INSTITUT FÜR THEORETISCHE PHYSIK
TECHNISCHE UNIVERSITÄT BRAUNSCHWEIG

Prof. Dr. W. Brenig
Dr. A. Honecker

QUANTENMECHANIK WS 2004/2005

10. Übungsblatt Abgabe der **Hausaufgaben** am 25. Januar 2005 bis 14:00

Dieses Aufgabenblatt beschäftigt sich mit zeitunabhängiger Störungstheorie für

$$H = H_0 + W\,. \tag{1}$$

Ist $|\psi_0\rangle$ ein <u>normierter</u> Eigenzustand von $H_0$ zu Energie $E^{(0)}$, so gilt:

1. Für den Eigenzustand $|\psi\rangle$ von $H$ gilt bis zu <u>erster</u> Ordnung in $W$

$$|\psi\rangle = |\psi_0\rangle + Q\left(E^{(0)} - H_0\right)^{-1} W\,|\psi_0\rangle + \mathcal{O}(W^2)\,. \tag{2}$$

   Hierbei ist $Q = \mathbb{1} - P$ und $P$ der Projektor auf die Eigenzustände von $H_0$ mit Energie $E^{(0)}$.

2. Für die Energie gilt bis zu <u>zweiter</u> Ordnung in $W$

$$E = \frac{\langle\psi|\;H\;|\psi\rangle}{\langle\psi|\;\psi\rangle} = E^{(0)} + E^{(1)} + E^{(2)} + \mathcal{O}(W^3) \tag{3}$$

   mit

$$E^{(1)} = \langle\psi_0|\;W\;|\psi_0\rangle\,, \qquad E^{(2)} = \langle\psi_0|\;W\frac{Q}{E^{(0)} - H_0}W\;|\psi_0\rangle\,. \tag{4}$$

   Gibt es mehr als einen Eigenzustand von $H_0$ zu Energie $E^{(0)}$ (entarteter Fall), so ist $|\psi_0\rangle$ nicht nur als Eigenzustand von $H_0$, sondern auch von $PWP$ zu wählen.

## Anwesenheitsübung (keine Abgabe)

A1. Als Beispiel betrachten wir eine $3 \times 3$ Matrix $H = H_0 + W$ $(\lambda \in \mathbb{R})$:

$$H_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}\,, \qquad W = \begin{pmatrix} 0 & \lambda & 0 \\ \lambda & 0 & \lambda \\ 0 & \lambda & 0 \end{pmatrix}\,.$$

(a) Berechnen Sie die Eigenwerte von $H = H_0 + W$ mit Hilfe der störungstheoretischen Formeln (4) bis zur zweiten Ordnung in $\lambda$ !

(b) Berechnen Sie das charakteristische Polynom von $H$ ! Setzen Sie die Ergebnisse aus (a) ein und prüfen Sie, daß die Terme bis einschließlich der Ordnung $\lambda^2$ verschwinden !

## Hausaufgaben

H1. Der Hamilton-Operator $H = H_0 + W$ des eindimensionalen anharmonischen Oszillators ist gegeben durch

$$H_0 = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\,r^2\,, \qquad W = \alpha\,\frac{m^2\omega^2}{\hbar}\,r^4$$

mit $\alpha > 0$.

(a) Drücken Sie $H_0$ und $W$ durch $a^\dagger$ und $a$ aus !

(b) Betrachten Sie $W$ als kleine Störung von $H_0$ und berechnen Sie die Korrektur erster Ordnung $E_n^{(1)}$ zum $n$ten Eigenzustand von $H_0$ !

4 Punkte

H2. Wir betrachten die Bewegung eines Teilchens der Masse $m$ in einem eindimensionalen periodischen Potential $W(x)$:

$$W(x+a) = W(x)\,.$$

Das Problem soll hier unter Betrachtung von $W(x)$ als Störung zu

$$H_0 = \frac{p^2}{2m}$$

behandelt werden.

(a) Geben Sie die ungestörten Energien $E_0(k)$ und Eigenfunktionen $\psi_k(x)$ von $H_0$ an ! Welche Werte für $k$ sind in in einem Volumen $L = Na$ mit periodischen Randbedingungen

$$\psi_k(x+Na) = \psi_k(x)$$

zugelassen ? Normieren Sie die Wellenfunktionen in diesem endlichen Volumen der Länge $L$ !

(b) Wie oft ist jeder ungestörter Energieeigenwert $E_0(k)$ entartet ? (Achten Sie auch auf Spezialfälle für $k$ !)
Welche Wellenzahlen $K$ treten in der Fourier-Zerlegung von $W(x)$ auf ?

(c) Leiten Sie eine notwendige Bedingung an $k$ und $k'$ her dafür, daß

$$\langle \psi_k |\ W\ | \psi_{k'} \rangle \neq 0\,.$$

Unter welcher Bedingung haben $|\,\psi_k\rangle$ und $|\,\psi_{k'}\rangle$ außerdem dieselbe Energie bezüglich $H_0$ ? Geben Sie für den Fall der Entartung eine Beziehung zwischen $k$ und $K$ an !

(d) Berechnen Sie die Korrekturen $E_k^{(1)}$ erster Ordnung zur Energie ! Führen Sie dabei eine Fallunterscheidung unter Beachtung der Entartung durch ! Wann ist die Entartung unproblematisch und wann müssen Sie geeignete Kombinationen von $|\,\psi_k\rangle$ und $|\,\psi_{k'}\rangle$ als Ausgangspunkt der Rechnung wählen (Zustände angeben !) ?

**Bemerkung:** Oben wird ein allgemeines (eindimensionales) Bandmodell für Festkörper diskutiert (vgl. das *Kronig-Penney*-Modell – H4.2): Durch Kopplung bestimmter $k$-Punkte über das Potential $W$ ergeben sich dort Lücken und man erhält verschiedene Bänder.

8 Punkte

H3. **Zusatzaufgabe** (Bearbeitung freiwillig)
Setzten Sie (2) in (3) ein und zeigen Sie, daß hieraus die störungstheoretischen Formeln (4) zweiter Ordnung für die Energie folgen !

4 Zusatzpunkte