Störningsteori

De flesta problem går inte att lösa exakt

↳ finns ett fåtal exakt lösbara problem

Många intressanta problem P ligger nära ett exakt lösbart problem $P^{(0)}$:

korrektion

symboliskt: $$P \text{ "="} P^{(0)} + \lambda P^{(1)} \quad (+\lambda^2 P^{(2)} + \ldots .$$

liten parameter

2:a ordn. korrektion

Hypotes: skriv lösningen L till P som en serieutveckling i λ:

$$L \text{ "="} L^{(0)} + \lambda L^{(1)} + \lambda^2 L^{(2)} + \ldots .$$

om $\lambda = 0$ så är $P = P^{(0)}$ som är exakt lösbart

vi måste alltså ha att $L^{(0)}$ = den exakta lösningen till $P^{(0)}$.

Störningsteori handlar om att systematiskt räkna ut korrektionerna $L^{(1)}, L^{(2)}, \ldots .$

I kvanten:

Fysikaliskt system med tillst.rum $\mathcal{H}$. Ett vanligt problem är att vi vill bestämma egenvärden E_n och egentillstånd ψ_n till Hamiltonoperatorn $\hat{H}: \mathcal{H} \to \mathcal{H}$

$$\hat{H}\psi_n = E_n \psi_n$$

svårt!

Antag att $\hat{H} = \hat{H}^{(0)} + \lambda H^{(1)} \quad (+ \lambda^2 H^{(2)} + \ldots)$

Hamiltonoperatorn med kända egenvärden och egentillstånd.
Ex. Väteatomen, harmonisk oscillator, styckvis konst. potential (15.6)

Vi tänker på egenvärden/-funktioner som serieutvecklingar i λ:

$$\begin{cases} E_n = E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \ldots \\ \psi_n = \psi_n^{(0)} + \lambda \psi_n^{(1)} + \lambda^2 \psi_n^{(2)} + \ldots \end{cases}$$

I allmänhet oändligt många termer, även om $\hat{H}^{(2)} = \hat{H}^{(3)} = \ldots = 0$

Sätt in denna ansatts i egenvärdesekv.:

$$(\hat{H}^{(0)} + \lambda H^{(1)} + \ldots)(\psi^{(0)} + \lambda \psi^{(1)} + \ldots) = (E^{(0)} + \lambda E^{(1)} + \ldots)(\psi^{(0)} + \lambda \psi^{(1)} + \ldots)$$

Likhet gäller då för varje ordning i λ separat!:

$\lambda^{(0)}$: $\quad \hat{H}^{(0)} \psi_n^{(0)} = E_n^{(0)} \psi_n^{(0)}$ egenvärdesprob. för $\hat{H}^{(0)}$ som förutsätts löst

$\lambda^{(1)}$: $\quad \hat{H}^{(0)} \psi_n^{(1)} + \hat{H}^{(1)} \psi_n^{(0)} = E_n^{(0)} \psi_n^{(1)} + E_n^{(1)} \psi_n^{(0)}$

$\lambda^{(2)}$: $\quad H^{(0)} \psi_n^{2} + \hat{H}^{(1)} \psi_n^{(1)} + H^{(2)} \psi_n^{(0)} = E_n^{(0)} \psi_n^{2} + E_n^{(1)} \psi_n^{(1)} + E_n^{(2)} \psi_n^{(0)}$

om $\neq 0$

$\vdots$

Systemet löses rekursivt ordn. för ordn. i λ

Lätt att beskriva ~~korr~~ korrektioner $E_n^{(1)}, \varphi_n^{(2)}, \ldots$ till egenvärdet

Hur beskriver vi korrektioner $\varphi_n^{(1)}, \varphi_n^{(2)}, \ldots$ till egentillståndet?

Tänk på de ostörda egentillstånden $\varphi_n^{(0)} \equiv \chi_n$ som är en ON-bas för $\mathcal{H}$.

$$\langle \chi_n | \chi_m \rangle = \begin{cases} 1 & n = m \\ 0 & n \neq m \end{cases} = \delta_{nm}$$

korrektionerna $\varphi_n^{(1)}, \varphi_m^{(2)}, \ldots$ kan nu utvecklas i dess bas

$$\varphi_n^{(1)} = \sum_{n'} c_{n,n'}^{(1)} \chi_{n'}$$

Alltså:

$$\varphi_n = \underset{\chi_n}{\underset{\shortparallel}{\varphi_n^{(0)}}} + \lambda \overbrace{\sum_{n' \neq n} c_{nn'}^{(1)} \chi_{n'}}^{\varphi_n^{(1)}} + \mathcal{O}(\lambda^2)$$

koeff. framför χ_n då φ_n utvecklas i denna bas är alltså exakt 1.

Kan ses som ett alternativ till att normera φ_n.

Till första ordningen i λ:

~~$\hat{H}^{(1)} \psi_n^{(0)} + \hat{H}^{(0)} \psi_n^{(1)} = E$~~

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

där $\psi_n^{(0)} \equiv \chi_n$ ON-bas

Multiplicera med $\langle\psi_n^{(0)}|$

(p.s.s)

$$\langle\psi_n^{(0)}|\hat{H}^{(1)}|\psi_n^{(0)}\rangle + \cancel{\langle\psi_n^{(0)}|\hat{H}^{(0)}|\psi_n^{(1)}\rangle} = \langle\psi_n^{(0)}|E_n^{(1)}|\psi_n^{(0)}\rangle + \cancel{\langle\psi_n^{(0)}|E_n^{(0)}|\psi_n^{(1)}\rangle}$$

Hermitesk

$$= E_n^{(0)}\langle\psi_n^{(0)}|\psi_n^{(1)}\rangle$$

$$= E_n^{(1)}\sum\langle\psi_n^{(0)}|c_{nn'}^{(1)}\psi_{n'}^{(0)}\rangle$$

$$= 0$$

1:a ordn. störning av $\hat{H}$

Så $E_n^{(1)} = \langle\psi_n^{(0)}|\hat{H}^{(1)}|\psi_n^{(0)}\rangle$

1:a ordn. energikorrektion

ostörda

"störningens diagonala matriselement"

störningens förväntans-värde för det ostörda tillståndet.

Multiplicera med $\langle\psi_{n'}^{(0)}|$ $n' \neq n$

$$\langle\psi_{n'}^{(0)}|H^{(1)}|\psi_n^{(0)}\rangle + \langle\psi_{n'}^{(0)}|\hat{H}^{(0)}|\psi_n^{(1)}\rangle$$

$$= E_n^{(1)}\langle\psi_{n'}^{(0)}|\psi_n^{(0)}\rangle + E_n^{(0)}\cancel{\langle\psi_{n'}^{(0)}}|\psi_n^{(1)}\rangle$$

Så $\langle\psi_{n'}^{(0)}|\hat{H}^{(0)}|\psi_n^{(1)}\rangle = \dfrac{1}{E_n^{(0)} - E_{n'}^{(0)}} \underbrace{\langle\psi_{n'}^{(0)}|\hat{H}^{(1)}|\psi_n^{(0)}\rangle}_{\text{störningens avdiagonala element}}$

Alltså:

$$E_n^{(1)} = \langle \psi_n^{(0)} | \hat{H}^{(1)} | \psi_n^{(0)} \rangle$$ korrektion till egenvärde

$$c_{nn'}^{(1)} = \frac{1}{E_n^{(0)} - E_{n'}^{(0)}} \langle \psi_{n'}^{(0)} | \hat{H}^{(1)} | \psi_n^{(0)} \rangle$$ korrektion till egentillstånd

se (15.10) för $E_n^{(2)}$

Problem med störningsteori

Hur stort får λ vara?

stort λ $\Rightarrow$ Ta med fler termer i utvecklingen?

$$e^{\lambda} = 1 + \lambda + \frac{1}{2}\lambda^2 + \ldots \qquad \forall \lambda$$

$$\frac{1}{1-\lambda} = 1 + \lambda + \lambda^2 + \ldots \qquad |\lambda| < 1 \quad \text{konv. radie} = 1$$