n$

$$\sum_j a_{nj} E_j^0 \langle u_\ell^0|u_j^0\rangle + \langle u_\ell^0|\hat{H}_1|u_n^0\rangle = E_n^0 \cdot \sum_j a_{nj} \langle u_\ell^0|u_n^0\rangle + \underbrace{E_n^1 \langle u_\ell^0|u_n^0\rangle}_{=0 \text{ wegen } n\neq\ell}$$

$$a_{n\ell} \cdot E_\ell^0 + \langle u_\ell^0|\hat{H}_1|u_n^0\rangle = a_{n\ell} \cdot E_n^0$$

$$a_{n\ell} = \frac{\langle u_\ell^0|\hat{H}_1|u_n^0\rangle}{E_n^0 - E_\ell^0}$$

Den Koeffizienten $a_{nn}$ kann man gleich Null setzen, da dieser höchstens eine Phasen-verschiebung bewirkt.

$$|u_n^1\rangle = \sum_{j\neq n} a_{nj} |u_j^0\rangle$$

$$\boxed{|u_n^1\rangle = \sum_{j\neq n} \frac{\langle u_j^0|\hat{H}_1|u_n^0\rangle}{E_n^0 - E_j^0} \cdot |u_j^0\rangle}$$



Der gesamte Zustand ist dann: $|u_n^0\rangle + |u_n^1\rangle$

Sehr oft stellt man fest, dass die Störung $\hat{H}_1$ in erster Ordnung gar keine Änderung der Energieeigenwerte bewirkt, weil

$$E_n^1 = \langle u_n^0|\hat{H}_1|u_n^0\rangle = 0 \text{ für alle } n \text{ ist.}$$

Dies liegt meist an der Symmetrie der Zustände. Wenn die Zustände $|u_n^0\rangle$ Symmetrien haben (z.B. gerade, ungerade, Punkt-Symmetrie), dann sind für viele "einfache Störungen" alle Matrixelemente $\langle u_n^0|\hat{H}_1|u_n^0\rangle \equiv 0$.

In einem solchen Fall muß man zur zweiten Ordnung in $\beta^2$ übergehen. Für die Energieterme ist das leicht:

$$\boxed{E_n^2 = \langle u_n^1|\hat{H}_1|u_n^1\rangle = \sum_{j\neq n} \frac{|\langle u_j^0|\hat{H}_1|u_n^0\rangle|^2}{(E_n^0 - E_j^0)}}$$

Insgesamt hat man dann folgende Energie des Eigenwertes:

$$\boxed{E_n = E_n^0 + \langle u_n^0 | \hat{H}_1 | u_n^0 \rangle + \sum_{j \neq n} \frac{|\langle u_j^0 | \hat{H}_1 | u_n^0 \rangle|^2}{(E_n^0 - E_j^0)}}$$

Die Störungstheorie ist besonders dann sehr einfach anzuwenden, wenn man "nicht viele relevante" Zustände hat.

"Relevant" heißt:

i) $\langle u_j^0 | \hat{H}_1 | u_n^0 \rangle \neq 0$

ii) $|E_n^0 - E_j^0|$ ist klein