Θεωρία Διαταραχών ΙΙ: Εκφυλισμένες Καταστάσεις

Δομή Διάλεξης

Εκφυλισμένη Θεωρία Διαταραχών: Γενική Μέθοδος για την αντιμετώπιση των απειρισμών λόγω εκφυλισμού

Εφαρμογή σε διεγερμένη κατάσταση υδρογόνου σε ομογενές μαγνητικό πεδίο (γραμμικό φαινόμενο Stark)

Φαινόμενο Stark σε διεγερμένη κατάσταση (n>1)

Αδιατάραχτη Χαμιλτονιανή:

$$H_0 \psi_{nlm} = E_n \psi_{nlm},$$

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

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

$$\xrightarrow[l' = l \pm 1.]{m' = m.}$$

$$E_{nl}' = E_n + e_{nlnl} + \sum_{n', l' = l \pm 1} \frac{|e_{n'l'nl}|^2}{E_n - E_{n'}},$$

$$\psi_{nlm}' = \psi_{nlm} + \sum_{n', l' = l \pm 1} \frac{e_{n'l'nl}}{E_n - E_{n'}} \psi_{n'l'm},$$

όπου $e_{n'l'nl} = \langle n', l', m | H_1 | n, l, m \rangle$

Πρόβλημα εκφυλισμού (n>1):

$$E_{nl}' = E_n + e_{nlnl} + \sum_{n', l' = l \pm 1} \frac{|e_{n'l'nl}|^2}{E_n - E_{n'}}, \xrightarrow{n'=n} \infty$$

Για n=1 (l=0) πρέπει l'=1 και άρα n'>1. άρα δεν υπάρχει απειρισμός.

Άρση προβλήματος απειρισμού άν:

$$\langle n, l', m | H_1 | n, l, m \rangle = \lambda_{nl}\, \delta_{ll'}.$$

Όλοι οι άπειροι όροι μηδενίζονται

Φαινόμενο Stark σε διεγερμένη κατάσταση (n>1)

Πρόβλημα εκφυλισμού (n>1):

$$E'_{nl} = E_n + e_{nlnl} + \sum_{n',l'=l\pm 1} \frac{|e_{n'l'nl}|^2}{E_n - E_{n'}},$$

$\xrightarrow{n'=n}$ ∞

Για n=1 (l=0) πρέπει l'=1 και άρα n'>1. άρα δεν υπάρχει απειρισμός.

Άρση προβλήματος απειρισμού άν: $\langle n, l', m|H_1|n, l, m\rangle = \lambda_{nl}\,\delta_{ll'}.$

Όλοι οι άπειροι όροι μηδενίζονται

Επανορισμός των αδιατάρακτων καταστάσεων του εκφυλισμένου υπόχωρου E_n ώστε να ισχύει:

$$\langle n, l', m|H_1|n, l, m\rangle = \lambda_{nl}\,\delta_{ll'}.$$

Έστω N_n ο βαθμός εκφυλισμού του υπόχωρου E_n.
Ορίζουμε N_n νέες καταστάσεις ως γραμμικούς συνδυασμούς στον υπόχωρο E_n:

$$\psi^{(1)}_{nlm} = \sum_{k=1,N_n} \langle n, k, m|n, l^{(1)}, m\rangle\, \psi_{nkm}.$$

$\boxed{\psi^{(1)}_{nlm} \equiv |n, l^{(1)}, m>}$ $\boxed{\psi_{nlm} \equiv |n, l\ , m>}$

Απαιτούμε οι νέες καταστάσεις να είναι: α. Ιδιοκαταστάσεις της H_1, β. Ορθοκανονικές

Τότε θα ισχύει: $\langle n, l'^{(1)}, m|H_1|n, l^{(1)}, m\rangle = \lambda_{nl}\,\delta_{ll'}.$

Κατασκευή Νέων Εκφυλισμένων Καταστάσεων Συναρτήσει των Παλαιών

Απαιτούμε οι νέες καταστάσεις να είναι: α. Ιδιοκαταστάσεις της H_1, β. Ορθοκανονικές

$$H_1\,\psi^{(1)}_{nlm} = \lambda_{nl}\,\psi^{(1)}_{nlm}.$$

$$\langle n, l'^{(1)}, m | n, l^{(1)}, m\rangle = \delta_{ll'}.$$

$$\Rightarrow \quad \langle n, l'^{(1)}, m | H_1 | n, l^{(1)}, m\rangle = \lambda_{nl}\,\delta_{ll'}.$$

Κατασκευή Νέων Καταστάσεων:

$$\boxed{\psi^{(1)}_{nlm} = \langle n, l', m | n, l^{(1)}, m\rangle | n, l', m\rangle}$$

$$\boxed{\psi^{(1)}_{nlm} \equiv | n, l^{(1)}, m\rangle}$$

$$H_1\,\psi^{(1)}_{nlm} = \lambda_{nl}\,\psi^{(1)}_{nlm}.$$

$$\sum_{l=1,N_n} |n, l, m\rangle\langle n, l, m| \equiv 1,$$

$$\Rightarrow \quad \sum_{l''=1,N_n} \langle n, l', m | H_1 | n, l'', m\rangle\,\langle n, l'', m | n, l^{(1)}, m\rangle = \lambda_{nl}\,\langle n, l', m | n, l^{(1)}, m\rangle.$$

+8a

$$\mathbf{U}\,\mathbf{x} = \lambda\,\mathbf{x},$$

όπου $U_{jk} = \langle n, j, m | H_1 | n, k, m\rangle.$ $N_n \times N_n$

Παλιές καταστάσεις.
Πληρότητα στον υπόχωρο E_n.

Αν η ορίζουσα της U είναι μη μηδενική μπορούμε να βρούμε τα ζητούμενα N_n ιδιοδιανύσματα και τις αντίστοιχες ιδιοτιμές.

Κατασκευή Νέων Εκφυλισμένων Καταστάσεων Συναρτήσει των Παλαιών

$$\sum_{l''=1,N_n} \langle n, l', m|H_1|n, l'', m\rangle \langle n, l'', m|n, l^{(1)}, m\rangle = \lambda_{nl} \langle n, l', m|n, l^{(1)}, m\rangle. \Rightarrow \quad \mathbf{U}\,\mathbf{x} = \lambda\,\mathbf{x},$$

όπου $U_{jk} = \langle n, j, m|H_1|n, k, m\rangle.$ $N_n \times N_n$

Επίλυση προβλήματος ιδιοτιμών: $(\mathbf{x}_{nl})_k = \langle n, k, m|n, l^{(1)}, m\rangle,$ k=1,…,N_n

Συνιστώσες νέων καταστάσεων στην βάση των παλαιών ιδιοκαταστάσεων

$$E'_{nl} = E_n + e_{nlnl} + \sum_{n',l'=l\pm1} \frac{|e_{n'l'nl}|^2}{E_n - E_{n'}},$$

$e_{n'l'nl} = \langle n', l', m|H_1|n, l, m\rangle.$

$\langle n, l'^{(1)}, m|H_1|n, l^{(1)}, m\rangle = \lambda_{nl}\,\delta_{ll'}.$

$$E'_{nl} = E_n + \lambda_{nl} + \sum_{n'\neq n,l'=l\pm1} \frac{|e_{n'l'nl}|^2}{E_n - E_{n'}},$$

+8b

Αφού για n=n' όλοι οι όροι με l ≠ l' μηδενίζονται.

Διαταραγμένες Ιδιοενέργειες και Ιδιοκαταστάσεις

Παλιά βάση αφού τα στοιχεία πίνακα της νέας βάσης που θα έμπαιναν μηδενίζονται.

$$E'_{nl} = E_n + e_{nlnl} + \sum_{n',l'=l\pm1} \frac{|e_{n'l'nl}|^2}{E_n - E_{n'}}, \xrightarrow[\langle n, l'^{(1)}, m|H_1|n, l^{(1)}, m\rangle = \lambda_{nl}\,\delta_{ll'}.]{e_{n'l'nl} = \langle n', l', m|H_1|n, l, m\rangle.} E'_{nl} = E_n + \lambda_{nl} + \sum_{n'\neq n,l'=l\pm1} \frac{|e_{n'l'nl}|^2}{E_n - E_{n'}},$$

Αφού για n=n′ όλοι οι όροι με l ≠ l′ μηδενίζονται.

$$\psi'_{nlm} = \psi_{nlm} + \sum_{n',l'=l\pm1} \frac{e_{n'l'nl}}{E_n - E_{n'}}\,\psi_{n'l'm}, \xrightarrow[\langle n, l'^{(1)}, m|H_1|n, l^{(1)}, m\rangle = \lambda_{nl}\,\delta_{ll'}.]{e_{n'l'nl} = \langle n', l', m|H_1|n, l, m\rangle} \psi^{(1)\prime}_{nlm} = \psi^{(1)}_{nlm} + \sum_{n'\neq n,l'=l\pm1} \frac{e_{n'l'nl}}{E_n - E_{n'}}\,\psi_{n'l'm}.$$

+8c

Αφού για n=n′ όλοι οι όροι με l ≠ l′ μηδενίζονται.

Ουσιαστικά δηλ. διατηρούμε την παλιά βάση παντού εκτός από τον E_n υπόχωρο όπου την αντικαθιστουμε με την νέα βάση ώστε μηδενίσουμε τα στοιχεία πίνακα που δίνουν τους απειρισμούς.

Εφαρμογή: Το γραμμικό φαινόμενο Stark

Διαταραχή στα n=2 ενεργειακά επίπεδα του ατόμου του υδρογόνου λόγω εξωτερικού ομογενούς πεδίου.

Με την μη εκφυλισμένη θεωρία διαταραχών θα παίρναμε απειρισμούς λόγω τετραπλού εκφυλισμού (n=2, 2s= (l=0, m=0) , 2p=(l=1,m=-1,0,1)).

Αδιατάραχτη ενέργεια → $E_{n00} = -\frac{e^2}{8\pi\,\epsilon_0\,a_0\,n^2}$, → $E_{200} = -e^2/(32\pi\,\epsilon_0\,a_0)$.

Κανόνες Επιλογής (αδιατάραχτη βάση) ⇒ $\left[\begin{array}{l} m' = m, \\ l' = l \pm 1 \end{array}\right]$ ⇒

- Σύζευξη των Ψ_{200} , Ψ_{210} μεταξύ τους
- Χωρίς σύζευξη των Ψ_{21-1} , Ψ_{211} με οποιαδήποτε αδιατάραχτη κατάσταση του ίδιου n.

Εφαρμογή μη εκφυλισμένης θεωρίας διαταραχών γι αυτές τις καταστάσεις ($\Delta E \sim \mathbf{E}^2$)

Εφαρμογή εκφυλισμένης θεωρίας διαταραχών για τις Ψ_{200} , Ψ_{210}

Επίλυση προβλήματος ιδιοτιμών: ⇒ $\mathbf{U}\,\mathbf{x} = \lambda\,\mathbf{x}$, όπου $\mathbf{U} = e\,|\mathbf{E}| \begin{pmatrix} 0 & \langle 2,0,0|z|2,1,0\rangle \\ \langle 2,1,0|z|2,0,0\rangle & 0 \end{pmatrix}$,

+8d

$$R_{2,0}(r) = \frac{2}{(2\,a_0)^{3/2}}\left(1 - \frac{r}{2\,a_0}\right)\exp\left(-\frac{r}{2\,a_0}\right),$$

$$R_{2,1}(r) = \frac{1}{\sqrt{3}\,(2\,a_0)^{3/2}}\,\frac{r}{a_0}\,\exp\left(-\frac{r}{2\,a_0}\right),$$

⇒ $\langle 2,0,0|z|2,1,0\rangle = \langle 2,1,0|z|2,0,0\rangle = 3\,a_0.$

++8e

Εφαρμογή: Το γραμμικό φαινόμενο Stark

$$\mathbf{U} = e\,|\mathbf{E}| \begin{pmatrix} 0 & \langle 2,0,0|z|2,1,0\rangle \\ \langle 2,1,0|z|2,0,0\rangle & 0 \end{pmatrix},$$

$$\langle 2,0,0|z|2,1,0\rangle = \langle 2,1,0|z|2,0,0\rangle = 3\,a_0.$$

$$\mathbf{U}\,\mathbf{x} = \lambda\,\mathbf{x},$$

+8f

$$\lambda_1 = 3\,e\,a_0\,|\mathbf{E}| \qquad \mathbf{x}_1 = \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} \end{pmatrix},$$

$$\lambda_2 = -3\,e\,a_0\,|\mathbf{E}|. \qquad \mathbf{x}_2 = \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ -1/\sqrt{2} \end{pmatrix}$$

$$\psi_1 = \frac{\psi_{200} + \psi_{210}}{\sqrt{2}},$$

$$\psi_2 = \frac{\psi_{200} - \psi_{210}}{\sqrt{2}}.$$

Ταυτόχρονες ορθοκανονικές ιδιοκαταστάσεις των H_0, H_1.

Σε αντίθεση με τις άλλες δύο εκφυλισμένες ιδιοκαταστάσεις (Ψ_{21-1} , Ψ_{211}) οι Ψ_{200} , Ψ_{210} εμφανίζουν μη μηδενική διαταραχή ενέργειας ακόμα και $1^{η}$ τάξη (γραμμικό φαινόμενο Stark). Άρα η επίπτωση του πεδίου είναι σημαντικά μεγαλύτερη γι αυτές τις καταστάσεις:

$$\Delta E_1 = +3\,e\,a_0\,|\mathbf{E}|,$$

$$\Delta E_2 = -3\,e\,a_0\,|\mathbf{E}|.$$

+8g

Σύνοψη

Διεγερμένες καταστάσεις του υδρογόνου σε ομογενές ηλεκτρικό πεδίο δεν μπορούν να μελετηθούν με την μη εκφυλισμένη θεωρία διαταραχών λόγω απειρισμών που προκύπτουν από την σύζευξη εκφυλισμένων καταστάσεων μέσω της διαταραχής.

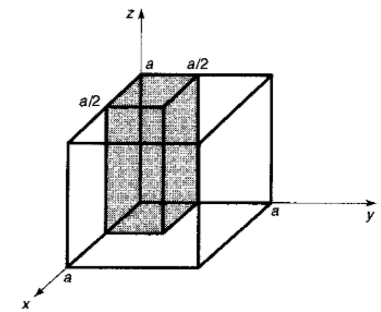
Στην εκφυλισμένη θεωρία διαταραχών κάνουμε αλλαγή βάσης στον εκφυλισμένο υπόχωρο ώστε να μηδενίσουμε τα στοιχεία πίνακα της διαταραχής που υπάρχουν στους όρους που απειρίζονται (μη διαγώνια στοιχεία).

Το φαινόμενο Stark για την πρώτη διεγερμένη κατάσταση του υδρογόνου (n=2) απαιτεί για την μελέτη του εκφυλισμένη θεωρία διαταραχών και οδηγεί σε διαταραχή της ενέργειας που μεταβάλλεται γραμμικά με το ομογενές ηλεκτρικό πεδίο της διαταραχής.

Άσκηση 1

Θεωρείστε 3-διάστατο κουτί δυναμικού απείρου βάθους με δυναμικό της μορφής:

$$V(x, y, z) = \begin{cases} 0, & 0 < x < a, 0 < y < a, \quad 0 < z < a; \\ \infty & \text{Σε κάθε άλλη περιοχή} \end{cases}$$



με διαταραχή της μορφής λH':

$$H' = \begin{cases} V_0, & 0 < x < a/2 \quad 0 < y < a/2; \\ 0, & \text{Σε κάθε άλλη περιοχή} \end{cases}$$

Βρείτε τις διαταραγμένες ιδιοτιμές και οι 'νέες' ιδιοκαταστάσεις σε 1η τάξη ως προς λ της θεμελιώδους και της 1ης διεγερμένης κατάστασης

Οι αδιατάραχτες ιδιοκαταστάσεις είναι:

$$\psi^0_{n_x n_y n_z}(x, y, z) = \left(\frac{2}{a}\right)^{3/2} \sin\left(\frac{n_x \pi}{a} x\right) \sin\left(\frac{n_y \pi}{a} y\right) \sin\left(\frac{n_z \pi}{a} z\right)$$

n_x, n_y, n_z θετικοί ακέραιοι

Οι αντίστοιχες ιδιοενέργειες είναι:

$$E^0_{n_x n_y n_z} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}(n_x^2 + n_y^2 + n_z^2).$$

+8h

Άσκηση 1

Οι αδιατάραχτες ιδιοκαταστάσεις είναι:

$$\psi^0_{n_x n_y n_z}(x, y, z) = \left(\frac{2}{a}\right)^{3/2} \sin\left(\frac{n_x\pi}{a}x\right) \sin\left(\frac{n_y\pi}{a}y\right) \sin\left(\frac{n_z\pi}{a}z\right)$$

n_x, n_y, n_z θετικοί ακέραιοι

Οι αντίστοιχες ιδιοενέργειες είναι: $$E^0_{n_x n_y n_z} = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}(n_x^2 + n_y^2 + n_z^2).$$

Η βασική κατάσταση Ψ_{111} είναι μη εκφυλισμένη με ενέργεια: $$E_0^0 \equiv 3\frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$$

Άρα η 'παλιά' ιδιοκατάσταση μένει ως έχει

Η 1η διεγερμένη κατάσταση είναι τριπλά εκφυλισμένη $$\psi_a \equiv \psi_{112}, \quad \psi_b \equiv \psi_{121}, \quad \psi_c \equiv \psi_{211}.$$

με ενέργεια: $$E_1^0 \equiv 3\frac{\pi^2\hbar^2}{ma^2}$$

Άρα πρέπει να βρούμε 'νέες' ιδιοκαταστάσεις

Η διαταραχή 1ης τάξης είναι λE_0^1 όπου

$$E_0^1 = \langle\psi_{111}|H'|\psi_{111}\rangle = \left(\frac{2}{a}\right)^3 V_0 \int_0^{a/2} \sin^2\left(\frac{\pi}{a}x\right) dx \int_0^{a/2} \sin^2\left(\frac{\pi}{a}y\right) dy \int_0^{a} \sin^2\left(\frac{\pi}{a}z\right) dz = \frac{1}{4}V_0$$

Άσκηση 1

Η 1η διεγερμένη κατάσταση είναι τριπλά εκφυλισμένη Ψ_{211} Ψ_{121} Ψ_{112}

με ενέργεια: $E_1^0 \equiv 3\frac{\pi^2\hbar^2}{ma^2}$

Για την 1η διεγερμένη κατάσταση θα εφαρμόσουμε εκφυλισμένη θεωρία διαταραχών

Κατασκευάζουμε των πίνακα διαταραχής W (3x3) για τριπλό εκφυλισμό που αντιστοιχεί στο (2x2) πίνακα U που είδαμε στην διάλεξη και αντιστοιχούσε σε διπλό εκφυλισμό.

Έχουμε: $W_{ij} = \langle\psi_i^0|H'|\psi_j^0\rangle$ $\longleftrightarrow$ $\mathbf{U}\mathbf{x} = \lambda\mathbf{x},$

Για τα διαγώνια στοιχεία παίρνουμε: $W_{aa} = W_{bb} = W_{cc} = \frac{1}{4}V_0.$

Ενώ για τα μη διαγώνια στοιχεία: $\psi_a \equiv \psi_{112}, \quad \psi_b \equiv \psi_{121}, \quad \psi_c \equiv \psi_{211}.$

$$W_{ab} = \left(\frac{2}{a}\right)^3 V_0 \int_0^{a/2} \sin^2\left(\frac{\pi}{a}x\right) dx \int_0^{a/2} \sin\left(\frac{\pi}{a}y\right) \sin\left(\frac{2\pi}{a}y\right) dy \int_0^a \sin\left(\frac{2\pi}{a}z\right) \sin\left(\frac{\pi}{a}z\right) dz.$$

Άσκηση 1

Για τα διαγώνια στοιχεία παίρνουμε:

$$W_{aa} = W_{bb} = W_{cc} = \frac{1}{4}V_0.$$

Ενώ για τα μη διαγώνια στοιχεία:

$$W_{ab} = \left(\frac{2}{a}\right)^3 V_0 \int_0^{a/2} \sin^2\left(\frac{\pi}{a}x\right) dx \int_0^{a/2} \sin\left(\frac{\pi}{a}y\right)\sin\left(\frac{2\pi}{a}y\right) dy \int_0^{a} \sin\left(\frac{2\pi}{a}z\right)\sin\left(\frac{\pi}{a}z\right) dz.$$

Το ολοκλήρωμα στο z δίνει 0 και εμφανίζεται και στο W_{ac}. Άρα:

$$W_{ab} = W_{ac} = 0.$$

+8i

Ακόμα:

$$W_{bc} = \left(\frac{2}{a}\right)^3 V_0 \int_0^{a/2} \sin\left(\frac{\pi}{a}x\right)\sin\left(\frac{2\pi}{a}x\right) dx \int_0^{a/2} \sin\left(\frac{2\pi}{a}y\right)\sin\left(\frac{\pi}{a}y\right) dy \int_0^{a} \sin^2\left(\frac{\pi}{a}z\right) dz = \frac{16}{9\pi^2}V_0$$

+8j

Άρα:

$$W = \frac{V_0}{4}\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & \kappa \\ 0 & \kappa & 1 \end{pmatrix}$$

όπου

$$\kappa \equiv (8/3\pi)^2 \approx 0.7205$$

Όπως κάναμε για την U, θα λύσουμε το πρόβλημα ιδιοτιμών/ιδιοδιανυσμάτων για την W

Άσκηση 1

Άρα: $$W = \frac{V_0}{4}\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & \kappa \\ 0 & \kappa & 1 \end{pmatrix}$$ όπου $\kappa \equiv (8/3\pi)^2 \approx 0.7205$

Όπως κάναμε για την U, θα λύσουμε το πρόβλημα ιδιοτιμών/ιδιοδιανυσμάτων για την W

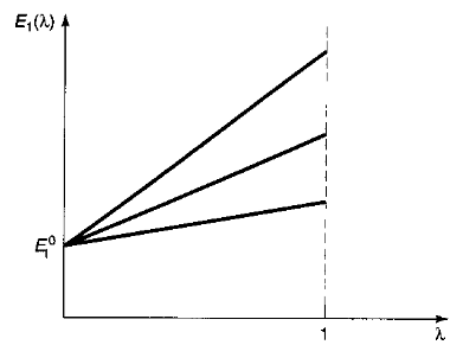
Η χαρακτηριστική εξίσωση για τις ιδιοτιμές είναι: $$(1-w)^3 - \kappa^2(1-w) = 0,$$ +8j

με λύσεις: $$w_1 = 1; \quad w_2 = 1+\kappa \approx 1.7205; \quad w_3 = 1-\kappa \approx 0.2795.$$ +8k

Άρα οι διαταραγμένες ιδιοενέργειες της 1ης διεγερμένης κατάστασης σε 1η τάξη στο λ είναι:

$$E_1(\lambda) = \begin{cases} E_1^0 + \lambda V_0/4, \\ E_1^0 + \lambda(1+\kappa)V_0/4, \\ E_1^0 + \lambda(1-\kappa)V_0/4, \end{cases}$$

Ο τριπλός εκφυλισμός έχει σπάσει πράγμα που δεν θα φαινόταν αν είχαμε απλά εφαρμόσει μη εκφυλισμένη θεωρία διαταραχών!



Άσκηση 1

Άρα:

$$W = \frac{V_0}{4}\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & \kappa \\ 0 & \kappa & 1 \end{pmatrix}$$

όπου

$$\kappa \equiv (8/3\pi)^2 \approx 0.7205$$

Για τις διαταραγμένες 'νεες' ιδιοκαταστάσεις έχουμε:

$$\psi^0 = \alpha\psi_a + \beta\psi_b + \gamma\psi_c, \quad \xleftrightarrow[\mathbf{U}\mathbf{x} = \lambda\mathbf{x},]{} \quad \begin{cases} (\mathbf{x}_{nl})_k = \langle n, k, m | n, l^{(1)}, m \rangle, \\ \boxed{\psi_{nlm}^{(1)} = <n, l', m \,|\, n, l^{(1)}, m> | n, l', m>} \end{cases}$$

Τα α, β, γ είναι οι συνιστώσες των ιδιοδιανυσμάτων της W:

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & \kappa \\ 0 & \kappa & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \\ \gamma \end{pmatrix} = w\begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \\ \gamma \end{pmatrix}$$

$$w = 1 \Rightarrow \alpha = 1, \beta = \gamma = 0;$$

$$w = 1 \pm \kappa \Rightarrow \alpha = 0, \beta = \pm\gamma = 1/\sqrt{2}.$$

+8l

Άρα η νέα βάση στον υπόχωρο 112 είναι:

$$\psi^0 = \begin{cases} \psi_a, \\ (\psi_b + \psi_c)/\sqrt{2}, \\ (\psi_b - \psi_c)/\sqrt{2}. \end{cases}$$

+8m

Άσκηση 2

Σωμάτιο βρίσκεται σε μονοδιάστατο πηγάδι δυναμικού απείρου βάθους με 0<x<a και διαταραχή της μορφής

$$W(x) = a\omega_0\delta(x - a/2)$$

Βρείτε τις διαταραγμένες ιδιοενέργειες σε 1η τάξη.

Οι αδιατάραχτες ιδιοενέργειες και ιδιοκαταστάσεις είναι:

$$\psi_n^0(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{\pi n x}{a}\right) \qquad E_n^{(0)} = \frac{\pi^2\hbar^2 n^2}{2ma^2}$$

Άρα:

$$\Delta E_n^{(1)} = \langle\psi_n^{(0)}|W|\psi_n^{(0)}\rangle = \frac{2}{a}\int_0^a \sin^2\left(\frac{\pi n x}{a}\right) a\omega_0\delta\left(x - \frac{a}{2}\right)dx = \begin{cases} 2\omega_0 & \text{n περιττό} \\ 0 & \text{n άρτιο} \end{cases}$$

+8n

Άσκηση 3

Δίνεται Χαμιλτονιανή της μορφής (C<<1 σταθερά)

$$\tilde{H} = \tilde{H}^0 + \tilde{H}^1$$

$$\tilde{H} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 3 & 0 \\ 0 & 0 & -2 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & C & 0 \\ C & 0 & 0 \\ 0 & 0 & C \end{pmatrix}$$

Βρείτε τις ιδιοτιμές ακριβώς και σε 2^η τάξη θεωρίας διαταραχών. Συγκρίνετε τα αποτελέσματα

Οι αδιατάραχτες ιδιοκαταστάσεις είναι προφανώς: $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$

Οι αντίστοιχες αδιατάραχτες ιδιοτιμές είναι προφανώς: $1, 3, -2$

Οι ακριβείς ιδιοτιμές της διαταραγμένης Χαμιλτονιανής βρίσκονται με λύση της χαρακτηριστικής εξίσωσης:

$$0 = \begin{vmatrix} 1-\lambda & C & 0 \\ C & 3-\lambda & 0 \\ 0 & 0 & C-2-\lambda \end{vmatrix} = (C-2-\lambda)\begin{vmatrix} 1-\lambda & C \\ C & 3-\lambda \end{vmatrix} = (C-2-\lambda)\,[\lambda^2 - 4\lambda + 3 - C^2]$$

ως: $\lambda = C-2,\ 2 \pm \sqrt{1+C^2}.$

+8ο

Άσκηση 3

Δίνεται Χαμιλτονιανή της μορφής (C<<1 σταθερά)

$$\tilde{H} = \tilde{H}^0 + \tilde{H}^1$$

$$\tilde{H} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 3 & 0 \\ 0 & 0 & -2 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & C & 0 \\ C & 0 & 0 \\ 0 & 0 & C \end{pmatrix}$$

Βρείτε τις ιδιοτιμές ακριβώς και σε 2η τάξη θεωρίας διαταραχών. Συγκρίνετε τα αποτελέσματα

Οι διαταραγμένες ιδιοενέργειες προκύπτουν ως:

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

$$E'_{nl} = E_n + e_{nlnl} + \sum_{n',l'=l\pm 1} \frac{|e_{n'l'nl}|^2}{E_n - E_{n'}}, \longrightarrow (\tilde{E})_i = (\tilde{H}^0)_{ii} + (\tilde{H}^1)_{ii} + \sum_{k \neq i} \frac{H^1_{ik} H^1_{ki}}{E_i^{(0)} - E_k^{(0)}}$$

Προφανώς έχουμε:

$$(H^0)_{ii} = 1,\ 3, -2.$$

Ακόμα, χρησιμοποιώντας τα αδιατάραχτα ιδιοδιανύσματα βρίσκουμε :

$$H^1_{11} = 0,\ H^1_{22} = 0,\ H^1_{33} = C$$

Για την 2η τάξη έχουμε (δεν υπάρχει εκφυλισμός):

$$E_1^{(2)} = \frac{H^1_{12} H^1_{21}}{E_1^{(0)} - E_2^{(0)}} + \frac{H^1_{13} H^1_{31}}{E_1^{(0)} - E_3^{(0)}} = \frac{C^2}{-2} + \frac{0}{3} = -\frac{C^2}{2}$$

+8p

Άσκηση 3

Δίνεται Χαμιλτονιανή της μορφής (C<<1 σταθερά)

$$\tilde{H} = \tilde{H}^0 + \tilde{H}^1$$

$$\tilde{H} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 3 & 0 \\ 0 & 0 & -2 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & C & 0 \\ C & 0 & 0 \\ 0 & 0 & C \end{pmatrix}$$

Βρείτε τις ιδιοτιμές ακριβώς και σε 2η τάξη θεωρίας διαταραχών. Συγκρίνετε τα αποτελέσματα

Για την 2η τάξη έχουμε:

$$E_1^{(2)} = \frac{H_{12}^1 H_{21}^1}{E_1^{(0)} - E_2^{(0)}} + \frac{H_{13}^1 H_{31}^1}{E_1^{(0)} - E_3^{(0)}} = \frac{C^2}{-2} + \frac{0}{3} = -\frac{C^2}{2}$$

$$E_2^{(2)} = \frac{H_{21}^1 H_{12}^1}{E_2^{(0)} - E_1^{(0)}} + \frac{H_{23}^1 H_{32}^1}{E_2^{(0)} - E_3^{(0)}} = \frac{C^2}{3-1} + \frac{0 \cdot 0}{3} = \frac{C^2}{2}$$

+8q

$$E_3^{(2)} = \frac{H_{31}^1 H_{13}^1}{E_3^{(0)} - E_1^{(0)}} + \frac{H_{32}^1 H_{23}^1}{E_3^{(0)} - E_2^{(0)}} = 0$$

+8r

Επομένως:

$$(\tilde{E})_i = (\tilde{H}^0)_{ii} + (\tilde{H}^1)_{ii} + \sum_{k \neq i} \frac{H_{ik}^1 H_{ki}^1}{E_i^{(0)} - E_k^{(0)}}$$

$$H_{11}^1 = 0, \quad H_{22}^1 = 0,$$

$$H_{33}^1 = C$$

$$E_1 = 1 - \frac{C^2}{2}$$

$$E_2 = 3 + \frac{C^2}{2}$$

$$E_3 = -2 + C$$

Άσκηση 3

Δίνεται Χαμιλτονιανή της μορφής (C<<1 σταθερά)

$$\tilde{H} = \tilde{H}^0 + \tilde{H}^1$$

$$\tilde{H} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 3 & 0 \\ 0 & 0 & -2 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & C & 0 \\ C & 0 & 0 \\ 0 & 0 & C \end{pmatrix}$$

Βρείτε τις ιδιοτιμές ακριβώς και σε 2^{η} τάξη θεωρίας διαταραχών. Συγκρίνετε τα αποτελέσματα

Επομένως:

$$(\tilde{E})_i = (\tilde{H}^0)_{ii} + (\tilde{H}^1)_{ii} + \sum_{k \neq i} \frac{H^1_{ik} H^1_{ki}}{E_i^{(0)} - E_k^{(0)}}$$

$$H^1_{11} = 0, \; H^1_{22} = 0,$$

$$H^1_{33} = C$$

$$\Rightarrow$$

$$E_1 = 1 - \frac{C^2}{2}$$

$$E_2 = 3 + \frac{C^2}{2}$$

$$E_3 = -2 + C$$

Αναπτύσσοντας τις ακριβείς ιδιοτιμές $\lambda = C - 2, \; 2 \pm \sqrt{1 + C^2}$ βρίσκουμε:

$$2 \pm \sqrt{1 + C^2} = 2 \pm \left(1 + \frac{1}{2}C^2 + \cdots\right) = 3 + \frac{1}{2}C^2, \;\; 1 - \frac{1}{2}C^2$$

σε συμφωνία με το αποτέλεσμα των διαταραχών. Για την E_3 η διαταραχή δίνει το ακριβές αποτέλεσμα!

Άσκηση 4

Ηλεκτρόνιο βρίσκεται σε 3-διάστατο κουτί απείρου βάθους και έχει ενέργεια $3\pi^2\hbar^2/ma^2$.

Ηλεκτρικό πεδίο στην διεύθυνση z προκαλεί διαταραχή $W = e\varepsilon z$.

Βρείτε την διόρθωση 1ης τάξης στην ενέργεια

Η γενική μορφή της αδιατάρακτης ενέργειας είναι: $\pi^2\hbar^2 n^2/2ma^2$;

όπου $n^2 = n_x^2 + n_y^2 + n_z^2$

Για $n^2 = 6$ ⇒ $n_x^2 + n_y^2 + n_z^2 = 6.$

Άρα $(n_x, n_y, n_z) = (1, 1, 2)$ $(n_x, n_y, n_z) = (1, 2, 1)$ $(n_x, n_y, n_z) = (2, 1, 1)$

Οι αντίστοιχες ιδιοκαταστάσεις είναι:

$$\phi_{112} = \sqrt{\frac{8}{a^3}}\sin\left(\frac{\pi x}{a}\right)\sin\left(\frac{\pi y}{a}\right)\sin\left(\frac{2\pi z}{a}\right)$$

$$\phi_{121} = \sqrt{\frac{8}{a^3}}\sin\left(\frac{\pi x}{a}\right)\sin\left(\frac{2\pi y}{a}\right)\sin\left(\frac{\pi z}{a}\right)$$

$$\phi_{211} = \sqrt{\frac{8}{a^3}}\sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right)\sin\left(\frac{\pi y}{a}\right)\sin\left(\frac{\pi z}{a}\right)$$

Άσκηση 4

Οι αντίστοιχες ιδιοκαταστάσεις είναι:

$$\phi_{112} = \sqrt{\frac{8}{a^3}}\sin\left(\frac{\pi x}{a}\right)\sin\left(\frac{\pi y}{a}\right)\sin\left(\frac{2\pi z}{a}\right)$$

$$\phi_{121} = \sqrt{\frac{8}{a^3}}\sin\left(\frac{\pi x}{a}\right)\sin\left(\frac{2\pi y}{a}\right)\sin\left(\frac{\pi z}{a}\right)$$

$$\phi_{211} = \sqrt{\frac{8}{a^3}}\sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right)\sin\left(\frac{\pi y}{a}\right)\sin\left(\frac{\pi z}{a}\right)$$

Ισχύει ότι: $\langle 2,1,1|z|2,1,1\rangle = \langle 1,2,1|z|1,2,1\rangle = \langle 1,1,2|z|1,1,2\rangle$

και: $\langle 2,1,1|z|2,1,1\rangle = \frac{8}{a^3}\int_0^a \sin^2\left(\frac{2\pi x}{a}\right)dx\int_0^a \sin^2\left(\frac{\pi y}{a}\right)dy\int_0^a z\sin^2\left(\frac{\pi z}{a}\right)dz = \frac{2}{a}\int_0^a z\sin^2\left(\frac{\pi z}{a}\right)dz = \frac{a}{2}$

Για τα μη διαγώνια στοιχεία εύκολα βρίσκουμε ότι:

+8s

$$\langle 2,1,1|z|1,2,1\rangle = \langle 2,1,1|z|1,1,2\rangle = \langle 1,2,1|z|1,1,2\rangle = 0.$$

Επομένως: $E = \frac{3\pi^2\hbar^2}{ma^2} + \frac{e\varepsilon a}{2}$

Άλυτες Ασκήσεις

1. Θεωρείστε 2-διάστατο κουτί δυναμικού απείρου βάθους με διαταραχή της μορφής της μορφής $C\,x\,y$ όπου C σταθερά. Βρείτε τις ιδιοκαταστάσεις και ιδιοτιμές του αδιατάρακτου συστήματος. Βρείτε την διαταραγμένη κυματοσυνάρτηση της $1^{ης}$ διαταραγμένης κατάστασης

2. Λύστε την λυμένη άσκηση 2 χωρίς προσέγγιση και συγκρίνετε με το προσεγγιστικό αποτέλεσμα. Υπόδειξη: Από την δ συνάρτηση προκύπτει οριακή συνθήκη ασυνέχειας για την $1^{η}$ παράγωγο της κυματοσυνάρτησης αλλά η ίδια η κυματοσυνάρτηση παραμένει συνεχής παντού.

3. Έστω η Χαμιλτονιανή:

$$H = \begin{cases} \dfrac{p^2}{2m} + \dfrac{m\omega^2 r^2}{2} & 0 \le r \le a \\ \dfrac{p^2}{2m} & r > a \end{cases}$$

Θεωρείστε αδιατάραχτο σύστημα τον αρμονικό ταλαντωτή και βρείτε την ενεργειακή διαταραχή $1^{ης}$ τάξης

Άλυτες Ασκήσεις

4. Έστω η Χαμιλτονιανή

$$H = \begin{pmatrix} E_1 & 0 & a \\ 0 & E_1 & b \\ a^* & b^* & E_2 \end{pmatrix}$$

Εφαρμόστε εκφυλισμένη και μη εκφυλισμένη θεωρία διαταραχών για να λύσετε το πρόβλημα ιδιοτιμών σε 2^{η} τάξη. Συγκρίνετε με το ακριβές αποτέλεσμα της λύσης του προβλήματος ιδιοτιμών.

Άλυτες Ασκήσεις

5. Αποδείξτε τις σχέσεις που δεν αποδείξαμε στην διάλεξη

$$\lambda_1 = 3\,e\,a_0\,|\mathbf{E}| \qquad \mathbf{x}_1 = \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} \end{pmatrix},$$

$$\lambda_2 = -3\,e\,a_0\,|\mathbf{E}|. \qquad \mathbf{x}_2 = \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ -1/\sqrt{2} \end{pmatrix}$$

$$\langle 2,0,0|z|2,1,0\rangle = \langle 2,1,0|z|2,0,0\rangle = 3\,a_0.$$

$$W_{aa} = W_{bb} = W_{cc} = \frac{1}{4}V_0. \qquad W_{ab} = W_{ac} = 0.$$

$$W_{bc} = \left(\frac{2}{a}\right)^3 V_0 \int_0^{a/2} \sin\left(\frac{\pi}{a}x\right)\sin\left(\frac{2\pi}{a}x\right)dx \int_0^{a/2} \sin\left(\frac{2\pi}{a}y\right)\sin\left(\frac{\pi}{a}y\right)dy \int_0^{a} \sin^2\left(\frac{\pi}{a}z\right)dz = \frac{16}{9\pi^2}V_0$$

$$w_1 = 1; \quad w_2 = 1+\kappa \approx 1.7205; \quad w_3 = 1-\kappa \approx 0.2795.$$

Ο τριπλός εκφυλισμός έχει σπάσει πράγμα που δεν θα φαινόταν αν είχαμε απλά εφαρμόσει μη εκφυλισμένη θεωρία διαταραχών!

$$w = 1 \Rightarrow \alpha = 1, \beta = \gamma = 0;$$

$$w = 1 \pm \kappa \Rightarrow \alpha = 0, \beta = \pm\gamma = 1/\sqrt{2}.$$

$$\langle 2,1,1|z|2,1,1\rangle = \langle 1,2,1|z|1,2,1\rangle = \langle 1,1,2|z|1,1,2\rangle$$

$$\langle 2,1,1|z|2,1,1\rangle = \frac{8}{a^3}\int_0^a \sin^2\left(\frac{2\pi x}{a}\right)dx \int_0^a \sin^2\left(\frac{\pi y}{a}\right)dy \int_0^a z\sin^2\left(\frac{\pi z}{a}\right)dz = \frac{2}{a}\int_0^a z\sin^2\left(\frac{\pi z}{a}\right)dz = \frac{a}{2}$$

$$\langle 2,1,1|z|1,2,1\rangle = \langle 2,1,1|z|1,1,2\rangle = \langle 1,2,1|z|1,1,2\rangle = 0.$$

$$E_1^{(2)} = \frac{H^1_{12}H^1_{21}}{E_1^{(0)} - E_2^{(0)}} + \frac{H^1_{13}H^1_{31}}{E_1^{(0)} - E_3^{(0)}} = \frac{C^2}{-2} + \frac{0}{3} = -\frac{C^2}{2}$$

$$E_2^{(2)} = \frac{H^1_{21}H^1_{12}}{E_2^{(0)} - E_1^{(0)}} + \frac{H^1_{23}H^1_{32}}{E_2^{(0)} - E_3^{(0)}} = \frac{C^2}{3-1} + \frac{0\cdot 0}{3} = \frac{C^2}{2}$$

$$E_3^{(2)} = \frac{H^1_{31}H^1_{13}}{E_3^{(0)} - E_1^{(0)}} + \frac{H^1_{32}H^1_{23}}{E_3^{(0)} - E_2^{(0)}} = 0$$