12.12.07

## Schmidt - Zerlegung

$$|\psi\rangle = \sum_{ab} c_{ab} \, |a\rangle \otimes |b\rangle$$

verschränkter Zustand

Matrix

$\{|a\rangle\}$ VOS in $\mathcal{H}_A$

$\{|b\rangle\}$ VOS in $\mathcal{H}_B$

schreiben als

$$= \sum_n \lambda_n |\alpha_n\rangle \otimes |\beta_n\rangle$$

**Singulärwertzerlegung** Matrix $C$, Elemente $C_{ab}$

$$C = UDV, \quad U, V \text{ unitär}$$

$$D = \mathrm{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_N)$$

$$\lambda_i \geq 0$$

$N = \dim \mathcal{H}_A = \dim \mathcal{H}_B$.

$$|\alpha_n\rangle = \sum_a U_{an} |a\rangle$$

Basistrafo

$$|\beta_n\rangle = \sum_b V_{nb} |b\rangle$$

$$\Rightarrow |\psi\rangle = \sum_{abn} \underbrace{U_{an} D_n V_{nb}}_{C_{ab}} |a\rangle \otimes |b\rangle$$

$$= \sum_n \lambda_n \underbrace{|\alpha_n\rangle \otimes |\beta_n\rangle}_{\text{Schmidt-Zerlegung}}$$

- statt Doppelsumme $\sum_{ab} c_{ab} |a\rangle |b\rangle$
  jetzt Einfachsumme
- reduzierte Dichtematrix, $Tr_B |\psi\rangle\langle\psi|$

$$\rho_A = \sum_n \lambda_n^2 |\alpha_n\rangle\langle\alpha_n|$$

$$\rho_B = \sum_n \lambda_n^2 |\beta_n\rangle\langle\beta_n|$$

Quadrate der Schmidt-Koeff. als Diagonalelemente von $\rho_A$ und $\rho_B$.

Def.: (Schmidt-Zahl). Die Anzahl der von Null verschiedenen Eigenwerte $\lambda_n$. in der Schmidt-Zerlegung heißt Schmidt-Zahl, $n_S$.

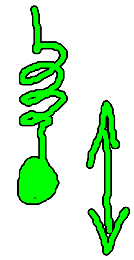
Falls $n_S = 1$, ist der Zustand separabel: $|\psi\rangle = \lambda_1 |\alpha\rangle \otimes |\beta\rangle$

Falls $n_S > 1$, ist der Zustand verschränkt.

# KAPITEL 5: Störungstheorie

## 5.1. Zeitunabhängig

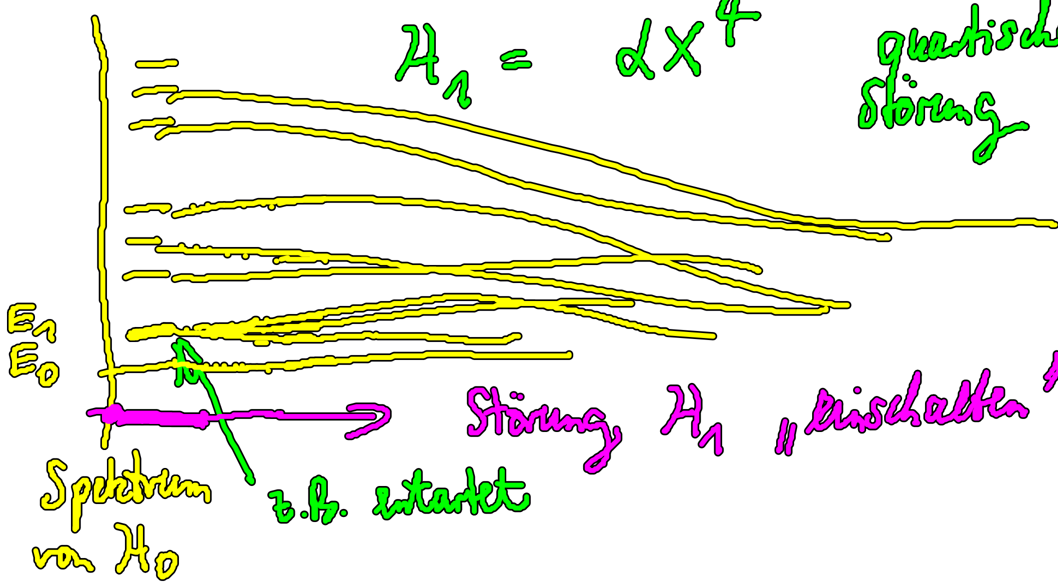
$$\hat{H} = \underbrace{\hat{H}_0}_{\text{bekannt}} + \lambda \cdot \underbrace{\hat{H}_1}_{\text{kleine Störung}} \qquad 0 \le \lambda \le 1$$



Matrix $\begin{pmatrix} H_0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} H_1 \end{pmatrix}$

Beispiel: $H_0 = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2$
$= \hbar\omega\left(a^+ a + \frac{1}{2}\right)$

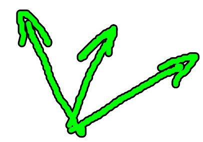
$H_1 = \alpha x^4$ quartische Störung




<u>Idee:</u> Für „kleine" $\hat{H}_1$ ändert sich das Spektrum nur wenig.

Sei $\mathcal{H}_0|i\nu\rangle = \varepsilon_i|i\nu\rangle$ $\qquad i=1,2,\dots$
$\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad \nu=1,\dots,d_i$

($d_i$ : Entartung des $i$-ten Eigenwertes.)



bekannt.

$|i\nu\rangle$ als VOS in $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \oplus \mathcal{H}_2 \oplus \dots$
(orthogonale Teilräume).

## 5.1.1. Projektor-Methode

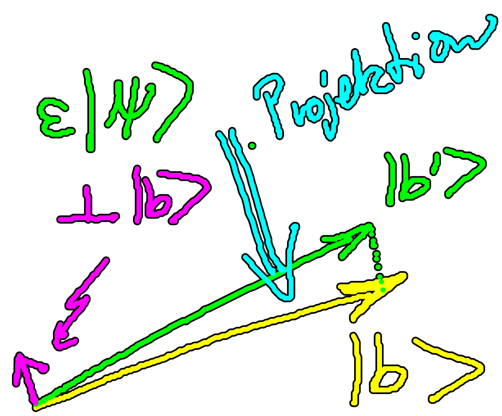
(Lit: Scherz) Betrachte festes $\varepsilon_b$,

$$\mathcal{H}_0|b\nu\rangle = \varepsilon_b|b\nu\rangle \qquad (*)$$
$$\nu = 1,\dots,d$$

1) $h = H - \varepsilon_b\hat{1}$; $h_0 = \mathcal{H}_0 - \varepsilon_b\hat{1}$;
$\varepsilon \equiv E - \varepsilon_b$

Wollen $\mathcal{H}|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle$ lösen.

$$\Rightarrow \quad h|\Psi\rangle = (h_0 + H_1)|\Psi\rangle = \varepsilon|\Psi\rangle$$




Definiere $\hat{P} \equiv \sum_{\nu=1}^{d} |b\nu\rangle\langle b\nu|$

Projektor, $\hat{P}^2 = \hat{P}$; $\qquad \hat{Q} = 1 - \hat{P}$

$1 = \hat{P} + \hat{Q}$

$$\hat{P}\hat{Q} = \hat{Q}\hat{P} = 0.$$

Weiterhin: $[\hat{\mathcal{H}}_0, \hat{P}] = [h_0, P] = [H_0, Q]$
$= [h_0, Q] = 0.$

$$\left(\hat{H}_0 = \sum_{i\nu} \varepsilon_i |i\nu\rangle\langle i\nu|\right).$$

$$h_0 Q|\psi\rangle = Q h_0 |\psi\rangle = Q(\varepsilon - \mathcal{H}_1)|\psi\rangle \quad (*)$$

Im Teilraum $\mathcal{H} \ominus \mathcal{H}_b$, $\mathcal{H}_b = \operatorname{span}\{|b\nu\rangle\}$

läßt sich $h_0$ invertieren:

$$h_0^{-1} = \frac{1}{H_0 - \varepsilon_b} \equiv [H_0 - \varepsilon_b]^{-1}$$

$$= -\frac{1}{\varepsilon_b}\frac{1}{1 - \frac{H_0}{\varepsilon_b}} = -\frac{1}{\varepsilon_b}\left(1 + \frac{1}{\varepsilon_b}H_0 + \frac{1}{\varepsilon_b^2}H_0^2 + \ldots\right)$$

$$\varepsilon_b \neq 0.$$

Definiert für Kets aus $\mathcal{H} \ominus \mathcal{H}_b$

$$\rightarrow \quad Q|\psi\rangle = h_0^{-1} Q(\varepsilon - \mathcal{H}_1)|\psi\rangle \qquad \Big/ \; Q \text{ von links}$$

$$Q|\psi\rangle = \underbrace{Q h_0^{-1} Q}\,(\varepsilon - \mathcal{H}_1)|\psi\rangle \qquad Q^2 = Q$$

$$R(\varepsilon_b) \equiv Q\frac{1}{H_0 - \varepsilon_b}Q \qquad \text{Resolvente (Pseudo-Inverse)}$$

Umschreibung

$$Q|\psi\rangle = R(\varepsilon_b)(\varepsilon - \mathcal{H}_1)|\psi\rangle \quad \Longleftrightarrow \quad (Q = 1 - P)$$

$$|\psi\rangle = P|\psi\rangle + R(\varepsilon_b)(\varepsilon - H_1)|\psi\rangle \qquad (**)$$

$$\overset{(**)}{=} P|\psi\rangle + R(\varepsilon_b)(\varepsilon - H_1)\left[P|\psi\rangle + R(\varepsilon_b)(\varepsilon - H_1)|\psi\rangle\right]$$

$$\overset{(**)}{=} \sum_{n=0}^{\infty}\left[R(\varepsilon_b)(\varepsilon - H_1)\right]^n P|\psi\rangle$$

## 5.1.2. Auswertung für die Eigenwerte

$$(h_0 + \mathcal{H}_1)|\psi\rangle = \varepsilon|\psi\rangle \qquad \hat{P}$$

$$\varepsilon\hat{P}|\psi\rangle = \hat{P}(h_0 + H_1)|\psi\rangle = \underbrace{h_0\hat{P}|\psi\rangle}_{0,} + PH_1|\psi\rangle$$

denn $P|\psi\rangle$ liegt in $\mathcal{H}_b$ und $h_0 = H_0 - \varepsilon_b 1$.

$$\Rightarrow \quad \varepsilon\hat{P}|\psi\rangle = \hat{P}H_1\sum_{n=0}^{\infty}\left(R(\varepsilon_b)(\varepsilon - H_1)\right)^n P|\psi\rangle. \qquad (*)$$

$$\varepsilon = E - \varepsilon_b = \varepsilon^{(1)} + \varepsilon^{(2)} + \varepsilon^{(3)} + \dots$$

mit $\varepsilon^{(i)} = O(H_1^i)$

Formal $\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \lambda \mathcal{H}_1$, $\lambda \in \mathbb{R}$

$$\varepsilon = \lambda \varepsilon^{(1)} + \lambda^2 \varepsilon^{(2)} + \lambda^3 \varepsilon^{(3)} + \dots$$

## 5.1.2.1. Erste Ordnung (Energien):

In Ordnung $O(\mathcal{H}_1)$ erhält man

(ε in * einsetzen).

$$\varepsilon^{(1)} \hat{P}|\psi\rangle = \hat{P} H_1 \hat{P}|\psi\rangle \quad \text{1. Ordn.} \quad \| \ \text{Eigenwertgleichung}$$

$A|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle$

$$\Longleftrightarrow \sum_{\nu=1}^{d} |b\nu\rangle\langle b\nu| \left[\hat{H}_1 \sum_{\nu'=1}^{d} |b\nu'\rangle\langle b\nu'| - \varepsilon^{(1)}\right] |\psi\rangle = 0 \quad / \langle b\mu|$$

$\langle b\mu|$

$$\sum_{\nu'=1}^{d} \langle b\mu|\hat{H}_1|b\nu'\rangle\langle b\nu'|\psi\rangle - \varepsilon^{(1)}\langle b\mu|\psi\rangle = 0 \quad *$$

Eigenwertgleichung für d Eigenwerte $\varepsilon^{(1)}$ und Eigenvektoren $|\psi_i\rangle$ im Teilraum $\mathcal{H}_b$.

$PH_1P$: $d \times d$ Matrix (hermitesch)

**Fall $d=1$: keine Entartung**

$$\langle b|H_1|b\rangle\langle b|\psi\rangle - \varepsilon^{(1)}\langle b|\psi\rangle = 0$$

$$\Rightarrow \quad \boxed{\varepsilon^{(1)} = \langle b | H_1 | b \rangle} \neq 0$$

$\varepsilon_b$ —— . . . . —— $\varepsilon_b + \varepsilon^{(1)}$

Mittelwert (Erwartungswert) der Störung im Zustand $|b\rangle$

$$\varepsilon^{(1)} = \int d^3x \, \psi_b^*(x) \, H_1 \, \psi_b(x)$$

z.B. $\quad H_1 = \alpha x^4$.

<u>Fall $d>1$</u>:

$\varepsilon_b$ —— $\varepsilon_1^{(1)}, \ \vdots, \ \varepsilon_d^{(1)}$

i. A. keine vollständige Aufspaltung, falls die $\varepsilon^{(1)}$ entartet sind.