7.3 Zeitunabhängige Störungstheorie [Fliessbach 39.; Griffiths 6.1]

(bzw. „Rayleigh-Schrödinger-Störungstheorie")

Sei $\hat{H} = \hat{H}_0 + g\hat{V}$, mit $|g| \ll 1$.

Wir nehmen an, dass die Eigenzustände und Eigenwerte des $\hat{H}_0$ schon bekannt sind:

$$\hat{H}_0 |\varphi_n\rangle = E_{0n} |\varphi_n\rangle .$$

Unsere Aufgabe ist die Bestimmung derjenigen von $\hat{H}$:

$$\hat{H} |\Psi_n\rangle = E_n |\Psi_n\rangle .$$

Wir nehmen weiterhin an, dass Folgendes gilt:

(i) das Spektrum bleibt für $g \neq 0$ diskret;

(ii) die ungestörten Eigenzustände $|\varphi_n\rangle$ sind nicht entartet [andernfalls: Kapitel 7.4];

(iii) $|\Psi_n\rangle$ und E_n können als Potenzreihen in g dargestellt werden. [Konvergenz: Seiten 95-96]

Es folgt:

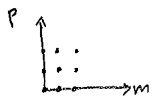
$$|\Psi_n\rangle = \sum_{m=0}^{\infty} g^m |\Psi_n\rangle^{(m)} \quad ; \quad |\Psi_n\rangle^{(0)} := |\varphi_n\rangle ,$$

$$E_n = \sum_{m=0}^{\infty} g^m E_n^{(m)} \quad ; \quad E_n^{(0)} := E_{0n} .$$

Schrödinger-Gleichung:

$$\sum_{m=0}^{\infty} g^m \hat{H}_0 |\Psi_n\rangle^{(m)} + \sum_{m=0}^{\infty} g^{m+1} \hat{V} |\Psi_n\rangle^{(m)} = \sum_{p=0}^{\infty} g^p \sum_{m=0} g^m E_n^{(p)} |\Psi_n\rangle^{(m)}$$

$m' := m+1$



$m' := p+m$
$m = m'-p$

$$\Longleftrightarrow \quad \sum_{m=0}^{\infty} g^m \hat{H}_0 |\Psi_n\rangle^{(m)} + \sum_{m'=1}^{\infty} g^{m'} \hat{V} |\Psi_n\rangle^{(m'-1)} = \sum_{m'=0}^{\infty} g^{m'} \sum_{p=0}^{m'} E_n^{(p)} |\Psi_n\rangle^{(m'-p)}$$

Umnenne $m' \to m$ und betrachte Koeffizient von g^m

$$\Longrightarrow \quad \boxed{\hat{H}_0 |\Psi_n\rangle^{(m)} + \hat{V} |\Psi_n\rangle^{(m-1)} = \sum_{p=0}^{m} E_n^{(p)} |\Psi_n\rangle^{(m-p)} \, , \; m \geq 0}$$

Normierung:

$$\langle \Psi_n | \Psi_n \rangle = \sum_{m=0}^{\infty} g^m \sum_{p=0}^{m} {}^{(p)}\langle \Psi_n | \Psi_n \rangle^{(m-p)} = 1$$

$$\Rightarrow \boxed{{}^{(0)}\langle \Psi_n | \Psi_n \rangle^{(0)} = \langle \varphi_n | \varphi_n \rangle = 1 \quad \& \quad \sum_{p=0}^{m} {}^{(p)}\langle \Psi_n | \Psi_n \rangle^{(m-p)} = 0, m \geq 1.}$$

Lösung:

$m=0$: $\hat{H}_0 |\Psi_n\rangle^{(0)} = E_n^{(0)} |\Psi_n\rangle^{(0)}$ OK.

$m=1$:

$$\begin{cases} \text{(i)} & \hat{H}_0 |\Psi_n\rangle^{(1)} + \hat{V} |\Psi_n\rangle^{(0)} = E_n^{(0)} |\Psi_n\rangle^{(1)} + E_n^{(1)} |\Psi_n\rangle^{(0)} \quad \Big| \cdot {}^{(0)}\langle \Psi_n | \\ \text{(ii)} & {}^{(0)}\langle \Psi_n | \Psi_n \rangle^{(1)} + {}^{(1)}\langle \Psi_n | \Psi_n \rangle^{(0)} = 0 \end{cases}$$

(i) $\Rightarrow$ $\underline{\underline{E_n^{(1)} = \langle \varphi_n | \hat{V} | \varphi_n \rangle}}$

(ii) $\Rightarrow$ $\langle \varphi_n | \Psi_n \rangle^{(1)}$ ist rein imaginär.

Wenn wir weiterhin $|\Psi_n\rangle^{(1)}$ in der ursprünglichen Basis ausdrücken, $|\Psi_n\rangle^{(1)} =: \sum_{m=0}^{\infty} C_{nm}^{(1)} |\varphi_m\rangle$, erhalten wir aus (i):

$$\sum_{m=0}^{\infty} C_{nm}^{(1)} E_{0m} |\varphi_m\rangle + \hat{V} |\varphi_n\rangle = E_{0n} \sum_{m=0}^{\infty} C_{nm}^{(1)} |\varphi_m\rangle + E_n^{(1)} |\varphi_n\rangle \quad \Big| \cdot \langle \varphi_p |$$

$$(E_{0p} - E_{0n}) C_{np}^{(1)} + \langle \varphi_p | \hat{V} | \varphi_n \rangle = E_n^{(1)} \delta_{pn}$$

$p = n \Rightarrow$ nichts Neues

$p \neq n \Rightarrow C_{np}^{(1)} = - \dfrac{\langle \varphi_p | \hat{V} | \varphi_n \rangle}{E_{0p} - E_{0n}}$

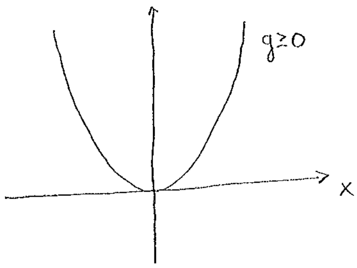
Dazu verlangt die Normierungsbedingung (ii): $\mathrm{Re}\left[C_{nn}^{(1)}\right] = 0$.

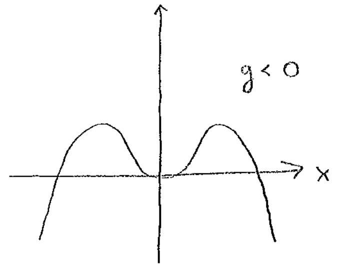
$$\Rightarrow \underline{\underline{|\Psi_n\rangle = \underbrace{\left[1 + ig\, \mathrm{Im}\left(C_{nn}^{(1)}\right)\right]}_{\text{unphysikalischer Phasenfaktor}} |\varphi_n\rangle + g \sum_{p \neq n} \frac{\langle \varphi_p | \hat{V} | \varphi_n \rangle}{E_{0n} - E_{0p}} |\varphi_p\rangle + \mathcal{O}(g^2)}}$$

$m \geq 2$: ...

— o — o —

Beispiel: $\hat{H} := \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 \hat{x}^2 + g\, \frac{m^2\omega^3}{4\hbar}\, \hat{x}^4$ „anharmonischer Oszillator"





Seite 57: $\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\,(\hat{a} + \hat{a}^+)$

Seite 59: $\hat{a}^+|n\rangle = \sqrt{n+1}\,|n+1\rangle$; $\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}\,|n-1\rangle$.

$\Rightarrow$ $E_n = E_n^{(0)} + g E_n^{(1)} + \mathcal{O}(g^2)$, mit $E_n^{(0)} = \hbar\omega(n+\frac{1}{2})$ und

$$
\begin{aligned}
E_n^{(1)} &= \langle n|\, \frac{m^2\omega^3}{4\hbar}\, \hat{x}^4\, |n\rangle \\
&= \frac{m^2\omega^3}{4\hbar} \cdot \left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^2 \langle n|\, (\hat{a}+\hat{a}^+)^4\, |n\rangle \\
&= \frac{\hbar\omega}{16} \langle n| (\hat{a}\hat{a} + \hat{a}\hat{a}^+ + \hat{a}^+\hat{a} + \hat{a}^+\hat{a}^+)(\hat{a}\hat{a} + \hat{a}\hat{a}^+ + \hat{a}^+\hat{a} + \hat{a}^+\hat{a}^+)|n\rangle \\
&= \frac{\hbar\omega}{16} \langle n|\, \hat{a}\hat{a}\hat{a}^+\hat{a}^+ + \hat{a}\hat{a}^+\hat{a}\hat{a}^+ + \hat{a}\hat{a}^+\hat{a}^+\hat{a} + \hat{a}^+\hat{a}\hat{a}\hat{a}^+ + \hat{a}^+\hat{a}\hat{a}^+\hat{a} + \hat{a}^+\hat{a}^+\hat{a}\hat{a}\, |n\rangle \\
&= \frac{\hbar\omega}{16} \left\{ (n+1)(n+2) + (n+1)^2 + (n+1)n + n(n+1) + n^2 + n(n-1) \right\} \\
&= \frac{\hbar\omega}{16} \left\{ n^2\,[1+1+1+1+1+1] + n\,[1+2+2+1+1-1] + [2+1] \right\} \\
&= \frac{\hbar\omega}{16} \left\{ 6n^2 + 6n + 3 \right\} \\
&= \frac{3\hbar\omega}{8}\left(n+\frac{1}{2}\right) + \frac{3\hbar\omega}{8}\cdot n^2
\end{aligned}
$$

Insgesamt: $E_n = \hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)\left(1+\frac{3g}{8}\right) + \frac{3g}{8}\hbar\omega n^2 + \mathcal{O}(g^2)$

wie eine Korrektur zur ω

eine neue Struktur!

Aus der Literatur [C.M. Bender, T.T. Wu, Phys. Rev. D 7 (1973) 1620]:

$$E_n^{(m)} \overset{m \gg n}{\sim} \hbar\omega\, \frac{12^n}{n!} \left(-\frac{3}{4}\right)^m \Gamma\left(n+m+\frac{1}{2}\right).$$

„Gammafunktion"

Jede Ordnung liefert eine neue Struktur, und die Korrekturen wachsen sehr schnell als Funktion von m.

Über Konvergenz

* Wenn die Reihe „absolut konvergent" wäre, d.h. wenn

$$\lim_{m\to\infty}\left|\frac{g\,E_n^{(m+1)}}{E_n^{(m)}}\right| < 1$$

existierte, dann würde die Reihe auch bei $g\to -g$ konvergieren. Dieses ist aber physikalisch gesehen unmöglich, weil das System bei $g<0$ instabil ist $\left[\lim_{|x|\to\infty} V(x) = -\infty\right]$, und quantenmechanisch eigentlich gar nicht definiert werden kann!

(* Aus dem Ausdruck auf Seite 95 folgt:

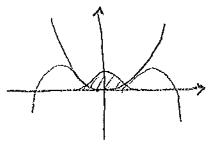
$$\lim_{m\to\infty}\left|\frac{E_n^{(m+1)}}{E_n^{(m)}}\right| = \lim_{m\to\infty}\frac{3\Gamma(n+m+\frac{3}{2})}{4\Gamma(n+m+\frac{1}{2})} = \lim_{m\to\infty}\frac{3}{4}(n+m+\tfrac{1}{2}) = \infty .$$

D.h. die Reihe ist absolut konvergent nur bei $g=0$!)

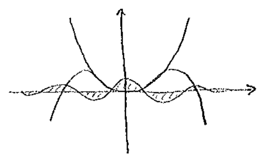
* Schon aus der Korrektur $E_n^{(1)}$ ist klar, dass die Konvergenz bei angeregten Zuständen noch langsamer ist als beim Grundzustand:

$$\left|\frac{gE_n^{(1)}}{E_n^{(0)}}\right| \ll 1 \quad \text{nur bei} \quad g\cdot n \ll 1 .$$

Physikalisch klar:

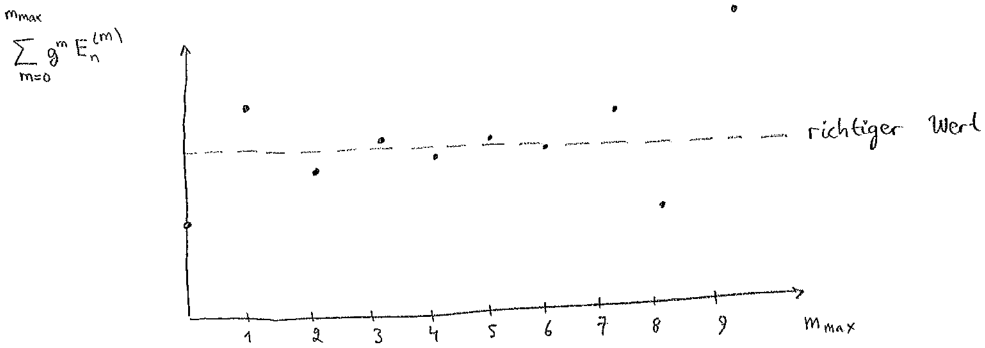


$\psi^{(0)}(x)$ „fühlt" kaum den Bereich in dem $V(x)$ wichtig ist



$\psi^{(n)}(x)$ besitzt einen grösseren $\langle\hat{x}^2\rangle$, und ist deshalb „empfindlicher".

* Trotz dieser Probleme ist die Störungsreihe unter Umständen nützlich. Es geht um eine „asymptotische Reihe":



„optimaler" m_{max} $\left(\propto \frac{1}{g}\right)$