

Zeitunabhängige Störungstheorie

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1 \quad \text{Störung (schwach!!)}$$

ungestörter Anteil
zugehörige 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
sind bekannt!!

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

Störoperator (zeitunabhängig)

kleiner Parameter ($\lambda \ll 1$)

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

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

VII.1.1. Störung eines nicht entarteten Energieniveaus

Idee:
$$E_n = E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \dots$$

und
$$|n\rangle = |n^{(0)}\rangle + \lambda |n^{(1)}\rangle + \lambda^2 |n^{(2)}\rangle + \dots$$

Störungs-
entwicklung
⊗

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

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

Konstruktion der Korrekturterme

Einsetzen von (*) in die SG des vollen Problems

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

$$\begin{aligned} \hat{H}|n\rangle &= (\hat{H}_0 + \hat{H}_1)|n\rangle = (\hat{H}_0 + \lambda \hat{V})|n\rangle \\ &= (\hat{H}_0 + \lambda \hat{V})(|n^{(0)}\rangle + \lambda |n^{(1)}\rangle + \lambda^2 |n^{(2)}\rangle + \dots) \\ &\stackrel{!}{=} E_n |n\rangle \\ &= (E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \dots) \\ &\quad (|n^{(0)}\rangle + \lambda |n^{(1)}\rangle + \lambda^2 |n^{(2)}\rangle + \dots) \end{aligned}$$

Beide Seiten sortieren nach Potenzen von λ :

$$\begin{aligned} &\hat{H}_0 |n^{(0)}\rangle + \lambda (\hat{V}|n^{(0)}\rangle + \hat{H}_0 |n^{(1)}\rangle) + \lambda^2 (\hat{V}|n^{(1)}\rangle + \hat{H}_0 |n^{(2)}\rangle) + O(\lambda^3) \\ &= E_n^{(0)} |n^{(0)}\rangle + \lambda (E_n^{(1)} |n^{(0)}\rangle + E_n^{(0)} |n^{(1)}\rangle) \\ &\quad + \lambda^2 (E_n^{(2)} |n^{(0)}\rangle + E_n^{(1)} |n^{(1)}\rangle + E_n^{(0)} |n^{(2)}\rangle) \\ &\quad + O(\lambda^3) \end{aligned}$$

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

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

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

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

$p=2$: Man findet

$$(\hat{H}_0 - E_n^{(0)}) |n^{(2)}\rangle = E_n^{(2)} |n^{(0)}\rangle + (E_n^{(1)} - \hat{V}) |n^{(1)}\rangle$$

Betrachte $p=1$

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

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

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

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

↳ Eigenzustand von \hat{H}_0

Einsetzen in die Gleichung für $p=1$

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

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

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

$$\sum_{k^0} (\langle m^{(0)} | \hat{H}_0 | k^{(0)} \rangle - E_n^{(0)} \underbrace{\langle m^{(0)} | k^{(0)} \rangle}_{d_{mk}}) \langle k^{(0)} | n^{(1)} \rangle = E_n^{(1)} \underbrace{\langle m^{(0)} | n^{(0)} \rangle}_{d_{mn}} - \langle m^{(0)} | \hat{V} | n^{(0)} \rangle$$

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

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

**

Fallunterscheidung

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

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

Energiekorrektur erster
Ordnung :

Erwartungswert des Störglieds
 \hat{V} in dem ungestörten
Eigenzustand $|n^{(0)}\rangle$!!

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

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

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

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

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

Bemerkung

- In erster Ordnung Störtheorie 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 setzt: Es war wichtig, nicht erlaubte Energieeigenwerte voraussetzen!! Sonst könnte der Nenner in der Korrektur der Zustände verschwinden
 → Korrektur würde divergieren

↙
Idee der Störentwicklung!!

- Außerdem:

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

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

- Analog 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. Störrechnung bei Entartung

Annahme:

Zum Energieniveau $E_n^{(0)}$ des ungestörten Systems gehören jetzt $\alpha = 1, \dots, s$ 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 orthonormal sind,

$$\text{also } \langle n^{(0)}, \alpha | m^{(0)}, \beta \rangle = \delta_{nm} \delta_{\alpha\beta}$$

Beachte:

- Eine Störung hebt die Entartung typischerweise auf!!
d.h. in der vollen SG $\hat{H} = \hat{H}_0 + \lambda \hat{V}$ 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 nichtige 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!!

$$\begin{aligned} (\hat{H}_0 - E_n^{(0)}) |n^{(1)}\rangle &= (E_n^{(1)} - \hat{V}) |n^{(0)}\rangle \\ &= (E_n^{(1)} - \hat{V}) \sum_{\alpha=1}^S c_{\alpha} |n^{(0)}, \alpha\rangle \end{aligned}$$

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

$$\begin{aligned} \underbrace{\langle n^{(0)}, \beta | \hat{H}_0 | n^{(1)} \rangle}_{E_n^{(0)} \langle n^{(0)}, \beta | n^{(1)} \rangle} - E_n^{(0)} \langle n^{(0)}, \beta | n^{(1)} \rangle &= \sum_{\alpha=1}^S \left(\overbrace{E_n^{(1)} \langle n^{(0)}, \beta | n^{(0)}, \alpha \rangle}_{\delta_{\alpha\beta}} - \langle n^{(0)}, \beta | \hat{V} | n^{(0)}, \alpha \rangle \right) c_{\alpha} \end{aligned}$$

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

$$\Leftrightarrow \sum_{\alpha} (V_{\beta\alpha} - E_n^{(0)} d_{\beta\alpha}) c_{\alpha} = 0 \quad (*)$$

homogenes lineares Gleichungssystem für die Koeffizienten c_{α} !!

Matrixgleichung:

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

Matrix mit Elementen $V_{\beta\alpha}$ Einheitsmatrix Vektor mit Elementen c_{α}

Aus der linearen Algebra wissen wir:

Nichttriviale Lösungen des Gleichungssystems (*) existieren genau dann, wenn

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

→ ergibt Polynom S -ten Grades in $E_n^{(0)}$

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

diese können voneinander verschieden sein!

Für gegebenes $E_n^{(1)}$ können dann die Koeffizienten c_k berechnet werden!

Beachte:

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

Beispiel: $s=2$

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

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

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

$$\Rightarrow \dots E_n^{(1)} = \frac{1}{2} (V_{11} + V_{22} \pm \sqrt{(V_{11} - V_{22})^2 + 4|V_{12}|^2})$$

⇒ 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 zu Aufspaltung!"