Χρονικώς ἀνεξάρτητη Θεωρία Διαταραχῶν

Ἔστω πρὸς ἐπίλυση τὸ πρόβλημα:

$$\hat{H}\psi_n = E_n \psi_n$$

καὶ ἔστω ὅτι ἡ $\hat{H}$ διαφέρει λίγο ἀπὸ μία $\hat{H}^{(0)}$ για τὴν ὁποία οἱ λύσεις τῆς

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

εἶναι γνωστές.

Ἡ διαφορὰ $\hat{H}' = \hat{H} - \hat{H}^{(0)}$ θὰ ὀνομάζεται "διατάραξις" τοῦ ἀδιαταράκτου συστήματος ποὺ περιγράφεται ἀπὸ τὴν $\hat{H}^{(0)}$.

Θὰ θέσω:

$$\hat{H} = \hat{H}^{(0)} + \lambda \hat{H}'$$

ὅπου $0 \leq \lambda \leq 1$, δηλαδὴ ἐφαρμόζω σταδιακὰ τὴν διατάραξη. Θέλω τελικῶς νὰ σχετίσω τὶς λύσεις τοῦ ἀδιαταράκτου συστήματος μὲ αὐτὲς τοῦ διαταραγμένου.

Θα έχω: $$\hat{H}\psi_n = (\hat{H}^{(0)} + \lambda \hat{H}')\psi_n = E_n \psi_n$$

Μπορώ να αναπτύξω:

$$\psi_n = \psi_n\Big|_{\lambda=0} + \frac{\partial \psi_n}{\partial \lambda}\Big|_{\lambda=0}\lambda + \frac{\partial^2 \psi_n}{\partial \lambda^2}\Big|_{\lambda=0}\frac{\lambda^2}{2!} + \dots$$

$$E_n = E_n\Big|_{\lambda=0} + \frac{\partial E_n}{\partial \lambda}\Big|_{\lambda=0}\lambda + \frac{\partial^2 E_n}{\partial \lambda^2}\Big|_{\lambda=0}\frac{\lambda^2}{2!} + \dots$$

με $\psi_n\big|_{\lambda=0} = \psi_n^{(0)}$ και $E_n\big|_{\lambda=0} = E_n^{(0)}$

Θέτω: $$\frac{1}{k!}\frac{\partial^k \psi_n}{\partial \lambda^k}\Big|_{\lambda=0} = \psi_n^{(k)}$$

$$\frac{1}{k!}\frac{\partial^k E_n}{\partial \lambda^k}\Big|_{\lambda=0} = E_n^{(k)}$$

Έτσι:

$$\psi_n = \psi_n^{(0)} + \lambda \psi_n^{(1)} + \lambda^2 \psi_n^{(2)} + \dots + \lambda^k \psi_n^{(k)} + \dots$$

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

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

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

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

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

Εξισώνοντας τούς ἀντίστοιχους συντελεστές τῶν λ^n

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

λ^1) $(\hat H^{(0)} - E_n^{(0)})|\psi_n^{(1)}\rangle = (E_n^{(1)} - \hat H')|\psi_n^{(0)}\rangle$

λ^2) $(\hat H^{(0)} - E_n^{(0)})|\psi_n^{(2)}\rangle = (E_n^{(1)} - \hat H')|\psi_n^{(1)}\rangle + E_n^{(2)}|\psi_n^{(0)}\rangle$

λ^3) $(\hat H^{(0)} - E_n^{(0)})|\psi_n^{(3)}\rangle = (E_n^{(1)} - \hat H')|\psi_n^{(2)}\rangle + E_n^{(2)}|\psi_n^{(1)}\rangle + E_n^{(3)}|\psi_n^{(0)}\rangle$

καὶ γενικώς

λ^k) $(\hat H^{(0)} - E_n^{(0)})|\psi_n^{(k)}\rangle = (E_n^{(1)} - \hat H')|\psi_n^{(k-1)}\rangle + E_n^{(2)}|\psi_n^{(k-2)}\rangle +$

$E_n^{(3)}|\psi_n^{(k-3)}\rangle + \dots + E_n^{(k)}|\psi_n^{(0)}\rangle$

Από την δεύτερη εξίσωση (για λ^1) θα έχουμε:

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

$$\Rightarrow (E_k^{(0)} - E_n^{(0)}) \langle \psi_k^{(0)} | \psi_n^{(1)} \rangle = E_n^{(1)} \delta_{kn} - \langle \psi_k^{(0)} | \hat{H}' | \psi_n^{(0)} \rangle$$

Για $k=n$ λαμβάνουμε:

$$\underline{E_n^{(1)} = \langle \psi_n^{(0)} | \hat{H}' | \psi_n^{(0)} \rangle}$$

δηλαδή την διόρθωση $1^{ης}$ τάξεως.

ενώ για $k \neq n$ θα έχουμε:

$$(E_k^{(0)} - E_n^{(0)}) \langle \psi_k^{(0)} | \psi_n^{(1)} \rangle = - \langle \psi_k^{(0)} | \hat{H}' | \psi_n^{(0)} \rangle$$

Θα σημειώσουμε ότι $\langle \psi_k^{(0)} | \psi_n^{(1)} \rangle$ είναι οι συντελεστές $c_{kn}^{(1)}$ στο ανάπτυγμα: $| \psi_n^{(1)} \rangle = \sum_k c_{kn}^{(1)} | \psi_k^{(0)} \rangle$

Έτσι λοιπόν:

$$\langle \psi_k^{(0)} | \psi_n^{(1)} \rangle = c_{kn}^{(1)} = - \frac{\langle \psi_k^{(0)} | \hat{H}' | \psi_n^{(0)} \rangle}{E_k^{(0)} - E_n^{(0)}}$$

και συνεπώς:

ἡ διόρθωση πρώτης τάξεως στὴν κυματοσυνάρτηση θὰ εἶναι:

$$|\psi_n^{(1)}\rangle = -\sum_{k\neq n} \frac{\langle \psi_k^{(0)}|\hat{H}'|\psi_n^{(0)}\rangle}{E_k^{(0)}-E_n^{(0)}}|\psi_k^{(0)}\rangle$$

Θὰ σημειώσουμε ἐδῶ ὅτι ἡ θεωρία ἐφαρμόζεται γιὰ μὴ ἐκφυλισμένες καταστάσεις λόγω τοῦ παρονομαστῆ. Θὰ δοῦμε ἀργότερα τὸν χειρισμὸ ἐκφυλισμένων καταστάσεων.

Παρατηροῦμε ἐπίσης ὅτι

$$\langle \psi_n^{(0)}|\psi_n^{(1)}\rangle = 0$$

Θὰ θεωρήσουμε ὅτι αὐτὸ ἰσχύει γενικῶς δηλαδὴ

$$\langle \psi_n^{(0)}|\psi_n^{(k)}\rangle = 0 \text{ γιὰ } k=1,2,3,\dots$$

ἡ $|\psi_n^{(0)}\rangle$ εἶναι ὀρθογωνικὴ μὲ ὅλες τὶς διορθώσεις $|\psi_n^{(k)}\rangle$.

Ἀπὸ τὴν τρίτη ἐξίσωση γιὰ λ^2 θὰ ἔχουμε:

$$\langle \psi_k^{(0)} | \hat{H}^{(0)} - E_n^{(0)} | \psi_n^{(2)} \rangle = \langle \psi_k^{(0)} | (E_n^{(1)} - \hat{H}') | \psi_n^{(1)} \rangle + E_n^{(2)} \langle \psi_k^{(0)} | \psi_n^{(0)} \rangle$$

$$(E_k^{(0)} - E_n^{(0)}) \langle \psi_k^{(0)} | \psi_n^{(2)} \rangle = E_n^{(1)} \langle \psi_k^{(0)} | \psi_n^{(1)} \rangle - \langle \psi_k^{(0)} | \hat{H}' | \psi_n^{(1)} \rangle + E_n^{(2)} \delta_{kn}$$

Γιὰ $k=n$

$$0 = E_n^{(1)} \underbrace{\langle \psi_n^{(0)} | \psi_n^{(1)} \rangle}_{(=0)} - \langle \psi_n^{(0)} | \hat{H}' | \psi_n^{(1)} \rangle + E_n^{(2)} \Longrightarrow$$

$$E_n^{(2)} = + \langle \psi^{(0)} | \hat{H}' | \psi_n^{(1)} \rangle = \langle \psi_n^{(0)} | \hat{H}' | - \sum_{k \neq n} \frac{\langle \psi_k^{(0)} | \hat{H}' | \psi_n^{(0)} \rangle}{E_k^{(0)} - E_n^{(0)}} \psi_k^{(0)} \rangle$$

$$\Longrightarrow \quad E_n^{(2)} = - \sum_{k \neq n} \frac{\langle \psi_n^{(0)} | \hat{H}' | \psi_k^{(0)} \rangle \langle \psi_k^{(0)} | \hat{H}' | \psi_n^{(0)} \rangle}{E_k^{(0)} - E_n^{(0)}}$$

$$\Longrightarrow \quad E_n^{(2)} = - \sum_{k \neq n} \frac{| \langle \psi_n^{(0)} | \hat{H}' | \psi_k^{(0)} \rangle |^2}{E_k^{(0)} - E_n^{(0)}}$$

ποὺ εἶναι ἡ διόρθωση $2^{ας}$ τάξεως στὴν ἐνέργεια.

Για $k \neq n$

$$(E_k^{(0)} - E_n^{(0)}) \langle \psi_k^{(0)} | \psi_n^{(2)} \rangle = -E_n^{(1)} \frac{\langle \psi_k^{(0)} | \hat{H}' | \psi_n^{(0)} \rangle}{E_k^{(0)} - E_n^{(0)}} - \langle \psi_k^{(0)} | \hat{H}' | \psi_n^{(1)} \rangle$$

$$\Rightarrow \langle \psi_k^{(0)} | \psi_n^{(2)} \rangle = - \frac{E_n^{(1)} \langle \psi_k^{(0)} | \hat{H}' | \psi_n^{(0)} \rangle}{(E_k^{(0)} - E_n^{(0)})^2} - \frac{\langle \psi_k^{(0)} | \hat{H}' | \psi_n^{(1)} \rangle}{E_k^{(0)} - E_n^{(0)}}$$

Θέτωντας: $E_n^{(1)} = \langle \psi_n^{(0)} | \hat{H}' | \psi_n^{(0)} \rangle$ και

$$|\psi_n^{(1)}\rangle = \sum_{m \neq n} \frac{\langle \psi_m^{(0)} | \hat{H}' | \psi_n^{(0)} \rangle}{E_m^{(0)} - E_n^{(0)}} \longrightarrow$$

$$\langle \psi_k^{(0)} | \psi_n^{(2)} \rangle = - \frac{\langle \psi_n^{(0)} | \hat{H}' | \psi_n^{(0)} \rangle \langle \psi_k^{(0)} | \hat{H}' | \psi_n^{(0)} \rangle}{(E_k^{(0)} - E_n^{(0)})^2} - \sum_{m \neq n} \frac{\langle \psi_k^{(0)} | \hat{H}' | \psi_m^{(0)} \rangle \langle \psi_m^{(0)} | \hat{H}' | \psi_n^{(0)} \rangle}{(E_k^{(0)} - E_n^{(0)})(E_m^{(0)} - E_n^{(0)})}$$

Συνεχίζοντας λ^3, λ^4 κλπ οι εκφράσεις γίνονται πολύπλοκες.

Τελικώς και για $\lambda = 1$

$$E_n \simeq E_n^{(0)} + E_n^{(1)} + E_n^{(2)} + \dots$$

$$|\psi_n\rangle \simeq |\psi_n^{(0)}\rangle + |\psi_n^{(1)}\rangle + |\psi_n^{(2)}\rangle + \dots$$

Παρατηρήσεις

1.) Ἡ διόρθωση πρώτης τάξεως στὴν θεμελιώδη κατάσταση $|\psi_0^{(0)}\rangle$ ἀνεβάζει τὴν ἐνέργεια:

$$E_0^{(0)} + E_0^{(1)} = \langle \psi_0^{(0)} | \hat{H}^{(0)} | \psi_0^{(0)} \rangle + \langle \psi_0^{(0)} | \hat{H}' | \psi_0^{(0)} \rangle$$
$$= \langle \psi_0^{(0)} | \hat{H}^{(0)} + \hat{H}' | \psi_0^{(0)} \rangle = \langle \psi_0^{(0)} | \hat{H} | \psi_0^{(0)} \rangle$$

τὸ ὁποῖο σύμφωνα μὲ τὸ θεώρημα παραλλαγῶν εἶναι $\geq E_0$

Ἀντιθέτως ἡ διόρθωση $2^{ας}$ τάξεως στὴν θεμελιώδη κατάσταση: $E_0^{(2)} = -\sum_{k \neq 0} \frac{|\langle \psi_k^{(0)} | \hat{H}' | \psi_0^{(0)} \rangle|^2}{E_k^{(0)} - E_0^{(0)}}$

εἶναι πάντα ἀρνητικὴ διότι $E_k^{(0)} > E_0^{(0)}$.

2.) Γιὰ μία τυχαία $|\psi_n^{(0)}\rangle$ ἡ $E_n^{(2)}$ ἀνεβάζει γιὰ $k < n$ ἐνῶ κατεβάζει γιὰ $k > n$.

3.) Ὑπάρχει τὸ πρόβλημα τῆς συγκλίσεως τῆς σειρᾶς διαταραχῶν. Ὅταν αὐτὴ δὲν συγκλίνει δὲν μπορεῖ νὰ ἐφαρμοσθεῖ ἡ μέθοδος.

Δίνεται ὁ γενικὸς κανόνας χωρὶς ἀπόδειξη:

πρέπει $|H'_{mn}| < E_m^{(0)} - E_n^{(0)}$

όπου $H'_{mn} = \langle \psi_m^{(0)} | \hat{H}' | \psi_n^{(0)} \rangle$