Χρονοανεξάρτητη Μη-Εκφυλισμένη Θεωρία Διαταραχών

Δομή Διάλεξης

Ανασκόπηση συμβολισμού Dirac

Διαταραχές σε σύστημα δύο καταστάσεων

Η γενική μέθοδος μη-εκφυλισμένης θεωρίας διαταραχών

Εφαρμογή: Διαταραχή ατόμου υδρογόνου από ομογενές ηλεκτρικό πεδίο: Φαινόμενο Stark

Σύνοψη – Λυμένες και Άλυτες Ασκήσεις

Ορισμός Προβλήματος

Έστω Χαμιλτονιανή της μορφής $H=H_0+H_1$ με ιδιοκαταστάσεις και ιδιοτιμές που δεν μπορούν να βρεθούν αναλυτικά. Θέλουμε να βρούμε προσεγγιστικά σωστές ιδιοκαταστάσεις και ιδιοτιμές.

Έστω ότι: H_0, έχει γνωστές ιδιοκαταστάσεις και ιδιοτιμές και $H_1 \ll H_0$

Θέλουμε να βρούμε προσεγγιστικά σωστές ιδιοκαταστάσεις και ιδιοτιμές της $H=H_0+H_1$

Μπορούμε να τις βρούμε χρησιμοποιώντας τις ιδιοκαταστάσεις και ιδιοτιμές της H_0 και την μέθοδο των διαταραχών.

Υπενθύμιση συμβολισμού Dirac: Ορθοκανονικότητα

Έστω σύστημα ιδιοκαταστάσεων Χαμιλτονιανής: $H\,\psi_i = E_i\,\psi_i.$

Ορθοκανονικό: $\int_{-\infty}^{\infty} \psi_i^*\,\psi_j\,dx = \delta_{ij}.$

Ορθοκανονικό σε 3D: $\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} \psi_i^*\,\psi_j\,dx\,dy\,dz = \delta_{ij}.$

Ορθοκανονικότητα στον χώρο των spin (spinors): $\psi_i^\dagger\,\psi_j = \delta_{ij}.$

Ορθοκανονικότητα γενικά (συμβολισμός Dirac): $\langle \psi_i | \psi_j \rangle \equiv \langle i | j \rangle = \delta_{ij}.$

Ανάπτυγμα κατάστασης σε πλήρη βάση ιδιοκαταστάσεων της H: $\psi_a = \sum_i c_i\,\psi_i.$

Με χρήση ορθοκανονικότητας βρίσκουμε (1D): $c_i = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_i^*\,\psi_a\,dx,$

Υπενθύμιση συμβολισμού Dirac: Αναπτυγμα σε ιδιοκαταστασεις

Ανάπτυγμα κατάστασης σε πλήρη βάση ιδιοκαταστάσεων της H: $$\psi_a = \sum_i c_i \psi_i.$$

Με χρήση ορθοκανονικότητας βρίσκουμε (1D): $$c_i = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_i^* \psi_a \, dx,$$

Με χρήση ορθοκανονικότητας βρίσκουμε (3D): $$c_i = \int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} \psi_i^* \psi_a \, dx\, dy\, dz.$$

Με χρήση ορθοκανονικότητας βρίσκουμε (spinor): $$c_i = \psi_i^\dagger \psi_a.$$

Με χρήση ορθοκανονικότητας βρίσκουμε (γενικός συμβολισμός Dirac): $$c_i = \langle \psi_i | \psi_a \rangle \equiv \langle i | a \rangle.$$

Άρα το αναπτυγμα γράφεται (γενικός συμβολισμός Dirac): $$\psi_a = \sum_i \langle \psi_i | \psi_a \rangle \psi_i \equiv \sum_i \langle i | a \rangle \psi_i.$$

Ισχύει ακόμα προφανώς ότι: $$\langle i | a \rangle^* = \langle a | i \rangle.$$

Υπενθύμιση συμβολισμού Dirac: Στοιχεία πίνακα τελεστών

Ανάπτυγμα κατάστασης σε πλήρη βάση ιδιοκαταστάσεων της H:
$$\psi_a = \sum_i c_i \, \psi_i .$$

Αναμενόμενη τιμή τελεστή A:
$$\langle A \rangle = \sum_{i,j} c_i^* \, c_j \, A_{ij} .$$
$$\langle A \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_a^* \, A \, \psi_a \, dx$$

όπου (1D)
$$A_{ij} = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_i^* \, A \, \psi_j \, dx,$$

όπου (3D)
$$A_{ij} = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \psi_i^* \, A \, \psi_j \, dx \, dy \, dz .$$

όπου (spinor)
$$A_{ij} = \psi_i^\dagger \, A \, \psi_j .$$

όπου (γενικός συμβολισμός Dirac):
$$A_{ij} = \langle \psi_i | A | \psi_j \rangle \equiv \langle i | A | j \rangle$$

$$\langle A \rangle = \sum_{i,j} c_i^* \, c_j \, A_{ij} . \quad \Longrightarrow \quad \langle A \rangle \equiv \langle a | A | a \rangle = \sum_{i,j} \langle a | i \rangle \langle i | A | j \rangle \langle j | a \rangle .$$

Υπενθύμιση συμβολισμού Dirac: Στοιχεία πίνακα τελεστών

Γενικός συμβολισμός Dirac:

$$A_{ij} = \langle \psi_i | A | \psi_j \rangle \equiv \langle i | A | j \rangle$$

$$\langle A \rangle = \sum_{i,j} c_i^* \, c_j \, A_{ij} . \Longrightarrow \langle A \rangle \equiv \langle a | A | a \rangle = \sum_{i,j} \langle a | i \rangle \langle i | A | j \rangle \langle j | a \rangle .$$

$$\Downarrow$$

$$\sum_i |i\rangle\langle i| \equiv 1,$$

Τελεστής μονάδα

Από τον ορισμό του Ερμιτειανού συζυγή προκύπτει:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \, (O \, \psi) \, dx = \int_{-\infty}^{\infty} (O^\dagger \, \psi)^* \, \psi \, dx. \Longrightarrow \langle i | A | j \rangle^* = \langle j | A^\dagger | i \rangle .$$

Διαταραχές σε σύστημα δύο καταστάσεων

Έστω αδιατάραχτη Χαμιλτονιανή δύο γνωστών ορθοκανονικών ιδιοκαταστάσεων χωρίς εκφυλισμό:

$$\begin{aligned} H_0\,\psi_1 &= E_1\,\psi_1, \\ H_0\,\psi_2 &= E_2\,\psi_2. \end{aligned}$$

Έστω το πρόβλημα ιδιοτιμών της διαταραγμένης Χαμιλτονιανής:

$$(H_0 + H_1)\,\psi_E = E\,\psi_E.$$

Ανάπτυγμα της Ψ_E σε ιδιοκαταστάσεις της H_0:

$$\psi_E = \langle 1|E\rangle\,\psi_1 + \langle 2|E\rangle\,\psi_2.$$

$$(H_0 + H_1)\,\psi_E = E\,\psi_E. \quad \Longrightarrow \quad \langle i|H_0 + H_1|E\rangle = E\,\langle i|E\rangle,$$

i=1,2

Διαταραχές σε σύστημα δύο καταστάσεων

$$\langle i|H_0 + H_1|E\rangle = E\,\langle i|E\rangle,$$

$$\psi_E = \langle 1|E\rangle\,\psi_1 + \langle 2|E\rangle\,\psi_2.$$

$$\langle i|j\rangle = \delta_{ij},$$

$$H_0\,\psi_1 = E_1\,\psi_1,$$
$$H_0\,\psi_2 = E_2\,\psi_2.$$

e_{11} e_{12}

$$<1|H_0+H_1|1><1|E>+<1|H_0+H_1|2><2|E>=E<1|E>\Rightarrow$$
$$E_1<1|E>+<1|H_1|1><1|E>+<1|H_1|2><2|E>=E<1|E>\Rightarrow$$
$$(E_1-E+e_{11})<1|E>+e_{12}<2|E>=0$$

$$\begin{pmatrix} E_1 - E + e_{11} & e_{12} \\ e_{12}^{*} & E_2 - E + e_{22} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \langle 1|E\rangle \\ \langle 2|E\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$<2|H_0+H_1|1><1|E>+<2|H_0+H_1|2><2|E>=E<2|E>\Rightarrow$$
$$E_2<2|E>+<2|H_1|1><1|E>+<2|H_1|2><2|E>=E<2|E>\Rightarrow$$
$$(E_2-E+e_{22})<2|E>+e_{12}^{*}<1|E>=0$$

όπου

$$e_{11} = \langle 1|H_1|1\rangle,$$
$$e_{22} = \langle 2|H_1|2\rangle,$$
$$e_{12} = \langle 1|H_1|2\rangle = \langle 2|H_1|1\rangle^{*}.$$

Ερμητιανός

Διαταραχές σε σύστημα δύο καταστάσεων

Άρα για το πρόβλημα ιδιοτιμών της διαταραγμένης Χαμιλτονιανής: $(H_0 + H_1)\,\psi_E = E\,\psi_E.$

Αναπτύξαμε $\psi_E = \langle 1|E\rangle\,\psi_1 + \langle 2|E\rangle\,\psi_2.$

και βρήκαμε:

$$\begin{pmatrix} E_1 - E + e_{11} & e_{12} \\ e_{12}^* & E_2 - E + e_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \langle 1|E\rangle \\ \langle 2|E\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\begin{aligned} e_{11} &= \langle 1|H_1|1\rangle, \\ e_{22} &= \langle 2|H_1|2\rangle, \\ e_{12} &= \langle 1|H_1|2\rangle = \langle 2|H_1|1\rangle^*. \end{aligned}$$

Ειδική περίπτωση: $e_{11} = e_{22} = 0.$

Από μηδενισμό ορίζουσας παίρνουμε:

$$(E_1 - E)(E_2 - E) - |e_{12}|^2 = 0 \Rightarrow E^2 - (E_1 + E_2)E + E_1 E_2 - |e_{12}|^2 = 0$$

$$\Downarrow$$

$$E = \frac{(E_1 + E_2) \pm \sqrt{(E_1 - E_2)^2 + 4\,|e_{12}|^2}}{2}.$$

+7a (εξετάστε και $e_{11} \neq 0$, $e_{22} \neq 0$)

Εύρεση Διαταραγμένων Ιδιοτιμών

Άρα οι ιδιοτιμές της διαταραγμένης Χαμιλτονιανής είναι:

$$E = \frac{(E_1 + E_2) \pm \sqrt{(E_1 - E_2)^2 + 4\,|e_{12}|^2}}{2}.$$

Ανάπτυγμα ως προς την μικρή παράμετρο:

$$\epsilon = \frac{|e_{12}|}{|E_1 - E_2|}.$$

Βρίσκουμε:

$$E \simeq \frac{1}{2}(E_1 + E_2) \pm \frac{1}{2}(E_1 - E_2)(1 + 2\,\epsilon^2 + \cdots). \quad (1)$$

όπου έγινε χρήση της σχέσης:

$$(E_1 - E_2)\sqrt{1 + \frac{4|e_{12}|^2}{(E_1 - E_2)^2}} = (E_1 - E_2)\left(1 + 2\varepsilon^2 + \ldots\right)$$

(1) $\Rightarrow$

$$E_1' = E_1 + \frac{|e_{12}|^2}{E_1 - E_2} + \cdots,$$

$$E_2' = E_2 - \frac{|e_{12}|^2}{E_1 - E_2} + \cdots.$$

+7b (βρείτε και την επόμενη διόρθωση)

Εύρεση Διαταραγμένων Ιδιοκαταστάσεων

$$E_1' = E_1 + \frac{|e_{12}|^2}{E_1 - E_2} + \cdots,$$

$$E_2' = E_2 - \frac{|e_{12}|^2}{E_1 - E_2} + \cdots.$$

Για κάθε διαταραγμένη ιδιοτιμή λύνουμε το σύστημα

$$\begin{pmatrix} E_1 - E + e_{11} & e_{12} \\ e_{12}^* & E_2 - E + e_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \langle 1|E\rangle \\ \langle 2|E\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \xrightarrow{e_{11} = e_{22} = 0.} \begin{array}{l} (E_1 - E) < 1|E > + e_{12} < 2|E > = 0 \\ e_{12}^* < 1|E > + (E_2 - E) < 2|E > = 0 \end{array}$$

$$(E_1 - E_1') < 1|E_1' > + e_{12} < 2|E_1' > = 0 \Rightarrow < 2|E_1' > = -\frac{(E_1 - E_1')}{e_{12}} < 1|E_1' > = \frac{|e_{12}|^2 \big/ (E_1 - E_2)}{e_{12}} < 1|E_1' > = \frac{e_{12}^*}{E_1 - E_2} < 1|E_1' >$$

$$E_1' = E_1 + \frac{|e_{12}|^2}{E_1 - E_2} + \cdots,$$

$$\psi_E = \langle 1|E\rangle \psi_1 + \langle 2|E\rangle \psi_2.$$

$$< 2|E_1' > = \frac{e_{12}^*}{E_1 - E_2} < 1|E_1' >$$

$$\Rightarrow \quad \psi_1' = \psi_1 + \frac{e_{12}^*}{E_1 - E_2}\psi_2 + \cdots,$$

Εύρεση Διαταραγμένων Ιδιοκαταστάσεων

Δείξαμε ότι:

$$\psi_E = \langle 1|E\rangle \psi_1 + \langle 2|E\rangle \psi_2.$$

$$<2|E_1'>=\frac{e_{12}^*}{E_1-E_2}<1|E_1'>$$

$$\Rightarrow \quad \psi_1' = \psi_1 + \frac{e_{12}^*}{E_1 - E_2}\psi_2 + \cdots,$$

Όμοια δείχνουμε ότι:

$$\psi_E = \langle 1|E\rangle \psi_1 + \langle 2|E\rangle \psi_2.$$

$$<2|E_2'>=-\frac{e_{12}}{E_1-E_2}<1|E_2'>$$

$$\Rightarrow \quad \psi_2' = \psi_2 - \frac{e_{12}}{E_1 - E_2}\psi_1 + \cdots.$$

+7c

Μικρή πρόσμιξη από άλλη αδιατάραχτη ιδιοκατάσταση

+7d: Δοκιμάστε να βρείτε την ακριβή λύση.

Για να είναι ακριβή τα αναπτύγματα θα πρέπει:

$$|e_{12}| \ll |E_1 - E_2|.$$

που συνήθως ισχύει αν $H_0 \gg H_1$.

Γενίκευση:Θεωρία Διαταραχών

Έστω αδιατάρακτο σύστημα: $H_0\,\psi_n = E_n\,\psi_n,$ n=1,…,N

Ορθοκανονικότητα: $\langle m|n\rangle = \delta_{nm},$

Διαταραγμένο σύστημα: $(H_0 + H_1)\,\psi_E = E\,\psi_E.$

Προβάλλοντας στην αδιατάραχτη βάση |m> έχουμε: $\langle m|H_0 + H_1|E\rangle = E\,\langle m|E\rangle,$

Αναπτύσσουμε την Ψ_E στην αδιατάραχτη βάση |m> και έχουμε: $\psi_E = \sum_k \langle k|E\rangle\,\psi_k,$

$$\sum_k |k\rangle\langle k| = \sum_k \psi_k \langle k| = \hat{1}$$

k=1,…,N

$$\left.\begin{aligned} &\langle m|H_0 + H_1|E\rangle = E\,\langle m|E\rangle, \\ &\psi_E = \sum_k \langle k|E\rangle\,\psi_k, \end{aligned}\right\} \Rightarrow (E_m - E + e_{mm})\,\langle m|E\rangle + \sum_{k\neq m} e_{mk}\,\langle k|E\rangle = 0,$$

+7e

όπου $e_{mk} = \langle m|H_1|k\rangle.$

Γενίκευση:Θεωρία Διαταραχών

Δείξαμε ότι:

$$\langle m|H_0 + H_1|E\rangle = E\,\langle m|E\rangle,$$

$$\psi_E = \sum_k \langle k|E\rangle\,\psi_k,$$

$$\Rightarrow \quad (E_m - E + e_{mm})\,\langle m|E\rangle + \sum_{k\neq m} e_{mk}\,\langle k|E\rangle = 0,$$

όπου $e_{mk} = \langle m|H_1|k\rangle.$

Επιλέγουμε ως μικρή παράμετρο αναπτύγματος την (τις): $\frac{e_{mk}}{E_m - E_k} \sim \mathcal{O}(\epsilon) \qquad \epsilon \ll 1$

$$\frac{e_{mm}}{E_m} \sim \mathcal{O}(\epsilon)$$

m=1,…,N

Αναζητούμε διαταραγμένες ιδιοτιμές της μορφής: $E = E_n + \mathcal{O}(\epsilon),$

Αναζητούμε διαταραγμένες ιδιοκαταστάσεις με αναπτυγματα της μορφής:

$$\langle n|E\rangle = 1, \qquad \langle m|E\rangle = \mathcal{O}(\epsilon)$$

όπου $\psi_E = \sum_k \langle k|E\rangle\,\psi_k,$

Ανάπτυγμα Διαταραγμένων ιδιοκαταστάσεων

Αναζητούμε διαταραγμένες ιδιοτιμές της μορφής: $E = E_n + \mathcal{O}(\epsilon),$

Αναζητούμε διαταραγμένες ιδιοκαταστάσεις με αναπτυγματα της μορφής:

$$\langle n|E\rangle = 1, \qquad \langle m|E\rangle = \mathcal{O}(\epsilon)$$

όπου $\psi_E = \sum_k \langle k|E\rangle\, \psi_k,$

δεν επιβιώνει σε O(ε)

επιβιώνει μόνο ο όρος με k=n (O(1)×O(ε))

$$(E_m - E + e_{mm})\,\langle m|E\rangle + \sum_{k\neq m} e_{mk}\,\langle k|E\rangle = 0,$$

$$E = E_n + \mathcal{O}(\epsilon),$$

$$\langle m|E\rangle = \mathcal{O}(\epsilon)$$

$\mathcal{O}(\epsilon)$

m≠n

$$(E_m - E_n)\,\langle m|E\rangle + e_{mn} \simeq 0,$$

+7f

$$\langle m|E\rangle \simeq -\frac{e_{mn}}{E_m - E_n}.$$

+7g

$$(E_m - E + e_{mm})\,\langle m|E\rangle + \sum_{k\neq m} e_{mk}\,\langle k|E\rangle = 0,$$

$$\langle m|E\rangle \simeq -\frac{e_{mn}}{E_m - E_n}.$$

m=n

$\mathcal{O}(\epsilon^2)$

$$(E_n - E + e_{nn}) - \sum_{k\neq n} \frac{|e_{nk}|^2}{E_k - E_n} \simeq 0.$$

Διαταραγμένες Ιδιοενέργειες και Ιδιοκαταστάσεις

$$(E_m - E + e_{mm})\langle m|E\rangle + \sum_{k\neq m} e_{mk}\langle k|E\rangle = 0,$$

$$\langle m|E\rangle \simeq -\frac{e_{mn}}{E_m - E_n}.$$

m=n

$\mathcal{O}(\epsilon^2)$

$$(E_n - E + e_{nn}) - \sum_{k\neq n}\frac{|e_{nk}|^2}{E_k - E_n} \simeq 0.$$

$E=E_n'$

Διαταραγμένη ιδιοτιμή n: $$E_n' = E_n + e_{nn} + \sum_{k\neq n}\frac{|e_{nk}|^2}{E_n - E_k} + \mathcal{O}(\epsilon^3),$$

$$\psi_E = \sum_k \langle k|E\rangle \psi_k,$$

$$\langle m|E\rangle \simeq -\frac{e_{mn}}{E_m - E_n}.$$

$\Psi_E=\Psi_n'$

$$\psi_n' = \psi_n + \sum_{k\neq n}\frac{e_{kn}}{E_n - E_k}\psi_k + \mathcal{O}(\epsilon^2).$$

+7h

Αποδεικνύεται η διατήρηση ορθοκανονικότητας σε Ο(ε) (το διαταραγμένο σύστημα ιδιοκαταστάσεων είναι και αυτό ορθοκανονικό: $\langle\Psi'_m|\Psi'_n\rangle=\delta_{mn}+O(\varepsilon^2)$)

++7i

Εφαρμογή: Το φαινόμενο Stark

Αδιατάραχτο σύστημα: Άτομο υδρογόνου

$$H_0 = \frac{p^2}{2\,m_e} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\, r},$$

Διαταραχή: Εξωτερικό ηλεκτρικό πεδίο

$$H_1 = e\,|\mathbf{E}|\,z.$$

Αγνοούμε το spin αφού η H_1 μετατίθεται με το spin (τα spinors δεν αλλάζουν)

Αδιατάραχτες ιδιοενέργειες και ιδιοκαταστάσεις: E_{nlm} , Ψ_{nlm}

Διαταραγμένη ιδιοτιμή nlm:

$$E'_n = E_n + e_{nn} + \sum_{k\neq n} \frac{|e_{nk}|^2}{E_n - E_k} + \mathcal{O}(\epsilon^3), \Longrightarrow$$

$$\Delta E_{nlm} = e\,|\mathbf{E}|\,\langle n, l, m|z|n, l, m\rangle$$

+7j

$$+e^2\,|\mathbf{E}|^2 \sum_{n',l',m'\neq n,l,m} \frac{|\langle n, l, m|z|n', l', m'\rangle|^2}{E_{nlm} - E_{n'l'm'}}.$$

Φαινόμενο Stark

Κανόνες Επιλογής

$$\Delta E_{nlm} = e\,|\mathbf{E}|\,\langle n,l,m|z|n,l,m\rangle + e^2\,|\mathbf{E}|^2 \sum_{n',l',m' \neq n,l,m} \frac{|\langle n,l,m|z|n',l',m'\rangle|^2}{E_{nlm} - E_{n'l'm'}}.$$

Φαινόμενο Stark

Ε:Ποιοι όροι του αθροίσματος μηδενίζονται ('κανόνες επιλογής – selection rules);

$$\left.\begin{aligned} L_z &= x\,p_y - y\,p_x, \\ [x_i, x_j] &= 0, \\ [p_i, p_j] &= 0, \\ [x_i, p_j] &= i\,\hbar\,\delta_{ij}. \end{aligned}\right\} \Rightarrow [L_z, z] = 0. \Rightarrow$$

$$\begin{aligned} \langle n,l,m|[L_z,z]|n',l',m'\rangle &= \langle n,l,m|L_z\,z - z\,L_z|n',l',m'\rangle \\ &= \hbar\,(m-m')\,\langle n,l,m|z|n',l',m'\rangle = 0, \end{aligned}$$

$$\Downarrow$$

$$m' = m.$$

κανόνας επιλογής για m

Κανόνες Επιλογής για l

$$\Delta E_{nlm} = e\,|\mathbf{E}|\,\langle n,l,m|z|n,l,m\rangle + e^2\,|\mathbf{E}|^2 \sum_{n',l',m' \neq n,l,m} \frac{|\langle n,l,m|z|n',l',m'\rangle|^2}{E_{nlm} - E_{n'l'm'}}.$$

E:Ποιοι όροι του αθροίσματος μηδενίζονται (‘κανόνες επιλογής – selection rules);

Αποδεικνύεται ότι:

$$[L^2,[L^2,z]] = 2\,\hbar^2\,(L^2 z + z\,L^2).$$

++7k

$$[L^2,[L^2,z]] = 2\,\hbar^2\,(L^2 z + z\,L^2). \Longrightarrow L^4 z - 2\,L^2 z\,L^2 + z\,L^4 - 2\,\hbar^2\,(L^2 z + z\,L^2) = 0.$$

$$\Downarrow$$

$$\langle n,l,m|L^4 z - 2\,L^2 z\,L^2 + z\,L^4 - 2\,\hbar^2\,(L^2 z + z\,L^2)|n',l',m\rangle = 0.$$

$$\Downarrow$$

$$\begin{aligned}\{l^2\,(l+1)^2 - 2\,l\,(l+1)\,l'\,(l'+1) + l'^2\,(l'+1)^2 \\ -2\,l\,(l+1) - 2\,l'\,(l'+1)\}\,\langle n,l,m|z|n',l',m\rangle &= 0,\end{aligned}$$

$$\Downarrow$$

$$(l+l'+2)\,(l+l')\,(l-l'+1)\,(l-l'-1)\,\langle n,l,m|z|n',l',m\rangle = 0.$$

++7l

Κανόνες Επιλογής για l

$$\Delta E_{nlm} = e\,|\mathbf{E}|\,\langle n,l,m|z|n,l,m\rangle + e^2\,|\mathbf{E}|^2 \sum_{n',l',m'\neq n,l,m} \frac{|\langle n,l,m|z|n',l',m'\rangle|^2}{E_{nlm}-E_{n'l'm'}}.$$

Ε:Ποιοι όροι του αθροίσματος μηδενίζονται ('κανόνες επιλογής – selection rules);

$$(l+l'+2)\,(l+l')\,(l-l'+1)\,(l-l'-1)\,\langle n,l,m|z|n',l',m\rangle = 0.$$

$$l = l' = 0$$

$$l' = l \pm 1.$$

$l = l' = 0 \Rightarrow$ Ψ_{nlm} σφαιρικά συμμετρική $\Rightarrow \langle n,l,m|z|n',l',m\rangle = 0,$ +7m

Άρα για να μη μηδενίζονται οι οι όροι θα πρέπει $l' = l \pm 1. \qquad m' = m.$ +7n

Άρα η μετατόπιση των διαταραγμένων σταθμών μέχρι 2η τάξη είναι

$$\Delta E_{nlm} = e^2\,|\mathbf{E}|^2 \sum_{n',l'=l\pm 1} \frac{|\langle n,l,m|z|n',l',m\rangle|^2}{E_{nlm}-E_{n'l'm}}.$$

Ηλεκτρική Πολωσιμότητα (Polarizability)

Άρα η μετατόπιση των διαταραγμένων σταθμών μέχρι 2η τάξη είναι

$$\Delta E_{nlm} = e^2 \, |\mathbf{E}|^2 \sum_{n',l'=l\pm1} \frac{|\langle n, l, m|z|n', l', m\rangle|^2}{E_{nlm} - E_{n'l'm}}.$$

Όροι γραμμικοί με το |E| μηδενίζονται λόγω κανόνων επιλογής (δευτεροβάθμιο (quadratic) φαινόμενο Stark)

Ηλεκτρική πολωσιμότητα α (ορισμός):

$$\Delta E = -\frac{1}{2}\, \alpha \, |\mathbf{E}|^2.$$

+7ο

$$\alpha_{nlm} = 2\, e^2 \sum_{n',l'=l\pm1} \frac{|\langle n, l, m|z|n', l', m\rangle|^2}{E_{n'l'm} - E_{nlm}}.$$

Πρόβλημα με τον Εκφυλισμό

Όταν υπάρχει εκφυλισμός με την αρχική (αδιατάρακτη) κατάσταση τότε η ενεργειακή μετατόπισή της απειρίζεται:

$$\Delta E_{nlm} = e^2\,|\mathbf{E}|^2 \sum_{n',l'=l\pm1} \frac{|\langle n,l,m|z|n',l',m\rangle|^2}{E_{nlm}-E_{n'l'm}}. \xrightarrow[E_{nlm}=E_{n'l'm'}]{} \infty$$

Η μόνη μη εκφυλισμένη κατάσταση για το υδρογόνο είναι η n=1 (l=0,m=0)

Άρα η παραπάνω μέθοδος διαταραχών (μη εκφυλισμένη) μπορεί να εφαρμοστεί για το υδρογόνο αλλά μόνο στην θεμελιώδη κατάσταση.

$$\alpha_{nlm} = 2\,e^2 \sum_{n',l'=l\pm1} \frac{|\langle n,l,m|z|n',l',m\rangle|^2}{E_{n'l'm}-E_{nlm}}. \Rightarrow \alpha = 2\,e^2 \sum_{n>1} \frac{|\langle 1,0,0|z|n,1,0\rangle|^2}{E_{n00}-E_{100}}.$$

όπου

$$E_{n00} = -\frac{e^2}{8\pi\,\epsilon_0\,a_0\,n^2}, \qquad a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0\,\hbar^2}{m_e\,e^2}$$

Υπολογισμός Πολωσιμότητας Θεμελιώδους Κατάστασης

$$\alpha = 2\, e^2 \sum_{n>1} \frac{|\langle 1,0,0|z|n,1,0\rangle|^2}{E_{n00} - E_{100}}.$$

$$E_{n00} = -\frac{e^2}{8\pi\, \epsilon_0\, a_0\, n^2},$$

$$a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0\, \hbar^2}{m_e\, e^2}$$

ακτίνα Bohr

Ενεργειακές Διαφορές

$$E_{n00} - E_{100} \geq E_{200} - E_{100} = \frac{3}{4}\, \frac{e^2}{8\pi\, \epsilon_0\, a_0},$$

$$\alpha = 2\, e^2 \sum_{n>1} \frac{|\langle 1,0,0|z|n,1,0\rangle|^2}{E_{n00} - E_{100}}.$$

$$E_{n00} - E_{100} \geq E_{200} - E_{100} = \frac{3}{4}\, \frac{e^2}{8\pi\, \epsilon_0\, a_0},$$

$$\Rightarrow \quad \alpha < \frac{16}{3}\, 4\pi\epsilon_0\, a_0 \sum_{n>1} |\langle 1,0,0|z|n,1,0\rangle|^2.$$

Υπολογισμός Πολωσιμότητας Θεμελιώδους Κατάστασης

$$\alpha < \frac{16}{3} 4\pi\epsilon_0\, a_0 \sum_{n>1} |\langle 1,0,0|z|n,1,0\rangle|^2.$$

Υπολογισμός αθροίσματος:

$$\begin{aligned}\sum_{n>1} |\langle 1,0,0|z|n,1,0\rangle|^2 &= \sum_{n>1} \langle 1,0,0|z|n,1,0\rangle\,\langle n,1,0|z|1,0,0\rangle \\ &= \sum_{n',l',m'} \langle 1,0,0|z|n',l',m'\rangle\,\langle n',l',m'|z|1,0,0\rangle \\ &= \langle 1,0,0|z^2|1,0,0\rangle = \frac{1}{3}\langle 1,0,0|r^2|1,0,0\rangle,\end{aligned}$$

Οι επιπλέον όροι είναι 0

$$\Rightarrow \sum_{n>1} |\langle 1,0,0|z|n,1,0\rangle|^2 = a_0^2.$$

Αναμενόμενη τιμή r^2:

$$\langle r^2\rangle = \frac{a_0^2\, n^2}{2}\,[5\,n^2 + 1 - 3\,l\,(l+1)], \Rightarrow \langle 1,0,0|r^2|1,0,0\rangle = 3\,a_0^2.$$

+7p

$$\alpha < \frac{16}{3} 4\pi\epsilon_0\, a_0 \sum_{n>1} |\langle 1,0,0|z|n,1,0\rangle|^2.$$

$$\sum_{n>1} |\langle 1,0,0|z|n,1,0\rangle|^2 = a_0^2.$$

$$\Rightarrow \alpha < \frac{16}{3} 4\pi\epsilon_0\, a_0^3 \simeq 5.3\; 4\pi\epsilon_0\, a_0^3.$$

Η ακριβής τιμή είναι 15% μικρότερη

Σύνοψη

Ο συμβολισμός Dirac γενικεύει και ενοποιεί τον συμβολισμό κυματοσυναρτήσεων και spinors στην κβαντομηχανική

Με χρήση της θεωρίας διαταραχών μπορούμε να βρούμε προσεγγιστικά σωστές, ιδιοκαταστάσεις και ιδιοτιμές της $H=H_0+H_1$ όταν $H_1 \ll H_0$ με την προϋπόθεση ότι είναι γνωστές οι ιδιοκαταστάσεις/ιδιοτιμές της αδιατάραχτης Χαμιλτονιανής H_0.

Η απλούστερη μορφή της θεωρίας διαταραχών είναι αυτή που αναφέρεται σε χρονοανεξάρτητα δυναμικά και σε αδιατάραχτες καταστάσεις που δεν είναι ενεργειακά εκφυλισμένες.

Το φαινόμενο Stark αποτελεί μια εφαρμογή της μη εκφυλισμένης θεωρίας διαταραχών σε άτομο υδρογόνου που διαταράσσεται από ασθενές ομογενές πεδίο. Μπορεί να υπολογιστεί κατά προσέγγιση η ενεργειακή μετατόπιση της θεμελιώδους κατάστασης καθώς και η αναπτυσσόμενη ηλεκτρική πολωσιμότητα.

Άσκηση 1

Η δυναμική σωματίου καθορίζεται από το δυναμικό:

$$V(x) = \begin{cases} \infty, & \text{για } x < 0 \quad \text{και} \quad x > 2a \\ bx, & \text{για } 0 \leq x \leq 2a \end{cases}$$

για μικρό b βρείτε τις διαταραγμένες ενέργειες του σωματίου

Οι αδιατάραχτες ιδιοτιμές ενέργειας είναι (b=0):

$$E_n^{(0)} = n^2 \frac{\pi^2 \hbar^2}{8ma^2} \qquad \text{και} \qquad \Psi_n^{(0)} = \sqrt{\frac{1}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{2a}\right)$$

Η πρώτης τάξης διαταραχή δίνει:

$$E_n^{(1)} = \langle \Psi_n^{(0)}, V \Psi_n^{(0)} \rangle = b \frac{1}{a} \int_0^{2a} x \sin^2\left(\frac{n\pi x}{2a}\right) \mathrm{d}x$$

$$= \frac{b}{a} \frac{4a^2}{n^2\pi^2} \int_0^{n\pi} y \sin^2 y \mathrm{d}y = ba$$

αφού

$$\int y \sin^2 y \mathrm{d}y = \frac{1}{4}\left(\sin^2 y - 2y \sin y \cos y\right) + \frac{y^2}{4}$$

+7q

Άσκηση 2

Η δυναμική σωματίου καθορίζεται από το δυναμικό:

$$V(x) = \begin{cases} \infty, & \text{για } x < 0 \\ \frac{1}{2}kx^2 + bx^3, & \text{για } x > 0 \end{cases}$$

για μικρό b βρείτε τις διαταραγμένες ενέργειες του σωματίου

Το αδιατάραχτο δυναμικό (αρμονικός ταλαντωτής) είναι της μορφής:

$$V_0(x) = \frac{1}{2}kx^2 = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$$

Με ιδιοκαταστάσεις: $\Psi_n(x) = C\frac{1}{\sqrt{2^n n!}}H_n(\xi)\mathrm{e}^{-\xi^2/2}$ όπου $C = \sqrt[4]{\frac{m\omega}{\pi\hbar}}$ $\xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x = \sqrt{a}x$

και ιδιοενέργειες: $E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)$

Οι ιδιοκαταστάσεις που ικανοποιούν τις οριακές συνθήκες και μηδενίζονται για x=0 αντιστοιχούν σε περιττό n (n=2ν+1).

Άσκηση 2

Με ιδιοκαταστάσεις: $\Psi_n(x) = C\frac{1}{\sqrt{2^n n!}}H_n(\xi)\mathrm{e}^{-\xi^2/2}$ όπου $C = \sqrt[4]{\frac{m\omega}{\pi\hbar}}$ $\xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x = \sqrt{a}x$

και ιδιοενέργειες: $E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)$

Οι ιδιοκαταστάσεις που ικανοποιούν τις οριακές συνθήκες και μηδενίζονται για x=0 αντιστοιχούν σε περιττό n (n=2v+1).

Η ενεργειακή μετατόπιση σε πρώτη τάξη θεωρίας διαταραχών είναι:

+7r

$$\Delta E_1 = \int_0^\infty \Psi_1(x)U(x)\Psi_1(x)\mathrm{d}x = U_{11} = \frac{4}{2}\sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}}\frac{m\omega}{\hbar}b\int_0^\infty x^5\mathrm{e}^{-ax^2}\mathrm{d}x \quad (1)$$

Από πίνακες ολοκληρωμάτων βρίσκουμε: $\int_0^\infty x^k\mathrm{e}^{-ax^2}\mathrm{d}x = \frac{\Gamma\left(\frac{k+1}{2}\right)}{2a^{(k+1)/2}}$

Άρα $$\int_0^\infty x^5\mathrm{e}^{-ax^2/2}\mathrm{d}x = \frac{\Gamma(6/2)}{2a^{6/2}} = \frac{\Gamma(3)}{2a^3} = \frac{2!}{2a^3} = \frac{1}{a^3} \quad (2)$$

(1), (2) $$\Rightarrow \Delta E_1 = 2b\sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}}\frac{m\omega}{\hbar}\left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^3 = \frac{b}{\sqrt{\pi}}\left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^{3/2}$$

Άσκηση 3

Αρμονικός ταλαντωτής βρίσκεται σε ομογενές ηλεκτρικό πεδίο και έχει Χαμιλτονιανή:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}kx^2 - qFx$$

Συγκρίνετε την ακριβή λύση του προβλήματος ιδιοτιμών με την προσεγγιστική θεωρίας διαταραχών.

Ακριβής λύση:

Με συμπλήρωση του τετραγώνου παίρνουμε: $\frac{1}{2}kx^2 - qFx = \frac{k}{2}\left(x^2 - \frac{2qF}{k}x\right) = \frac{k}{2}\left(\left(x - \frac{qF}{k}\right)^2 - \left(\frac{qF}{k}\right)^2\right)$

Ορίζουμε: $\xi = x - \frac{qF}{k}$

Άρα η εξίσωση Schrodinger γίνεται: $\hat{H}\Phi(\xi) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{d\xi^2} + \frac{1}{2}k\xi^2 + \frac{(qF)^2}{2k}\right)\Phi(\xi) = E\Phi(\xi)$

$$\Downarrow$$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{d\xi^2} + \frac{1}{2}k\xi^2\right)\Phi(\xi) = \left(E + \frac{(qF)^2}{2k}\right)\Phi(\xi)$$

Άσκηση 3

Άρα η εξίσωση Schrodinger γίνεται:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{d\xi^2}+\frac{1}{2}k\xi^2\right)\Phi(\xi)=\left(E+\frac{(qF)^2}{2k}\right)\Phi(\xi)$$

Αρμονικός Ταλαντωτής

Ιδιοκαταστάσεις: $\Phi_n(\xi)=N_n H_n(\alpha^{1/2}\xi)e^{-\alpha\xi^2}$ $\quad \alpha=\left(\frac{km}{\hbar^2}\right)^{1/2}$

Μετατοπισμένες στον άξονα των x (με κέντρο qF/k) $\quad \xi=x-\frac{qF}{k}$

Ιδιοτιμές: $E_n=h\nu(n+\frac{1}{2})-(qF)^2/2k$

Μετατοπισμένες κατά $-(qF)^2/2k$

Θεωρία Διαταραχών:

$$E'_n=E_n+e_{nn}+\sum_{k\neq n}\frac{|e_{nk}|^2}{E_n-E_k}+\mathcal{O}(\epsilon^3), \longrightarrow E_n^{(2)}=\sum_{p\neq n}^{\infty}\frac{|\langle p|-qFx|n\rangle|^2}{h\nu(n-p)}=\frac{(qF)^2}{h\nu}\sum_{p\neq n}^{\infty}\frac{(x)_{pn}^2}{(n-p)}$$

$$x\sim\alpha^{+}+\alpha \qquad p=n\pm 1$$

$$E_n^{(2)}=\frac{(qF)^2}{h\nu}\left(\frac{(x)_{n,n-1}^2}{1}+\frac{(x)_{n.n+1}^2}{-1}\right)$$

Άσκηση 3

$$E_n^{(2)} = \frac{(qF)^2}{h\nu}\left(\frac{(x)_{n,n-1}^2}{1} + \frac{(x)_{n.n+1}^2}{-1}\right)$$

$$x \sim \alpha^+ + \alpha \longrightarrow (x)_{n,n-1}^2 = \frac{n}{2\alpha} \;\;\&\;\; (x)_{n,n+1}^2 = \frac{n+1}{2\alpha}$$

+7s

$$\Rightarrow E_n^{(2)} = -\frac{(qF)^2}{2k}$$

+7t

που αποδίδει πλήρως το ακριβές αποτέλεσμα

$$E_n = h\nu(n + 1/2) - \frac{(qF)^2}{2k}$$

Για τις ιδιοκαταστάσεις έχουμε:

$$\psi_n' = \psi_n + \sum_{k \neq n} \frac{e_{kn}}{E_n - E_k}\psi_k + \mathcal{O}(\epsilon^2).$$

$$\Big\Downarrow \; E_n = h\nu(n + 1/2) - \frac{(qF)^2}{2k}$$

$$\Phi_n^{(1)} = \frac{-qF}{h\nu}\sum_{p \neq n}\frac{(x)_{np}\,\Phi_p^0}{n-p} = \frac{-qF}{h\nu}\left(\frac{(x)_{n,n-1}\,\Phi_{n-1}^0}{1} + \frac{(x)_{n,n+1}\,\Phi_{n+1}^0}{-1}\right) = \frac{-qF}{\sqrt{2\alpha}h\nu}\left(\sqrt{n}\Phi_{n-1}^0 - \sqrt{n+1}\Phi_{n+1}^0\right)$$

Άσκηση 3

$$\Phi_n^{(1)} = \frac{-qF}{h\nu}\sum_{p\neq n}\frac{(x)_{np}\,\Phi_p^0}{n-p} = \frac{-qF}{h\nu}\left(\frac{(x)_{n,n-1}\,\Phi_{n-1}^0}{1}+\frac{(x)_{n,n+1}\,\Phi_{n+1}^0}{-1}\right) = \frac{-qF}{\sqrt{2\alpha}h\nu}\left(\sqrt{n}\Phi_{n-1}^0-\sqrt{n+1}\Phi_{n+1}^0\right)$$

Άσκηση: Συγκρίνετε την ακριβή ιδιοκατάσταση με αυτήν που προκύπτει από την διόρθωση πρώτης τάξης. Είναι η διαφορά αναμενόμενη;

$$\Phi_0(x) = \left(\alpha/\pi\right)^{1/4} e^{-\alpha\left(x-qF/k\right)^2/2}$$

$$\Phi_0^{(1)} = \frac{+qF}{\sqrt{2\alpha}h\nu}\Phi_1^0$$

Άσκηση 4

Ο σχετικιστικός αρμονικός ταλαντωτής έχει δυναμικό της μορφής: $V(x) = \frac{1}{2} m\omega^2 x^2$.

και κινητική ενέργεια: $T = E - mc^2 = \sqrt{m^2c^4 + p^2c^2} - mc^2 \approx \frac{p^2}{2m} - \frac{p^4}{8m^3c^2}$ +7u

Θεωρόντας τον σχετικιστικό όρο ~p^4 σαν διαταραχή βρείτε την ενεργειακή διόρθωση της θεμελιώδους κατάστασης

Η διαταραχή της Χαμιλτονιανής γράφεται ως: $\mathcal{H}_1 = \frac{-p^4}{8m^3c^2}$

Συναρτήσει των τελεστών α⁺ και α αυτή γράφεται ως:

$$\mathcal{H}_1 = \frac{-1}{8m^3c^2} i^4 \left(\frac{m\omega\hbar}{2}\right)^2 (a^\dagger - a)^4$$

$$= -\frac{\omega^2\hbar^2}{32mc^2} \left(a^{\dagger 2} - a^\dagger a - a a^\dagger + a^2\right)^2$$

Για τον μεταθέτη των τελεστών α⁺ και α έχουμε: $[a,\, a^\dagger] = 1 \quad \Rightarrow \quad a a^\dagger = \mathbb{I} + a^\dagger a$

Αναπτύσσουμε την παρένθεση της διαταραχής:

$$\mathcal{H}_1 = -\frac{\omega^2\hbar^2}{32mc^2} \left(a^{\dagger 2} + a^2 - \mathbb{I}\right) \left(a^{\dagger 2} + a^2 - \mathbb{I}\right)$$

$$= -\frac{\omega^2\hbar^2}{32mc^2} \left(a^{\dagger 4} + a^{\dagger 2} a^2 - a^{\dagger^2} + a^2 a^{\dagger 2} + a^4 - a^2 - a^{\dagger 2} - a^2 + \mathbb{I}\right)$$

Άσκηση 4

Αναπτύσσουμε την παρένθεση της διαταραχής:

$$\mathcal{H}_1 = -\frac{\omega^2\hbar^2}{32mc^2}\left(a^{\dagger 2} + a^2 - \mathbb{I}\right)\left(a^{\dagger 2} + a^2 - \mathbb{I}\right)$$

$$= -\frac{\omega^2\hbar^2}{32mc^2}\left(a^{\dagger 4} + a^{\dagger 2}a^2 - a^{\dagger^2} + a^2 a^{\dagger 2} + a^4 - a^2 - a^{\dagger 2} - a^2 + \mathbb{I}\right)$$

Για την διαταραχή 1ης τάξης οι όροι που συνεισφέρουν είναι:

$$\mathcal{H}_1 = -\frac{\omega^2\hbar^2}{32mc^2}\left(a^{\dagger 2}a^2 + a^2 a^{\dagger 2} + \mathbb{I}\right)$$

Για την διαταραχή 1ης τάξης έχουμε:

$$E_n^2 = -\frac{\omega^2\hbar^2}{32mc^2}\langle n|a^{\dagger 2}a^2 + a^2 a^{\dagger 2} + \mathbb{I}|n\rangle$$

$$= -\frac{\omega^2\hbar^2}{32mc^2}\left(n(n-1) + (n+1)(n+2) + 1\right)$$

+7u

Για την θεμελιώδη κατάσταση (n=0) παίρνουμε:

$$\boxed{E_0^1 = -\frac{3\omega^2\hbar^2}{32mc^2}}$$

Άλυτες Ασκήσεις

1. Εφαρμόστε θεωρία διαταραχών στην Χαμιλτονιανή

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}kx^2 + \lambda x^3 = \hat{H}^0 + \lambda x^3$$

και βρείτε τις διαταραγμένες ιδιοκαταστάσεις και ιδιοτιμές στην ελάχιστη μη μηδενική τάξη.

2. Θεώρείστε σωμάτιο μάζας m και φορτίου e σε δυναμικό της μορφής:

$$V(r) = \begin{cases} -\frac{e^2}{r} & 0 \leq r \leq R \\ -\frac{e^2}{r}\exp(-\lambda(r-R)) & R < r < \infty \end{cases}$$

Για μικρό λ βρείτε την διαταραχή 1ης ταξης στην θεμελιώδη ενέργεια του υδρογόνου

3. Βρείτε την ενεργειακή διαταραχή 1ης τάξης για σωμάτιο σε κουτί απείρου βάθους που διαταράσσεται από ομογενές σταθερό ηλεκτρικό πεδίο

$$\mathcal{H}_1 = \frac{V_0}{L}x$$

Άλυτες Ασκήσεις

4. Έστω αδιατάρακτη Χαμιλτονιανή της μορφής $H_0=h_0\,\sigma_z$ (σωμάτιο με spin σε μαγνητικό πεδίο στην διεύθυνση z χωρίς τροχιακή στροφορμή). Έστω διαταραχή της μορφής $H_1=h_1\,\sigma_x$ όπου σ_x και σ_y οι πίνακες του Pauli. Με ακριβή διαγονοποίηση της Χαμιλτονιανής βρείτε τις ακριβείς ιδιοενέργειες. Μετά εφαρμόστε θεωρία διαταραχών και βρείτε τις διαταραγμένες (δύο) ιδιοενέργειες μέχρι την 2^{η} τάξη.

4. Αποδείξτε τις σχέσεις που δεν αποδείξαμε στην διάλεξη

$$<2|E_2'>=-\frac{e_{12}}{E_1-E_2}<1|E_2'>$$

$\Psi'_m|\Psi'_n>=\delta_{mn}+O(\varepsilon^2))$

$$[L^2,[L^2,z]]=2\,\hbar^2\,(L^2\,z+z\,L^2).$$

$$\begin{aligned}\{l^2\,(l+1)^2-2\,l\,(l+1)\,l'\,(l'+1)+l'^2\,(l'+1)^2\\ -2\,l\,(l+1)-2\,l'\,(l'+1)\}\,\langle n,l,m|z|n',l',m\rangle &= 0,\end{aligned}$$

$$\Downarrow$$

$$(l+l'+2)\,(l+l')\,(l-l'+1)\,(l-l'-1)\,\langle n,l,m|z|n',l',m\rangle=0.$$

$$\Delta E=-\frac{1}{2}\,\alpha\,|\mathbf{E}|^2.$$