קוונטים 2 – תרגול 7
תורת ההפרעות I

מתרגל: זמיר הלר-אלגזי

תוכן העניינים

1 תורת הפרעות – ללא ניוון

כאשר אנחנו פותרים בעיות בתורת ההפרעות אנחנו מחלקים המילטוניאן H (לרוב לא פתיר במדויק) להמילטוניאן מוכר (פתיר וסימטרי) H_0 והפרעה *קטנה* V (ששוברת את הסימטריה):

$$H = H_0 + V \tag{1.1}$$

אנחנו יודעים מנק' ההנחה שהפתרון של H_0 ידוע, עם מ"ע ואנרגיות עצמיות:

$$H_0 \left|n^{(0)}\right\rangle = E_n^{(0)} \left|n^{(0)}\right\rangle \tag{1.2}$$

כאשר H_0 ו-V **לא תלויים בזמן**, אנחנו יכולים לפתח את את האנרגיות העצמיות והמ"ע של H המלא,

$$H \left|n\right\rangle = E_n \left|n\right\rangle \tag{1.3}$$

בטור חזקות של ההפרעה לפתרון של H_0,

$$\begin{aligned} E_n &= E_n^{(0)} + \Delta E_n^{(1)} + \Delta E_n^{(2)} + \dots \\ \left|n\right\rangle &= \left|n^{(0)}\right\rangle + \left|n^{(1)}\right\rangle + \left|n^{(2)}\right\rangle + \dots \end{aligned} \tag{1.4}$$

כאשר החזקה (i) מסמנת את התיקון מסדר i לפתרון.
התיקון מסדר ראשון ושני לאנרגיה של המצב $\left|n\right\rangle$ הוא

$$\begin{aligned} \Delta E_n^{(1)} &= \left\langle n^{(0)}\middle|V\middle|n^{(0)}\right\rangle = V_{nn} \\ \Delta E_n^{(2)} &= \sum_{m\neq n} \frac{\left|\left\langle m^{(0)}\middle|V\middle|n^{(0)}\right\rangle\right|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} = \sum_{m\neq n} \frac{\left|V_{mn}\right|^2}{\Delta_{n,m}^{(0)}} \end{aligned} \tag{1.5}$$

כאשר סימנו $V_{mn} \equiv \left\langle m^{(0)}\middle|V\middle|n^{(0)}\right\rangle$ אלמנטי המטריצה ו-$\Delta_{n,m}^{(0)} \equiv E_n^{(0)} - E_m^{(0)}$ ההפרש בין רמות האנרגיה הלא מופרעות.
התיקון מסדר ראשון למצב $\left|n\right\rangle$ הוא

$$\left|n^{(1)}\right\rangle = \sum_{m\neq n} \frac{\left\langle m^{(0)}\middle|V\middle|n^{(0)}\right\rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \left|m^{(0)}\right\rangle = \sum_{m\neq n} \frac{V_{mn}}{\Delta_{n,m}^{(0)}} \left|m^{(0)}\right\rangle \tag{1.6}$$

אם אין ניוון אז אין בעיה עם המכנים במשוואות (1.5) ו-(1.6).
הפיתוח ההפרעתי יהיה תקף כאשר המקדמים בטור קטנים,

$$\left|\left\langle m^{(0)}\middle|V\middle|n^{(0)}\right\rangle\right| \ll \left|E_n^{(0)} - E_m^{(0)}\right| \iff \left|V_{mn}\right| \ll \left|\Delta_{n,m}^{(0)}\right| \tag{1.7}$$

תרגיל 1

נתונה מערכת שתי רמות המאופיינת ע"י ההמילטוניאן

$$H = \underbrace{\begin{pmatrix} \epsilon_+ & 0 \\ 0 & \epsilon_- \end{pmatrix}}_{H_0} + \underbrace{\begin{pmatrix} 0 & \delta \\ \delta & 0 \end{pmatrix}}_{V} = \begin{pmatrix} \epsilon_+ & \delta \\ \delta & \epsilon_- \end{pmatrix} \tag{1.8}$$

א. חשבו את האנרגיה של שני המצבים של המערכת עד לסדר שני.

ב. חשבו את התיקון של פונקצית הגל לסדר ראשון.

ג. פתרו את הבעיה במדויק ומצאו את המצבים העצמיים והאנרגיות העצמיות.

ד. מהו התנאי על δ עבורו הקירוב תקף?

א. המ"ע של ההמילטוניאן הלא מופרע הם

$$\left|\phi_+^{(0)}\right\rangle \equiv |+\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \qquad \left|\phi_-^{(0)}\right\rangle \equiv |-\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \tag{1.9}$$

עם אנרגיות עצמות $H_0 |\pm\rangle = \epsilon_\pm |\pm\rangle$. התיקון באנרגיות מסדר ראשון אלו פשוט האיברים האלכסוניים של ההפרעה שמתאפסים,

$$\Delta E_\pm^{(1)} = \langle \pm | V | \pm \rangle = 0 \tag{1.10}$$

התיקון מסדר שני לאנרגיות הוא

$$\Delta E_\pm^{(2)} = \sum_{m \neq \pm} \frac{\left| \langle m^{(0)} | V | \pm \rangle \right|^2}{E_\pm^{(0)} - E_m^{(0)}} = \frac{|\langle \mp | V | \pm \rangle|^2}{E_\pm^{(0)} - E_\mp^{(0)}} \tag{1.11}$$

כי יש במערכת רק שתי רמות $\pm$. נסמן $\Delta \equiv \epsilon_+ - \epsilon_-$,

$$\Delta E_\pm^{(2)} = \pm \frac{\delta^2}{\epsilon_+ - \epsilon_-} = \pm \frac{\delta^2}{\Delta} \tag{1.12}$$

מכאן שהאנרגיה של שני המצבים במערכת עד לסדר שני היא

$$\boxed{E_\pm = \epsilon_\pm \pm \frac{\delta^2}{\epsilon_+ - \epsilon_-}} \tag{1.13}$$

שימו לב שהתיקון לרמת היסוד ϵ_- בסדר שני הוא תמיד שלילי, שזו תוצאה כללית לרמת היסוד תמיד.

ב. התיקון מסדר ראשון למצבים הוא

$$\left|\phi_\pm^{(1)}\right\rangle = \sum_{m \neq \pm} \frac{\langle m^{(0)} | V | \pm \rangle}{E_\pm^{(0)} - E_m^{(0)}} \left| m^{(0)} \right\rangle = \frac{\langle \mp | V | \pm \rangle}{E_\pm^{(0)} - E_\mp^{(0)}} |\mp\rangle = \pm \frac{\delta}{\Delta} |\mp\rangle \tag{1.14}$$

ההפרעה מערבבת בין המצבים של H_0:

$$\boxed{|\phi_\pm\rangle = |\pm\rangle \pm \frac{\delta}{\Delta} |\mp\rangle} \tag{1.15}$$

ג. כדי לפתור במדויק את המערכת נלכסן את H:

$$\begin{vmatrix} \epsilon_+ - \lambda & \delta \\ \delta & \epsilon_- - \lambda \end{vmatrix} = \left(\epsilon_+ - \lambda\right)\left(\epsilon_- - \lambda\right) - \delta^2 = \lambda^2 - \left(\epsilon_+ + \epsilon_-\right)\lambda + \epsilon_+\epsilon_- - \delta^2 = 0 \tag{1.16}$$

ולכן האנרגיות העצמיות הן

$$\begin{aligned} E_\pm &= \frac{\epsilon_+ + \epsilon_-}{2} \pm \frac{\sqrt{\left(\epsilon_+ + \epsilon_-\right)^2 - 4\left(\epsilon_+\epsilon_- - \delta^2\right)}}{2} = \frac{\epsilon_+ + \epsilon_-}{2} \pm \frac{\sqrt{\left(\epsilon_+ - \epsilon_-\right)^2 + 4\delta^2}}{2} \\ &= \frac{\epsilon_+ + \epsilon_-}{2} \pm \frac{\Delta}{2}\sqrt{1 + 4\left(\frac{\delta}{\Delta}\right)^2} \end{aligned} \tag{1.17}$$

נפתח ב-δ/Δ את השורש:

$$E_\pm \simeq \frac{\epsilon_+ + \epsilon_-}{2} \pm \frac{\Delta}{2}\left(1 + 2\left(\frac{\delta}{\Delta}\right)^2\right) = \frac{\epsilon_+ + \epsilon_- \pm \Delta}{2} \pm \frac{\delta^2}{\Delta} = \epsilon_\pm \pm \frac{\delta^2}{\Delta} \tag{1.18}$$

כמו שקיבלנו בתורת ההפרעות מסדר שני. כמו כן, המ"ע של המערכת המדויקת הם

$$\begin{pmatrix} \epsilon_+ - E_\pm & \delta \\ \delta & \epsilon_- - E_\pm \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = 0 \implies \begin{cases} |\phi_+\rangle \propto \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{E_+ - \epsilon_+}{\delta} \end{pmatrix} \simeq \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{\delta}{\Delta} \end{pmatrix} \\ |\phi_-\rangle \propto \begin{pmatrix} \frac{E_- - \epsilon_-}{\delta} \\ 1 \end{pmatrix} \simeq \begin{pmatrix} -\frac{\delta}{\Delta} \\ 1 \end{pmatrix} \end{cases} \tag{1.19}$$

בהתאם לתוצאה שקיבלנו בתורת ההפרעות.

ד. הקירוב יעשה טוב יותר ככל ש-$\Delta \gg \delta$, כלומר ככל שההפרעה תהיה קטנה יותר ביחס למרווח הטיפוסי בין רמות האנרגיה המקוריות.

תרגיל 2

מולקולה דו-אטומית מתוארת ע"י ההמילטוניאן (הבעיה תלת-מימדית)

$$H = \frac{L^2}{2I} + \lambda\cos\theta \tag{1.20}$$

כאשר $I\lambda/\hbar^2 \ll 1$. חשבו את אנרגית מצב היסוד לסדר **שני** ב-λ.

תחילה נבחן הבעיה המקורית, $H_0 = L^2/2I$. היא סימטרית תחת סיבובים ושיקופים, ובבסיס $|\ell m\rangle$ (כי $[H_0, L^2] = 0$) האנרגיות העצמיות הן

$$E^{(0)}_{\ell m} = \frac{\hbar^2\ell(\ell+1)}{2I} \implies E^{(0)}_{\text{GS}} = E^{(0)}_{00} = 0 \tag{1.21}$$

ההפרעה $V = \lambda\cos\theta$ שוברת את הסימטריה ומשאירה רק סימטריה לסיבובים סביב ציר z ושיקופים Π_x, Π_y.
אנחנו מזהים ש-V היא רכיב של הטנזור הכדורי $\mathbf{V} = \lambda\hat{\mathbf{r}}$:

$$V = V^{(1)}_0 = \lambda\sqrt{\frac{4\pi}{3}}Y^{(1)}_0 \tag{1.22}$$

זיהוי הסימטריות שנשמרות תחת H_0 ונשברות תחת V יעזרו לנו לפשט את החישובים.

סדר 1 בתורת ההפרעות: אם נשתמש במשפט ויגנר-אקרט ($\ell' = 1$) או בזוגיות ($V \sim z$ א"ס) נראה שהתיקון הראשון מתאפס,

$$\boxed{\Delta E^{(1)}_{\text{GS}} = \Delta E^{(1)}_{00} = \langle 00|V^{(1)}_0|00\rangle = 0} \tag{1.23}$$

סדר 2 בתורת ההפרעות: נשתמש במשפט ויגנר-אקרט כדי לראות שהאיבר היחיד שנותר בסכום הוא $(\ell' = 1, m' = 0)$,

$$\Delta E^{(2)}_{\text{GS}} = \Delta E^{(2)}_{00} = \sum_{|\ell',m'\rangle\neq|0,0\rangle} \frac{\left|\langle\ell' m'|V^{(1)}_0|00\rangle\right|^2}{E^{(0)}_{00} - E^{(0)}_{\ell',m'}} = \frac{\left|\langle 10|V^{(1)}_0|00\rangle\right|^2}{E^{(0)}_{00} - E^{(0)}_{10}} \tag{1.24}$$

נחשב את אלמנט המטריצה,

$$\langle 10|V^{(1)}_0|00\rangle = \int Y^{(1)*}_0 \lambda\sqrt{\frac{4\pi}{3}}Y^{(1)}_0 \underbrace{Y^{(0)}_0}_{1/\sqrt{4\pi}}\, d\Omega = \frac{\lambda}{\sqrt{3}}\langle 10|10\rangle = \frac{\lambda}{\sqrt{3}} \tag{1.25}$$

ולכן

$$\boxed{\Delta E^{(2)}_{\text{GS}} = \frac{\left|\lambda/\sqrt{3}\right|^2}{0 - \hbar^2/I} = -\frac{I\lambda}{3\hbar^2} < 0} \tag{1.26}$$

שוב, התיקון מסדר שני לאנרגית היסוד הוא שלילי. קיבלנו בסה"כ

$$\boxed{E_{\text{GS}} = -\frac{I\lambda}{3\hbar^2}} \tag{1.27}$$

שימו לב ש-$1 \gg I\lambda/\hbar^2$ גורר שהתיקון הזה קטן, ולכן השימוש בתורת ההפרעות מוצדק.

2 תורת ההפרעות – עם ניוון

כאשר יש ניוון במערכת המכנה $E_n^{(0)} - E_m^{(0)}$ במשוואות (1.5) ו-(1.6) מתאפס והתיקון להפרעות מתבדר – מה עושים?

נניח שיש לנו תת-מרחב מנוון, נסמנו $D = \left\{ \left| n_a^{(0)} \right\rangle \right\}_{a=1}^{g}$ כאשר g הניוון של רמת האנרגיה $E_n^{(0)}$:

$$H_0 \left| n_a^{(0)} \right\rangle = E_n^{(0)} \left| n_a^{(0)} \right\rangle \tag{2.1}$$

בתת-המרחב המנוון D יש לנו חופש לעבור לבסיס אחר כרצוננו ועדיין H_0 יהיה מלוכסן ב-D עם אנרגיות $E_n^{(0)}$ – כלומר, מעבר בסיס ב-D לא משנה את H_0! זה כי כפי שראינו בעבר, כל סופרפוזיציה של $|\psi\rangle = \sum_{a=1}^{g} c_a \left| n_a^{(0)} \right\rangle$ היא גם מ"ע של H_0 עם אותה אנרגיה:

$$H_0 |\psi\rangle = \sum_{a=1}^{g} c_a H_0 \left| n_a^{(0)} \right\rangle = E_n^{(0)} \sum_{a=1}^{g} c_a \left| n_a^{(0)} \right\rangle = E_n^{(0)} |\psi\rangle \tag{2.2}$$

אם כך, **נמצא בסיס חדש של D שבה ההפרעה V מלוכסנת.** שימו לב שאנחנו רק מלכסנים את V בתת-המרחב D, כלומר V_D – הבלוק של V השייך לתת-המרחב D – מלוכסן. לא לכסנו (בהכרח) את כל V.

נסמן את הבסיס המלכסן ב-$D = \left\{ \left| n_\alpha^{(0)} \right\rangle \right\}_{\alpha=1}^{g}$, עם אינדקס α במקום a. בבסיס זה של V אין אלמנטי מטריצה לא-אלכסוניים בתת-המרחב D, כלומר $(V_D)_{\alpha\beta} = \left\langle n_\alpha^{(0)} \middle| V \middle| n_\beta^{(0)} \right\rangle = 0$ אם $\alpha \neq \beta$. אנחנו רואים שכל התרומות המסוכנות עם מכנים מתאפסים במשוואות (1.5) ו-(1.6) מלוות עם מונים שמתאפסים גם הם. בפועל צריך לחזור לפיתוח לתורת ההפרעות ולראות שכאשר V_D מלוכסן לא סוכמים את התרומות של המצבים מ-D בתיקונים.

היישום של תורת ההפרעות בתת-המרחב המנוון D בבסיס המלוכסן $\left\{ \left| n_\alpha^{(0)} \right\rangle \right\}_{\alpha=1}^{g}$ הוא

$$\begin{aligned}
\Delta E_\alpha^{(1)} &= \left\langle n_\alpha^{(0)} \middle| V \middle| n_\alpha^{(0)} \right\rangle = V_{\alpha\alpha} \\
\Delta E_\alpha^{(2)} &= \sum_{m \notin D} \frac{\left| \left\langle m^{(0)} \middle| V \middle| n_\alpha^{(0)} \right\rangle \right|^2}{E_\alpha^{(0)} - E_m^{(0)}} = \sum_{m \notin D} \frac{|V_{m\alpha}|^2}{\Delta_{\alpha,m}^{(0)}} \\
\left| n_\alpha^{(1)} \right\rangle &= \sum_{m \notin D} \frac{\left\langle m^{(0)} \middle| V \middle| n_\alpha^{(0)} \right\rangle}{E_\alpha^{(0)} - E_m^{(0)}} \left| m^{(0)} \right\rangle = \sum_{m \notin D} \frac{V_{m\alpha}}{\Delta_{\alpha,m}^{(0)}} \left| m^{(0)} \right\rangle
\end{aligned} \tag{2.3}$$

כשכמובן, $E_\alpha^{(0)} = E_n^{(0)}$ לכל $\alpha \in \{1, \ldots, g\}$. מכיוון ש-$m \notin D$ אין סכנה שהמונה יתאפס. שימו לב ש-$V_{\alpha\alpha}$ הם פשוט הע"ע של V_D שנמצאו בזמן הלכסון.

ייתכן ולמערכת יהיו כמה תת-מרחבים מנוונים, במקרה כזה נלכסן את כל אחד מהם בנפרד.

תרגיל 3

חלקיק טעון מאולץ לנוע על פני כדור בעל רדיוס R תחת השפעת שדה חשמלי קבוע. ההמילטוניאן הוא

$$H = \frac{L^2}{2MR^2} + q\mathcal{E}z \tag{2.4}$$

חשבו את האנרגיות של שלושת המצבים בעלי $\ell = 1$ בסדר ראשון ושני ב-$q\mathcal{E}$.

נחלק את H להמילטוניאן מדויק $H_0 = L^2/2MR^2$ והפרעה $V = q\mathcal{E}z$ ונבחן את הסימטריות שלהם. ב-H_0 יש סימטריה ספרית וסימטריה לכל השיקופים Π. לכן נעבור לבסיס המלכסן את L^2 ו-L_z, לכן המ"ע של H_0 הם $|\ell m\rangle$ עם ספקטרום אנרגיה

$$E_\ell^{(0)} = \frac{\hbar^2\ell(\ell+1)}{2MR^2} \tag{2.5}$$

יש ניוון בכל תת-מרחב ℓ כי האנרגיה לא תלויה ב-m, כתוצאה מהסימטריה הספרית של H_0.
ההפרעה V שוברת את הסימטריה הספרית אך משאירה סימטריה לסיבובים סביב ציר z ($[L_z, V] = 0$), ומסימטרית השיקופים נותרים עדיין שיקופים Π_x, Π_y (וכל שיקוף שמכיל את ציר z). תחת Π_x המ"ע הופכים את התנ"ז שלהם בכיוון z,

$$\Pi_x |\ell, m\rangle = |\ell, -m\rangle \tag{2.6}$$

ולכן אנחנו מצפים שבבעיה המלאה H יישאר הניוון של המצבים $\{|\ell, \pm m\rangle\}$.
ההפרעה V היא רכיב של וקטור $\mathbf{V} \equiv q\mathcal{E}\mathbf{R}$ (זכרו ש-$r = R$ על פני הכדור):

$$V = V_0^{(1)} = q\mathcal{E}R\sqrt{\frac{4\pi}{3}}Y_0^{(1)} \tag{2.7}$$

שלושת המצבים עם $\ell = 1$ מנוונים, נסמן $D = \{|1m\rangle\}_{m=-1}^{1}$. האם V מלוכסן ב-D? נבדוק,

$$\langle 1m'|V|1m\rangle = \langle 1m'|V_0^{(1)}|1m\rangle = 0 \tag{2.8}$$

כי הזוגיות של $V_0^{(1)}$ שלילית ואילו שני המצבים בעלי אותה זוגיות. V מתאפס בתת-המרחב D ולכן מלוכסן, אז לא צריך לעבור בסיס ואפשר להפעיל את תורת ההפרעות כרגיל. שימו לב שלמרות ש-V מתאפס ב-D, יש עדיין רכיבים לא אפסים שיכולים לקשר בין D לתתי-המרחבים האחרים:

$$\langle \ell'm'|V|\ell m\rangle = \begin{pmatrix} * & * & * & * & \dots \\ * & 0 & 0 & 0 & * \\ * & 0 & 0 & 0 & * \\ * & 0 & 0 & 0 & * \\ \vdots & * & * & * & \ddots \end{pmatrix} \tag{2.9}$$

התיקון מסדר 1 לאנרגיה מתאפס כי האיברים האלכסוניים של V הם אפס:

$$\Delta E_{1,m}^{(1)} = \langle 1m|V|1m\rangle = 0 \tag{2.10}$$

נחשב את התיקון מסדר 2 לאנרגיה:

$$\Delta E_{1,m}^{(2)} = \sum_{|\ell'm'\rangle \notin D} \frac{|\langle \ell'm'|V|1m\rangle|^2}{E_{1m}^{(0)} - E_{\ell'm'}^{(0)}} = \sum_{|\ell'm'\rangle \notin D} \frac{\left|\langle \ell'm'|V_0^{(1)}|1m\rangle\right|^2}{\frac{\hbar^2}{MR^2} - \frac{\hbar^2\ell'(\ell'+1)}{2MR^2}} \tag{2.11}$$

זוגיות לא מוסיפה תנאי חדש כי $\ell' = 1$ הוא חלק מ-D ולכן לא בסכום בכל מקרה. משפט ויגנר-אקרט בורר $\ell' = 0, 2$ (כי $\ell' \neq 1$) ו-$m' = m$,

$$\Delta E^{(2)}_{1,m} = \frac{MR^2}{\hbar^2}\left[\left|\langle 0m|V^{(1)}_0|1m\rangle\right|^2 - \frac{1}{2}\left|\langle 2m|V^{(1)}_0|1m\rangle\right|^2\right] \tag{2.12}$$

נתחיל עם חישוב התיקון לאנרגיה של $|10\rangle$:

$$\Delta E^{(2)}_{1,0} = \frac{MR^2}{\hbar^2}\left[\left|\langle 00|V^{(1)}_0|10\rangle\right|^2 - \frac{1}{2}\left|\langle 20|V^{(1)}_0|10\rangle\right|^2\right] = \frac{MR^2}{\hbar^2}\left[\frac{(q\mathcal{E}R)^2}{3} - \frac{1}{2}\left|\langle 20|V^{(1)}_0|10\rangle\right|^2\right] \tag{2.13}$$

האיבר הראשון חושב עם הטריק הרגיל ש-$Y^{(0)}_0 = 1/\sqrt{4\pi}$ וש-$\langle 10|10\rangle = 1$. נחשב את אלמנט המטריצה הנותר,

$$\langle 20|V^{(1)}_0|10\rangle = q\mathcal{E}R\sqrt{\frac{4\pi}{3}}\int Y^{(2)*}_0 Y^{(1)}_0 Y^{(1)}_0 \, \mathrm{d}\Omega \tag{2.14}$$

ההרמוניות הספריות הרלוונטיות הן

$$Y^{(1)}_0 = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}x, \qquad Y^{(2)}_0 = \sqrt{\frac{5}{16\pi}}\left(3\cos^2\theta - 1\right) = \sqrt{\frac{5}{16\pi}}\left(3x^2 - 1\right) \tag{2.15}$$

כאשר הצבנו $x \equiv \cos\theta$ כהרגלנו. נחשב:

$$\begin{aligned}\langle 20|V^{(1)}_0|10\rangle &= q\mathcal{E}R\frac{\sqrt{15}}{8\pi}2\pi\int_{-1}^{1}\left(3x^2-1\right)x^2\,\mathrm{d}x = q\mathcal{E}R\frac{\sqrt{15}}{4}\int_{-1}^{1}\left(3x^4 - x^2\right)\mathrm{d}x \\ &= q\mathcal{E}R\frac{\sqrt{15}}{2}\left(\frac{3}{5} - \frac{1}{3}\right) = \frac{2q\mathcal{E}R}{\sqrt{15}}\end{aligned} \tag{2.16}$$

בסה"כ מצאנו:

$$\boxed{\Delta E^{(2)}_{10} = \frac{MR^2}{\hbar^2}\left(q\mathcal{E}R\right)^2\left[\frac{1}{3} - \frac{1}{2}\cdot\frac{4}{15}\right] = \frac{MR^4}{5\hbar^2}\left(q\mathcal{E}\right)^2} \tag{2.17}$$

נחשב את התיקון לרמה $|11\rangle$ (זכרו שמובטח לנו שהתיקון ל-$|1,-1\rangle$ זהה מהניוון של H):

$$\Delta E^{(2)}_{1,1} = -\frac{MR^2}{2\hbar^2}\left|\langle 21|V^{(1)}_0|11\rangle\right|^2 \tag{2.18}$$

האיבר הראשון בסכום לא ייתכן ממשפט ויגנר-אקרט. את אלמנט המטריצה נחשב באמצעות ויגנר-אקרט:

$$\begin{aligned}\langle 20|V^{(1)}_0|10\rangle &= \langle 11;00|20\rangle\left\langle 2\middle\|V^{(1)}\middle\|1\right\rangle = \frac{2q\mathcal{E}R}{\sqrt{15}} \\ \Longrightarrow \quad \langle 21|V^{(1)}_0|11\rangle &= \langle 11;01|21\rangle\left\langle 2\middle\|V^{(1)}\middle\|1\right\rangle = \frac{\langle 11;01|21\rangle}{\langle 11;00|20\rangle}\langle 20|V^{(1)}_0|10\rangle \\ &= \frac{\sqrt{1/2}}{\sqrt{2/3}}\frac{2q\mathcal{E}R}{\sqrt{15}} = \frac{q\mathcal{E}R}{\sqrt{5}}\end{aligned} \tag{2.19}$$

התיקון ל-$|1,\pm 1\rangle$ הוא אם כן:

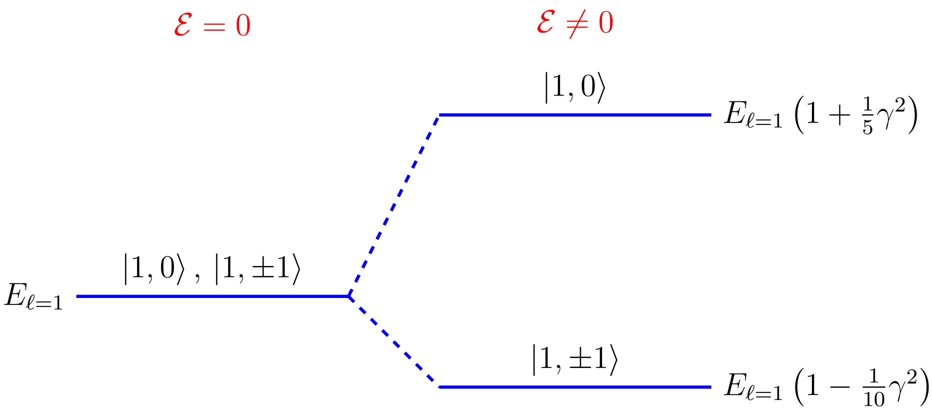
$$\boxed{\Delta E^{(2)}_{1,\pm 1} = -\frac{MR^4}{10\hbar^2}\left(q\mathcal{E}\right)^2} \tag{2.20}$$

נסמן את הפרמטר הקטן (חסר המימדים) בבעיה

$$\gamma \equiv \frac{q\mathcal{E}R}{E_{\ell=1}} = \frac{MR^3}{\hbar^2}q\mathcal{E} \tag{2.21}$$

במונחי הפרמטר γ האנרגיות של המצבים $\ell = 1$ הם

$$\boxed{\begin{aligned} E_{10} &= E_{\ell=1} + \frac{1}{5}\frac{\hbar^2}{MR^2}\gamma^2 = E_{\ell=1}\left(1+\frac{1}{5}\gamma^2\right) \\ E_{1,\pm1} &= E_{\ell=1} - \frac{1}{10}\frac{\hbar^2}{MR^2}\gamma^2 = E_{\ell=1}\left(1-\frac{1}{10}\gamma^2\right) \end{aligned}} \tag{2.22}$$



איור 1: פיצול של האנרגיות $\ell = 1$ כשמפעילים את השדה החשמלי $\mathcal{E}$.

תרגיל 4

הדינמיקה של חלקיק בעל ספין $s=1$ מאופיינת ע"י ההמילטוניאן

$$H=\frac{A}{\hbar^2}S_z^2+\frac{B}{\hbar^2}\left(S_x^2-S_y^2\right) \tag{2.23}$$

א. מצאו את האנרגיות העצמיות במדויק.

ב. התייחסו ל-B כהפרעה וחשבו את האנרגיות לסדר ראשון ב-B.

א. נשתמש בהצגה המטריצית של $\mathbf{S}$ בבסיס המלכסן את S_z,

$$\begin{aligned}
S_x&=\frac{\hbar}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}0&1&0\\1&0&1\\0&1&0\end{pmatrix} &&\Longrightarrow\ S_x^2=\frac{\hbar^2}{2}\begin{pmatrix}1&0&1\\0&2&0\\1&0&1\end{pmatrix}\\
S_y&=\frac{i\hbar}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}0&-1&0\\1&0&-1\\0&1&0\end{pmatrix} &&\Longrightarrow\ S_y^2=\frac{\hbar^2}{2}\begin{pmatrix}1&0&-1\\0&2&0\\-1&0&1\end{pmatrix}\\
S_z&=\hbar\begin{pmatrix}1&0&0\\0&0&0\\0&0&-1\end{pmatrix} &&\Longrightarrow\ S_z^2=\hbar^2\begin{pmatrix}1&0&0\\0&0&0\\0&0&1\end{pmatrix}
\end{aligned} \tag{2.24}$$

ההמילטוניאן בבסיס המלכסן את S_z הוא אם כן

$$H=A\begin{pmatrix}1&0&0\\0&0&0\\0&0&1\end{pmatrix}+\frac{B}{2}\left[\begin{pmatrix}1&0&1\\0&2&0\\1&0&1\end{pmatrix}-\begin{pmatrix}1&0&-1\\0&2&0\\-1&0&1\end{pmatrix}\right]=\begin{pmatrix}A&0&B\\0&0&0\\B&0&A\end{pmatrix} \tag{2.25}$$

נלכסן את המטריצה ונקבל את האנרגיות העצמיות המדויקות

$$\begin{vmatrix}A-\lambda&0&B\\0&-\lambda&0\\B&0&A-\lambda\end{vmatrix}=0\ \Longrightarrow\ \boxed{E_1=0,\qquad E_{2,3}=A\pm B} \tag{2.26}$$

ב. נפריד את H לחלק לא מופרע והפרעה קטנה

$$H=\underbrace{\begin{pmatrix}A&0&0\\0&0&0\\0&0&A\end{pmatrix}}_{H_0}+\underbrace{\begin{pmatrix}0&0&B\\0&0&0\\B&0&0\end{pmatrix}}_{V} \tag{2.27}$$

שימו לב שיש ניוון באנרגיות של המצבים $|1,\pm1\rangle$,

$$E_{10}=0,\qquad E_{1,\pm1}=A \tag{2.28}$$

הניוון הזה הוא תוצאה של הסימטריה של H_0 לשיקופים Π_x או Π_y שמקשרים בין המצבים $|\ell,\pm m\rangle$.
בבסיס של $|1,\pm1\rangle$ ההפרעה לא מלוכסנת,

$$V_D=\begin{pmatrix}0&B\\B&0\end{pmatrix} \tag{2.29}$$

הע"ע של המטריצה הזו הם $\pm B$, ולכן התיקון מסדר ראשון לאנרגיות של המ"ע האלו הם

$$\Delta E_{\alpha}^{(1)} = \pm B \tag{2.30}$$

בדיוק כמו בפתרון המדויק. בינתיים המצב $|10\rangle$ לא מקבל תיקונים לאנרגיה כי כל האלמנטים $V_{0m} = 0$ וכך גם לאחר הלכסון של D, ולכן התיקון הוא

$$\Delta E_{10}^{(1)} = \Delta E_{10}^{(2)} = 0 \tag{2.31}$$

אנחנו רואים שבמקרה הזה התיקון בתורת ההפרעות נותן את התשובה המדויקת.

תרגיל 5 *(מיסוך)*

חלקיק בעל מסה m ומטען e נמצא תחת פוטנציאל

$$V(r)=\begin{cases}-\frac{e^2}{r} & 0<r<R\\ -\frac{e^2}{r}\exp\left[-\lambda\frac{r-R}{a_0}\right] & r>R\end{cases} \tag{2.32}$$

כאשר a_0 הוא רדיוס בוהר ו-$\lambda\ll 1$. נכתוב את ההמילטוניאן כסכום של המילטוניאן בעל פתרון ידוע ועוד הפרעה קטנה,

$$H=H_0+V_\lambda \tag{2.33}$$

כאשר $H_0=\frac{p^2}{2m}-\frac{e^2}{r}$ הוא ההמילטוניאן של אטום המימן.

א. מצאו את V_λ, והראו שאכן עבור $\lambda\ll 1$ ניתן להתייחס לתוספת כהפרעה קטנה.

ב. חשבו את התיקון מסדר ראשון $\Delta E_1^{(1)}$ לרמת האנרגיה $E_1^{(0)}$ של H_0.

נתון האינטגרל:

$$\int_R^\infty r\left(r-R\right)e^{-kr}\,\mathrm{d}r=\frac{e^{-kR}}{k^3}\left(2+kR\right) \tag{2.34}$$

א. נכתוב את הפוטנציאל מחדש בעזרת פונקצית מדרגה

$$V(r)=-\frac{e^2}{r}+\frac{e^2}{r}\left(1-e^{-\lambda\frac{r-R}{a_0}}\right)\Theta\left(r-R\right) \tag{2.35}$$

לכן ההמילטוניאן המלא הוא

$$H=\frac{p^2}{2m}+V(r)=\frac{p^2}{2m}-\frac{e^2}{r}+\Theta\left(r-R\right)\frac{e^2}{r}\left(1-e^{-\lambda\frac{r-R}{a_0}}\right)=H_0+V_\lambda(r) \tag{2.36}$$

כאשר

$$\boxed{V_\lambda(r)=\frac{e^2}{r}\left(1-e^{-\lambda\frac{r-R}{a_0}}\right)\Theta\left(r-R\right)} \tag{2.37}$$

כאשר $\lambda\ll 1$ אנחנו רואים שהתוספת של V_λ ל-H קטנה,

$$\lim_{\lambda\to0}V_\lambda(r)=\lim_{\lambda\to0}\frac{e^2}{r}\left(1-e^{-\lambda\frac{r-R}{a_0}}\right)\Theta\left(r-R\right)=\lim_{\lambda\to0}\lambda\frac{e^2}{r}\frac{r-R}{a_0}\Theta\left(r-R\right)=0 \tag{2.38}$$

ב. נחשב את התיקון לאנרגיה מסדר ראשון למצב היסוד $|100\rangle$:

$$\begin{aligned}\Delta E_1^{(1)}&=\left\langle100^{(0)}\middle|V_\lambda\middle|100^{(0)}\right\rangle\\&=\int_0^\infty\int_\Omega\psi_{100}^{(0)*}(\mathbf{r})\left[\frac{e^2}{r}\left(1-e^{-\lambda\frac{r-R}{a_0}}\right)\Theta\left(r-R\right)\right]\psi_{100}^{(0)}(\mathbf{r})\,\mathrm{d}^3r\\&=\int_R^\infty R_{10}(r)\left[\frac{e^2}{r}\left(1-e^{-\lambda\frac{r-R}{a_0}}\right)\right]R_{10}(r)\,r^2\,\mathrm{d}r\underbrace{\int_\Omega Y_0^{(0)*}Y_0^{(0)*}\,\mathrm{d}\Omega}_{1}\end{aligned} \tag{2.39}$$

נזכיר שהחלק המרחבי של פונקצית הגל של מצב היסוד של אטום מימן הוא

$$R_{10}\left(r\right)=\frac{2}{\sqrt{a_0^3}}e^{-r/a_0} \tag{2.40}$$

נציב באינטגרל ונפתח ב-λ קטנה את האינטגרד,

$$\begin{aligned}\Delta E_1^{(1)}&=\frac{4}{a_0^3}\int_R^\infty e^{-r/a_0}\left[\frac{e^2}{r}\left(1-e^{-\lambda\frac{r-R}{a_0}}\right)\right]e^{-r/a_0}r^2\,\mathrm{d}r\\&\simeq\frac{4e^2}{a_0^3}\int_R^\infty\lambda\frac{r-R}{a_0}\cdot re^{-2r/a_0}\,\mathrm{d}r=\lambda\frac{4e^2}{a_0^4}\int_R^\infty r\left(r-R\right)e^{-2r/a_0}\,\mathrm{d}r\end{aligned} \tag{2.41}$$

נזהה $k=2/a_0$ ונציב את תוצאת האינטגרל הנתון,

$$\Delta E_1^{(1)}=\lambda\frac{4e^2}{a_0^4}\cdot\frac{e^{-2R/a_0}}{\left(2/a_0\right)^3}\left(2+\frac{2R}{a_0}\right)=\lambda\frac{e^2}{a_0}\left(1+\frac{R}{a_0}\right)e^{-2R/a_0} \tag{2.42}$$

אנרגית מצב היסוד החדשה (זכרו ש-$E_1^{(0)}=-e^2/2a_0$) היא

$$\boxed{E_1=-\frac{e^2}{2a_0}\left[1-2\lambda\left(1+\frac{R}{a_0}\right)e^{-2R/a_0}\right]} \tag{2.43}$$

אנחנו רואים שגם בגבול $\lambda\to 0$ (חוזקה מתאפס) וגם בגבול $R\to\infty$ (תחומה נעלם) ההפרעה נעלמת ו-$E_1=E_1^{(0)}$.