1. Häiriöteoriaa:

Idea: Jos tunnet ratkaisun johonkin ongelmaan voit käyttää sitä ehkä hyväksesi löytääksesi aproksimatiivisen ratkaisun läheiseen ongelmaan.

Tunnemme ratkaisun Hamiltonin operaattorilla $H^0$ eli

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

niin, että ominaistilat $\psi_n^0$ ja ominaisarvot $E_n^0$ tunnetaan.

Häiritään systeemiä hieman niin, että $H = H^0 + \lambda H'$, missä $\lambda H'$ on "pieni"

2. halumme ratkaista

$H\Psi_n = E_n\Psi_n$, mutta emme tunne tarkkaa ratkaisua.

Huom! $\lambda$ on dimensioton luku, jonka tehtävä on helpottaa häiriöteorian kertalukujen tunnistamista.

Ominaistilat: $\Psi_n = \Psi_n^0 + \lambda\Psi_n^1 + \lambda^2\Psi_n^2 + \ldots$

-"- energiat: $E_n = E_n^0 + \lambda E_n^1 + \lambda^2 E_n^2 + \ldots$

missä $E_n^1$ ja $\Psi_n^1$ ovat ensimmäisen kertaluvun korjauksia ominaistilaan n.
$E_n^2$ ja $\Psi_n^2$ ovat 2. kertaluvun korjauksia jne.

Sijoitetaan yritteet Schrödingerin yhtälöön ja saadaan ...

3.

$$(H_0+\lambda H')[\psi_n^0+\lambda\psi_n^1+\lambda^2\psi_n^2+\dots]$$
$$=(E_n^0+\lambda E_n^1+\lambda^2 E_n^2+\dots)[\psi_n^0+\lambda\psi_n^1+\lambda^2\psi_n^2]$$

Kerätään saman kertaluvun termit yhteen.

$$\Rightarrow H_0\psi_n^0+\lambda(H_0\psi_n^1+H'\psi_n^0)+\lambda^2(H^0\psi_n^2+H'\psi_n^1)$$
$$=E_n^0\psi_n^0+\lambda(E_n^0\psi_n^1+E_n^1\psi_n^0)+\lambda^2(E_n^0\psi_n^2+E_n^1\psi_n^1+E_n^2\psi_n^0)+\dots$$

0:s kertaluku: $H_0\psi_n^0=E_n^0\psi_n^0$ (tehty)

1. kertaluku: $H^0\psi_n^1+H'\psi_n^0=E_n^0\psi_n^1+E_n^1\psi_n^0$

2. kertaluku: $H_0\psi_n^2+H'\psi_n^1=E_n^0\psi_n^2+E_n^1\psi_n^1+E_n^2\psi_n^0$

then what?

4. otetaan sisätulo $\langle\psi_n^0|$:lla

$$\Rightarrow \langle\psi_n^0|H^0|\psi_n^1\rangle + \langle\psi_n^0|H^1|\psi_n^0\rangle$$

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

$H^0$ on hermiittinen eli ensimmäisessä termissä.

$$\langle\psi_n^0|H^0|\psi_n^1\rangle = \langle H_0\psi_n^0|\psi_n^1\rangle$$

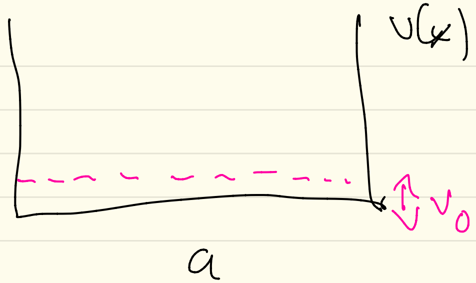
$$= E_n^0\langle\psi_n^0|\psi_n^1\rangle$$

jolloin 1. termi vasemmalla kumoaa ensimmäisen oikealla.

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

1. kertaluvun korjaus ominaisenergioihin voidaan siis helposti laskea, koska $\psi_n^0$ tunnetaan!

5. Esim:




$$\Rightarrow \psi_n^0 = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a} x\right)$$

$H' = V_0$ eli vakion siirto energiassa

$$\Rightarrow E_n^1 = \langle \psi_n^0 | V_0 | \psi_n^0 \rangle = V_0$$

Tietenkin! Tosin yllättävää on ehkä se, että 1. kertaluvun häiriöteoria antoi tässä tarkan tuloksen. Korkeamman kertaluokan korjauksien pitää siis hävitä.

Miten aaltofunktiot muuttuivat?
1. kertaluvun termi oli:

$$(H^0 - E_n^0)\psi_n^1 = -(H' - E_n^1)\psi_n^0 \quad (*)$$

6. Oikea puoli tunnetaan, mutta vasemmalla puolella jotain differentiaaleja. Ei-homogeeninen diffis funktiolle $\psi_n^1$. Koska $\psi_m^0$ muodostaa kannan:

$$\psi_n^1 = \sum_{m \neq n} c_m^{(n)} \psi_m^0$$

$m=n$ termi voidaan jättää pois, koska jos $\psi_n^1$ ratkaisee (*):n edellisellä sivulla, myös $\psi_n^1 + \alpha \psi_n^0$ on ratkaisu (tarkista!) tälä voidaan vaihentaa $n=m$ termi sarjakehitelmästä pois.

$H_0 \psi_m^0 = E_m \psi_m^0$ + sijoitus

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

$T_v$ sitten sisätulo vasemmalta $\langle \psi_\ell^0 |$:lla

$$\Rightarrow \sum_{m \neq n} (E_m^0 - E_n^0) C_m^{(n)} \underbrace{\langle \psi_\ell^0 | \psi_m^0 \rangle}_{\delta_{\ell,m}}$$

$$- \langle \psi_\ell^0 | H' | \psi_n^0 \rangle + E_n^1 \underbrace{\langle \psi_\ell^0 | \psi_n^0 \rangle}_{\delta_{\ell,n}}$$

$$\ell = n \Rightarrow E_n^1 = \langle \psi_n^0 | H' | \psi_n^0 \rangle$$

$$\ell \neq n \Rightarrow (E_\ell^0 - E_n^0) C_\ell^{(n)} = - \langle \psi_\ell^0 | H' | \psi_n^0 \rangle$$

$$\Rightarrow C_m^{(n)} = \frac{\langle \psi_m^0 | H' | \psi_n^0 \rangle}{E_n^0 - E_m^0}$$

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

ok, jos spektri on ei-degeneroitunut. muuten nimittäjä aiheuttaa ongelmia.

8. Kokeillaa aiempaan


$$H' = V_0$$

$$\Rightarrow \psi_n^1 = \sum_{m \neq n} \frac{\langle \psi_m^0 | V_0 | \psi_n^0 \rangle}{E_n^0 - E_m^0} \psi_m^0$$

$$= V_0 \sum_{m \neq n} \frac{\langle \psi_m^0 | \psi_n^0 \rangle}{E_n^0 - E_m^0} \psi_m^0$$

$$= V_0 \sum_{m \neq n} \delta_{m,n} \frac{\psi_m^0}{E_n^0 - E_m^0}$$

$= 0$, mikä ei yllätä.

9. Toisen kertaluvun korjaus: Otetaan 2. kertaluvun termistä sisätulo $\langle\psi_n^0|$:llä

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

$H^0$ on hermiittinen $\Rightarrow \langle\psi_n^0|H_0|\psi_n^2\rangle =$
$$E_n^0\langle\psi_n^0|\psi_n^2\rangle$$

ja ensimmäiset termit oikealla ja vasemmalla kumoutuvat.

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

mutta $\langle\psi_n^0|\psi_n^1\rangle = \sum_{m\neq n} c_m^{(n)}\langle\psi_n^0|\psi_m^0\rangle = 0$

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

e.n.t.

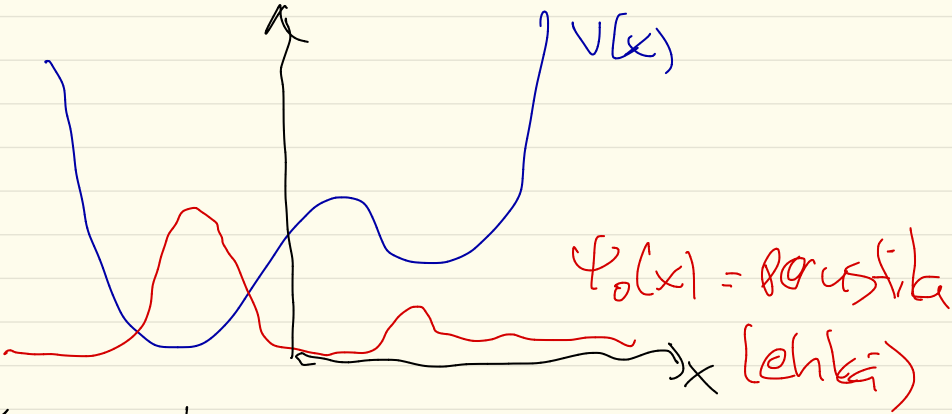
10.

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

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

2. kertaluvun korjaus aaltofunktioihin on painajainen eikä sinne kannata mennä.

## 11. Esimerkki: aaltofunktio yritteestä.




Suunnilleen:

$$\psi_0(x) = a\, e^{-(x-d_1)^2/2\sigma_1^2} + b\, e^{-(x-d_2)^2/2\sigma_2^2}$$

$$E(a, b, d_1, d_2, \sigma_1, \sigma_2) = \langle \psi_0 | \hat{H} | \psi_0 \rangle$$

Minimoi tuo ja löydä $a, b, d_1, d_2, \sigma_1, \sigma_2$