Teorija motenj (perturbacij)

$H = H_0 + H_1$

$H_0 |n^\circ\rangle = E_n^\circ |n^\circ\rangle$ → to recimo, da poznamo

neka baza

Npr., da je H_0 harmonski oscilator, H_1 pa popravek/odmik od tega. Če razviješ potencial je harmonski člen (H_0) in višji členi (H_1).

$H|n\rangle = E_n|n\rangle$ → to iščemo.

Predpostavka je še: $\hat{H} = \hat{H}_0 + \underbrace{\lambda \hat{V}}_{H_1}$

λ je brez dimenzije. V je motnja. Naj gre $\lambda \to 0$. majhna motnja.

$$E_n = E_n^\circ + \lambda E_n^1 + \lambda^2 E_n^2 + \dots$$

Predpostavimo, da spekter E_n° ni degeneriran:

NEDEGENERIRAN PRVOTNI SPEKTER E_n°:

Rayleigh-Schrödinger perturbacija

$$|n\rangle = |n^\circ\rangle + \lambda|n^1\rangle + \lambda^2|n^2\rangle + \dots$$

Ta funkcija mora rešiti enačbo: $H|n\rangle = E_n|n\rangle$

$$(H_0 + \lambda V)(|n^\circ\rangle + \lambda|n^1\rangle + \lambda^2|n^2\rangle + \dots) = (E_n^\circ + \lambda E_n^1 + \lambda^2 E_n^2 + \dots) \cdot (|n^\circ\rangle + \lambda|n^1\rangle + \lambda^2|n^2\rangle + \dots)$$

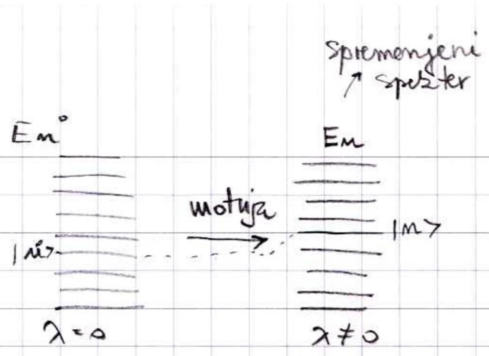
$\forall \lambda$

poglejmo člene brez λ: $H_0|n^\circ\rangle = E_n^\circ|n^\circ\rangle$ → to je že izpolnjeno.

λ^1: $H_0|n^1\rangle + V|n^\circ\rangle = E_n^1|n^\circ\rangle + E_n^\circ|n^1\rangle$

λ^2: $H_0|n^2\rangle + V|n^1\rangle = E_n^\circ|n^2\rangle + E_n^1|n^1\rangle + E_n^2|n^\circ\rangle$

1\. red: iščemo $|n^1\rangle$

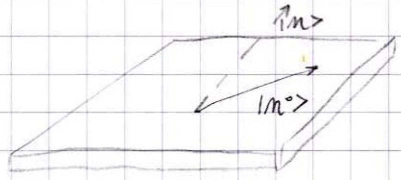


Funkcijo $|n\rangle$ pomnožimo $|n^0\rangle$:

$$\langle n^0|n\rangle = \underbrace{\langle n^0|n^0\rangle}_{1} + \lambda\langle n^0|n^1\rangle + \lambda^2\langle n^0|n^2\rangle + \dots$$

$$= 1$$

tako definiram.
Normiramo tako, da je projekcija $|n\rangle$ na $|n^0\rangle$ je 1.



$\langle n|n\rangle \neq 1$ ↓ smo tako zbrali. Lahko normiramo: $|n\rangle := \frac{|n\rangle}{\sqrt{\langle n|n\rangle}}$

Torej mora biti $\lambda\langle n^0|n^1\rangle + \lambda^2\langle n^0|n^2\rangle + \dots = 0 \quad \forall \lambda$

Torej je zagotovo:

$\langle n^0|n^1\rangle = \langle n^0|n^2\rangle = \dots = 0$

Popravki so ortogonalni na $|n^0\rangle$

Gledamo enačbo z λ^1: / množimo z n^0

$$\underbrace{\underbrace{\langle n^0|H_0|n^1\rangle}_{E_n^0\langle n^0|}}_{0} + \underbrace{\langle n^0|V|n^0\rangle}_{V_{nn}} = E_n^0\underbrace{\langle n^0|n^1\rangle}_{0} + E_n^1\underbrace{\langle n^0|n^0\rangle}_{1}$$

$$\boxed{V_{nn} = E_n^1}$$

→ Energija E_n^0 se spremeni za λE_n^1, kjer je E_n^1 pričakovana vrednost motnje V.

Zanima nas $|n^1\rangle$.
Zapišemo razvoj: $|n^1\rangle = \sum_{m \neq n} C_m^1 |m^0\rangle$

↳ razvoj po originalni bazi, ampak brez $|n^0\rangle$.

$$C_m^1 = \langle m^0|n^1\rangle$$

Enačbo λ^1 množimo z $\langle m^0|$:

$$\underbrace{\langle m^0|H_0|n^1\rangle}_{E_m^0\langle m^0| \;=\; E_m^0 C_m^1} + \langle m^0|V|n^0\rangle = E_n^0\overbrace{\langle m^0|n^1\rangle}^{C_m^1} + E_n^1\overbrace{\langle m^0|n^0\rangle}^{\delta_{mn} = 0}$$

$$E_m^0 C_m^1 + V_{mn} = E_n^0 C_m^1$$

$$\boxed{C_m^1 = \frac{V_{mn}}{E_n^0 - E_m^0}}$$

→ s tem je določena $|n^1\rangle$

$E_n^1 = V_{nn}$

$$|n^1\rangle = \sum_{m\neq n} \frac{V_{mn}}{E_n^0 - E_m^0}|m^0\rangle$$

$|n^0\rangle$ je tisti nivo, ki ga popravljamo, $|m^0\rangle$ so vsi ostali.

2. red: Zopet enačbo $|n^2\rangle$ (λ^2) pomnožimo z $\langle m^0|$

$$\underbrace{\langle m^0|H_0}_{E_m^0\langle m^0|}|n^2\rangle + \underbrace{\langle m^0|V|n^1\rangle}_{V_m} = E_n^0\langle m^0|n^2\rangle + E_n^1\underbrace{\langle m^0|n^1\rangle}_{=0} + E_n^2\underbrace{\langle m^0|n^0\rangle}_{\delta_{mn}}$$

vzemimo, da je $m=n$: Potem: $\langle n^0|n^2\rangle = 0$

in ostane:

$$\langle n^0|V|n^1\rangle = E_n^2 = \sum_{m\neq n}\frac{\overbrace{\langle n^0|V|m^0\rangle}^{V_{nm}}}{E_n^0-E_m^0}V_{mn}$$

$$\boxed{E_n^2 = \sum_{m\neq n}\frac{|V_{mn}|^2}{E_n^0-E_m^0}}$$

vaja: Poglejmo kako se spremeni $|n_0^0\rangle$ osnovno stanje.

$E_n^0 < E_m^0$

najmanjša energije — ostale energije so večje

$\to E_n^0 - E_m^0 < 0$

Torej $\boxed{E_n^2 < 0}$. Perturbacija manjša energijo v drugem redu.

energijo osn. stanje v motenem sistemu

V drugem redu se energije osnovnega stanja zmanjša!

Postopek za dobiti $|n^2\rangle$ je daljši in bo Ramšak kar napisal koeficiente /razvoj.

$$E_n^1 = V_{nn}$$

$$|n^1\rangle = \sum_{m\neq n} \frac{V_{mn}}{E_n^0 - E_m^0} |m^0\rangle$$

$$E_n^2 = \sum_{m\neq n} \frac{|V_{mn}|^2}{E_n^0 - E_m^0}$$

$$|n^2\rangle = \sum_{m,k\neq n} \frac{V_{mk} V_{kn}}{\hbar^2 \omega_{nk} \omega_{mn}} |m^0\rangle - \sum_{m\neq n} \frac{V_{nn} V_{mn}}{\omega_{nm}^2 \hbar^2} |m^0\rangle$$

Normirajmo $|n\rangle$:

$$\langle n|n\rangle = \langle n^0|n^0\rangle + \lambda \underbrace{\langle n^0|n^1\rangle}_{0} + \lambda \underbrace{\langle n^1|n^0\rangle}_{0} + O(\lambda^2) = 1 + O(\lambda^2)$$

za $\lambda \to 0$ je valovna funkcija že kar normirana do prvega reda.

* E_n^0 diskreten spekter

Če spekter ni diskreten se zakomplicira, a se da. Vsota se spremeni v integral in je treba integrirati okrog polov.

* $E_n^2 < 0$.

* Perturbativna vrsta ni nujno konvergentna. Potreben pogoj je, da ko $\lambda \to 0$, $|n\rangle \to |n^0\rangle$, se zdi samoumevno pa ni vedno

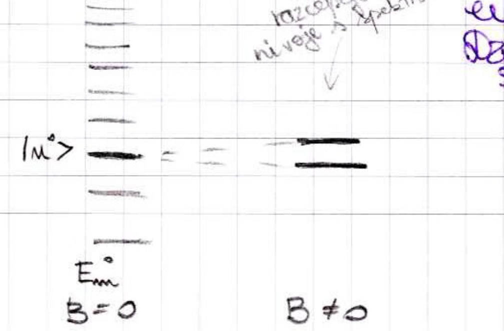
Primer: SUPERPREVODNIK, → ne gre s perturbativno teorijo. Narobe rezultat dobimo.

$$E \sim \omega_D \, e^{-\frac{1}{c_1 V_{nn}}}$$

→ za $V_{nn} \to 0$ je funkcija ne analitična. V ničli so vsi odvodi enaki 0. Ne da se razviti...

DEGENERIRAN SPEKTER

se vidi razcepljene nivoje s spektrometrom



Recimo, da imamo za vsako energijo dve stanji/funkciji. Damo to v magnetno polje. Stanje se razcepijo. Kako? →

$|n_1^\circ\rangle$ in $|n_2^\circ\rangle$ sta stanji z isto energijo

npr: $|\uparrow\rangle$ in $|\downarrow\rangle$ spin gor, spin dol

Želimo dobiti novi funkciji: $|n_1\rangle, |n_2\rangle$ (E_{n1}, E_{n2})

Energija $E_{n_1} = E_n^\circ + \lambda E_{n_1}^1 + \lambda^2 E_{n_1}^2 + \dots$

$E_{n_2} = E_n^\circ + \lambda E_{n_2}^1 + \lambda^2 E_{n_2}^2 + \dots$

Postopek je enak kot prej.

1) $|n_1\rangle = C_{11}|n_1^\circ\rangle + C_{21}|n_2^\circ\rangle + \lambda|n_1^1\rangle + \dots$

lin. komb. obeh možnih h. stanj nemotenega

2) $|n_2\rangle = C_{12}|n_1^\circ\rangle + C_{22}|n_2^\circ\rangle + \lambda|n_2^1\rangle + \dots$

$H|n_1\rangle = E_n|n_1\rangle = (H_0 + \lambda V)|n_1\rangle$

λ°: $\left.\begin{array}{l} H_0|n_1^\circ\rangle = E_n^\circ|n_1^\circ\rangle \\ H_0|n_2^\circ\rangle = E_n^\circ|n_2^\circ\rangle \end{array}\right\}$ to že velja

λ^1: $H_0|n_1^1\rangle + C_{11}V|n_1^\circ\rangle + C_{21}V|n_2^\circ\rangle = E_n^\circ|n_1^1\rangle + E_{n_1}^1(|n_1^\circ\rangle C_{11} + |n_2^\circ\rangle C_{21})$

$H_0|n_2^1\rangle + C_{12}V|n_1^\circ\rangle + C_{22}V|n_2^\circ\rangle = E_n^\circ|n_2^1\rangle + E_{n_2}^1(|n_1^\circ\rangle C_{12} + |n_2^\circ\rangle C_{22})$

Zdaj množimo enačbe z $|n_1^\circ\rangle, |n_2^\circ\rangle$:

$$\overbrace{\langle n_1^\circ|H_0|n_1^1\rangle}^{E_n^\circ\langle n_1^\circ|} + \overbrace{\langle n_1^\circ|V|n_1^\circ\rangle}^{V_{11}} C_{11} + \overbrace{\langle n_1^\circ|V|n_2^\circ\rangle}^{V_{12}} C_{21} =$$

$$= E_n^\circ \underbrace{\langle n_1^\circ|n_1^1\rangle}_{=0} + E_{n_1}^1 (C_{11}\underbrace{\langle n_1^\circ|n_1^\circ\rangle}_{=1} + C_{21}\underbrace{\langle n_1^\circ|n_2^\circ\rangle}_{=0})$$

$\langle n_1^\circ|n_1^1\rangle = 0$ ker popravek $|n_1^1\rangle$ nima nič starega noter. $|n_1\rangle$ razvijemo po starih + motnja.

$|n_1\rangle = C_{11}|n_1^\circ\rangle + C_{21}|n_2^\circ\rangle + \lambda|n_1^1\rangle + \dots$

ta nima nič starega noter, ko razviješ.

Ko enako narediš še za množenje z $|n_2^\circ\rangle$, dobiš tole na koncu:

$$\begin{pmatrix} V_{11} - E_{n_1}^1 & V_{12} \\ V_{21} & V_{22} - E_{n_1}^1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_{11} \\ C_{21} \end{pmatrix} = 0$$

Akta

zdaj smo naredili za $N=2$ (2 stanji z isto energijo)

splošno:

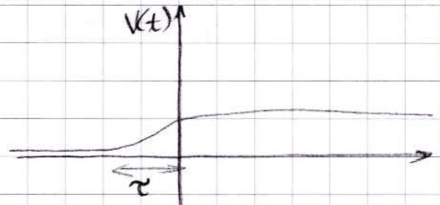
$$\det\left(V_{ij} - E_n{}^{i}\,\delta_{ij}\right) = 0$$

$$V_{ij} = \langle n_i{}^{\circ} | V | n_j{}^{\circ} \rangle$$

Če daš atome vodika v $\vec{E}$ (→ kondenzator) /linearno zmotiš/ (→ $V \propto x$). V prvem redu se ne razcepi. Šele v drugem redu.
Lahko pa si pomagaš s tem za prvi red:
Matrične elemente popraviš $V_{ij} \leftrightarrow V_{ij} + \sum_{m \neq i} \frac{V_{im} V_{mj}}{E_i{}^{\circ} - E_m{}^{\circ}}$.

Adiabatni vklop motnje

$H = H_0 + V(t)$



↳ $\tau \gg \frac{E_n - E_m}{\hbar}$ → τ mora biti mnogo večji od karakterističnih časov sistema

Če je sistem v osnovnem stanju in počasi vklopimo motnjo, bo po dolgem času zopet v osnovnem stanju novega sistema.
Če je prvotni sistem degeneriran, pa ni čisto tako.

} sistem E_n mora biti nedegeneriran

ČASOVNO ODVISNA MOTNJA

$$H = H_0 + V(t) \; ; \; V(t) = V^{+}(t)$$

npr:
- $eU_1(t)$ → napetost, če imaš naboj
- $-\vec{p}_e \cdot \vec{E}(t)$ → če imaš dipol
- $-\vec{p}_m \cdot \vec{B}(t)$ → magnetno polje

Posledica:
→ ni več stacionarnih stanj, ni lastnih energij
↳ energije ni več konst., ne gre več za problem lastnih vrednosti

$$H_0 |n^{\circ}\rangle = E_n |n^{\circ}\rangle$$

↳ baza za nemoten sistem