ΕΛΛΗΝΙΚΗ ΔΗΜΟΚΡΑΤΙΑ
Εθνικόν και Καποδιστριακόν
Πανεπιστήμιον Αθηνών

# Κβαντική Μηχανική ΙΙ

## Ενότητα 7: Θεωρία διαταραχών

Αθανάσιος Λαχανάς
Σχολή Θετικών Επιστημών
Τμήμα Φυσικής

# Περιεχόμενα 7ης ενότητας

**Θεωρία διαταραχών**

- Χρονικά ανεξάρτητη θ.δ.
- Διορθώσεις πρώτης τάξης
- Διορθώσεις ανώτερης τάξης

# Προσεγγιστικές μέθοδοι

- Επιλύσιμο πρόβλημα Ιδιοσυναρτήσεων - Ιδιοτιμών της Χαμιλτωνιανής $\hat{H}_0$

$$\hat{H}_0 \, |\psi_n^0\rangle = E_n^{(0)} \, |\psi_n^0\rangle \qquad n = 1, 2 \cdots$$

- Μη επιλύσιμο πρόβλημα Ιδιοσυναρτήσεων - Ιδιοτιμών της Χαμιλτωνιανής $\hat{H}$

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + g \, \hat{H}_1$$

- ✓ Ο πρόσθετος όρος $g \, \hat{H}_1$ θεωρείται μικρή διαταραχή της $\hat{H}_0$ και διορθώνει τις ενέργειες και τα ιδιοανύσματα της

  ✓ Μπορεί να επιδιωχθεί διαταρακτική προσέγγιση του προβλήματος

$$\hat{H} \, |\psi_n\rangle = E_n \, |\psi_n\rangle \qquad n = 1, 2 \cdots$$

  ✓ Η αδιάστατη παράμετρος $g$ καθορίζει την τάξη προσέγγισης της διαταραχής !

- Επιλύσιμο πρόβλημα Ιδιοσυναρτήσεων - Ιδιοτιμών της Χαμιλτωνιανής $\hat{H}_0$

$$\hat{H}_0 \, |\psi_n^0\rangle = E_n^{(0)} \, |\psi_n^0\rangle \qquad n = 1, 2 \cdots$$

- Μη επιλύσιμο πρόβλημα Ιδιοσυναρτήσεων - Ιδιοτιμών της Χαμιλτωνιανής $\hat{H}$

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + g\,\hat{H}_1$$

- ✓ Ο προσθετός όρος $g\,\hat{H}_1$ θεωρείται μικρή διαταραχή της $\hat{H}_0$ και διορθώνει τις ενέργειες και τα ιδιοανύσματα της
  ✓ Μπορεί να επιδιωχθεί διαταρακτική προσέγγιση του προβλήματος

$$\hat{H} \, |\psi_n\rangle = E_n \, |\psi_n\rangle \qquad n = 1, 2 \cdots$$

  ✓ Η αδιάστατη παράμετρος $g$ καθορίζει την τάξη προσέγγισης της διαταραχής !

- Επιλύσιμο πρόβλημα Ιδιοσυναρτήσεων - Ιδιοτιμών της Χαμιλτωνιανής $\hat{H}_0$

$$\hat{H}_0 \, |\psi_n^0\rangle = E_n^{(0)} \, |\psi_n^0\rangle \qquad n = 1, 2 \cdots$$

- Μη επιλύσιμο πρόβλημα Ιδιοσυναρτήσεων - Ιδιοτιμών της Χαμιλτωνιανής $\hat{H}$

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + g\,\hat{H}_1$$

- ✓ Ο πρόσθετος όρος $g\,\hat{H}_1$ θεωρείται μικρή διαταραχή της $\hat{H}_0$ και διορθώνει τις ενέργειες και τα ιδιοανύσματα της
  - ✓ Μπορεί να επιδιωχθεί διαταρακτική προσέγγιση του προβλήματος

$$\hat{H} \, |\psi_n\rangle = E_n \, |\psi_n\rangle \qquad n = 1, 2 \cdots$$

  - ✓ Η αδιάστατη παράμετρος $g$ καθορίζει την τάξη προσέγγισης της διαταραχής !

# Διαταρακτική επίλυση

- Οι διορθώσεις στην $n-$ οστή ενέργεια και ιδιοκατάσταση

$$|\psi_n\rangle = |\psi_n^0\rangle + \delta\,|\psi_n\rangle \quad , \quad E_n = E_n^{(0)} + \delta\,E_n$$

- Οι διορθώσεις $\delta\,E_n$ , $\delta\,|\psi_n\rangle$ είναι μικρές και αιτιολογείται ανάπτυγμα στην αδιάστατη σταθερά $g$

$$\begin{aligned}
\delta\,|\psi_n\rangle &= g\,|\psi_n^1\rangle + g^2\,|\psi_n^2\rangle + g^3\,|\psi_n^3\rangle + \cdots \\
\delta\,E_n &= g\,E_n^{(1)} + g^2\,E_n^{(2)} + g^3\,E_n^{(3)} + \cdots
\end{aligned}$$

- Οι διορθώσεις υπολογίζονται διαδοχικά **¨τάξη προς τάξη¨** αρχίζοντας από την πρώτης τάξης προσέγγιση

# Πρώτης τάξης προσέγγιση

- Πρώτης τάξης διόρθωση στην $n-$ οστή ενέργεια και ιδιοκατάσταση

$$|\psi_n\rangle = |\psi_n^0\rangle + g\,|\psi_n^1\rangle \quad , \quad E_n = E_n^{(0)} + g\,E_n^{(1)}$$

- Από την εξίσωση ιδιοτιμών $\hat{H}\,|\psi_n\rangle = E_n\,|\psi_n\rangle$ προκύπτει

$$\hat{H}_1\,|\psi_n^0\rangle + \hat{H}_0\,|\psi_n^1\rangle = E_n^{(1)}\,|\psi_n^0\rangle + E_n^{(0)}\,|\psi_n^1\rangle$$

- Η πρώτης τάξης διόρθωση στην ενέργεια είναι

$$\boxed{\delta E_n = g\,\langle\psi_n^0|\,\hat{H}_1\,|\psi_n^0\rangle}$$

# Πρώτης τάξης προσέγγιση

- Πρώτης τάξης διόρθωση στην $n-$ οστή ενέργεια και ιδιοκατάσταση

$$|\psi_n\rangle = |\psi_n^0\rangle + g\,|\psi_n^1\rangle \quad , \quad E_n = E_n^{(0)} + g\,E_n^{(1)}$$

- Από την εξίσωση ιδιοτιμών $\hat{H}\,|\psi_n\rangle = E_n\,|\psi_n\rangle$ προκύπτει

$$\hat{H}_1\,|\psi_n^0\rangle + \hat{H}_0\,|\psi_n^1\rangle = E_n^{(1)}\,|\psi_n^0\rangle + E_n^{(0)}\,|\psi_n^1\rangle$$

- Η πρώτης τάξης διόρθωση στην ενέργεια είναι

$$\delta E_n = g\,\langle\psi_n^0|\,\hat{H}_1\,|\psi_n^0\rangle$$

# Πρώτης τάξης προσέγγιση

- Πρώτης τάξης διόρθωση στην $n-$ οστή ενέργεια και ιδιοκατάσταση

$$|\psi_n\rangle = |\psi_n^0\rangle + g\,|\psi_n^1\rangle \quad , \quad E_n = E_n^{(0)} + g\,E_n^{(1)}$$

- Από την εξίσωση ιδιοτιμών $\hat{H}\,|\psi_n\rangle = E_n\,|\psi_n\rangle$ προκύπτει

$$\hat{H}_1\,|\psi_n^0\rangle + \hat{H}_0\,|\psi_n^1\rangle = E_n^{(1)}\,|\psi_n^0\rangle + E_n^{(0)}\,|\psi_n^1\rangle$$

- Η πρώτης τάξης διόρθωση στην ενέργεια είναι

$$\boxed{\delta E_n = g\,\langle\psi_n^0|\,\hat{H}_1\,|\psi_n^0\rangle}$$

- Η πρώτης τάξης διόρθωση στην ιδιοκατάσταση της ενέργειας

$$\boxed{\delta\,|\psi_n\rangle = g\sum_{m\neq n}^{\infty}\frac{\langle\psi_m^0|\,\hat{H}_1\,|\psi_n^0\rangle}{E_n^{(0)}-E_m^{(0)}}\,|\psi_m^0\rangle}$$

- Για την διόρθωση αυτή
  - Υποτίθεται ότι το ενεργειακό φάσμα δεν είναι εκφυλισμένο !
  - Σε πρώτη τάξη στην $g$ η κανονικοποιημένη στην μονάδα διορθωμένη κατάσταση είναι

$$|\psi_n\rangle = |\psi_n^0\rangle + \delta\,|\psi_n\rangle$$

- Η πρώτης τάξης διόρθωση στην ιδιοκατάσταση της ενέργειας

$$\delta\,|\psi_n\rangle = g \sum_{m\neq n}^{\infty} \frac{\langle\psi_m^0|\,\hat{H}_1\,|\psi_n^0\rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}\,|\psi_m^0\rangle$$

- Για την διόρθωση αυτή :
  - Υποτίθεται ότι το ενεργειακό φάσμα δεν είναι εκφυλισμένο !
  - Σε πρώτη τάξη στην $g$ η κανονικοποιημένη στην μονάδα διορθωμένη κατάσταση είναι

$$|\psi_n\rangle = |\psi_n^0\rangle + \delta\,|\psi_n\rangle$$

- Για μικρή διαταραχή $\hat{V}$ στην αρχική Χαμιλτωνιανή $\hat{H}_0$ :

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$$

- Η πρώτης τάξης προσέγγιση στην ενέργεια :

$$E_n = E_n^{(0)} + V_{nn}$$

- Η κανονικοποιημένη κατάσταση πρώτης τάξης :

$$|\psi_n\rangle = |\psi_n^0\rangle + \sum_{m\neq n}^{\infty} \frac{V_{mn}}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} |\psi_m^0\rangle$$

όπου $V_{ij} = \langle \psi_i^0 | \hat{V} | \psi_j^0 \rangle$

# Δεύτερης τάξης προσέγγιση

- Μετά την εύρεση των διορθώσεων πρώτης τάξης με παρόμοιους χειρισμούς μπορούν να βρεθούν οι ανώτερης τάξης διορθώσεις. Μέχρι δεύτερη τάξη οι διορθώσεις στην $n-$ οστή ενέργεια και την αντίστοιχη ιδιοκατάσταση γράφονται ως

$$|\psi_n\rangle = |\psi_n^0\rangle + g\,|\psi_n^1\rangle + g^2\,|\psi_n^2\rangle$$

$$E_n = E_n^{(0)} + g\,E_n^{(1)} + g^2\,E_n^{(2)}$$

όπου οι πρώτης τάξης διορθώσεις $E_n^{(1)}$ , $|\psi_n^1\rangle$ έχουν ήδη υπολογισθεί

- Από την εξίσωση ιδιοτιμών και ιδιοκαταστάσεων της ενέργειας, μέχρι αυτήν την τάξη, βρίσκεται τελικά $\Longrightarrow$

- Μέχρι δεύτερη τάξη η προσέγγιση στην ενέργεια είναι:

$$E_n = E_n^{(0)} + V_{nn} + \sum_{m\neq n}^{\infty} \frac{|V_{nm}|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}$$

- Η κανονικοποιημένη κατάσταση σε δεύτερη τάξη:

$$|\psi_n\rangle = (1 + C_{nn})\,|\psi_n^0\rangle + \sum_{m\neq n}^{\infty} \frac{V_{mn}}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}\,|\psi_m^0\rangle +$$

$$\sum_{m\neq n}^{\infty}\left[\sum_{k\neq n}^{\infty} \frac{V_{mk}V_{kn}}{(E_n^{(0)} - E_k^{(0)})(E_n^{(0)} - E_m^{(0)})} - \frac{V_{mn}V_{nn}}{(E_n^{(0)} - E_m^{(0)})^2}\right]|\psi_m^0\rangle$$

όπου η σταθερά $C_{nn}$ είναι $C_{nn} = -\frac{1}{2}\sum_{m\neq n}^{\infty} \frac{|V_{nm}|^2}{(E_n^{(0)} - E_m^{(0)})^2}$

# Αναρμονικός ταλαντωτής

Το δυναμικό **¨αναρμονικού ταλαντωτή¨** είναι

$$V(x) = \frac{m\omega^2}{2} x^2 + \tilde{g}\, x^4$$

Εισάγοντας αδιάσταστη διαταρακτική σταθερά $g$ αντί της $\tilde{g}$ ο αναρμονικός όρος γίνεται

$$\Delta V(x) = g\, \frac{m^2 \omega^3}{\hbar}\, x^4$$

Σε πρώτη τάξη στην $g$ η διορθωμένη ενέργεια είναι

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2}\right) + \frac{3}{4}\, g\, \hbar\omega \,(2n^2 + 2n + 1)$$

# Αναρμονικός ταλαντωτής

Το δυναμικό **"αναρμονικού ταλαντωτή"** είναι

$$V(x) = \frac{m\omega^2}{2} x^2 + \tilde{g}\, x^4$$

Εισάγοντας αδιάστατη διαταρακτική σταθερά $g$ αντί της $\tilde{g}$ ο αναρμονικός όρος γίνεται

$$\Delta V(x) = g\, \frac{m^2\omega^3}{\hbar}\, x^4$$

Σε πρώτη τάξη στην $g$ η διορθωμένη ενέργεια είναι

$$E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right) + \frac{3}{4}\, g\, \hbar\omega\, (2n^2 + 2n + 1)$$

# Αναρμονικός ταλαντωτής

Το δυναμικό **¨αναρμονικού ταλαντωτή¨** είναι

$$V(x) = \frac{m\omega^2}{2} x^2 + \tilde{g}\, x^4$$

Εισάγοντας αδιάσταστη διαταρακτική σταθερά $g$ αντί της $\tilde{g}$ ο αναρμονικός όρος γίνεται

$$\Delta V(x) = g\, \frac{m^2 \omega^3}{\hbar}\, x^4$$

Σε πρώτη τάξη στην $g$ η διορθωμένη ενέργεια είναι

$$E_n = \hbar\omega \left( n + \frac{1}{2} \right) + \frac{3}{4}\, g\, \hbar\omega \,(2n^2 + 2n + 1)$$

Το διαταρακτικό αποτέλεσμα αξιόπιστο για τιμές

$$\frac{3}{4}\, g << \frac{n+1/2}{2n^2 + 2n + 1}$$

που για μεγάλες ενέργειες ( μεγάλα $n$ ) θέτει τον φραγμό

$$g << \frac{2}{3\,n}$$

Το διαταρακτικό αποτέλεσμα αξιόπιστο για τιμές

$$\frac{3}{4} g << \frac{n+1/2}{2n^2 + 2n + 1}$$

που για μεγάλες ενέργειες ( μεγάλα $n$ ) θέτει τον φραγμό

$$g << \frac{2}{3\, n}$$

- Επομένως για δεδομένη τιμή της σταθεράς $g$ τα αποτελέσματα αναξιόπιστα όταν ο κβαντικός αριθμός $n$ ( ενέργεια ) παίρνει τιμές που υπερβαίνουν τα πιο επάνω όρια !
- Για παράδειγμα όταν $g = 1/10$ μπορούμε να εμπιστευθούμε το διαταρακτικό αποτέλεσμα για τιμές $n < 6$ ενώ όταν $g = 1/100$ πρέπει $n < 66$ ( επιβεβαιώστε το ! )

# Χρηματοδότηση

- Το παρόν εκπαιδευτικό υλικό έχει αναπτυχθεί στο πλαίσιο του εκπαιδευτικού έργου του διδάσκοντα.
- Το έργο «**Ανοικτά Ακαδημαϊκά Μαθήματα στο Πανεπιστήμιο Αθηνών**» έχει χρηματοδοτήσει μόνο την αναδιαμόρφωση του εκπαιδευτικού υλικού.
- Το έργο υλοποιείται στο πλαίσιο του Επιχειρησιακού Προγράμματος «Εκπαίδευση και Δια Βίου Μάθηση» και συγχρηματοδοτείται από την Ευρωπαϊκή Ένωση (Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο) και από εθνικούς πόρους.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ

# Σημειώματα

# Σημείωμα Ιστορικού Εκδόσεων Έργου

Το παρόν έργο αποτελεί την έκδοση 1.1

Η έκδοση 1.0 είναι διαθέσιμη εδώ.

# Σημείωμα Αναφοράς

Copyright Εθνικόν και Καποδιστριακόν Πανεπιστήμιον Αθηνών. Αθανάσιος Λαχανάς. «Κβαντική Μηχανική ΙΙ. Ενότητα 7: Θεωρία διαταραχών». Έκδοση: 0.1. Αθήνα 2015. Διαθέσιμο από τη δικτυακή διεύθυνση: http://opencourses.uoa.gr/courses/PHYS9/.

# Σημείωμα Αδειοδότησης

# Διατήρηση Σημειωμάτων

Οποιαδήποτε αναπαραγωγή ή διασκευή του υλικού θα πρέπει να συμπεριλαμβάνει:

- το Σημείωμα Αναφοράς
- το Σημείωμα Αδειοδότησης
- τη δήλωση Διατήρησης Σημειωμάτων

μαζί με τους συνοδευόμενους υπερσυνδέσμους.