Klausur: mit 1 Seite Formelsammlung oder ohne ?

Stimmungsbild Di 1.2.22			
	Hörsaal	6	15
	Zoom	11	18

Do 3.2.22

Review: **Nondegenerate perturbation theory**

$$E_n = E_n^{(0)} + \langle n|\hat{V}|n\rangle + \sum_{m\neq n} \frac{|\langle n|\hat{V}|m\rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} + \mathcal{O}(\hat{V}^3)$$

$$|\psi_n\rangle = |n\rangle + \sum_{m\neq n} \frac{\langle m|\hat{V}|n\rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} |m\rangle + \mathcal{O}(\hat{V}^2)$$

$$E_n^{(k)} \sim \frac{|\langle i|\hat{V}|j\rangle|^k}{|E_i^{(0)} - E_j^{(0)}|^{k-1}}$$

$$|\psi_n^{(k)}\rangle \sim \frac{|\langle i|\hat{V}|j\rangle|^k}{|E_i^{(0)} - E_j^{(0)}|^k}$$

nondeg. PT:

so energy denominators $\neq 0$

2. Fall: Entartete Störungstheorie $\hat{H}_0 + g\hat{V}$

2-fach entartet

3-fach entartet

1-fach

$$\begin{pmatrix} E_1^{(0)} & 0 & & & & & \\ 0 & E_1^{(0)} & & & 0 & & \\ & & E_2^{(0)} & 0 & 0 & & \\ & 0 & 0 & E_2^{(0)} & 0 & & \\ & & 0 & 0 & E_2^{(0)} & & \\ & 0 & & & & E_3^{(0)} & \\ & & & & & & \ddots \end{pmatrix} \qquad \begin{pmatrix} V_{11} & V_{12} & \cdots & & & \neq 0 \\ V_{21} & V_{22} & & & & \\ & & V_{33} & V_{34} & V_{35} & \cdots \\ & & V_{43} & V_{44} & V_{45} & \cdots \\ & & V_{53} & V_{54} & V_{55} & \\ \neq 0 & \cdots & & & & V_{66} \end{pmatrix}$$

$k=0$: 0. Ordnung (g^0):

$E_n^{(0)}$ ist D_n-fach entartet $\Rightarrow$ $\hat{H}_0 |\psi_{nj}^{(0)}\rangle = E_n^{(0)} |\psi_{nj}^{(0)}\rangle$

für $j = 1, \ldots, D_n$

Bsp.: H-Atom $\quad E_2 = -\frac{13{,}6\,\text{eV}}{4} \quad |200\rangle, |21m\rangle \quad m = -1, 0, 1$

$D_{n=2} = 4$

$k=1$: 1. Ordnung (g^1):

Wählen als 0. Ordnung Basiszustände die $|\psi_{nj}^{(0)}\rangle$, die $\hat{V}$ im $D_n \times D_n$ Unterraum diagonalisieren

$\rightarrow |\psi_{nj}^{(0)}\rangle = |nj\rangle$ mit $\langle nj | \hat{V} | nk \rangle = \delta_{jk}\, v_{nj}$

$\rightarrow$ Matrixdarstellung

$$\begin{pmatrix} v_{11} & 0 & & & & & \neq 0 \\ 0 & v_{12} & & & & & \\ & & v_{21} & 0 & 0 & & \\ & & 0 & v_{22} & 0 & & \\ & & 0 & 0 & v_{23} & & \\ & \neq 0 & & & & v_{31} & \\ & & & & & & \ddots \end{pmatrix}$$

$k=1$: $\quad \hat{H}_0 |\psi_{nj}^{(1)}\rangle + \hat{V} |nj\rangle = E_n^{(0)} |\psi_{nj}^{(1)}\rangle + E_{nj}^{(1)} |nj\rangle \qquad (3)$

Für $E_{nj}^{(1)}$: (3) mit $\langle nk|$

$\Rightarrow \underbrace{\langle nk | \hat{H}_0 | \psi_{nj}^{(1)}\rangle} + \langle nk | \hat{V} | nj\rangle = E_n^{(0)} \langle nk | \psi_{nj}^{(1)}\rangle + E_{nj}^{(1)} \langle nk | nj\rangle$

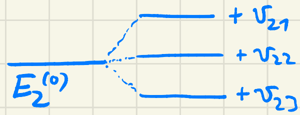
$E_n^{(0)} \langle nk | \psi_{nj}^{(1)} \rangle$

$k=j \Rightarrow$ $\boxed{\langle nj | \hat{V} | nj \rangle = E_{nj}^{(1)} = v_{nj}}$, $E_{nj} = E_n^{(0)} + v_{nj}$

Für entartetes Energieniveau $E_n^{(0)}$ ist 1. Ordnung Störungstheorie eine Verschiebung um "Eigenwerte" von $\hat{V}$ im $D_n \times D_n$ Unterraum

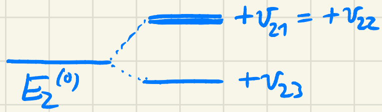
Beispiel: $E_2^{(0)}$ ist 3-fach entartet, 3 Möglichkeiten

1) v_{2j} $j=1,2,3$ alle verschieden



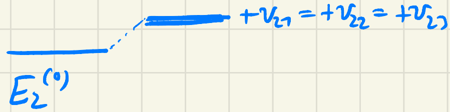
Entartung komplett aufgehoben

2) v_{2j} : $v_{21} = v_{22}$, v_{23} verschieden



Entartung teilweise aufgehoben

3) v_{2j} : $v_{21} = v_{22} = v_{23}$



1. Ordnung Korrektur $|\psi_{nj}^{(1)}\rangle$

Multipliziere Glg. (3) mit $\langle n'j'|$ mit $n' \neq n$

$$\Rightarrow E_{n'}^{(0)} \langle n'j' | \psi_{nj}^{(1)} \rangle + \langle n'j' | V | nj \rangle = E_n^{(0)} \langle n'j' | \psi_{nj}^{(1)} \rangle + E_{nj}^{(1)} \underbrace{\cancel{\langle n'j' | nj \rangle}}_{\substack{=0 \\ n' \neq n}}$$

$$\Rightarrow \langle n'j' | \psi_{nj}^{(1)} \rangle = \frac{\langle n'j' | V | nj \rangle}{E_n^{(0)} - E_{n'}^{(0)}}$$

Wollen $|\Psi_{nj}\rangle = |nj\rangle + |\Psi_{nj}^{(1)}\rangle + \mathcal{O}(\hat{V}^2)$

$$\Rightarrow \boxed{|\Psi_{nj}^{(1)}\rangle = \sum_{\substack{n'j' \\ n'\neq n}} \frac{\langle n'j'|V|nj\rangle}{E_n^{(0)} - E_{n'}^{(0)}} |n'j'\rangle + \sum_{j'\neq j} b_{jj'}^{n} |nj'\rangle}$$

kein $j=j'$ aus Normierungsargument

Koeffizienten $b_{jj'}^n$ sind Ordnung $g^1 = \hat{V}^1$, folgen aber erst aus Gleichung für $k=2$ (g^2).

$k=2$: 2. Ordnung (g^2)

Vereinfachung: Nehmen an, dass in 1. Ordnung die Entartung komplett aufgehoben, v_{nj} alle verschieden für $j=1,\dots,D_n$

$$\hat{H}_0 |\Psi_{nj}^{(2)}\rangle + \hat{V} |\Psi_{nj}^{(1)}\rangle = E_n^{(0)} |\Psi_{nj}^{(2)}\rangle + E_{nj}^{(1)} |\Psi_{nj}^{(1)}\rangle + E_{nj}^{(2)} |nj\rangle$$

Multipliziere mit $\langle nj''|$ $\rightarrow$ $E_n^{(2)}$, $b_{jj'}^n$

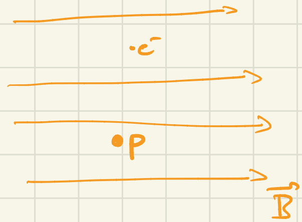
$j''=j$ $\Rightarrow$
$$\boxed{E_{nj}^{(2)} = \sum_{\substack{n'j' \\ n'\neq n}} \frac{|\langle n'j'|\hat{V}|nj\rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_{n'}^{(0)}}} \sim \hat{V}^2$$

$j''\neq j$ $\Rightarrow$
$$\boxed{b_{jj''}^{n} = \frac{1}{E_{nj}^{(1)} - E_{nj''}^{(1)}} \sum_{\substack{n'j' \\ n'\neq n}} \frac{\langle nj''|\hat{V}|n'j'\rangle\langle n'j'|\hat{V}|nj\rangle}{E_n^{(0)} - E_{n'}^{(0)}}}$$

v_{nj} $\qquad v_{nj''}$

$$b^{n}_{jj''} \sim \frac{\hat V^2}{\hat V} \sim \hat V^1$$

Zeeman Effekt



$\underbrace{\text{H-Atom}}_{\hat H_0}$ im $\underbrace{\text{schwachen homogenen Magnetfeld } \vec B}_{\hat V}$

Ankopplung des Magnetfelds wie in klassischen Mechanik/EM

"minimale Kopplung": $\vec p \to \vec p - \frac{e}{c}\vec A$ (cgs) ← Vektorpotential

$\vec p$ Impuls des geladenen Teilchens

bzw. $\vec p - e\vec A$ (SI)

QM: $\frac{\hbar}{i}\vec\nabla \to \frac{\hbar}{i}\vec\nabla - \frac{e}{c}\vec A$

Näherung für Elektronkoord. $\simeq$ Relativkoord., $m_r = m_e$

$\Rightarrow$ Hamiltonoperator für H-Atom im Magnetfeld

$$\hat H = \frac{1}{2m}\left(\frac{\hbar}{i}\vec\nabla - \frac{e}{c}\vec A\right)^2 - \frac{Z\alpha\hbar c}{r}$$

$$\Rightarrow \hat H = \underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta - \frac{Z\alpha\hbar c}{r}}_{\hat H_0} - \frac{\hbar e}{2mic}\underbrace{\vec\nabla\cdot\vec A}_{=\underbrace{(\vec\nabla\cdot\vec A)}_{=0} + \cancel{\vec A\cdot\vec\nabla}} \underbrace{- \frac{\hbar e}{\cancel{2}mic}\vec A\cdot\vec\nabla}_{\hat V} + \overbrace{\frac{e^2}{2mc^2}\vec A^2}^{\approx 0}$$

Schwaches Magnetfeld $\vec A^2 \ll \vec A$

Coulombeichung $\vec\nabla\cdot\vec A = 0$ ✓

Für homogenes $\vec{B}$ Feld, $\vec{B} = \text{const.}$

$$\Rightarrow \vec{A} = \frac{1}{2}\vec{B}\times\vec{r} \Rightarrow \vec{\nabla}\cdot\vec{A} = 0 \checkmark \quad \text{und} \quad \vec{\nabla}\times\vec{A} = \vec{B}$$

$$\Rightarrow \hat{V} = -\frac{\hbar e}{mic}\vec{A}\cdot\vec{\nabla} = -\frac{e}{mc}\vec{A}\cdot\hat{\vec{p}} = -\frac{e}{2mc}(\vec{B}\times\hat{\vec{r}})\cdot\hat{\vec{p}}$$

$$\Rightarrow \hat{V} = -\frac{e}{2mc}\vec{B}\cdot(\hat{\vec{r}}\times\hat{\vec{p}}) = -\frac{e\hbar}{2mc}\vec{B}\cdot\frac{\hat{\vec{L}}}{\hbar}$$

→ Potentielle Energie eines magnetischen Dipols $\vec{\mu} = \mu_B \frac{\vec{L}}{\hbar}$ im Magnetfeld $\vec{B}$

$$\Rightarrow \boxed{\hat{V} = -\mu_B \vec{B}\cdot\frac{\hat{\vec{L}}}{\hbar}}$$

mit Bohr Magneton $\boxed{\mu_B = \frac{e\hbar}{2mc}}$ (cgs) $m_r \approx m_e$

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m} \quad (\text{SI})$$

cgs $\mu_B = 9{,}274\cdot 10^{-21}\,\frac{\text{erg}}{\text{G}}$ G(auß) Einheit für B

SI $\mu_B = 9{,}274\cdot 10^{-24}\,\frac{\text{J}}{\text{T}}$

Wähle $\vec{B} = (0,0,B) \sim \hat{z}$ Richtung

$$\Rightarrow \hat{V} = -\mu_B B \frac{\hat{L}_z}{\hbar}$$

Störungstheorie $\quad E_{nlm} = E_n^{(0)} + E_{nlm}^{(1)} + \mathcal{O}(\hat{V}^2)$

$$E_n^{(0)} = -\frac{13{,}6\,\mathrm{eV}\, Z^2}{n^2}$$

$$\boxed{E_{nlm}^{(1)} =} \langle nlm | \hat{V} | nlm \rangle \boxed{= -\mu_B B \cdot m}$$