Zeitunabhängige Störungstheorie

$$\hat{H} = \underbrace{\hat{H}_0}_{\text{ungestörter Anteil}} + \underbrace{\hat{H}_1}_{\text{Störung (schwach!!)}}$$

ungestörter Anteil
zugehöriges Eigenwertproblem
exakt lösbar!!

Zu lösen: Eigenwertproblem von $\hat{H}$

$$\hat{H}|n\rangle = E_n|n\rangle$$

$$\hat{H}_0|n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)}|n^{(0)}\rangle$$

Eigenzustände und Eigenwerte von $\hat{H}_0$ seien bekannt!!

$$\langle n^{(0)}|m^{(0)}\rangle = \delta_{nm}$$

$$\hat{H}_1 = \lambda \hat{V}$$

$\hat{V}$: Störoperator (zeitunabhängig)

λ: kleiner Parameter ($\lambda \ll 1$)

Nun muß unterschieden werden, ob man ein nicht entartetes oder ein entartetes Energieniveau $E_n^{(0)}$ betrachtet!!

VII.1.1. Störung eines nicht entarteten Energieniveaus

Idee:

$$\left.\begin{aligned} E_n &= E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \ldots \\ \text{und } |n\rangle &= |n^{(0)}\rangle + \lambda|n^{(1)}\rangle + \lambda^2|n^{(2)}\rangle + \ldots \end{aligned}\right\} \text{Störungsentwicklung } (*)$$

mit $E_n^{(\alpha)}$, $|n^{(\alpha)}>$ $(\alpha \geq 1)$
als Korrekturen der Ordnung α

Erinnerung: $\lambda \ll 1$ $\Rightarrow$ Reihen können nach wenigen Termen abgebrochen werden

<u>Konstruktion der Korrekturterme</u>
Einsetzen von (*) in die SG des vollen Problems

$$\hat{H}|n> = E_n|n>$$

$$\hat{H}|n> = (\hat{H}_0 + \hat{H}_1)|n> = (\hat{H}_0 + \lambda\hat{V})|n>$$
$$= (\hat{H}_0 + \lambda\hat{V})(|n^{(0)}> + \lambda|n^{(1)}> + \lambda^2|n^{(2)}> \dots)$$
$$\stackrel{!}{=} E_n|n>$$
$$= (E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \dots)$$
$$(|n^{(0)}> + \lambda|n^{(1)}> + \lambda^2|n^{(2)}> \dots)$$

Beide Seiten sortieren nach Potenzen von λ:

$$\hat{H}_0|n^{(0)}> + \lambda(\hat{V}|n^{(0)}> + \hat{H}_0|n^{(1)}>) + \lambda^2(\hat{V}|n^{(1)}> + \hat{H}^0|n^{(2)}>) + O(\lambda^3)$$
$$= E_n^{(0)}|n^{(0)}> + \lambda(E_n^{(1)}|n^{(0)}> + E_n^{(0)}|n^{(1)}>)$$
$$+ \lambda^2(E_n^{(2)}|n^{(0)}> + E_n^{(1)}|n^{(1)}> + E_n^{(0)}|n^{(2)}>)$$
$$+ O(\lambda^3)$$

Betrachte nun (wie üblich bei Potenzreihenansätzen) getrennt die einzelnen Ordnungen (Terme $\sim \lambda^p$)

$p=0$: $\hat{H}_0|n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)}|n^{(0)}\rangle$ ungestörtes Problem! (bekannt)

$p=1$: $$\hat{V}|n^{(0)}\rangle + \hat{H}_0|n^{(1)}\rangle = E_n^{(1)}|n^{(0)}\rangle + E_n^{(0)}|n^{(1)}\rangle$$

$$\Leftrightarrow \left(\hat{H}_0 - E_n^{(0)}\right)|n^{(1)}\rangle = \left(E_n^{(1)} - \hat{V}\right)|n^{(0)}\rangle$$

$p=2$: man findet:
$$\left(\hat{H}_0 - E_n^{(0)}\right)|n^{(2)}\rangle = E_n^{(2)}|n^{(0)}\rangle + \left(E_n^{(1)} - \hat{V}\right)|n^{(1)}\rangle$$

Betrachte $p=1$

Frage: Was ist $E_n^{(1)}$, was ist $|n^{(1)}\rangle$?

Lösung: Entwickle die $|n^{(1)}\rangle$ nach den Eigenzuständen des ungestörten Problems (Beachte: Die $|n^{(0)}\rangle$ bilden eine Basis des Hilbertraums!)

$$|n^{(1)}\rangle = \hat{1}\,|n^{(1)}\rangle = \overbrace{\sum_{k^0} |k^{(0)}\rangle\langle k^{(0)}}^{\hat{1}}|n^{(1)}\rangle$$

$$\underbrace{\langle k^{(0)}|n^{(1)}\rangle}_{\text{Entwicklungskoeffizienten}}$$

$$\boxed{\langle n^{(0)}|k^{(0)}\rangle = \delta_{nk}}$$

└ Eigenzustand von $\hat{H}_0$

Einsetzen in die Gleichung für $p=1$

Wir hatten: $(\hat{H}_0 - E_n^{(0)})|n^{(1)}\rangle = (E_n^{(1)} - \hat{V})|n^{(0)}\rangle$
($p=1$)

$$\Leftrightarrow (\hat{H}_0 - E_n^{(0)}) \sum_{k^0} |k^{(0)}\rangle\langle k^{(0)}|n^{(1)}\rangle = (E_n^{(1)} - \hat{V})|n^{(0)}\rangle$$

Multipliziere von links mit einem andern Eigenzustand ($\langle m^{(0)}|$) des ungestörten Problems

$$\sum_{k^0} \Big(\langle m^{(0)}|\underbrace{\hat{H}^0|k^{(0)}\rangle}_{E_k^{(0)}|k^{(0)}\rangle} - E_n^{(0)} \underbrace{\langle m^{(0)}|k^{(0)}\rangle}_{\delta_{mk}}\Big)\langle k^{(0)}|n^{(1)}\rangle = E_n^{(1)} \underbrace{\langle m^{(0)}|n^{(0)}\rangle}_{\delta_{mn}} - \langle m^{(0)}|\hat{V}|n^{(0)}\rangle$$

$$\Leftrightarrow \sum_{k^0} \left(E_k^{(0)}\delta_{mk} - E_n^{(0)}\delta_{mk}\right)\langle k^{(0)}|n^{(1)}\rangle = E_n^{(1)}\delta_{mn} - \langle m^{(0)}|\hat{V}|n^{(0)}\rangle$$

$$\Leftrightarrow \boxed{(E_m^{(0)} - E_n^{(0)})\langle k^{(0)}|n^{(1)}\rangle = E_n^{(1)}\delta_{mn} - \langle m^{(0)}|\hat{V}|n^{(0)}\rangle}$$

(**)

Fallunterscheidung

i) $m=n \overset{(**)}{\Longrightarrow} 0 = E_n^{(1)} - \langle n^{(0)}|\hat{V}|n^{(0)}\rangle$

$$\Rightarrow \boxed{\underbrace{E_n^{(1)}}_{\text{Energiekorrektur erster Ordnung}} = \underbrace{\langle n^{(0)}|\hat{V}|n^{(0)}\rangle}_{\text{Erwartungswert des Störoperators } \hat{V} \text{ in dem ungestörten Eigenzustand } |n^{(0)}\rangle \;!!}}$$

ii) $m \neq n$ Aus (**):

$$\langle m^{(0)}|n^{(1)}\rangle = \frac{\langle m^{(0)}|\hat{V}|n^{(0)}\rangle}{\left(E_n^{(0)} - E_m^{(0)}\right)}$$

Dies ergibt die Korrektur 1. Ordnung für die Eigenzustände. Denn wir hatten

$$|n^{(1)}\rangle = \sum_{k^0} |k^{(0)}\rangle\langle k^{(0)}|n^{(1)}\rangle$$

also: $|n^{(1)}\rangle = \sum_{k \neq n} \frac{\langle k^{(0)}|\hat{V}|n^{(0)}\rangle}{\left(E_n^{(0)} - E_k^{(0)}\right)} |k^{(0)}\rangle$

Bemerkungen

- In erster Ordnung Störungstheorie für ein nicht entartetes Energieniveau $E_n^{(0)}$ ergibt sich also

$$E_n = E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)}$$
$$ = E_n^{(0)} + \lambda \langle n^{(0)} | \hat{V} | n^{(0)} \rangle$$

$$|n\rangle = |n^{(0)}\rangle + \lambda \sum_{k \neq n} \frac{\langle k^{(0)} | \hat{V} | n^{(0)} \rangle}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} |k^{(0)}\rangle$$

- Man sieht: Es war wichtig, nicht entartete Energieeigenwerte vorauszusetzen!! Sonst könnte der Nenner in der Korrektur der Zustände verschwinden
  $\Rightarrow$ Korrektur würde divergieren

  Idee der Störungsentwicklung!!

- Außerdem:
  Durch die Störung $\hat{V}$ werden verschiedene Eigenzustände des ungestörten Problems linear kombiniert!

  Dabei haben solche Zustände $|k^{(0)}\rangle$, deren Energie $E_n^{(0)}$ dicht an $E_n^{(0)}$ liegen, ein besonders großes Gewicht
  (da dann $E_n^{(0)} - E_n^{(0)}$ klein)

- Analoges Vorgehen für die höheren Ordnungen!!
  z.B. ergibt sich für die Energiekorrektur 2. Ordnung:

$$E_n^{(2)} = \sum_{k \neq n} \frac{|\langle k^{(0)}|\hat{V}|n^{(0)}\rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}$$

VII.1.2. Störungsrechnung bei Entartung

Annahme:

Zum Energieniveau $E_n^{(0)}$ des ungestörten Systems gehören jetzt $\alpha = 1, .., s$ unabhängige Eigenzustände

$$\hat{H}_0 |n^{(0)}, \alpha\rangle = E_n^{(0)} |n^{(0)}, \alpha\rangle$$

mit $\alpha = 1, \dots, s$

s-fache Entartung !

Wir nehmen wieder an, dass Zustände orthonormiert sind, also $\langle n^{(0)}, \alpha | m^{(0)}, \beta\rangle = \delta_{nm}\,\delta_{\alpha\beta}$

Beachte:

- Eine Störung hebt die Entartung typischerweise auf !! d.h. in der vollen SG $\underbrace{\hat{H}}_{\hat{H}_0 + \lambda \hat{V}}|n\rangle = E_n|n\rangle$ sind die $|n\rangle$ häufig nicht mehr entartet !!
- wir benutzen wieder als Ansatz:

$$|n\rangle = |n^{(0)}\rangle + \lambda\, |n^{(1)}\rangle \dots$$

Für $\lambda \Rightarrow 0$ soll wieder der richtige Zustand $|n^{(0)}, \alpha\rangle$ aus dem Eigenraum zu $E_n^{(0)}$ herauskommen!

Ansatz: $|n^{(0)}\rangle = \sum_{\alpha=1}^{S} c_\alpha \, |n^{(0)}, \alpha\rangle$ | Die c_α müssen erst noch bestimmt werden!

Wir nehmen nun an, dass dieser Ansatz funktioniert.
Dann erfüllt er auch die Störungsgleichung erster Ordnung ($p=1$), die wir für den nicht-entarteten Fall hergeleitet hatten!

$$\left(\hat{H}_0 - E_n^{(0)}\right)|n^{(1)}\rangle \overset{!}{=} \left(E_n^{(1)} - \hat{V}\right)|n^{(0)}\rangle$$

$$= \left(E_n^{(1)} - \hat{V}\right) \sum_{\alpha=1}^{S} c_\alpha \, |n^{(0)}, \alpha\rangle$$

multipliziere von links mit Zustand $\langle n^{(0)}, \beta|$

$$\underbrace{\langle n^{(0)}, \beta|\hat{H}_0|n^{(1)}\rangle}_{E_n^{(0)}\langle n^{(0)},\beta|n^{(1)}\rangle} - E_n^{(0)}\langle n^{(0)},\beta|n^{(1)}\rangle$$

$$= \sum_{\alpha=1}^{S} \Big(E_n^{(1)} \overbrace{\langle n^{(0)},\beta|n^{(0)},\alpha\rangle}^{\delta_{\alpha\beta}} - \langle n^{0},\beta|\hat{V}|n^{(0)},\alpha\rangle \Big) c_\alpha$$

$$\Leftrightarrow \quad 0 = \sum_{\alpha=1}^{s} c_\alpha \left(E_n^{(1)} \delta_{\alpha\beta} - \underbrace{\langle n^{(0)}, \beta | \hat{V} | n^{(0)}, \alpha \rangle}_{=: V_{\beta\alpha}} \right)$$

$$\Leftrightarrow \boxed{\sum_\alpha \left(V_{\beta\alpha} - E_n^{(1)} \delta_{\beta\alpha} \right) c_\alpha = 0} \quad (*)$$

homogenes lineares Gleichungssystem für die Koeffizienten c_α !!

Matrixgleichung:

$$(\underline{\underline{V}} - E_n^{(1)} \underline{\underline{1}}) \underline{c} = 0 \quad (*)$$

Matrix mit Elemente $V_{\beta\alpha}$

Einheitsmatrix

Vektor mit Elemente c_α

Aus der linearen Algebra wissen wir:
Nichttriviale Lösungen des Gleichungssystems (*) existieren genau dann, wenn

$$\det(\underline{\underline{V}} - E_n^{(1)} \underline{\underline{1}}) = 0$$

$\rightarrow$ ergibt Polynom s-ten Grades in $E_n^{(1)}$

$\Rightarrow$ s Lösungen $E_{n,\alpha}^{(1)}$

diese können voneinander verschieden sein!

Für gegebene $E_{n\alpha}^{(1)}$ können dann die Koeffizienten c_α berechnet werden!

Beachte:

Das Nullsetzen der Determinante von $\left(\underline{\underline{V}} - E_n^{(1)} \underline{\underline{1}}\right)$ entspricht gerade der Berechnung der Eigenwerte der Matrix $\underline{\underline{V}}$!!

↑ „Störmatrix"

Beispiel: $s=2$

$$\det\left(\underline{\underline{V}} - E_n^{(1)} \underline{\underline{1}}\right) = \det\begin{pmatrix} V_{11} - E_n^{(1)} & V_{12} \\ V_{21} & V_{22} - E_n^{(1)} \end{pmatrix} \stackrel{!}{=} 0$$

mit $V_{21} = V_{12}^*$ Matrixelemente!

$$\left(V_{11} - E_n^{(1)}\right)\left(V_{22} - E_n^{(1)}\right) - |V_{12}|^2 \stackrel{!}{=} 0$$

$$\Rightarrow \ldots \quad E_n^{(1)} = \frac{1}{2}\left(V_{11} + V_{22} \pm \sqrt{(V_{11} - V_{22})^2 + 4|V_{12}|^2}\right.$$

$\Rightarrow$ Energie in Störungstheorie 1. Ordnung:

$$E_n = E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)}$$

$$= E_n^{(0)} + \frac{\lambda}{2} \left(V_{11} + V_{22} \pm \sqrt{(V_{11} - V_{22})^2 + 4|V_{12}|^2} \right.$$

Störung führt zur Aufspaltung!