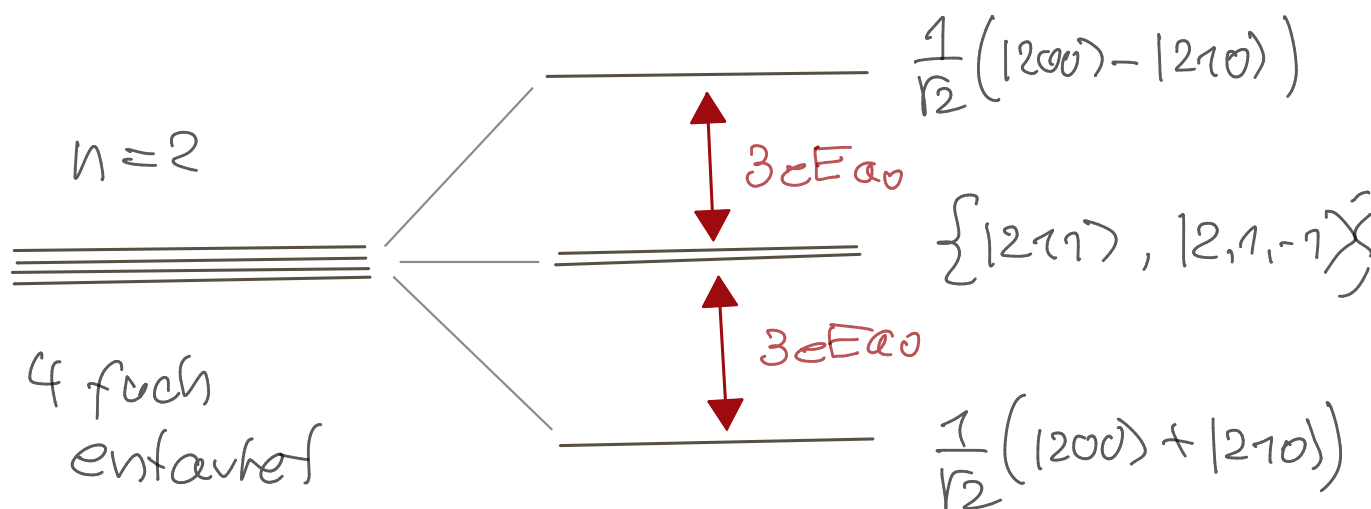


(557)

$$\lambda_+ \quad |2_{2+}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|200\rangle - |210\rangle)$$

$$\lambda_- \quad |2_{2-}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|200\rangle + |210\rangle)$$



partielle Aufhebung der Entartung

9.3 zeitabhängige Störungstheorie

$\Rightarrow$ Q.M.II Vorlesung

9.4 Ritzsches Variationsverfahren

Störungstheorie setzt Existenz eines lösbaren ungestörten Hamiltonoperators H_0 voraus.

Betrachten separablen Hilbertraum, d.h. es existiert eine vollständige ONB $\{|\phi_n\rangle\}$

Satz: Falls $\hat{H}$ von unten beschränkt ist, gilt für jeden (nicht notwendig) normierten Zustand $|\varphi\rangle$

$$(552) \quad \frac{\langle \varphi | \hat{H} | \varphi \rangle}{\langle \varphi | \varphi \rangle} \geq E_0 \quad \forall |\varphi\rangle$$

wobei E_0 die Grundzustandsenergie von $\hat{H}$ ist

Beweis: $|\varphi\rangle = \sum_n \langle \phi_n | \varphi \rangle |\phi_n\rangle$

Sei: $\hat{H} |\phi_n\rangle = E_n |\phi_n\rangle \quad \{|\phi_n\rangle\} \text{ von NB}$

$$\langle \varphi | \hat{H} | \varphi \rangle = \sum_{n,m} \langle \varphi | \phi_m \rangle \underbrace{\langle \phi_m | \hat{H} | \phi_n \rangle}_{= \delta_{mn} E_n} \langle \phi_n | \varphi \rangle$$

$$= \sum_n |\langle \varphi | \phi_n \rangle|^2 E_n \geq E_0 \underbrace{\sum_n |\langle \varphi | \phi_n \rangle|^2}_{=1}$$

□

Jetzt wollen wir eine möglichst gute Approximation des tatsächlichen Grundzustandes finden

Ansatz: $|\psi\rangle = |f(\alpha, \beta, \gamma, \dots)\rangle$

Wobei $f(\dots)$ eine geschickt gewählte Funktion ausgewählter Zustände ist, und $\alpha, \beta, \gamma, \dots$ noch zu bestimmende Variationsparameter sind

Nun definieren wir

$$(554) \quad \bar{H}(\alpha, \beta, \gamma, \dots) \equiv \frac{\langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle}$$

Minimierung von $\bar{H}$ bzgl. der Variationsparameter gibt die mit dem obigen Ansatz bestmögliche Approximation der Grundzustandsenergie und der Grundzustände

$$(555) \quad \left. \frac{\partial \bar{H}}{\partial \alpha} \right|_{\alpha=\alpha_0} = 0 \quad \left. \frac{\partial \bar{H}}{\partial \beta} \right|_{\beta=\beta_0} = 0 \quad \text{etc.}$$

Man beachte daß $\alpha, \beta, \dots$ in der Regel komplexe Zahlen sind und man daher sowohl die Ableitungen nach $\text{Re}[\alpha], \text{Re}[\beta], \dots$ als auch nach $\text{Im}[\alpha], \text{Im}[\beta], \dots$ null setzen muß.

$$(556) \quad \boxed{|\tilde{E}_0\rangle \cong |f(\alpha_0, \beta_0, \gamma_0, \dots)\rangle}$$

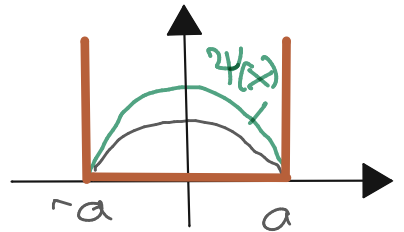
ist dann die beste Approximation des Grundzustandes (ohne Normierung)

(557)

$$\tilde{E}_0 \equiv \frac{\langle \tilde{E}_0 | \hat{H} | \tilde{E}_0 \rangle}{\langle \tilde{E}_0 | \tilde{E}_0 \rangle}$$

Beispiel 1D Box Potential

$$V(x) = \begin{cases} 0 & |x| < a \\ \infty & |x| \geq a \end{cases}$$



• exakte Lösung für Grundzustand, und -energie

$$(558) \quad \psi_0(x) = \langle x | E_0 \rangle = \frac{1}{\sqrt{a}} \cos\left(\frac{\pi x}{2a}\right)$$

$$E_0 = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\pi^2}{4a^2}$$

• Variationsansatz mit einem Parameter λ

$$\psi(x) = a^\lambda - |x|^\lambda$$

erfüllt Randbedingung
 $\psi(\pm a) \equiv 0$

$$\Rightarrow \bar{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\int_{-a}^a (a^\lambda - |x|^\lambda) \frac{d^2}{dx^2} (a^\lambda - |x|^\lambda) dx}{\int_{-a}^a (a^\lambda - |x|^\lambda)^2 dx}$$

(559)

$$= \dots = \frac{(\lambda+1)(2\lambda+1)}{(2\lambda-1)} \frac{\hbar^2}{2ma^2}$$

$$(560) \quad \frac{\partial \bar{H}}{\partial \lambda} = 0 \Rightarrow \lambda_0 = \frac{1+\sqrt{6}}{2} \simeq 1.72$$

$$(561) \quad \tilde{E}_0 = \bar{H}(\lambda = \lambda_0) = \frac{5+2\sqrt{6}}{\pi^2} E_0 \approx 1.00298 E_0$$

recht gut!

Betrachten wir jetzt speziell einen endlichen
Superpositionsansatz

$$(562) \quad |\psi\rangle = \sum_{n=1}^N \alpha_n |\phi_n\rangle$$

$\{|\phi_n\rangle\}$
bekannte Zust.
nicht notwendig
orthogonal

Variationsbedingungen

$$(563) \quad \frac{\partial \bar{H}}{\partial \alpha_n} = 0 \quad \frac{\partial \bar{H}}{\partial \alpha_n^*} = 0$$

wobei α, α^* als
unabhängig behandelt
werden

Nun ist

$$(564) \quad \bar{H} = \frac{\sum_{n,m} \alpha_n^* \alpha_m \langle \phi_n | \hat{H} | \phi_m \rangle}{\sum_{n,m} \alpha_n^* \alpha_m \langle \phi_n | \phi_m \rangle} \Big|_{\min} = \tilde{E}_0$$

$$\frac{\partial \bar{H}}{\partial \alpha_n^*} = 0 \quad \text{liefert}$$

$$(565) \quad \sum_n \left[\langle \phi_n | \hat{H} | \phi_m \rangle - \tilde{E}_0 \langle \phi_n | \phi_m \rangle \right] \alpha_n = 0$$

Damit eine Lösung für die α_n existiert, muß

$$(566) \quad \det [\langle \phi_n | \hat{H} | \phi_m \rangle - \tilde{E}_0 \langle \phi_n | \phi_m \rangle] = 0$$

Der kleinste Eigenwert von (566) ist eine Approximation zu E_0 , die höheren Eigenwerte Approximationen von $E_1, E_2, \dots$ etc.

9.5 Adiabatische Näherung und Berry Phase

A) Adiabatisches Theorem

Jetzt betrachten wir einen explizit zeitabhängigen Hamiltonoperator. Die Zeitabhängigkeit sei durch einen zeitabhängigen Parameter $R(t)$ gegeben, z.B. Spin in einem zeitabhängigen Magnetfeld d.h.

$$(567) \quad \hat{H} = \hat{H}(R(t))$$

Zu jedem Zeitpunkt können wir instantane Eigenzustände und Eigenenergien bestimmen.

$$(568) \quad \hat{H}(R) |E_n(R)\rangle = E_n(R) |E_n(R)\rangle$$

Nun gilt: Falls $R = R(t)$ hinreichend langsam von t abhängt, wird ein anfänglich in einem instantanen Eigenzustand von $H(R(t))$ präpariertes System in diesem Zustand verbleiben

adiabatisches Theorem

Was "hinreichend langsam" bedeutet werden wir noch sehen. Es gilt insbesondere

$$(569) \quad |\Psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t) e^{i\alpha_n(t)} |E_n(t)\rangle,$$

$$(570) \quad \text{mit} \quad \alpha_n(t) = -\frac{1}{\hbar} \int_0^t E_n(\tau) d\tau$$

$\alpha_n(t)$ wird dynamische Phase bezeichnet

► Was sind die $c_n(t)$?

Schwingungsgleichung

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\Psi(t)\rangle = \hat{H}(R(t)) |\Psi(t)\rangle$$

⇒ (571)

$$\sum_n \left[\dot{c}_n(t) e^{i\alpha_n(t)} |E_n(t)\rangle + c_n(t) e^{i\alpha_n(t)} |\dot{E}_n(t)\rangle \right] = 0$$

Multiplikation von (571) von links mit $\langle E_m(t)|$

Defekt

$$(572) \quad \dot{C}_m(t) = - \sum_n C_n(t) e^{i(\alpha_n(t) - \alpha_m(t))} \cdot \langle E_m(t) | \dot{E}_n(t) \rangle$$

Was ist $\langle E_m | \dot{E}_n \rangle$?

Dazu betrachten wir

$$(573) \quad \frac{d}{dt} \left(\hat{H}(t) |E_n(t)\rangle \right) = \left(\frac{d}{dt} \hat{H}(t) \right) |E_n(t)\rangle + \hat{H}(t) | \dot{E}_n(t) \rangle$$

$$\parallel$$

$$\frac{d}{dt} \left(\langle E_n(t) | E_n(t) \rangle \right) = \dot{E}_n(t) | E_n(t) \rangle + \langle \dot{E}_n(t) | E_n(t) \rangle$$

Multiplikation von (573) von links mit $\langle E_m(t) |$
liefert ($m \neq n$)

$$(574) \quad \langle E_m | \frac{d}{dt} \hat{H} | E_n \rangle + E_m \langle E_m | \dot{E}_n \rangle =$$

$$= \dot{E}_n \underbrace{\langle E_m | E_n \rangle}_{=0} + E_n \langle E_m | \dot{E}_n \rangle$$

Damit

$$(575) \quad \langle E_m | \dot{E}_n \rangle = \frac{\langle E_m | \frac{d}{dt} \hat{H} | E_n \rangle}{E_n(t) - E_m(t)}$$

D.h.,

$$\dot{C}_m(t) = - \sum_{n \neq m} C_n(t) e^{i(\alpha_n(t) - \alpha_m(t))} \frac{\langle E_m | \frac{d}{dt} \hat{H} | E_n \rangle}{E_n(t) - E_m(t)}$$

Jetzt nehmen wir an, daß System war
anfänglich in einem instantanen Eigenzustand
präpariert, d.h. $|\psi(0)\rangle = |E_n\rangle$

$$(576) \quad C_n(0) = 1 \quad C_{m \neq n}(0) = 0$$

$$(577) \quad \dot{C}_m(t) = e^{i(\alpha_n(t) - \alpha_m(t))} \frac{\langle E_m | \frac{d}{dt} \hat{H} | E_n \rangle}{E_n(t) - E_m(t)}$$

Falls $E_n(t)$, $E_m(t)$ und $\hat{H}$ nur langsam zeitabh.
hängig, können wir die Lösung von (577) schreiben
als

$$C_m(t) \approx -it \frac{\langle E_m | \frac{d}{dt} \hat{H} | E_n \rangle}{(E_n - E_m)^2} \left[e^{i(E_n - E_m)\frac{t}{\hbar}} - 1 \right] \quad m \neq n$$

Somit bleibt die Besetzung anderer Zustände
als $|E_n\rangle$ klein, falls $|C_m(t)| \ll 1$ d.h.

$$(578) \quad \left| \langle E_m | \frac{d}{dt} \hat{H} | E_n \rangle \right| \ll \frac{|E_n - E_m|^2}{\hbar} \quad m \neq n$$

adiabatische Bedingung

Die charakteristische Zeitskala der Änderung
der Matrixelemente des Hamiltonians muß
langsam im Vergleich zur inversen Energie-
lücke vom adiabatischen Zustand zu anderen
Zuständen sein.

B) Berry Phase

Im adiabatischen Limes gilt

$$(579) \quad C_n(0)=1 \Rightarrow |C_n(t)|=1$$

Aber die Phase von $C_n(t)$ kann sich ändern!

Ausatz

$$(580) \quad C_n(t) = |C_n(t)| e^{i\gamma_n(t)} = e^{i\gamma_n(t)}$$

$$(581) \quad \dot{C}_n(t) = i\dot{\gamma}_n(t) C_n(t)$$

Andererseits hatten wir nach (572) und $C_{n \neq n}(t)=0$

$$(582) \quad \dot{C}_n(t) = -C_n(t) \langle E_n(t) | \dot{E}_n(t) \rangle$$

$$\Rightarrow \dot{\gamma}_n(t) = i \langle E_n(t) | \dot{E}_n(t) \rangle$$

$$(583) \quad \boxed{\gamma_n(t) = i \int_0^t d\tau \langle E_n(\tau) | \dot{E}_n(\tau) \rangle}$$

adiabatische Phase

Somit lautet die Zeitentwicklung eines instantanen Eigenzustandes im adiabatischen Limes

$$(584) \quad |\Psi(0)\rangle = |E_n\rangle \quad |\Psi(t)\rangle = e^{i(\alpha_n(t) + \gamma_n(t))} |E_n(t)\rangle$$

Da $|E_n(t)\rangle$ ein instantaner Eigenzustand von $\hat{H}(t)$ bis auf einen beliebigen Phasenfaktor ist, könnte man vermuten, daß sich $\gamma_n(t)$ durch geeignete Wahl der $|E_n(t)\rangle$ stets zu null wählen läßt!?

Das ist jedoch nicht der Fall (V.M. Berry 1984)

Betrachten wir eine zyklische Zeitabhängigkeit

$$(585) \quad H(t) = H(R(t)) \quad R(T) = R(0)$$

Dann können wir die adiabatische Phase formulieren als

$$(586) \quad \dot{\gamma}_n(t) = i \langle E_n | \vec{\nabla}_{\vec{R}} E_n \rangle \cdot \dot{\vec{R}}(t)$$

Die bei einem Zyklus aufgesammelte adiabatische Phase, Berry Phase genannt ist

$$\Delta \gamma_n = \gamma_n(T) - \gamma_n(0) = \int_0^T dt \dot{\gamma}_n(t)$$

$$(587) \quad \Delta \gamma_n = i \oint_{\mathcal{C}} d\vec{R} \cdot \langle E_n | \vec{\nabla}_{\vec{R}} E_n \rangle \quad \text{Berry Phase}$$

$\Delta \gamma_n$ ist invariant unter Eichungen von $|E_n(\vec{R})\rangle$