Εκφυλισμένη θεωρία διαταραχών.

Έστω η αδιατάρακτη εξίσωση:

$$\hat{H}^{(0)}\psi_n^{(0)} = E_n^{(0)}\psi_n^{(0)}$$

όπου $E_1^{(0)} = E_2^{(0)} = \dots = E_d^{(0)}$ δηλαδή οι πρώτες d καταστάσεις είναι εκφυλισμένες.

Και η εξίσωση $\hat{H}\psi_n = (\hat{H}^{(0)} + \lambda \hat{H}')\psi_n = E_n\psi_n$

Γιά τις εκφυλισμένες αδιατάρακτες καταστάσεις ισχύει ότι και οποιοσδήποτε γραμμικός συνδυασμός τους $\sum_{i=1}^{d} c_i\psi_i^{(0)}$ είναι επίσης αποδεκτή ιδιοσυνάρτηση τού $\hat{H}^{(0)}$. Ανακύπτει τό ερώτημα γιά τις διαταραγμένες ψ_n σέ ποιά από τις αδιατάρακτες εκφυλισμένες θά τείνει όταν εκλείψει η διατάραξη.

Έστω λοιπόν ότι θά έχουμε: $\lim_{\lambda \to 0} \psi_n = \phi_n^{(0)} = \sum_{i=1}^{d} c_i\psi_i^{(0)}$

όπου πρέπει νά προσδιορισθούν τά c_i.

Θά έχουμε: $\psi_n = \phi_n^{(0)} + \lambda\psi_n^{(1)} + \lambda^2\psi_n^{(2)} + \dots$

$n = 1, 2 \dots d$

$$E_n = E_d^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \dots$$

$$(\hat{H}^{(0)}+\lambda\hat{H}')(\phi_n^{(0)}+\lambda\psi_n^{(1)}+\lambda^2\psi_n^{(2)}+\dots)=$$

$$=(E_d^{(0)}+\lambda E_n^{(1)}+\lambda E_n^{(2)})(\phi_n^{(0)}+\lambda\psi_n^{(1)}+\lambda^2\psi_n^{(2)})$$

$$\longrightarrow \underline{(\lambda^0):}\ \hat{H}^{(0)}\phi_n^{(0)}=E_d^{(0)}\phi_n^{(0)}$$

$$\underline{(\lambda^1):}\ (\hat{H}^{(0)}-E_d^{(0)})|\psi_n^{(1)}\rangle=(E_n^{(1)}-\hat{H}')|\phi_n^{(0)}\rangle$$

$$\Rightarrow \langle\psi_m^{(0)}|\hat{H}^{(0)}|\psi_n^{(1)}\rangle-E_d^{(0)}\langle\psi_m^{(0)}|\psi_n^{(1)}\rangle= \qquad (1\leq m\leq d)$$

$$=E_n^{(1)}\langle\psi_m^{(0)}|\phi_n^{(0)}\rangle-\langle\psi_m^{(0)}|\hat{H}'|\phi_n^{(0)}\rangle$$

$$\Rightarrow (E_d^{(0)}-E_d^{(0)})\langle\psi_m^{(0)}|\psi_n^{(1)}\rangle=0=E_n^{(1)}\langle\psi_m^{(0)}|\phi_n^{(0)}\rangle-\langle\psi_m^{(0)}|\hat{H}|\phi_n^{(0)}\rangle$$

$$\Rightarrow \langle\psi_m^{(0)}|\hat{H}'|\sum_{i=1}^{d}c_i\psi_i^{(0)}\rangle-E_n^{(1)}\langle\psi_m^{(0)}|\sum_{i=1}^{d}c_i\psi_i^{(0)}\rangle=0$$

$$\Rightarrow \sum_{i=1}^{d}c_i\left[\langle\psi_m^{(0)}|\hat{H}'|\psi_i^{(0)}\rangle-E_n^{(1)}\delta_{mi}\right]=0$$

δηλ. έχουμε ένα σύστημα d εξισώσεων (για $m=1,\dots d$) μέ d άγνωστους τούς c_i $(i=1,\dots d)$.

Γιά νά έχουμε μή τετριμμένες λύσεις θά πρέπει η ορίζουσα:

$$\det\left[\langle\psi_m^{(0)}|\hat{H}'|\psi_i^{(0)}\rangle-E_n^{(1)}\delta_{mi}\right]=0$$

Πιό αναλυτικά πρέπει:

$$\begin{vmatrix} (H'_{11}-E_n^{(1)}) & H'_{12} & H'_{13} & \cdots & H'_{1d} \\ H'_{21} & (\hat{H}'_{22}-E_n^{(1)}) & H'_{23} & \cdots & H'_{2d} \\ - & - & - & - & - \\ H'_{d1} & H'_{d2} & H'_{d3} & & (H'_{dd}-E_n^{(1)}) \end{vmatrix} = 0$$

όπου $H'_{mn} = \langle \psi_m^{(0)} | \hat{H}' | \psi_n^{(0)} \rangle$. Αύτή είναι μία εξίσωση βαθμού d ώς πρός $E_n^{(1)}$. Προκύπτουν d λύσεις καί γιά κάθε λύση ένα σετ $\{c_i\}_n$ συντελεστών. Οί νέες $\Phi_n^{(0)}$ τυπικά δέν είναι εκφυλισμένες καί σέ αυτές μπορεί νά εφαρμοσθεί ή απλή θεωρία διαταραχών. Οί λύσεις $E_n^{(1)}$ δίνουν τίς διορθώσεις πρώτης τάξεως στήν ενέργεια γιά τίς εκφυλισμένες συναρτήσεις, $E_d^{(0)} + E_n^{(1)}$ $(n=1,2,\ldots d)$.

Παράδειγμα γιά $d=2$ μέ ἐκφυλισμένες $\psi_1^{(0)}$ καί $\psi_2^{(0)}$.

$$\begin{vmatrix} H'_{11}-E_n^{(1)} & H'_{12} \\ H'_{21} & H'_{22}-E_n^{(1)} \end{vmatrix} = 0 \implies$$

$$\implies E_n^{(1)2} - E_n^{(1)}(H'_{11}+H'_{22}) + (H'_{11}\,H'_{22} - H'_{12}H'_{21})$$

$$\implies E_{\pm}^{(1)} = \frac{1}{2}\left\{(H'_{11}+H'_{22}) \pm \sqrt{(H'_{11}-H'_{22})^2 + 4|H'_{12}|^2}\right\}$$

Πού εἶναι οἱ δύο διορθώσεις πρώτης τάξεως.

Στήν σχέση αὐτή παρατηροῦμε ὅτι ἄν $H_{12}=0$ τότε

$$E_+^{(1)} = H'_{11} \quad \text{καί} \quad E_-^{(1)} = H'_{22}$$

δηλαδή καταλήγουμε στήν μή ἐκφυλισμένη θεωρία.

Γενικῶς ἐάν ὅλα τά $H'_{ij}=0$ τότε εἶναι OK.

Ἐάν ὁ τελεστής $\hat{A}$ εἶναι Ἑρμιτειανός καί μετατίθεται μέ τούς $\hat{H}^{(0)}, \hat{H}'$ καί οἱ συναρτήσεις $\psi_1^{(0)}, \psi_2^{(0)}, \dots \psi_d^{(0)}$ εἶναι ἰδιοσυναρτήσεις καί τοῦ $\hat{A}$ μέ

$$\hat{A}\psi_i^{(0)} = \alpha_i \psi_i^{(0)} \quad \text{μέ} \quad \alpha_1 \neq \alpha_2 \neq \dots \neq \alpha_d$$

Τότε οἱ $\{\psi_i^{(0)}\}$ εἶναι καλές γιά νά ἐφαρμοσθεῖ ἡ μή ἐκφυλισμένη θεωρία.

Ἀπόδειξη

$$\langle\psi_i^{(0)}|[\hat{A},\hat{H}]|\psi_j^{(0)}\rangle = \langle\psi_i^{(0)}|[\hat{A},\hat{H}^{(0)}]|\psi_j^{(0)}\rangle +$$

$$+ \langle\psi_i^{(0)}|[\hat{A},\hat{H}']|\psi_j^{(0)}\rangle = \langle\psi_i^{(0)}|\hat{A}\hat{H}'|\psi_j^{(0)}\rangle - \langle\psi_i^{(0)}|\hat{H}'\hat{A}|\psi_j^{(0)}\rangle = 0$$

$$\Rightarrow (\alpha_i - \alpha_j) H'_{ij} = 0 \quad \Rightarrow H'_{ij} = 0$$