Curs 12

Teoria perturbațiilor

Cele mai multe probleme nu pot fi rezolvate exact și din cauza asta se caută metode care permit găsirea unei aprox. ptr fct de undă.

Notăm cu H - Hamiltonianul sistemului.

$$H|\Psi_n\rangle = E_n|\Psi_n\rangle$$

În teoria perturbațiilor construim perturbații fct de undă și energiile asociate.

$$H = H_0 + H_p$$

H_0 - reprezintă Hamiltonianul ptr care cunoaștem fct de undă asociate și energiile.

H_p - reprezintă perturbația (este mic în comparație cu H_0)

$H_p = \lambda \cdot W$ $\qquad$ λ - parametru adimensional, $\lambda \ll 1$.

Ec. Schrödinger:

$$\boxed{(H_0 + \lambda \cdot W)|\Psi_n\rangle = E_n|\Psi_n\rangle}$$

Teoria perturbațiilor ptr sisteme cu stări nedegenerate

Ne limităm la cazul când H_0 are un spectru nedegenerat.

Notăm $E_n^{(0)}$ - valori energiilor libere
$|\phi_n\rangle$ - fct proprii ale lui H_0 } presupuse a fi cunoscute.

$$\boxed{H_0|\phi_n\rangle = E_n^{(0)}|\phi_n\rangle}$$ - ecuația Schrödinger poate fi rezolvată exact!

Teoria perturbațiilor presupune că valorile proprii E_n și funcțiile proprii $|\psi_n\rangle$, care dorim să le evaluăm pot fi dezvoltate în serie de puteri ale lui λ

$$E_n = E_n^{(0)} + \lambda \cdot E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \ldots$$

$$|\psi_n\rangle = |\phi_n\rangle + \lambda \underbrace{|\psi_n^{(1)}\rangle}_{\text{corecția de ordinul I}} + \lambda^2 \cdot \underbrace{|\psi_n^{(2)}\rangle}_{\text{corecția de ordinul II}} + \ldots$$

$$(H_0 + \lambda \cdot W)\left(|\phi_n\rangle + \lambda |\psi_n^{(1)}\rangle + \lambda^2 \cdot |\psi_n^{(2)}\rangle + \ldots\right) =$$

$$= \left(E_n^{(0)} + \lambda \cdot E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \ldots\right)\left(|\phi_n\rangle + \lambda |\psi_n^{(1)}\rangle + \lambda^2 \cdot |\psi_n^{(2)}\rangle + \ldots\right)$$

Rescriem ec. generală și identificăm puterile lui λ.

→ ordinul λ^0:

$$H_0 \cdot |\phi_n\rangle = E_n^{(0)} \cdot |\phi_n\rangle$$

→ ordinul λ^1:

$$H_0 \cdot |\psi_n^{(1)}\rangle + W \cdot |\phi_n\rangle = E_n^{(0)} \cdot |\psi_n^{(1)}\rangle + E_n^{(1)} \cdot |\phi_n\rangle$$

→ ordin λ^2:

$$H_0 \cdot |\psi_n^{(2)}\rangle + W \cdot |\psi_n^{(1)}\rangle = E_n^{(0)} |\psi_n^{(2)}\rangle + E_n^{(1)} |\psi_n^{(1)}\rangle + E_n^{(2)} |\phi_n\rangle$$

Dorim să evaluăm $E_n^{(1)}$, $E_n^{(2)}$, ..., $|\psi_n^{(1)}\rangle$, $|\psi_n^{(2)}\rangle$, ...

$|\psi_n\rangle$ și $|\phi_n\rangle$.

În teoria perturbațiilor se presupune că $|\psi_n\rangle$ și $|\phi_n\rangle$ sunt apropiate și

$$\langle \phi_n | \psi_n \rangle = 1. \quad \text{și}$$

$$\langle \phi_n | \psi_n^{(1)} \rangle = \langle \phi_n | \psi_n^{(2)} \rangle = \ldots = 0.$$

$$\langle\phi_n|\cdot\Big|\quad H_0\cdot|\psi_n^{(1)}\rangle + W\cdot|\phi_n\rangle = E_n^{(0)}\cdot|\psi_n^{(1)}\rangle + E_n^{(1)}\cdot|\phi_n\rangle$$

$$\langle\phi_n|W|\phi_n\rangle = E_n^{(1)}\cdot\underbrace{\langle\phi_n|\phi_n\rangle}_{=1}$$

$$\boxed{E_n^{(1)} = \langle\phi_n|W|\phi_n\rangle} \Rightarrow \boxed{E_n = E_n^{(0)} + \lambda\cdot\langle\phi_n|W|\phi_n\rangle}$$

Ptr găsirea lui $|\psi_n^{(1)}\rangle$ ne folosim de relația de completitudine a stărilor $|\phi_n\rangle$.

$$\sum_m |\phi_m\rangle\langle\phi_m| = \mathbb{1}.$$

$$|\psi_n^{(1)}\rangle = \mathbb{1}\cdot|\psi_n^{(1)}\rangle = \sum_m |\phi_m\rangle\langle\phi_m|\psi_n^{(1)}\rangle$$

$$= \sum_{m\neq n} \langle\phi_m|\psi_n^{(1)}\rangle\cdot|\phi_m\rangle.$$

$$|\psi_n^{(1)}\rangle = \sum_{m\neq n} \langle\phi_m|\psi_n^{(1)}\rangle\cdot|\phi_m\rangle$$

$$\overset{m\neq n}{\langle\phi_m|}\quad H_0\cdot|\psi_n^{(1)}\rangle + W\cdot|\phi_n\rangle = E_n^{(0)}\cdot|\psi_n^{(1)}\rangle + E_n^{(1)}\cdot|\phi_n\rangle$$

$$\langle\phi_m|H_0|\psi_n^{(1)}\rangle + \langle\phi_m|W|\phi_n\rangle = \langle\phi_m|E_n^{(0)}|\psi_n^{(1)}\rangle + \langle\phi_m|E_n^{(1)}|\phi_n\rangle$$

$$E_m^{(0)}\underline{\langle\phi_m|\psi_n^{(1)}\rangle} + \langle\phi_m|W|\phi_n\rangle = E_n^{(0)}\underline{\langle\phi_m|\psi_n^{(1)}\rangle} + E_n^{(1)}\cdot\underbrace{\langle\phi_m|\phi_n\rangle}_{=0\ (m\neq n)}$$

$$\langle\phi_m|\psi_n^{(1)}\rangle\cdot\left(E_n^{(0)} - E_m^{(0)}\right) = \langle\phi_m|W|\phi_n\rangle$$

$$\langle\phi_m|\psi_n^{(1)}\rangle = \frac{\langle\phi_m|W|\phi_n\rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}, \quad m\neq n$$

$$|\psi_n^{(1)}\rangle = \sum_{m\neq n}\frac{\langle\phi_m|W|\phi_n\rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}\cdot|\phi_m\rangle$$

$$|\psi_n\rangle = |\phi_n\rangle + \lambda \sum_{m \neq n} \frac{\langle \phi_m | w | \phi_n \rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \cdot |\phi_m\rangle$$

Corecția de ordinul I pentru funcția de undă și energie.

$$\boxed{|\psi_n\rangle = |\phi_n\rangle + \sum_{m \neq n} \frac{\langle \phi_m | H_p | \phi_n \rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \cdot |\phi_m\rangle + \ldots}$$

$$\boxed{E_n = E_n^{(0)} + \langle \phi_n | H_p | \phi_n \rangle + \ldots} \qquad H_p = \lambda \cdot W.$$

Corecția de ordinul II. $\Rightarrow$ det. $E_n^{(2)}$ și $|\psi_n^{(2)}\rangle, \ldots$

$$\langle \phi_n | \; \Big| \; H_0 \cdot |\psi_n^{(2)}\rangle + w \cdot |\psi_n^{(1)}\rangle = E_n^{(0)} |\psi_n^{(2)}\rangle + E_n^{(1)} |\psi_n^{(1)}\rangle + E_n^{(2)} |\phi_n\rangle$$

$$\langle \phi_n | H_0 | \psi_n^{(2)} \rangle + \langle \phi_n | w | \psi_n^{(1)} \rangle = E_n^{(0)} \underbrace{\langle \phi_n | \psi_n^{(2)} \rangle}_{=0} + E_n^{(1)} \underbrace{\langle \phi_n | \psi_n^{(1)} \rangle}_{=0} + E_n^{(2)} \underbrace{\langle \phi_n | \phi_n \rangle}_{=1}$$

$$E_n^{(0)} \underbrace{\langle \phi_n | \psi_n^{(2)} \rangle}_{=0} + \langle \phi_n | w | \psi_n^{(1)} \rangle = E_n^{(2)}$$

$$E_n^{(2)} = \langle \phi_n | w | \psi_n^{(1)} \rangle$$

$$E_n^{(2)} = \sum_{n \neq m} \frac{\langle \phi_m | H_p | \phi_n \rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \cdot \langle \phi_n | H_p | \phi_m \rangle$$

In ordinul II

$$\boxed{E_n = E_n^{(0)} + \langle \phi_n | H_p | \phi_n \rangle + \sum_{n \neq m} \frac{|\langle \phi_m | H_p | \phi_n \rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} + \ldots}$$

In continuare folosind același procedeu se pot evalua corecțiile la energie $E_n^{(3)}, \dots$ în ordin superior a teoriei perturbațiilor sau corecțiile la fct de undă $|\psi_n^{(2)}\rangle, \dots$

Exemple:

Oscilator armonic plasat într-un câmp electric

O particulă de masă m și sarcină q se mișcă într-un potențial armonic unidimensional $V(x) = \frac{1}{2} m\omega^2 x^2$ și se găsește într-un câmp electric extern cu intensitatea E.

a) Să se găsească valorile exacte ale energiilor

b) Folosind teoria perturbațiilor să se determine corecțiile energetice până în ordinul II.

a) Rezolvarea exactă.

$$F = q \cdot E \quad \Rightarrow \quad V(x) = -\int_{\infty}^{x} F \cdot dx = q E \cdot x.$$

$V(x) = q \cdot E \cdot x$ - reprezintă potențialul generat de un câmp electric extern.

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \partial_x^2 + \frac{1}{2} m\omega^2 X^2 + qEX$$

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \partial_x^2 + \frac{1}{2} m\omega^2 \left(X^2 + \frac{2qE \cdot X}{m\omega^2} \right)$$

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \partial_x^2 + \frac{1}{2} m\omega^2 \left(X^2 + \frac{2qE \cdot X}{m\omega^2} + \frac{q^2E^2}{m^2\omega^4} - \frac{q^2E^2}{m^2\omega^4} \right)$$

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \partial_x^2 + \frac{1}{2} m\omega^2 \left(X + \frac{qE}{m\omega^2} \right)^2 - \frac{1}{2} \cdot \frac{q^2E^2}{m\omega^2}.$$

m schimbarea de variabilă

$$\partial_x = \partial_y$$

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\partial_y^2$$

b) Rezolvarea perturbativă a oscilatorului în câmp electric ext.

În teoria perturbațiilor:

$$E_n = E_n^{(0)} + \langle \phi_n | H_p | \phi_n \rangle + \sum_{n \neq m} \frac{|\langle \phi_n | H_p | \phi_m \rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} + \dots$$

Ptr oscilatorul armonic $|\phi_n\rangle$ sunt $|n\rangle$.

$$H_p = q \cdot E \cdot X \qquad X = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\,(a + a^+)$$

$$a|n\rangle = \sqrt{n}\,|n-1\rangle$$

$$a^+|n\rangle = \sqrt{n+1}\,|n+1\rangle$$