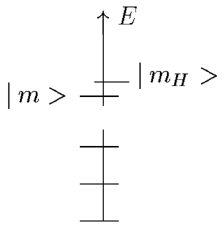
Hannover
2. 1. 1991

Stationäre Störungsrechnung

Real existierende Physiken kann man mitunter noch recht gut dadurch verstehen und behandeln, daß man eine Aufteilung $H = H_o + V$ findet, in welcher der hermitesche Operator V nur eine "kleine" und qualitativ harmlose Störung am gelösten H_o-Problem darstellt. $H_o|n\!> = \epsilon_n|n\!>$ liefere ein diskretes, nicht-entartetes Spektrum. Bei Hinzuschalten von V geht $|m\!>$ in einen H-Eigenzustand $|\mathbf{m}_H\!>$ über ($H|\mathbf{m}_H\!> = E_m|\mathbf{m}_H\!>$) , der nach Potenzen von V entwickelt gedacht werden kann: $\quad |\mathbf{m}_H\!> = \alpha \cdot (|m\!> + |m,1\!> + |m,2\!> + ...)$

$|m,\nu\!>$=Korrektur d. Ordnung V^ν ; $|m,0\!> := |m\!>$; $<\!m|m,\nu\!> = 0$ f. $\nu > 0$, d.h. $\alpha = <\!m|\mathbf{m}_H\!>$.



$$(H_o + V)\,(|m\!> + |m,1\!> + |m,2\!> + ...) = (\epsilon_m + \epsilon_{m,1} + \epsilon_{m,2} + ...)\cdot(|m\!> + |m,1\!> + |m,2\!> + ...) \qquad \text{(St.1)}$$

Gleichsetzen von Termen gleicher V-Ordnung liefert:

$$(H_o - \epsilon_m)\;|m,\nu\!> = -V\;|m,\nu-1\!> + \textstyle\sum_{\mu=1}^{\nu} \epsilon_{m,\mu}|m,\nu-\mu\!>$$

$$<\!m|\cdot ... \quad \Rightarrow \quad \epsilon_{m,\nu} = <\!m|V|m,\nu-1\!> \; , \;\; E_m = \epsilon_m + \textstyle\sum_{\nu=1}^{\infty} <\!m|V|m,\nu-1\!> = \epsilon_m + \frac{1}{\alpha} <\!m|V|\mathbf{m}_H\!>$$

$$<\!n|\cdot ... \quad \Rightarrow \quad <\!n|m,\nu\!> = \tfrac{1}{\epsilon_m - \epsilon_n}\cdot(<\!n|V|m,\nu-1\!> - \textstyle\sum_{\mu=1}^{\nu} \epsilon_{m,\mu} <\!n|m,\nu-\mu\!>)$$

Diese Rekursionsformel ($n \neq m, \nu > 0$) legt nun alle Skalarprodukte $<\!n|m,\nu\!>$ fest. Also kennt man $|m,\nu\!>$ und erhält E_m (aus obiger Formel), sowie

$$|\mathbf{m}_H\!> = \alpha\cdot(|m\!> + \textstyle\sum_{\nu=1}^{\infty}\sum_n' |n\!><\!n|m,\nu\!>) \qquad \text{mit } \alpha \text{ aus } <\!\mathbf{m}_H|\mathbf{m}_H\!> = 1 \,.$$

Durchführung (die ersten Terme) :

$$\epsilon_{m,1} = <\!m|V|m\!> \;,\; \epsilon_{m,2} = <\!m|V|m,1\!> = \sum_n{}' <\!m|V|n\!><\!n|m,1\!> \;,\; <\!n|m,1\!> = \frac{<\!n|V|m\!>}{\epsilon_m - \epsilon_n} \;; \quad <\!n|V|m\!> =: V_{nm} \;:$$

$$E_m = \epsilon_m + V_{mm} + \sum_n{}' \frac{|V_{nm}|^2}{\epsilon_m - \epsilon_n} + \ldots \qquad ; \qquad |\mathbf{m}_H\!> = \alpha\cdot(|m\!> + \sum_n{}' \frac{V_{nm}}{\epsilon_m - \epsilon_n}|n\!> + \ldots) \qquad \text{(St.2)}$$

$\alpha = 1 + O(V^2)$. Natürlich erhält man V_{nm} in Ortsdarstellung per $V_{nm} = \int dx \varphi_n^*(x) V \varphi_m(x)$, $V_{mm} = <\!V\!>_{\varphi_m}$. Die gestörte m-te Eigenfuktion sieht (Zitat) bis mit 2. Ordnung folgendermaßen aus:

$$<\!x|\mathbf{m}_H\!> = \alpha\cdot\left(\varphi_m(x) + \sum_n{}' \varphi_n(x)\frac{1}{\epsilon_m - \epsilon_n}\left[V_{nm}\left(1 - \frac{V_{mm}}{\epsilon_m - \epsilon_n}\right) + \sum_l{}' \frac{V_{nl}V_{lm}}{\epsilon_m - \epsilon_l}\right]\right) . \qquad \text{(St.3)}$$

Entartung : Innerhalb entarteter oder fast-entarteter ϵ_m's ist der Effekt der Störung V nicht mehr "klein"; Motto: nimm die wichtigen V-Anteile mit zu H_o ! In Energie-Darstellung (H_o-Darstellung) besteht $H_o + V$ zunächst aus den Operatoren

$$H_o = \begin{pmatrix} \epsilon_o & 0 & 0 \\ 0 & \epsilon_1 & 0 \\ 0 & 0 & ... \end{pmatrix} \quad , \quad V = \begin{pmatrix} V_{00} & V_{01} & ... \\ V_{10} & V_{11} & ... \\ ... & ... & ... \end{pmatrix}$$

Sei nun z.B. $\epsilon_m \approx \epsilon_l$ (und alle anderen ϵ weit von diesen beiden entfernt); dann definieren wir ein neues H_o

$$H_o^{\text{neu}} := \begin{pmatrix} \epsilon_{...} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \epsilon_m + V_{mm} & V_{ml} & 0 \\ 0 & V_{lm} & \epsilon_l + V_{ll} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \epsilon_{...} \end{pmatrix} \qquad \text{(St.4)}$$

(der neue Störoperator V^{neu} hat nun Nullen an den vier m-l-Positionen) und lösen die "Säkulargleichung":

$$\begin{pmatrix} \epsilon_m + V_{mm} - \epsilon & V_{ml} \\ V_{lm} & \epsilon_l + V_{ll} - \epsilon \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_m \\ a_l \end{pmatrix} = 0 \qquad \Rightarrow$$

$$\epsilon_\pm = \frac{1}{2}\Big(\epsilon_m + \epsilon_l + V_{mm} + V_{ll} \pm \sqrt{(\epsilon_m - \epsilon_l + V_{mm} - V_{ll})^2 + 4|V_{lm}|^2}\Big) \;. \qquad \text{(St.5)}$$

In H_o^{neu}-Darstellung ist der l-m-Block = diag(ϵ_+, ϵ_-); und die Störungsrechnung funktioniert nun wieder bestens. Bei Entartung wird also die Bosheit der Energie-Nenner in (St.2) dadurch behoben, daß man zuerst *die* Basis des Entartungs-Unterraumes wählt, bei welcher man mit $V \to 0$ ankommen würde: die zugehörigen $|V_{nm}|^2$ verschwinden.

(H. Schulz, ITP, Uni Hannover)