Korrekturen mittels Störungstheorie berechnen

Betrachte $(H_0 + \lambda V - E_n)|\Psi_n\rangle = 0$ (P) mit dem Ansatz einer Reihenentwicklung der Energien & Zustände um λ

$$|\Psi_n\rangle = \sum_{k=0}^{\infty} \lambda^k |\phi_n^{(k)}\rangle \quad ; \quad E_n = \sum_{k=0}^{\infty} \lambda^k E_n^{(k)}$$

k-ter Korrekturterm

Weiterhin gelte $(H_0 - E_n^{(0)})|\phi_n^{(0)}\rangle = 0$ (ungestörtes Problem)

normiert: $1 = \langle\phi_n^{(0)}|\phi_n^{(0)}\rangle$

Außerdem soll $|\Psi_n\rangle$ normiert sein

Normierung: (N)
$$1 = \langle\Psi_n|\Psi_n\rangle = \underbrace{\langle\phi_n^{(0)}|\phi_n^{(0)}\rangle}_{=1} + \sum_{k=1}^{\infty}\lambda^k \underbrace{\sum_{m=0}^{k}\langle\phi_n^{(k-m)}|\phi_n^{(m)}\rangle}_{\overset{!}{=}0}$$

$\Rightarrow$

Alles in (P) einsetzen liefert:

$$0 = \sum_{k=0}^{\infty}\lambda^k \Big(H_0|\phi_n^{(k)}\rangle + V\underbrace{|\phi_n^{(k-1)}\rangle}_{0\,(k=0)} - \sum_{m=0}^{k} E_n^{(k-m)}|\phi_n^{(m)}\rangle \Big)$$

Reduziertes Problem (RP)
$$\Leftrightarrow \quad (H_0 - E_n^{(0)})|\phi_n^{(k)}\rangle = E_n^{(k)}|\phi_n^{(0)}\rangle - V|\phi_n^{(k-1)}\rangle + \sum_{m=1}^{k-1} E_n^{(k-m)}|\phi_n^{(m)}\rangle$$

Durch Lösen von RP für immer höhere k können rekursiv immer mehr Korrekturterme berechnet werden

Feststellung: wenn $|\phi_n^{(k)}\rangle$ eine Lösung von (RP) ist, so ist auch $|\tilde\phi_n^{(k)}\rangle = |\phi_n^{(k)}\rangle + \alpha|\phi_n^{(0)}\rangle$ eine Lösung

(Einsetzen in (RP) [nur linke Seite, da in rechter Seite nicht ~~von~~ $|\phi_n^{(k)}\rangle$]

liefert
$$(H_0 - E_n^{(0)})|\tilde\phi_n^{(k)}\rangle = (H_0 - E_n^{(0)})|\phi_n^{(k)}\rangle + \underbrace{(H_0 - E_n^{(0)})|\phi_n^{(0)}\rangle}_{=0}\,)$$

$\Rightarrow$ $|\phi_n^{(k)}\rangle$ kann orthogonal zu $|\phi_n^{(0)}\rangle$ gewählt werden

Orthogonalität (k) zu (0) für $k \neq 0$
$$\Rightarrow \langle\phi_n^{(0)}|\phi_n^{(k)}\rangle = 0 \quad \text{für beliebige } k \neq 0$$

Energiekorrektur: $\langle\phi_n^{(0)}|\cdot$ (RP) liefert:

$$\underbrace{\langle\phi_n^{(0)}|(H_0 - E_n^{(0)})|\phi_n^{(k)}\rangle}_{\substack{= \langle\phi_n^{(0)}|E_n^{(0)} \\ =0}} = E_n^{(k)} - \langle\phi_n^{(0)}|V|\phi_n^{(k-1)}\rangle + \sum_{m=1}^{k-1} E_n^{(k-m)}\underbrace{\langle\phi_n^{(0)}|\phi_n^{(m)}\rangle}_{=0,\text{ da } m\neq 0}$$

$$\Leftrightarrow \quad E_n^{(k)} = \langle\phi_n^{(0)}|V|\phi_n^{(k-1)}\rangle$$

Entartung: wenn $\phi_n^{(0)}, \phi_{n+1}^{(0)}, \ldots, \phi_{n+g-1}^{(0)}$ (Entartungsgrad) alle denselben Eigenwert E_n besitzen, ~~kann~~ gilt auch $\langle\phi_i|(H_0 - E_n^{(0)})|\phi_n^{(k)}\rangle = 0$ $(\forall i \in [n, n+g-1] \cap \mathbb{N}_0)$.

~~Dann muss die ... Energiekorrektur so ... werden, dass V diagonal ist~~

~~Betrachte Entartung~~ 1. Ordnung

$\cancel{E_{n,i}^{(1)} = \langle n,i|V|n,i\rangle}$

~~Siehe~~ Siehe entartete ST

Zustandskorr. siehe Rückseite

Siehe auch: - Entartete ST

Um die Korrekturen des Zustands zu finden:

Da davon ausgegangen wird, dass H_0 verhalten dominiert:

Ansatz: $$|\phi_n^{(k)}\rangle = \sum_{p=0}^{\infty} c_{np} |\phi_p^{(0)}\rangle$$ (k-te Korrektur in ungestörten Funktionen (orthonormiert) entwickelbar)

Betrachte zuerst Orthogonalitätsbedingung:

$$\underline{\underline{0}} \overset{!}{=} \langle\phi_n^{(0)}|\phi_n^{(k)}\rangle = \sum_{p=0}^{\infty} c_{np} \underbrace{\langle \phi_n^{(0)}|\phi_p^{(0)}\rangle}_{=\delta_{np}} = \underline{\underline{c_{nn}}}$$

$|\phi_n^{(k)}\rangle$ in (RP) liefert

$$\langle\phi_l^{(0)}| \quad \sum_{p=0}^{\infty} c_{np}\,(H_0 - E_n^{(0)})\,|\phi_p^{(0)}\rangle = \overset{\text{bekannt}}{E_n^{(k)}}\,|\phi_n^{(0)}\rangle - V|\phi_n^{(k-1)}\rangle + \sum_{m=1}^{k-1} E_n^{(k-m)}\,|\phi_n^{(m)}\rangle$$

Um den l-ten Koeffizienten c_{nl} zu berechnen: $\langle\phi_l^{(0)}|$ $(l \neq n)$

$$\underbrace{\sum_{p=0}^{\infty} c_{np}\,(E_l^{(0)} - E_n^{(0)})\,\underbrace{\langle\phi_l^{(0)}|\phi_p^{(0)}\rangle}_{=\delta_{lp}}}_{=c_{nl}\,(E_l^{(0)} - E_n^{(0)})} = E_n^{(k)} \underbrace{\langle\phi_l^{(0)}|\phi_n^{(0)}\rangle}_{=0,\ \text{da}\ l\neq n} - \langle\phi_l^{(0)}|V|\phi_n^{(k-1)}\rangle + \sum_{m=1}^{k-1} E_n^{(k-m)} \underbrace{\langle\phi_l^{(0)}|\phi_n^{(m)}\rangle}_{=0}$$

$=0$: Derselbe Ansatz wurde schon für $\phi_n^{(m)}$ gemacht, da $m<k$.
$\to |\phi_n^{(m)}\rangle = \sum_p d_{np}^{(m)} |\phi_n^{(0)}\rangle$
und $l \neq n$

$$\Rightarrow \quad c_{nl} = \frac{\langle\phi_l^{(0)}|V|\phi_n^{(k-1)}\rangle}{E_n^{(0)} - E_l^{(0)}}$$ (ohne Entartung ~~ungestört~~)

Für Entartung siehe entartete ST