Bemerkungen:

- Konvergenz der E_0 - Reihe ?

$$\left| \frac{g^{m+1} E_0^{(m+1)}}{g^m E_0^{(m)}} \right| \overset{m \gg 1}{\sim} \left| -\frac{3m}{4} g \right| \quad \Rightarrow \text{ konvergiert für } \underline{\text{kein}}\ g\ !$$

denn: für $g<0$ gibt es keinen Grundzustand (s.o.)

dies wird im analytischen Verhalten der Fkt $E_0(g)$ reflektiert

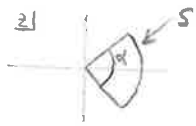
(vgl. $\frac{1}{1-x} = \sum_{n=0}^{\infty} x^n$; links: analytische Fkt in $\mathbb{C} \setminus \{1\}$

rechts: konvergiert nur für $|x|<1$)

- aus physikalischen Gründen (s.o.) können wir annehmen, daß die Entwicklung für $g>0$ sinnvoll sein sollte.

$\Rightarrow$ "asymptotische" Reihe : gut nur bis zu einem m_{max}

- Sei $f(z)$ analytisch (in einem Sektor $S \in \mathbb{C}$)



(($E_0(g)$ ist analytisch in $g \in \mathbb{C} \setminus \{$negative reelle Achse$\}$.

nichttriviale Feststellung ; s. z.B. Bender/Wu))

Sei $f(z) = \sum_{k=0}^{\infty} f_k z^k$ die asymptotische Entwicklung für f (in S)

d.h. sie divergiert für alle $z \neq 0$

und hat eine Schranke

$$\left| f(z) - \sum_{k=0}^{N} f_k z^k \right| \leq c_{N+1} |z|^{N+1} \quad \text{für alle } N$$

$$\text{wobei } c_N |z|^N \xrightarrow[N\to\infty]{} \infty \quad \text{für alle } z \neq 0$$

- die Partialsummen liefern also einen Wert "nah" der Antwort: bei fixiertem z können wir die Schranke über N minimieren, und bekommen eine Abschätzung für f mit endlichem Fehler $\min_{\{N\}} c_N |z|^N$

- in unserem Fall definiert die E_0 - Reihe sogar eine eindeutige Fkt $E_0(g)$. Grund: $E_0^{(m)} \sim (m!)^1$ und $\alpha > \pi$, dann kann man keine in S beschränkte analytische Fkt addieren (ist Null!)

(Theorem der Funktionentheorie)

- dieses Verhalten ist typisch für Störungstheorie. Man erhält sehr selten konvergente Reihen, meist asymptotische.

- unsere E_0-Reihe ist "Borel-summierbar":

wenn $f_k \sim c\,(-a)^k\, k!$ $\quad (a>0)$

definiere Borel-Transformierte von $f(z)$

$$B_f(z) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{f_k}{k!} z^k \quad , \quad \text{konvergiert für } |a \cdot z| < 1$$

im Sinne einer Potenzreihe ist dann

$$f(z) = \int_0^\infty dt\, e^{-t}\, B_f(zt)$$

die "Borel-summierte" asymptotische Reihe.

6.4 Störungstheorie für entartete Zustände

(die in § 6.2 versprochene Verallgemeinerung)

Kerngedanke: innerhalb entarteter (oder fast entarteter) E_n's ist der Effekt der Störung $\lambda \hat{H}_1$ nicht mehr "klein". Nehme also die wichtigsten $\hat{H}_1$-Anteile mit zu $\hat{H}_0$.

Ausgangspunkt wie in § 6.2:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \lambda \hat{H}_1 \quad , \quad |\lambda| \ll 1$$

ungestörte Zustände: $\hat{H}_0 \,|\varphi_{nk}\rangle = E_{0n}\, |\varphi_{nk}\rangle$

n: Hauptquantenzahl (E_n), $k = 1, \dots, N(n)$ ← Entartung

ungestörte EZ orthonormal gewählt: $\langle \varphi_{nj} | \varphi_{nk} \rangle = \delta_{jk}$

Ansatz für das volle System

$$\hat{H}\, |\psi_{n\alpha}\rangle = E_{n\alpha}\, |\psi_{n\alpha}\rangle \quad , \quad \alpha = 1, \dots, N(n)$$

mit $E_{n\alpha} = \sum_{m=0}^{\infty} \lambda^m E_{n\alpha}^{(m)}$, $\quad E_{n\alpha}^{(0)} = E_{0n}$ (wie vorher)

und $|\psi_{n\alpha}\rangle = \sum_{m=0}^{\infty} \lambda^m |\psi_{n\alpha}\rangle^{(m)}$, $\quad |\psi_{n\alpha}\rangle^{(0)} = \sum_{k=1}^{N(n)} b_{\alpha k}^{(n)}\, |\varphi_{nk}\rangle$

((weil die Wahl der $|\varphi_{nk}\rangle$ nicht unbedingt optimal für Stö. war)) diesen Ansatz in die zeitunabh. Schröd.-Glg einsetzen, λ-Koeff-Vergleich (völlig analog zu § 6.2, vgl. S. 66)

$$\Rightarrow \hat{H}_0 |\psi_{n\alpha}\rangle^{(m)} + \hat{H}_1 |\psi_{n\alpha}\rangle^{(m-1)} = \sum_{p=0}^{m} E_{n\alpha}^{(p)} |\psi_{n\alpha}\rangle^{(m-p)} \quad , \; m \geq 0$$

<u>m=0:</u> ist wieder trivial

$$\hat{H}_0 |\psi_{n\alpha}\rangle^{(0)} = E_{0n} |\psi_{n\alpha}\rangle^{(0)}$$

<u>m=1:</u>

$$\hat{H}_0 |\psi_{n\alpha}\rangle^{(1)} + \hat{H}_1 |\psi_{n\alpha}\rangle^{(0)} = E_{0n} |\psi_{n\alpha}\rangle^{(1)} + E_{n\alpha}^{(1)} |\psi_{n\alpha}\rangle^{(0)}$$

von links mit $\langle \varphi_{nj}|$ multiplizieren

$$\Rightarrow \langle \varphi_{nj} | \hat{H}_1 | \psi_{n\alpha}\rangle^{(0)} = E_{n\alpha}^{(1)} \langle \varphi_{nj} | \psi_{n\alpha}\rangle^{(0)}$$

$$\Leftrightarrow \sum_{k=1}^{N(n)} \left\{ \langle \varphi_{nj} | \hat{H}_1 | \varphi_{nk}\rangle - E_{n\alpha}^{(1)} \delta_{jk} \right\} b_{\alpha k}^{(n)} = 0 \qquad \forall\, j \in \{1, .., N(n)\}$$

dies sind also lineare Gleichungen für die Koeff's $b_{\alpha k}^{(n)}$.

es gibt eine nichttriviale Lösung, falls

$$\det_{jk} \left\{ \langle \varphi_{nj} | \hat{H}_1 | \varphi_{nk}\rangle - E_{n\alpha}^{(1)} \delta_{jk} \right\} = 0$$

"Säkulargleichung" oder "charakterist. Polynom"

((EW einer Matrix = Nullst. des char. Polynoms))

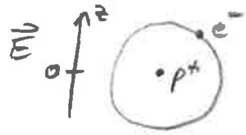
$\Rightarrow$ $\boxed{\text{die Energien } E_{n\alpha}^{(1)} \text{ sind genau die (reellen) Eigenwerte der (hermiteschen) } N(n) \times N(n)\text{-Matrix } \langle \varphi_{nj} | \hat{H}_1 | \varphi_{nk}\rangle}$

$\rightarrow$ nachdem die $E_{n\alpha}^{(1)}$ bekannt sind, können auch die $b_{\alpha k}^{(n)}$ bestimmt werden, was die $|\psi_{n\alpha}\rangle^{(0)}$ festlegt.

<u>Bem.:</u>

- die Energien $E_{n\alpha}^{(1)}$, $\alpha = 1, .., N(n)$, sind i.A. nicht mehr entartet: $\hat{H}_1$ hat weniger Symmetrien als $\hat{H}_0$ und löst die Entartung auf
- mit bekannten $E_{n\alpha}^{(1)} \rightarrow b_{\alpha k}^{(n)} \rightarrow |\psi_{n\alpha}\rangle^{(0)}$ könnten wir wie in § 6.2 dann $|\psi_{n\alpha}\rangle^{(1)}$ bestimmen, und auch höhere Ordnungen (in λ) betrachten ...

Bsp: Stark-Effekt (H-Atom im $\vec{E}$-Feld)



wähle z-Achse entlang $\vec{E}$-Richtung

$$\Rightarrow \hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\vec{\nabla}^2 - \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r} + e|\vec{E}|z$$
$$\equiv \hat{H}_0 + \lambda\hat{H}_1 \qquad (|\vec{E}| \text{ "klein"})$$

ungestörte Zustände: $\varphi_{nk}(\vec{r}) = \psi_{nlm}(\vec{r}) = R_{nl}(r)\,Y_{lm}(\vartheta,\varphi)$ ((vgl. §5))

$n = 1,2,3,\dots$; $l = 0,1,\dots,n-1$; $m = -l,\dots,+l$

→ E_n ist $(4)n^2$-fach entartet

↑((wenn wir auch Spin betrachten))

Korrekturen zum Grundzustand E_1? (nicht entartet → "normale" Stö.)

$\underline{n=1} \Rightarrow l=0,\ m=0$; $Y_{00}(\vartheta,\varphi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$

$$\langle\varphi_{10}|\hat{H}_1|\varphi_{10}\rangle \sim \int_0^\infty dr\, r^2|R_{10}(r)|^2 \int_0^\pi d\vartheta\,\sin(\vartheta)\int_0^{2\pi}d\varphi\,\overbrace{r\cos(\vartheta)}^{=z}$$
$$= 0 \quad ((\text{nach } \textstyle\int d\vartheta)) \quad \Rightarrow \underline{\text{keine}} \text{ Korrektur}$$

↳ $s \cdot c = \frac{1}{2}s(2\vartheta)$

Korrekturen zu E_2?

((s. A27b)) → kennen $Y_{10}(\vartheta,\varphi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos(\vartheta)$; $Y_{1\pm1}(\vartheta,\varphi) = \mp\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin(\vartheta)\,e^{\pm i\varphi}$

((s. A36)) $\left(\left(a = \frac{4\pi\varepsilon_0\hbar^2}{\mu e^2}\right)\right)$ → und $R_{20}(r) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{Z}{a}\right)^{3/2}\left(1-\frac{Zr}{2a}\right)e^{-\frac{Zr}{2a}}$; $R_{21}(r) = \frac{1}{2\sqrt{6}}\left(\frac{Z}{a}\right)^{5/2} r\, e^{-\frac{Zr}{2a}}$

sei nun $V_{jk} \equiv \langle\varphi_{2j}|\lambda\hat{H}_1|\varphi_{2k}\rangle$ mit $k = 1,2,3,4$
$$\Rightarrow \begin{cases} l = 0,1,1,1 \\ m = 0,0,1,-1 \end{cases}$$

müssen die V_{jk} nun berechnen.

z.B.
$$V_{12} = e|\vec{E}|\int_0^\infty dr\, r^2 \cdot \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{Z}{a}\right)^{3/2}\left(1-\frac{Zr}{2a}\right)e^{-\frac{Zr}{2a}} \cdot r \cdot \frac{1}{2\sqrt{6}}\left(\frac{Z}{a}\right)^{5/2} r\, e^{-\frac{Zr}{2a}}$$
$$* \int_0^{2\pi}d\varphi\int_0^\pi d\vartheta\,\sin(\vartheta)\cdot\frac{1}{\sqrt{4\pi}}\cdot\cos(\vartheta)\cdot\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos(\vartheta)$$

Subst $\left\{\begin{matrix}\frac{Zr}{2a} \equiv \hat{r} \\ \cos(\vartheta) \equiv u\end{matrix}\right\}$
$$= e|\vec{E}|\,\frac{2^4}{2\sqrt{2}\sqrt{6}}\,\frac{2a}{Z}\underbrace{\int_0^\infty d\hat{r}\,\hat{r}^4(1-\hat{r})\,e^{-2\hat{r}}}_{-\frac{9}{8}} * 2\pi\,\frac{\sqrt{3}}{4\pi}\underbrace{\int_{-1}^{1}du\,u^2}_{\frac{2}{3}}$$
$$= e|\vec{E}|\,\frac{a}{Z}\,4\left(-\frac{9}{8}\right)\frac{2}{3} = -3e|\vec{E}|\frac{a}{Z}$$