8.2 Entartete Störungsrechnung

H_0 habe entartete Energieniveaus

$\Downarrow$

$$W_{mn} = (E_n^0 - E_m^0) c_{nm}^1 \ , \ m \neq n$$

$$\text{für } E_n^0 = E_m^0 \ , \ W_{mn} \neq 0 \Rightarrow Widerspruch (Unsinn)$$

$$H_0 |\varphi_{n,\alpha_n}\rangle = E^0 |\varphi_{n,\alpha_n}\rangle \ , \ \alpha_n = 1, \dots, r_n$$

r_n entartete Energieniveaus $r_n - dim.$ Untervektorraum

Sei $|\varphi_{n,\alpha_n}\rangle$ ein dazugehöriger Satz von Basisvektoren

$$W_{n,\alpha_n \beta_n} = \langle \varphi_{n,\alpha_n} | W | \varphi_{n,\beta_n} \rangle \quad \Rightarrow \text{ für jedes } n \text{ ist dies eine } r_n \times r_n \text{ Matrix}$$

Wähle neue Basis, so dass

$$W_{n,\alpha_n \beta_n} = w_{n,\alpha_n} \delta_{\alpha_n \beta_n} \qquad \text{(Diagonalmatrix)}$$

In dieser Basis gibt es obiges Problem nicht mehr:

$$W_{nm} \neq 0 \text{ nur für } E_n^0 \neq E_m^0,$$

$\Rightarrow$dann gleicher Formalismus wie bei nichtentarteter Störungstheorie

$$E_{n,\alpha_n}^2 = \sum_{l \neq n, \beta_l} \frac{|W_{n,l,\alpha_n \beta_l}|^2}{|E_n^0 - E_l^0|}$$

Jetzt im Detail:

Ausgangssituation:

$$H_0 |\varphi_{n,\alpha_n}\rangle = E_n^0 |\varphi_{n,\alpha_n}\rangle \ , \ \alpha = 1, \dots, r_n$$

$$\langle \varphi_{n,\alpha_n} | \varphi_{m\beta_n} \rangle = \delta_{nm} \delta_{\alpha_n \beta_n}$$

$$|\varphi_{n,\alpha_n}\rangle \Rightarrow n \text{ fest}$$

r_n lin. unabh. Eigenvektoren, die den $r_n - dim$ Eigenraum U_{r_n} von E_n^0 aufspannen. Diese sind nur bis auf eine unitäre Transformation in U_{r_n} bestimmt.

Ziel:
Bestimme Eigenwerte und Eigenvektoren des gestörten Hamilton Operators

$$H = H_0 + \lambda W$$

$$H|\psi_{n,\alpha_n}(\lambda)\rangle = E_{n,\alpha_n}|\psi_{n,\alpha_n}(\lambda)\rangle$$

näherungsweise aus denen des ungestörten Problems.

Beachte: Entartung wird i. allg. durch Störung W aufgehoben
$\Rightarrow$ Eigenwerte von H müssen Index α erhalten.

Annahme: wir hätten die $|\psi_{n,\alpha_n}(\lambda)\rangle$ bereits gefunden

$$\lim_{\lambda\to 0}|\psi_{n,\alpha_n}(\lambda)\rangle = |\tilde{\varphi}_{n,\alpha_n}\rangle$$

$|\hat{\varphi}_{n,\alpha_n}\rangle$ = für die Störungsrechnung geeignete Eigenvektoren im Eigenraum U_{r_n} ("der Störung W angepasste" Eigenvektoren)

Weiteres Vorgehen: ähnlich wie bei der nichtentarteten Störungsrechnung

$$\begin{aligned}
E_{n,\alpha_n} &= E^0_{n,\alpha_n} + \lambda E^1_{n,\alpha_n} + \lambda^2 E^2_{n,\alpha_n} + \lambda^3 E^3_{n,\alpha_n} + \ldots \\
|\psi_{n,\alpha_n}\rangle &= |\tilde{\varphi}_{n,\alpha_n}\rangle + \lambda|\psi^1_{n,\alpha_n}\rangle + \lambda^2|\psi^2_{n,\alpha_n}\rangle + \ldots
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&(H_0+\lambda W)(|\hat{\varphi}_{n,\alpha_n}\rangle + \lambda|\psi^1_{n,\alpha_n}(\lambda)\rangle + \lambda^2|\psi^2_{n,\alpha_n}(\lambda)\rangle + \ldots) \\
&= (E^0_{n,\alpha_n} + \lambda E^1_{n,\alpha_n} + \lambda^2 E^2_{n,\alpha_n} + \ldots)(|\hat{\varphi}_{n,\alpha_n}\rangle + \lambda|\psi^1_{n,\alpha_n}\rangle + \ldots)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\lambda^0 : &\quad H_0|\hat{\varphi}_{n,\alpha_n}\rangle = E^0_{n,\alpha_n}|\hat{\varphi}_{n,\alpha_n}\rangle \\
\lambda^1 : &\quad (H_0 - E^0_{n,\alpha_n})|\psi^1_{n,\alpha_n}\rangle = (E^1_{n,\alpha_n} - W)|\hat{\varphi}_{n,\alpha_n}\rangle
\end{aligned}$$

i) Entwicklung der $|\tilde{\varphi}_{n,\alpha_n}\rangle$ nach (irgendwelchen) orthonormalen Eigenvektoren $|\varphi_{n,\alpha_n}\rangle$ des Eigenraumes U_{r_n}:

$$|\tilde{\varphi}_{n,\alpha_n}\rangle = \sum_{\beta_n=1}^{r_n} A_{n,\alpha_n\beta_n}|\varphi_{n,\beta_n}\rangle$$

ii) Entwicklung von $|\psi^1_{n,\alpha_n}\rangle$ nach vollständigem orthonormalem System aller Eigenvektoren $|\varphi_{l,\beta_l}\rangle$

$$|\psi^1_{n,\alpha_n}\rangle = \sum_{l,\beta_l} c^1_{n_l;\alpha_n,\beta_l}|\varphi_{l,\beta_l}\rangle$$

$$\Rightarrow (H_0 - E^0_{n,\alpha_n})\sum_{l,\beta_l} c^1_{n_l;\alpha_n,\beta_l}|\varphi_{l,\beta_l}\rangle = (E^1_{n,\alpha_n} - W)\sum_{\beta_n=1}^{r_n} A_{n,\alpha_n\beta_n}|\varphi_{n,\beta_n}\rangle$$

iii) von links mit $\langle\varphi_{m,\alpha_m}|$

$$\Rightarrow (E^0_{m,\alpha_m} - E^0_{n,\alpha_n})c^1_{nm;\alpha_n,\alpha_m} = \sum_{\beta_n=1}^{r_n} A_{n;\alpha_n\beta_n}(E^1_{n,\alpha_n}\delta_{nm;\beta_n\alpha_m} - \langle\varphi_{m,\alpha_m}|W|\varphi_{n,\beta_n}\rangle)$$

Fall: $m = n \Rightarrow$ linke Seite $= 0$

$$\Rightarrow \sum_{\beta_n=1}^{r_n} (\langle\varphi_{n,\alpha_n}|W|\varphi_{n,\beta_n}\rangle - E^1_{n,\alpha_n}\delta_{\beta_n\alpha_n})A_{n;\alpha_n\beta_n} = 0$$

$\Rightarrow$ homogenes Gleichungssystem für $A_{n;\alpha_n\beta_n}$

$\Downarrow$

hat nur dann eine nichttriviale Lösung, wenn

$$\det(\langle\varphi_{n,\alpha_n}|W|\varphi_{n,\beta_n}\rangle - E^1_{n,\alpha_n}\delta_{\beta_n\alpha_n}) = 0$$

$\Rightarrow$ Bestimmung der $A_{n;\alpha_n\beta_n}$

$$\Rightarrow |\hat{\varphi}_{n,\alpha_n}\rangle = \sum_{\beta_n=1}^{r_n} A_{n,\alpha_n\beta_n}|\varphi_{n,\beta_n}\rangle$$

Die der "Störung angepassten Eigenvektoren" nullter Ordnung erhält man also durch **Diagonalisierung der Matrix** $(\langle\varphi_{n,\alpha_n}|W|\varphi_{n,\beta_n}\rangle)_{(\alpha_n,\beta_n)}$

Die Energiestörung erster Ordnung wird durch die Matrixelemente der Störung W, gebildet mit den ungestörten Eigenvektoren bestimmt.

Die Sekulardeterminante führt auf eine algebraische Gleichung vom Grad r_n, deren Nullstellen $E^1_{n,1}, E^1_{n,2}, \dots E^1_{n,r_n}$ die Aufspaltung der entarteten Energie E^0_n in erster Ordnung liefert.