Skript zur 15. Vorlesung "Quantenmechanik", Montag den 6. Juni, 2011.

11 Zeitunabhängige Störungsrechnung

Sei $\hat{H} = \hat{H}_0 + \lambda \hat{H}_1$ ein Hamiltonoperator, sodass

- das Spektrum <u>und</u> die Energie-Eigenzustände von $\hat{H}_0$ bekannt sind,
- λ ein kleiner, dimensionsloser Parameter ist.

Dann können die Energie-Eigenzustände und das Spektrum von $\hat{H}$ in einer Potenzreihe in λ entwickelt werden:

$$\begin{aligned} E &= E^{(0)} + \lambda E^{(1)} + \lambda^2 E^{(2)} + \ldots \\ |\psi\rangle &= |\psi^{(0)}\rangle + \lambda |\psi^{(1)}\rangle + \lambda^2 |\psi^{(2)}\rangle + \ldots. \end{aligned}$$

Hier ist $E^{(0)}$ ein Eigenwert zum Hamilton-Operator $\hat{H}_0$ und $|\psi^{(0)}\rangle$ ein zugehöriger Eigenzustand. Wir haben hier ein Energieniveau und einen Eigenzustand herausgegriffen und den Einfluss der Störung angegeben. Nun werden wir die Koeffizienten $E^{(j)}$ und $|\psi^{(j)}\rangle$ in der Potenzreihenentwicklung explizit berechnen.

[Bemerkung: Eine solche Potenzreihenentwicklung ist vor allem relevant, wenn die "Störung" $\lambda \hat{H}_1$ klein ist, und die Potenzreihen konvergent sind.]

11.1 Störungstheorie für einen nicht-entarteten Eigenwert $E_n^{(0)}$

Sei $\left\{ |\psi_k^{(0)}\rangle \right\}$ eine orthonormale Basis aus $\hat{H}_0$-Eigenzuständen

$$\hat{H}_0 |\psi_k^{(0)}\rangle = E_k^{(0)} |\psi_k^{(0)}\rangle.$$

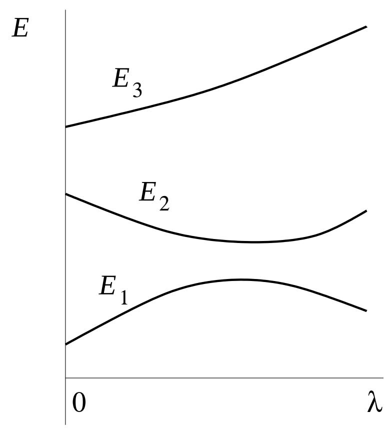
Sei $E_n^{(0)}$ ein nicht-entarteter Eigenwert mit Eigenzustand $|\psi_n^{(0)}\rangle$. Sei $E_n(\lambda)$ der Eigenwert des Hamilton-Operators $\hat{H}(\lambda)$, der im Limes $\lambda \to 0$ zu $E_n^{(0)}$ geht und sei $|\psi_n(\lambda)\rangle$ der zugehörende Eigenzustand:

$$\begin{aligned} \hat{H} |\psi_n(\lambda)\rangle &= E_n(\lambda) |\psi_n(\lambda)\rangle, \\ E_n(\lambda) &\stackrel{\lambda \to 0}{\to} E_n^{(0)}, \\ |\psi_n(\lambda)\rangle &\stackrel{\lambda \to 0}{\to} |\psi_n^{(0)}\rangle. \end{aligned}$$

(Letzteres folgt, da $E_n^{(0)}$ nicht entartet ist!) Wir wählen die “Normierung” von $|\psi_n(\lambda)\rangle$ als

$$\langle\psi_n^{(0)}|\psi_n(\lambda)\rangle = 1.$$

Bemerkung: Am Ende der Berechnung werden wir dann $\langle\psi_n(\lambda)|\psi_n(\lambda)\rangle$ ausrechnen und $|\psi_n(\lambda)\rangle$ wie üblich normieren.



Mit den Potenzreihen

$$\begin{aligned} E_n &= E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \dots \\ |\psi_n\rangle &= |\psi_n^{(0)}\rangle + \lambda|\psi_n^{(1)}\rangle + \lambda^2|\psi_n^{(2)}\rangle + \dots \end{aligned}$$

wird die Energie-Eigenwert-Gleichung $\hat{H}|\psi_n\rangle = E_n|\psi_n\rangle$ nun als

$$\begin{aligned} &\left(\hat{H}_0 + \lambda\hat{H}_1\right)\left(|\psi_n^{(0)}\rangle + \lambda|\psi_n^{(1)}\rangle + \dots\right) \\ &= \left(E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \cdots\right)\left(|\psi_n^{(0)}\rangle + \lambda|\psi_n^{(1)}\rangle + \lambda^2|\psi_n^{(2)}\rangle + \dots\right) \end{aligned}$$

geschrieben. Diese Gleichung wird nun für jede Ordnung in λ separat gelöst.

0. Ordnung: $\hat{H}_0|\psi_n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)}|\psi_n^{(0)}\rangle$,

1. Ordnung: $\hat{H}_0|\psi_n^{(1)}\rangle + \hat{H}_1|\psi_n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)}|\psi_n^{(1)}\rangle + E_n^{(1)}|\psi_n^{(0)}\rangle$,

2. Ordnung: $\hat{H}_0|\psi_n^{(2)}\rangle + \hat{H}_1|\psi_n^{(1)}\rangle = E_n^{(0)}|\psi_n^{(2)}\rangle + E_n^{(1)}|\psi_n^{(1)}\rangle + E_n^{(2)}|\psi_n^{(0)}\rangle$,

usw.

0. Ordnung: Der Gleichung der 0. Ordnung wird genügt, weil E_n^0 ein Eigenwert des Operators $\hat{H}_0$ ist. (Trivial.)

1. Ordnung: Um die Gleichung der 1. Ordnung zu untersuchen, nimmt man das Skalarprodukt mit $|\psi_n^{(0)}\rangle$ und allen anderen Basiszuständen $|\psi_k^{(0)}\rangle$ mit $k \neq n$. Das Skalarprodukt mit $|\psi_n^{(0)}\rangle$ gibt:

$$\langle\psi_n^{(0)}|\hat{H}_0|\psi_n^{(1)}\rangle + \langle\psi_n^{(0)}|\hat{H}_1|\psi_n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)}\langle\psi_n^{(0)}|\psi_n^{(1)}\rangle + E_n^{(1)}\langle\psi_n^{(0)}|\psi_n^{(0)}\rangle.$$

Aus $\langle\psi_n^{(0)}|\hat{H}_0 = \langle\psi_n^{(0)}|E_n^{(0)}$, $\langle\psi_n^{(0)}|\psi_n^{(0)}\rangle = 1$ und $\langle\psi_n^{(0)}|\psi_n^{(1)}\rangle = 0$ folgt dann, dass

$$E_n^{(1)} = \langle\psi_n^{(0)}|\hat{H}_1|\psi_n^{(0)}\rangle.$$

Das Skalarprodukt mit $|\psi_k^{(0)}\rangle$ mit $k \neq n$ gibt:

$$\langle\psi_k^{(0)}|\hat{H}_0|\psi_n^{(1)}\rangle + \langle\psi_k^{(0)}|\hat{H}_1|\psi_n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)}\langle\psi_k^{(0)}|\psi_n^{(1)}\rangle + E_n^{(1)}\langle\psi_k^{(0)}|\psi_n^{(0)}\rangle.$$

Aus $\langle\psi_k^{(0)}|\hat{H}_0 = \langle\psi_k^{(0)}|E_k^{(0)}$ und $\langle\psi_k^{(0)}|\psi_n^{(0)}\rangle = 0$ folgt dann, dass

$$\langle\psi_k^{(0)}|\psi_n^{(1)}\rangle = \frac{\langle\psi_k^{(0)}|\hat{H}_1|\psi_n^{(0)}\rangle}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}.$$

Hiermit findet man, dass

$$|\psi_n^{(1)}\rangle = \sum_{k\neq n} \frac{\langle\psi_k^{(0)}|\hat{H}_1|\psi_n^{(0)}\rangle}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}|\psi_k^{(0)}\rangle.$$

2. Ordnung: Um die Gleichung der 2. Ordnung zu untersuchen, nimmt man wieder Skalarprodukte mit $|\psi_n^{(0)}\rangle$ und mit $|\psi_k^{(0)}\rangle$ (wobei $k \neq n$) und setzt die 1. Ordnung-Ergebnisse ein. Man findet dann:

$$E_n^{(2)} = \sum_{k\neq n} \frac{\left|\langle\psi_k^{(0)}|\hat{H}_1|\psi_n^{(0)}\rangle\right|^2}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}.$$

usw.

Zusammenfassend: Bis zum 2. Ordnung in λ werden die Energie-Eigenwerte durch

$$E_n(\lambda) = E_n^{(0)} + \langle\psi_n^{(0)}|\lambda\hat{H}_1|\psi_n^{(0)}\rangle + \sum_{k\neq n} \frac{\left|\langle\psi_k^{(0)}|\lambda\hat{H}_1|\psi_n^{(0)}\rangle\right|^2}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} + \mathcal{O}(\lambda^2)$$

gegeben. Bis zum 1. Ordnung in λ werden die zugehörenden Energie-Eigenkets durch

$$|\psi_n\rangle = |\psi_n^{(0)}\rangle + \sum_{k\neq n} \frac{\langle\psi_k^{(0)}|\lambda\hat{H}_1|\psi_n^{(0)}\rangle}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}|\psi_k^{(0)}\rangle + \mathcal{O}(\lambda^2)$$

gegeben. Bis zum 1. Ordnung in λ ist der Ket $|\psi_n\rangle$ normiert, $\langle\psi_n|\psi_n\rangle = 1 + \mathcal{O}(\lambda^2)$. (Mit der angegebenen Genauigkeit gilt sowohl $\langle\psi_n(\lambda)|\psi_n(\lambda)\rangle = 1$ als auch $\langle\psi_n^{(0)}|\psi_n(\lambda)\rangle = 1$.)

Beispiel: Berechnen Sie die Eigenwerte der hermiteschen 2×2-Matrix

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \lambda\hat{H}_1 = \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} + \lambda \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

bis auf 2. Ordnung in λ. Die $\hat{H}_0$-Eigenvektoren sind

$$|e_1^{(0)}\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad |e_2^{(0)}\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Die Eigenwerte sind $E_1^{(0)} = 0$, $E_2^{(0)} = 2$. Dan findet man:

$$\begin{aligned}
E_1^{(1)} &= \langle e_1^{(0)}|H_1|e_1^{(0)}\rangle = 0, \\
E_2^{(1)} &= \langle e_2^{(0)}|H_1|e_2^{(0)}\rangle = 0, \\
E_1^{(2)} &= \frac{\left|\langle e_2^{(0)}|H_1|e_1^{(0)}\rangle\right|^2}{E_1^{(0)} - E_2^{(0)}} = -\frac{1}{2}, \\
E_2^{(2)} &= \frac{\left|\langle e_1^{(0)}|H_1|e_2^{(0)}\rangle\right|^2}{E_2^{(0)} - E_1^{(0)}} = \frac{1}{2}.
\end{aligned}$$

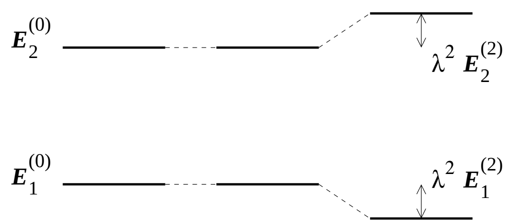
Hieraus folgt, dass

$$\begin{aligned}
E_1(\lambda) &= -\frac{1}{2}\lambda^2 + \ldots. \\
E_2(\lambda) &= 2 + \frac{1}{2}\lambda^2 + \ldots,
\end{aligned}$$

Die Störungstheorie stimmt mit den exakten Eigenwerte

$$E_{1,2} = 1 \pm \sqrt{1+\lambda^2}$$

überein.


$E_2^{(0)}$
$\lambda^2\ E_2^{(2)}$
$E_1^{(0)}$
$\lambda^2\ E_1^{(2)}$