Review: Time-independent perturbation theory

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + g\hat{V} : \qquad \hat{H}|\Psi_n\rangle = E_n|\Psi_n\rangle$$

exactly solvable, unperturbed

weak perturbation: $g\hat{V}$ small

g = counting factor for powers of $\hat{V}$

final result $g=1$

Expand exact E_n, $|\Psi_n\rangle$ of $\hat{H}$

in terms of unperturbed $E_n^{(0)}$, $|\Psi_n^{(0)}\rangle \equiv |n\rangle$ of $\hat{H}_0$

$$E_n = E_n^{(0)} + g\,E_n^{(1)} + g^2 E_n^{(2)} + \cdots$$

$$|\Psi_n\rangle = |n\rangle + g\,|\Psi_n^{(1)}\rangle + g^2|\Psi_n^{(2)}\rangle$$

$\langle m|$

$$\Rightarrow g^1 : \quad \underbrace{\hat{H}_0|\Psi_n^{(1)}\rangle}_{\sim\hat{V}} + \underbrace{\hat{V}|n\rangle}_{\sim\hat{V}} = \underbrace{E_n^{(0)}|\Psi_n^{(1)}\rangle}_{\sim\hat{V}} + \underbrace{E_n^{(1)}|n\rangle}_{\sim\hat{V}} \qquad (1)$$

$$g^2 : \quad \hat{H}_0|\Psi_n^{(2)}\rangle + \hat{V}|\Psi_n^{(1)}\rangle = E_n^{(0)}|\Psi_n^{(2)}\rangle + E_n^{(1)}|\Psi_n^{(1)}\rangle + E_n^{(2)}|n\rangle \qquad (2)$$

$\vdots$

Case 1: Nondegenerate perturbation theory, $E_n^{(0)}$ is not degenerate

(1): $\langle n|$ 1st order energy correction $E_n^{(1)} = \langle n|\hat{V}|n\rangle$

$$\Rightarrow \boxed{E_n = E_n^{(0)} + \langle n|\hat{V}|n\rangle + \mathcal{O}(\hat{V}^2)}$$

Nichtentarteter Fall.

1. Ordnung Korrektur $|\psi_n^{(1)}\rangle$?

$$|\psi_n\rangle = \underline{1}\,|n\rangle + g\,|\psi_n^{(1)}\rangle$$

Bsp. $|\psi_0\rangle \approx 0.99\ldots|0\rangle + 0.01\,|1\rangle + 0.0001\,|2\rangle + \ldots$

Zur Ordnung g^1, können wir Koeff. von $|n\rangle = 1$ wählen, da die erste Korrektur zur Norm $\langle\psi_n|\psi_n\rangle = 1 + \mathcal{O}(g^2)$ (siehe explizit gleich)

$$\Rightarrow \text{Ansatz} \quad g\,|\psi_n^{(1)}\rangle = \sum_{m\neq n} g\, c_m\, |m\rangle$$

$\langle m|\psi_n^{(1)}\rangle = c_m$

Störung führt zu $m\neq n$ Komponenten im Zustand $|\psi_n\rangle$

$$(1):\ \langle m| \Rightarrow \quad \underbrace{\langle m|\hat{H}_0|\psi_n^{(1)}\rangle}_{E_m^{(0)}\langle m|\psi_n^{(1)}\rangle} + \langle m|\hat{V}|n\rangle = E_n^{(0)}\langle m|\psi_n^{(1)}\rangle + E_n^{(1)}\underbrace{\cancel{\langle m|n\rangle}}_{=0}$$

$m\neq n$ $\qquad\qquad m\neq n$

$$\Rightarrow \quad E_m^{(0)}\, c_m + \langle m|\hat{V}|n\rangle = E_n^{(0)}\, c_m$$

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

Nichtentartung wichtig für Energienenner

$$\Rightarrow \quad \boxed{|\psi_n\rangle = \underbrace{|n\rangle}_{|\psi_n^{(0)}\rangle} + \underbrace{\sum_{m\neq n}\frac{\langle m|\hat{V}|n\rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}\,|m\rangle}_{|\psi_n^{(1)}\rangle} + \underbrace{\mathcal{O}(\hat{V}^2)}_{|\psi_n^{(2)}\rangle + |\psi_n^{(3)}\rangle + \ldots}}$$

Explizit: $\langle\psi_n|\psi_n\rangle = \underbrace{\langle n|n\rangle}_{=1} + \mathcal{O}(\hat{V}^2)$

Näherung 2. Ordnung: Gleichung (2): g^2

Für Energiekorrektur 2. Ordnung, (2): $\langle n|$

$\sum_{m\neq n} \dots |m\rangle$

$$\Rightarrow \underbrace{\langle n|\hat{H}_0|\psi_n^{(2)}\rangle}_{E_n^{(0)}\cancel{\langle n|\psi_n^{(2)}\rangle}} + \langle n|\hat{V}|\psi_n^{(1)}\rangle = E_n^{(0)}\cancel{\langle n|\psi_n^{(2)}\rangle} + \underbrace{E_n^{(1)}\langle n|\psi_n^{(1)}\rangle}_{=0} + E_n^{(2)}\underbrace{\langle n|n\rangle}_{1}$$

$$\Rightarrow E_n^{(2)} = \langle n|\hat{V}|\psi_n^{(1)}\rangle$$

$$E_n^{(2)} = \sum_{m\neq n} \frac{\langle m|\hat{V}|n\rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \langle n|\hat{V}|m\rangle \qquad \text{vgl. } E^{(1)} = \langle n|\hat{V}|n\rangle$$

$$\Rightarrow \boxed{E_n^{(2)} = \sum_{m\neq n} \frac{|\langle m|\hat{V}|n\rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}}$$

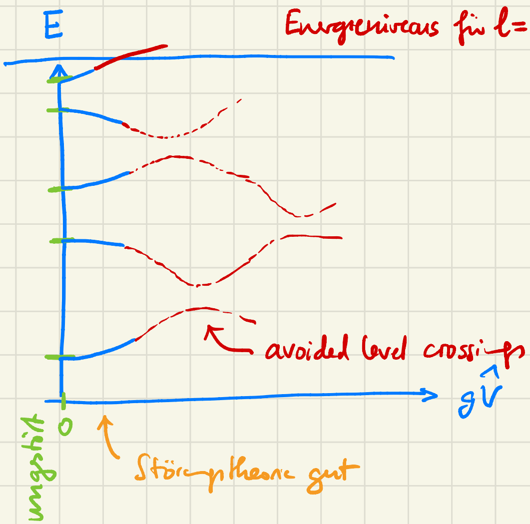
2. Ordnung Energiekorrektur für Grundzustand $(n=0)$ immer attraktiv!

Berechnung von $|\psi_n^{(2)}\rangle$, $\langle m|$, ..., folgt den gleichen Rezept.

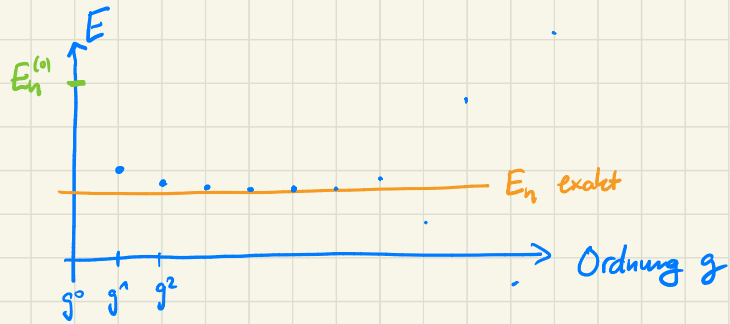
Für Konvergenz der Störungstheorie brauchen wir

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

d.h. Matrixelemente von $\hat{V}$ $\ll$ $\Delta E^{(0)}$ Abstand der ungestörten Energieniveaus



Bemerkung



Für physikalische Anwendungen ist Störungstheorie eine asymptotische Reihe, mit Konvergenzradius 0

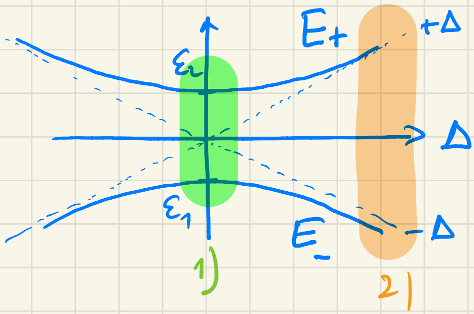
Beispiel

1) $\hat{H}_0 = \begin{pmatrix} \varepsilon_1 & 0 \\ 0 & \varepsilon_2 \end{pmatrix}, \quad \hat{V} = \begin{pmatrix} 0 & \Delta \\ \Delta & 0 \end{pmatrix}$

$\varepsilon_2 > \varepsilon_1, \quad \Delta > 0$

exakte Lösung $E_\pm = \frac{\varepsilon_1 + \varepsilon_2}{2} \pm \sqrt{\frac{(\varepsilon_2 - \varepsilon_1)^2}{4} + \Delta^2}$

exakte Grundzustandsenergie E_-



$|\psi_1^{(0)}\rangle = |1\rangle$

1. Ordnung Störungstheorie für Grundzustand $E_1^{(0)} = \varepsilon_1$

$$E_1^{(1)} = \langle 1 | \hat{V} | 1 \rangle$$

$$= (1 \; 0) \begin{pmatrix} 0 & \Delta \\ \Delta & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = 0$$

$|2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$

2. Ordnung Störungstheorie $\qquad |\psi_2^{(0)}\rangle = |2\rangle$

$$E_1^{(2)} = \sum_{m \neq 1} \frac{|\langle 1 | \hat{V} | m \rangle|^2}{E_1^{(0)} - E_m^{(0)}} = \frac{|\langle 1 | \hat{V} | 2 \rangle|^2}{\varepsilon_1 - \varepsilon_2}$$

$$= \frac{\Delta^2}{\varepsilon_1 - \varepsilon_2} < 0$$

$$\Rightarrow \quad E_1 = \varepsilon_1 - \frac{\Delta^2}{|\varepsilon_2 - \varepsilon_1|} + \mathcal{O}(\Delta^3)$$

vgl. $$E_- = \frac{\varepsilon_1+\varepsilon_2}{2} - \sqrt{\frac{(\varepsilon_1-\varepsilon_2)^2}{4} + \Delta^2} = \frac{\varepsilon_1+\varepsilon_2}{2} - \frac{\varepsilon_2-\varepsilon_1}{2}\sqrt{1+\frac{4\Delta^2}{(\varepsilon_2-\varepsilon_1)^2}}$$

$$\approx \frac{\varepsilon_1+\varepsilon_2}{2} - \frac{\varepsilon_2-\varepsilon_1}{2}\left(1+\frac{1}{2}\frac{4\Delta^2}{(\varepsilon_2-\varepsilon_1)^2}\right)$$

$$\approx \varepsilon_1 - \frac{\Delta^2}{\varepsilon_2-\varepsilon_1} \quad \checkmark$$

2) Störungstheorie für große Δ, $\varepsilon_1, \varepsilon_2$ klein

siehe Skript.