Tímaóháður truflanareikningur

Hugsum okkur að við þekkjum lausnir

$$H^0\psi_n^0 = E_n^0\psi_n^0$$

→ fullkominn staðlaður grunnur $\{|\psi_n^0\rangle\}$ og róf E_n^0

Er hægt að nota þessa þekkingu t.þ.a. leysa

$$H\psi_n = E_n\psi_n$$

Við munum nota til þess truflanareikning

* Rayleigh-Schrödinger
* Brillouin-Wigner
* Hnikun 1. stiga, fjölstiga

⋮

skoðum mörg athyglisverð kerfi, sem truflana-reikningur leyfir okkur að skilja

Rayleigh-Schrödinger truflanareikn

$$H^0 |\psi_n^0\rangle = E_n^0 |\psi_n^0\rangle$$

$$\langle \psi_n^0 | \psi_m^0 \rangle = \delta_{n,m}$$

Viljum leysa

$$H = H^0 + \lambda H'$$

þar sem λ er smár truflanastiki

Er hægt að finna lausn, sem veldisröð í λ?

$$|\psi_n\rangle = \sum_{i=0}^{\infty} \lambda^i |\psi_n^{(i)}\rangle$$

Rayleigh-Schrödinger röð

$$E_n = \sum_{i=0}^{\infty} \lambda^i E_n^{(i)}$$

þar sem $|\psi_n^{(i)}\rangle$ er i-ta stigs leiðrétting á ástandinu $|\psi_n\rangle$

og $E_n^{(i)}$ er i-ta stigs leiðrétting (eða þáttur) orkunnar E_n ?

λ : styrkur truflunar

H' : truflun

<u>Reynum</u> með innsetningu

$$(H^0 + \lambda H')\{|\psi_n^0\rangle + \lambda|\psi_n^1\rangle + \lambda^2|\psi_n^2\rangle + \cdots\}$$
$$= (E_n^0 + \lambda E_n^1 + \lambda^2 E_n^2 + \cdots)\{|\psi_n^0\rangle + \lambda|\psi_n^1\rangle + \lambda^2|\psi_n^2\rangle + \cdots\}$$

tökum saman veldi

$$H^0|\psi_n^0\rangle + \lambda\{H^0|\psi_n^1\rangle + H'|\psi_n^0\rangle\} + \lambda^2\{H^0|\psi_n^2\rangle + H'|\psi_n^1\rangle\} + \cdots$$
$$= E_n^0|\psi_n^0\rangle + \lambda\{E_n^0|\psi_n^1\rangle + E_n^1|\psi_n^0\rangle\} + \lambda^2\{E_n^0|\psi_n^2\rangle + E_n^1|\psi_n^1\rangle$$
$$+ E_n^2|\psi_n^0\rangle\} + \cdots$$

0-te-Stig

$$H^0 |\psi_n^0\rangle = E_n^0 |\psi_n^0\rangle$$ varpekkt

1-ta-Stig

$$H^0|\psi_n^1\rangle + H^1|\psi_n^0\rangle = E_n^0 |\psi_n^1\rangle + E_n^1 |\psi_n^0\rangle$$

2-ar-Stig

$$H^0|\psi_n^2\rangle + H^1|\psi_n^1\rangle = E_n^0|\psi_n^2\rangle + E_n^1|\psi_n^1\rangle + E_n^2|\psi_n^0\rangle$$

---

1. Stig Innföldum með $\langle\psi_n^0|$

$$\langle\psi_n^0|H^0|\psi_n^1\rangle + \langle\psi_n^0|H^1|\psi_n^0\rangle = E_n^0\langle\psi_n^0|\psi_n^1\rangle + E_n^1\langle\psi_n^0|\psi_n^0\rangle$$

H^0 er Hermiskt

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

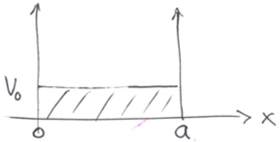
þ.a. eftir stendur

$$\boxed{E_n^1 = \langle \psi_n^0 | H' | \psi_n^0 \rangle}$$

Fyrsta stigs leiðrétting á orku ástands vegna ytri truflunar er væntigildi truflunar í ótruflaða ástandinu

Dæmi

Óendanlegur brunnur



bætum fasta V_0 við mættið

$$E_n^1 = \langle \psi_n^0 | V | \psi_n^0 \rangle$$

$$= V_0 \langle \psi_n^0 | \psi_n^0 \rangle = V_0$$

→ um öll orkustig gildir

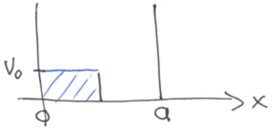
$$E_n \simeq E_n^0 + V_0$$

þeim er hnikað um V_0

Í raun er þetta nákvæmt svar og við sjáum að allir hærri liðir í röðinni hverfa

Notuðum hvergi eiginföllin, þetta gildir almennt

Ef mættið næði
yfir hálfan brunninn



fáum við

$$E_n^1 = \langle \psi_n^0 | V(x) | \psi_n^0 \rangle$$

$$= \int dx \{\psi_n^0\}^* V(x)\, \psi_n^0(x)$$

$$= \frac{2}{a} V_0 \int_0^{a/2} \sin^2\left(\frac{n\pi x}{a}\right) dx$$

$$= \frac{V_0}{2}$$

þ.a. $E_n \simeq E_n^0 + \frac{V_0}{2}$

sem er nálgun, 1. stigs nálgun
og hvorri liðir skipta litlu máli,
(eða geta gert það).

Hvað með 1. stigs leiðréttingu á ástandinu

Við ritjum upp 1. stigs liðina

$$H^0 |\psi_n^1\rangle + H^1 |\psi_n^0\rangle = E_n^0 |\psi_n^1\rangle + E_n^1 |\psi_n^0\rangle$$

$$\rightarrow (H^0 - E_n^0) |\psi_n^1\rangle = \underbrace{-(H^1 - E_n^1) |\psi_n^0\rangle}_{\text{allt þekkt}}$$

ástand (leiðrétting)
sem við viljum finna

Jafnan er jafngild hliðraðri afleiðujöfnu fyrir $|\psi_n^1\rangle$

Ótrufluðu ástöndin mynda fullkominn staðlaðan grunn $\{|\psi_n^0\rangle\}$ þess vegna má liða nýja ástandið í grunninum

$$|\psi_n^1\rangle = \sum_m C_m^{(n)} |\psi_m^0\rangle$$

hér er hægt að sleppa $m=n$ liðnum úr summunni

því ef $|\psi_n^1\rangle$ er lausn jöfnunnar þá er $|\psi_n^1\rangle + \alpha|\psi_n^0\rangle$ það líka því $(H^0 - E_n^0)|\psi_n^0\rangle = 0$

Notum því

$$|\psi_n^1\rangle = \sum_{\substack{m \\ m\neq n}} C_m^{(n)} |\psi_m^0\rangle$$

og reynum innsetningu

$$\sum_{m\neq n} \{E_m^0 - E_n^0\} C_m^{(n)} |\psi_m^0\rangle = -(H^1 - E_n^1)|\psi_n^0\rangle$$

innföldum með $\langle\psi_l^0|$

$$\sum_{m\neq n} \{E_m^0 - E_n^0\} C_m^{(n)} \langle\psi_l^0|\psi_m^0\rangle = -\langle\psi_l^0|H^1|\psi_n^0\rangle + E_n^1 \langle\psi_l^0|\psi_n^0\rangle$$

$$\left\{E_\ell^\circ - E_n^\circ\right\} C_\ell^{(n)} = -\langle \psi_\ell^\circ | H' | \psi_n^\circ \rangle + E_n^1 \delta_{\ell n}$$

Ef $\ell = n$ fæst

$$E_n = \langle \psi_n^\circ | H' | \psi_n^\circ \rangle$$

sem áður, en ef $\ell \neq n$ fæst

$$\left\{E_\ell^\circ - E_n^\circ\right\} C_\ell^{(n)} = -\langle \psi_\ell^\circ | H' | \psi_n^\circ \rangle$$

$$\rightarrow \quad C_\ell^{(n)} = \frac{\langle \psi_\ell^\circ | H' | \psi_n^\circ \rangle}{E_n^\circ - E_\ell^\circ}$$

og þess vegna

$$\boxed{|\psi_n^1\rangle = \sum_{m \neq n} \frac{\langle \psi_m^\circ | H' | \psi_n^\circ \rangle}{E_n^\circ - E_m^\circ} |\psi_m^\circ\rangle}$$

þurfum að skoða margföld ástönd sér

1. stig leiðrétting á ástandi getur oft verið léleg þó leiðréttingin á orkunni sé góð

1. stigs leiðrétting á ástandi

enginn sérst. punktur

2. Stigs orka

Notum aftur jöfnuna fyrir 2. Stigs treflun

$$H^0|\psi_n^2\rangle + H'|\psi_n^1\rangle = E_n^0|\psi_n^2\rangle + E_n^1|\psi_n^1\rangle + E_n^2|\psi_n^0\rangle$$

Innföldum $\langle\psi_n^0|$

$$\cancel{\langle\psi_n^0|H^0|\psi_n^2\rangle} + \langle\psi_n^0|H'|\psi_n^1\rangle = \cancel{E_n^0\langle\psi_n^0|\psi_n^2\rangle} + E_n^1\langle\psi_n^0|\psi_n^1\rangle + E_n^2\langle\psi_n^0|\psi_n^0\rangle$$

$$\rightarrow \quad E_n^2 = \langle\psi_n^0|H'|\psi_n^1\rangle - E_n^1\langle\psi_n^0|\psi_n^1\rangle$$

og við höfðum rétt fundið að

$$|\psi_n^1\rangle = \sum_{m\neq n} C_m^{(n)}|\psi_m^0\rangle \quad \rightarrow \quad \langle\psi_n^0|\psi_n^1\rangle = \sum_{m\neq n} C_m^{(n)}\underbrace{\langle\psi_n^0|\psi_m^0\rangle}_{=0 \text{ því } n\neq m}$$

$$= 0$$

$$\rightarrow E_n^2 = \langle \psi_n^0 | H' | \psi_n^1 \rangle = \sum_{m \neq n} c_m^{(n)} \langle \psi_n^0 | H' | \psi_m^0 \rangle$$

$$= \sum_{m \neq n} \frac{\langle \psi_m^0 | H' | \psi_n^0 \rangle \langle \psi_n^0 | H' | \psi_m^0 \rangle}{E_n^0 - E_m^0}$$

$$\rightarrow \boxed{E_n^2 = \sum_{m \neq n} \frac{|\langle \psi_m^0 | H' | \psi_n^0 \rangle|^2}{E_n^0 - E_m^0}}$$

Við sleppum hærri liðum í orku og 2-stigs leiðréttingu á bylgjufallinu

Við munum skoða til viðbótar aðra röð sem einfaldara er að smíða. 1. og 2. stigs truflanareikn. samkvæmt Rayleigh-Schrödinger er mjög mikil vogun— . . . .

* Við eigum eftir að fjalla um margföld ástönd

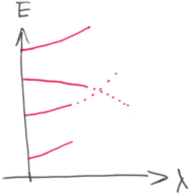
* Samleitni raðar er ekki fyrir fram gefin.
Finna þarf lítinn truflana stika.

Hann er ekki alltaf til. Þá þarf að beita öðrum aðferðum eða aðferðum sem túlka má sem summun raðarinnar eða hlutraðar

* Fjöldi aðferða til. Hafa þróast oft á mismunandi sviðum, eðlisfræði, efnafræði og stærðfræði .....

* Röð getur verið aðfelluröð....

*



Við getum ekki gert λ það stórt að ástönd falli saman (skerist)

Við munum skoða aðferðir sem ráða við þann styrkleika truflunar skilningur okkar á mörgum kerfum er aðeins með truflanafræði → QED

quantum electrodynamics

skammta rafsegulfræði

↳ truflanaskilningur

↓

Munum hermi ástöndin milli tveggja δ-toppa

undur staðlum

þýðing upphaflegra stika

⇕

Mældir stikar