6. Störungstheorie (Griffiths, Kap. 6, Sakurai, Kap. 5)

(v20) 17.01.05 St 1

6.1 Zeitunabhängige Störungstheorie

6.1.1 Grundidee: Effekt eines kleinen "Störterms" $\lambda H'$ im Hamilton wird berechnet durch systematische Entwicklung der Eigenenergien und Eigenzuständen des vollen Hamiltons in Potenzen von $\lambda H'$:

"ungestört"

Effizientere Notation (Sakurai) $\hat{H}_0 |n\rangle_0 = E_n^{(0)} |n\rangle_0$

Ungestörter Hamilton: $$\hat{H}_0 |\psi_n^0\rangle = E_n^0 |\psi_n^0\rangle \qquad (St1.1)$$

ungestörte Eigenenergien

Ungestörte Eigenkets als Orthonormalbasis: $$\langle \psi_n^0 | \psi_m^0 \rangle = \delta_{nm} \qquad (St1.2)$$

Ziel: finde Eigenkets- und -Energien des vollen Hamiltons, $$\hat{H} |\psi_n\rangle = E_n |\psi_n\rangle \qquad (St1.3)$$

$\lambda = 1$ zum Schluss

als Entwicklung in Potenzen des kleinen "Störterms" $\lambda \hat{H}'$: $$\hat{H} = \hat{H}^0 + \lambda \hat{H}' \qquad (St1.4)$$

Ansatz: Reihenentwicklungen für $|\psi_n\rangle$, E_n: $$|\psi_n\rangle = \sum_{j=0}^{\infty} \lambda^j |\psi_n^j\rangle = |\psi_n^0\rangle + \lambda |\psi_n^1\rangle + \lambda^2 |\psi_n^2\rangle + \dots \qquad (St1.5)$$

$$E_n = \sum_{j=0} \lambda^j E_n^j = E_n^0 + \lambda E_n^1 + \lambda^2 E_n^2 + \dots \qquad (St1.6)$$

Stz

(St1.4,5,6) in (St1.3):

$$(\hat{H}^0 + \lambda \hat{H}^1)\left[|\psi_n^0\rangle + \lambda|\psi_n^1\rangle + \lambda^2|\psi_n^2\rangle + \dots\right] \quad \text{(Stz.1)}$$

$$= (E_n^0 + \lambda E_n^1 + \lambda^2 E_n^2 + \dots)(|\psi_n^0\rangle + \lambda|\psi_n^1\rangle + \lambda^2|\psi_n^2\rangle + \dots$$

Gruppiert nach Potenzen von λ;

$$\hat{H}^0|\psi_n^0\rangle + \lambda\left[\hat{H}^0|\psi_n^1\rangle + \hat{H}^1|\psi_n^0\rangle\right] + \lambda^2\left[\hat{H}^0|\psi_n^2\rangle + \hat{H}^1|\psi_n^1\rangle\right] \quad \text{(Stz.2)}$$

$$= E_n^0|\psi_n^0\rangle + \lambda\left[E_n^0|\psi_n^1\rangle + E_n^1|\psi_n^0\rangle\right]$$

$$+ \lambda^2\left[E_n^0|\psi_n^2\rangle + E_n^1|\psi_n^1\rangle + E_n^2|\psi_n^0\rangle\right] + \dots$$

Vergleich der Koeffizenten von λ^n liefert:

$$\lambda^0: \quad \hat{H}^0|\psi_n^0\rangle = E_n|\psi_n^0\rangle \qquad \text{(=ungestörte Gl.)} \quad \text{(Stz.3)}$$

$$\lambda^1: \quad \hat{H}^0|\psi_n^1\rangle + \hat{H}^1|\psi_n^0\rangle = E_n^0|\psi_n^1\rangle + E_n^1|\psi_n^0\rangle \quad \text{(Stz.4)}$$

$$\lambda^2: \quad \hat{H}^0|\psi_n^2\rangle + \hat{H}^1|\psi_n^1\rangle = E_n^0|\psi_n^2\rangle + E_n^1|\psi_n^1\rangle + E_n^2|\psi_n^0\rangle \quad \text{(Stz.5)}$$

[Ab jetzt: $\lambda = 1$]

St3

6.1.2 Störungstheorie 1.ster Ordnung:

(St3.1)

$$\langle\psi_n^0|\,(St2.4):\quad \langle\psi_n^0|\hat H^0|\psi_n^1\rangle + \langle\psi_n^0|\hat H^1|\psi_n^0\rangle = \cancel{E_n^0\langle\psi_n^0|\psi_n^1\rangle} + E_n^1 \underbrace{\langle\psi_n^0|\psi_n^0\rangle}_{=1}$$

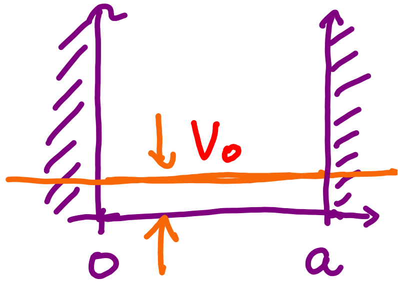
$$\cancel{E_n^0\langle\psi_n^0|\psi_n^1\rangle}$$

$$\boxed{E_n^1 = \langle\psi_n^0|\hat H^1|\psi_n^0\rangle} \qquad (St3.2)$$

Verschiebung der Eigenenergien in 1.ster Ordnung = Erwartungswert der Störung

Beispiel: unendlich

(a) Mit konstanter Störung $\hat H' = V_0 \hat{\mathbb{1}}$



Ungestörte WF: $\psi_n^0(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right)$ (St3.3)

Energieverschiebung: $E_n^1 \overset{(St3.2)}{=} \langle\psi_n^0|V_0\hat{\mathbb{1}}|\psi_n^0\rangle = V_0$ (logisch!) (St3.4)

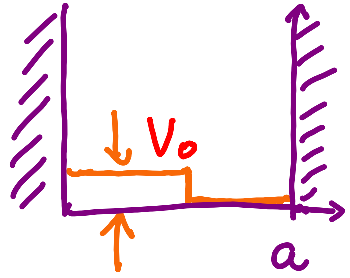
$\langle x|\hat H'|x\rangle$

(b) ~~Mit~~ Störung:

$$\hat H' = \begin{cases} V_0 & \text{für } x < a/2 \\ 0 & \text{"} \ x > a/2 \end{cases} ;$$

$$E_n^1 \overset{(St3.2)}{=} \int dx\, \psi_n^{0*}(x)\, \overbrace{V_0\,\Theta(-x+a/2)}^{h'(x)}\, \psi_n^0(x)$$

$$= V_0 \int_0^{a/2} dx\, \frac{2}{a}\sin^2\left(\frac{n\pi x}{a}\right) = V_0/2$$



Eigenkets (WF) in 1.ster Ordnung:

(St2.4) $$\hat{H}^0|\psi_n^1\rangle + \hat{H}^1|\psi_n^0\rangle = E_n^1|\psi_n^0\rangle + E_n^0|\psi_n^1\rangle$$

$$(\hat{H}^0 - E_n^0)|\psi_n^1\rangle = -(\hat{H}^1 - E_n^1)|\psi_n^0\rangle \quad \text{(St4.1)}$$

Ansatz für $|\psi_n^1\rangle$:
$$|\psi_n^1\rangle = \sum_{m \neq n} c_m^{(n)} |\psi_m^0\rangle \quad \text{(St4.2)}$$

[denn $m = n$ liefert 0 auf linker Seite von

(St4.2) in (St4.1), mit $\hat{H}^0|\psi_m^0\rangle = E_m^0|\psi_m^0\rangle$:

$$\sum_m (E_m^0 - E_n^0) c_m^{(n)} |\psi_m^0\rangle = -(\hat{H}^1 - E_n^1)|\psi_n^0\rangle \quad \text{(St4.3)}$$

$\langle\psi_\ell^0|$ (St4.3):

$$\sum_m (E_m^0 - E_n^0) c_m^{(n)} \underbrace{\langle\psi_\ell^0|\psi_m^0\rangle}_{\delta_{\ell m}} = -\langle\psi_\ell^0|\hat{H}^1|\psi_n^0\rangle + E_n^1 \langle\psi_\ell^0|\psi_n^0\rangle \quad \text{(St4.4)}$$

$$(E_\ell^0 - E_n^0) c_\ell^{(n)} = -\langle\psi_\ell^0|\hat{H}^1|\psi_n^0\rangle + E_n^1 \delta_{\ell n}$$

$\boxed{St5}$

$l = n$ reproduziert (St3.2): $\quad 0 = -\langle \psi_l^0 | \hat{H}' | \psi_n^0 \rangle + E_n^1$

$l \neq n$:

$$\left(E_l^0 - E_n^0\right) c_l^{(n)} = -\langle \psi_l^0 | \hat{H}' | \psi_n^0 \rangle \equiv -H'_{ln} \qquad (St5.1)$$

$$c_l^{(n)} = \frac{H'_{ln}}{E_n^0 - E_l^0} \qquad (St5.2)$$

(St5.2) in (St4.2):
$(l \to m)$

$$\boxed{|\psi_n^1\rangle = \sum_{m \neq n} \frac{H'_{mn}}{E_n^0 - E_m^0} |\psi_m^0\rangle} \qquad (St5.3)$$

[nicht-entartete St.Th.]

Nenner ist unbedenklich, falls Spektrum <u>nicht</u> entartet ist
(Falls Entartungen vorliegen: "Entartete Störungstheorie" nötig)

Korrekturket ist orthogonal zu

$$\langle \psi_n^0 | \psi_n^1 \rangle = \sum_{m \neq n} \frac{H'_{mn}}{E_n^0 - E_m^0} \langle \psi_n^0 | \psi_m^0 \rangle = 0. \qquad (St5.4)$$

6.1.3 Energien in 2.ter Ordnung:

$\langle\psi_n^0|$ (St2.5): $\quad \underbrace{\langle\psi_n^0|\hat{H}^0|\psi_n^2\rangle}_{E_n^0 \cancel{\langle\psi_n^0|\psi_n^2\rangle}} + \langle\psi_n^0|\hat{H}^1|\psi_n^1\rangle = \langle\psi_n^0|\left[\cancel{E_n^0|\psi_n^2\rangle} + E_n^1|\psi_n^1\rangle + E_n^2|\psi_n^0\rangle\right]$

$\langle\psi_n^0|\psi_n^1\rangle = 0$ (St5.4) $\qquad \langle\psi_n^0|\psi_n^0\rangle = 1$

$$E_n^2 = \langle\psi_n^0|H^1|\psi_n^1\rangle \overset{(St5.3)}{=} \sum_{m\neq n} \underbrace{\langle\psi_n^0|H^1|\psi_m^0\rangle}_{H'_{nm}} \frac{H'_{mn}}{E_n^0-E_m^0}$$

$$\boxed{E_n^2 = \sum_{m\neq n} \frac{|H'_{mn}|^2}{E_n^0-E_m^0}}$$

(gilt nur für nicht-entartete St.Th.) (St6.1)

Zur Kenntnisnahme: Energieverschiebung bis zur 3.ter

$$E_n = E_n^0 + E_n^1 + E_n^2 + E_n^3 + \dots \qquad H'_{nm} \equiv \langle\psi_n^0|\hat{H}'|\psi_m^0\rangle$$

$$E_n^1 = H'_{nn}, \quad E_n^2 = \sum_{m\neq n} \frac{|H'_{nm}|^2}{\Delta_{nm}} \qquad \Delta_{nm} \equiv E_n^0 - E_m^0$$

$$E_n^3 = \sum_{\ell,m\neq n} \frac{H'_{n\ell}H'_{\ell m}H'_{mn}}{\Delta_{n\ell}\Delta_{nm}} - H'_{nn}\sum_{m\neq n}\frac{|H'_{nm}|^2}{\Delta_{nm}^2} \qquad (St6.2)$$

St 7

6.1.4 Renormierung der Wellenfunktion: (Sakurai, S.293)

(St1.5) ist nicht auf 1 normiert:

$$|\psi_n\rangle = \sum_{j=0}^{\infty} \lambda^j |\psi_n^j\rangle = |\psi_n^0\rangle + \lambda|\psi_n^1\rangle + \lambda^2|\psi_n^2\rangle + \dots$$

(ist auf 1 normiert)

$Z_n^{1/2}(|\psi_n^0\rangle + |\psi_n^1\rangle + \dots$

reell, per Konvention

Definiere normiertes Ket: $|\psi_n\rangle_N \equiv Z_n^{1/2}|\psi_n\rangle$, also $Z_n^{1/2} = \langle\psi_n^0|\psi_n\rangle_N$ (St7.1)

Z_n = Wahrscheinlichkeit, gestörten Zustand im ungestörten Zustand zu finden.

mit $1 \equiv {}_N\langle\psi_n|\psi_n\rangle_N = = Z_n\langle\psi_n|\psi_n\rangle$ (St7.2)

$$Z_n^{-1} = [\langle\psi_n^0| + \lambda\langle\psi_n^1| + \lambda^2\langle\psi_n^2| + \dots]\cdot[|\psi_n^0\rangle + \lambda|\psi_n^1\rangle + \lambda^2|\psi_n^2\rangle + \dots]$$

$\langle\psi_n^0|\psi_n\rangle = 1$

$$Z_n^{+1} = 1 \mp \lambda^2\langle\psi_n^1|\psi_n^1\rangle + O(\lambda^3) \quad \text{(St7.3)}$$

2.ter Term: Übergangswschkt.

$$Z_n \underset{(St5.3)}{\overset{\lambda=1}{=}} 1 - \sum_{m\neq n} \frac{|H'_{mn}|^2}{(E_n^0 - E_m^0)^2} < 1 \quad \text{(St7.4)}$$

Übrigens gilt in allen Ordnungen der St.Th.:

$$Z_n = \frac{\partial E_n}{\partial E_n^0} \quad \text{[vergleiche mit (St6.1)]} \quad \text{(St7.5)}$$

6.2 Entartete Störungstheorie (allgemeine Formulierung, siehe G. Aufgabe 6.10)

Falls Entartungen vorliegen, bricht "nicht-Entartete Störungstheorie zusammen:

Nenner divergiert falls $E^0_n = E^0_m$

$$|\psi'_n\rangle = \sum_{m \neq n} \frac{H'_{mn}}{E^0_n - E^0_m} |\psi^0_m\rangle \qquad \text{(St 5.3)}$$

Idee zur Vermeidung des Problems: Wähle Basis so, dass
("Präpariere Basis für die Anwendung der Störung!",
nämlich so, dass Störung in der "präparierten Basis" diagonal ist)

$\{|\psi^0_j\rangle\}$ sei N-fach entarteter Satz v. ungestörten Zuständen:

$$\{|\psi^0_j\rangle,\ j = 1, \dots, N\} \quad \text{mit} \quad E^0_j = E^0_{j'} = E^0, \ \langle \psi^0_j | \psi^0_{j'} \rangle = \delta_{jj'} \qquad \text{(St 8.1)}$$

Ansatz für Basistransformation im entarteten Unterraum:

unitäre Matrix

$$|\tilde{\psi}_n\rangle = \sum_{j=1}^{N} |\psi^0_j\rangle c_{jn} \qquad \hat{H}^0 |\tilde{\psi}_n\rangle = E^0 |\tilde{\psi}_n\rangle \qquad \text{(St 8.2)}$$

Strategie: Wiederhole Herleitung in Abschnitt 6.1.2, nun für $|\tilde{\psi}_n\rangle$ statt $|\psi_n\rangle$
aber nutze zusätzliche Freiheit in Wahl v. C_{nj} um "Teilen durch 0" zu vermeiden.

Störungsansatz wie (St1.5,6):

$$|\tilde{\psi}_n\rangle = |\tilde{\psi}_n^0\rangle + \lambda |\tilde{\psi}_n^1\rangle + \dots \quad \text{(St9.1)}$$

$$\tilde{E}_n = E^0 + \lambda E_n^1 + \lambda^2 E_n^2 + \dots \quad \text{(St9.2)}$$

(gleich für alle n)

Man erhält, analog zu (St2.4):

$$\hat{H}^0 |\tilde{\psi}_n^1\rangle + \hat{H}' |\tilde{\psi}_n^0\rangle = E^0 |\tilde{\psi}_n^1\rangle + E_n^1 |\tilde{\psi}_n^0\rangle \quad \text{(St9.3)}$$

$\langle \psi_j^0 |$ (St9.3) :

$$\cancel{E^0 \langle \psi_j^0 | \tilde{\psi}_n^1\rangle} + \langle \psi_j^0 | \hat{H}' | \tilde{\psi}_n^0\rangle = \cancel{E^0 \langle \psi_j^0 | \tilde{\psi}_n^1\rangle} + E_n^1 \langle \psi_j^0 | \tilde{\psi}_n^0\rangle \quad \text{(St9.4)}$$

Setze (St8.9) für $|\tilde{\psi}_n^0\rangle$: ein

$$\sum_{j'} \langle \psi_j^0 | \hat{H}' | \psi_{j'}^0\rangle c_{j'n} = E_n^1 \sum_{j'} \underbrace{\langle \psi_j^0 | \psi_{j'}^0\rangle}_{\delta_{jj'}} c_{j'n}$$

$$\boxed{\sum_{j'} H'_{jj'} c_{j'n} = E_n^1 c_{jn}} \quad \text{(St9.5)}$$

St10

(St9.5) entspricht Eigenwertgl. für Spaltenvektor:

$$\left(\quad H' \quad \right)_{jj'} \left(\psi^n \right)_{j'} = E_n' \left(\psi^n \right)_j \qquad \psi^n = \begin{pmatrix} c_{1n} \\ c_{2n} \\ \vdots \\ c_{Nn} \end{pmatrix}$$

Schlussfolgerung:

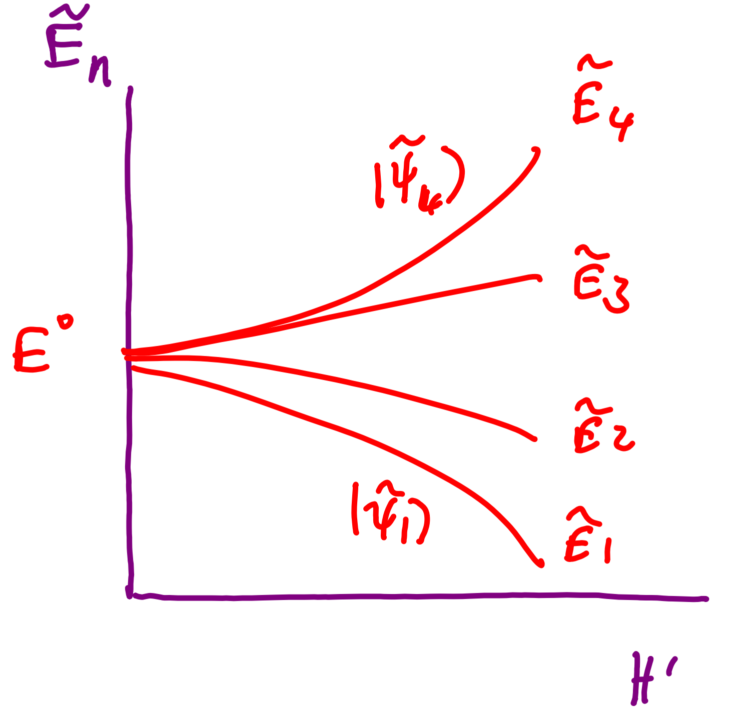
(St10.1)

$$\boxed{\text{In einem entarteten Unterraum sind die Verschiebungen der Eigenenerien durch die \underline{Eigenwerte des Stör-Hamiltons} in diesem Unterraum gegeben.}}$$

(St10.2)

Die Lösung des "durch-0-Teilen-Problems" ist also: Löse ein Eigenwertproblem!

Im allgemeinen sind die Eigenwerte dieses neuen Eigenwertproblems nicht entartet. Die Störung "hebt also die Entartung auf".



$$\langle \tilde{\psi}_m | \hat{H}' | \tilde{\psi}_n \rangle = \begin{pmatrix} \tilde{E}_1 & & 0 \\ & \tilde{E}_2 & \\ 0 & & \ddots & \tilde{E}_n \end{pmatrix}$$

St11

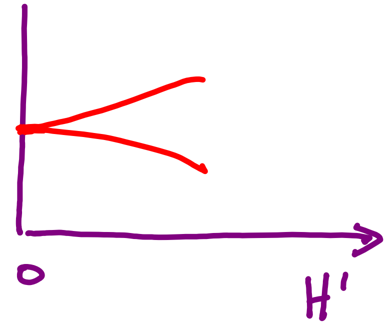
6.2.1 Beispiel: Zweifache Entartung:

Sei $H^0|\varphi_j^0\rangle = E^0|\varphi_j^0\rangle\ , \quad j=1,2$

mit $\langle\varphi_j^0|\hat{H}'|\varphi_i^0\rangle = \begin{pmatrix} H'_{11} & H'_{12} \\ H'_{21} & H'_{22} \end{pmatrix}\ , \quad H'_{12} = (H'_{21})^* .$

Diagonalisiere $\hat{H}'$: Löse charakteristische Gl.:

$$(H' - E\,\mathbb{1})_{jj'}\,c_{j'n} = 0$$



$$\Rightarrow \quad (H'_{11} - E)(H'_{22} - E) - H'_{12}H'_{21} = 0$$

$$E'_{\pm} = \frac{1}{2}(H'_{11} + H'_{22}) \pm \Big[(H'_{11} + H'_{22})^2 - 4(H'_{11}H'_{22} - H'_{12}H'_{21})\Big]^{1/2}$$

$$\boxed{E'_{\pm} = \frac{1}{2}(H'_{11} + H'_{22}) \pm \Big[(H'_{11} - H'_{22})^2 + 4|H'_{12}|^2\Big]^{1/2}}$$

Theorem: Sei $[\hat{A}, \hat{H}^0] = [\hat{A}, \hat{H}'] = 0$, $\hat{A} = \hat{A}^\dagger$, und (St12)

$\{|\psi_j^0\rangle\}$ ein Satz von entarteten Eigenzuständen von H, (St12.1)
mit nicht-entarteten Eigenwerten a_i für A; dann gilt

$$\langle\psi_j^0| H |\psi_i^0\rangle = 0 \, , \quad \forall\, i \neq j$$

(also ist diese Basis bereits "gut präpariert).

Beweis:

$$0 = \langle\psi_j|[\hat{A}, \hat{H}']|\psi_i\rangle \qquad \text{(St12.2)}$$

$$= \underbrace{(a_j - \overset{= a_i}{a_i^*})}_{\neq 0,\ \text{per Annahme}} \langle\psi_j|\hat{H}'|\psi_i\rangle \Rightarrow H'_{ji} = 0. \qquad \text{(St12.3)}$$

Fazit bei Entartungen: Suche nach weiterem Operator A, der mit $\hat{H}^0$ vertauscht: dessen Eigenzustände, falls <u>nicht</u> "A-entartet", bilden eine gut-präparierte Basis für entartete Störungstheorie.

Schönes Beispiel zum Selber-Lesen: Griffiths, Example