

13 Stacjonarny rachunek zaburzeń

13.1 Przypadek bez degeneracji

Dyskutowane w poprzednich rozdziałach potencjały dopuszczają dokładne rozwiązanie problemu własnego. Jednak bardzo często nie potrafimy analitycznie uzyskać takich rozwiązań. Dlatego w takich przypadkach musimy szukać przybliżonych metod znajdowania energii i funkcji falowych. W tym rozdziale omówimy tzw. stacjonarny rachunek zaburzeń. Jest to metoda w której hamiltonian układu dzielimy na dwie części: \hat{H}_0 , dla której znane są dokładne rozwiązania problemu własnego i na część *zaburzającą* \hat{H}' . Aby wyprowadzić rachunek zaburzeń posłużymy się trickiem wprowadzając formalny parametr λ , który posłuży nam jako parametr rozwinięcia

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}' = \hat{H}_0 + \lambda \hat{H}'. \quad (13.1)$$

W trakcie rachunku będziemy zakładać że $\lambda \ll 1$, jednak na końcu położymy $\lambda = 1$. Metoda taka może wydawać się niepoprawna, jednak za każdym razem upewnimy się, czy uzyskane w ten sposób poprawki do spektrum \hat{H}_0 są rzeczywiście małe. Może się jednak czasem zdarzyć, że metodą tą potrafimy otrzymać poprawne rezultaty, nawet gdy warunek ten nie jest spełniony. Dyskusja stosowalności otrzymanych wyników jest nieodłącznym elementem przeprowadzenia rachunku zaburzeń.

Okazuje się, że musimy tu wyróżnić dwa przypadki: pierwszy, kiedy spektrum \hat{H}_0 nie jest zdegenerowane i drugi, kiedy degeneracja występuje.

Napiszmy równanie własne dla hamiltonianu (13.1):

$$\begin{aligned} \hat{H} |\tilde{n}\rangle &= (\hat{H}_0 + \lambda \hat{H}') |n\rangle = E_n |n\rangle, \\ \hat{H}_0 |n\rangle &= E_n^{(0)} |n\rangle_0. \end{aligned} \quad (13.2)$$

Stany $|n\rangle$ są szukanymi stanami własnymi pełnego hamiltonianu. Stan $|n\rangle_0$ to stan, do którego redukuje się stan $|n\rangle$ w granicy $\lambda \rightarrow 0$. Stany $|n\rangle_0$ stanowią niezdegenerowany układ zupełny unormowanych stanów własnych \hat{H}_0 do wartości własnej $E_n^{(0)}$. Ponieważ stany $|n\rangle_0$ stanowią układ zupełny, więc każdy stan, w tym $|n\rangle$, możemy rozwinąć jako

$$|n\rangle = \sum_m c_{mn} |m\rangle_0. \quad (13.3)$$

O współczynnikach c_{mn} i energiach własnych E_n założymy, że mają postać szeregu potęgowego w λ :

$$\begin{aligned} c_{mn} &= \delta_{mn} + \lambda c_{mn}^{(1)} + \lambda^2 c_{mn}^{(2)} + \dots, \\ E_n &= E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \dots. \end{aligned} \quad (13.4)$$

Zauważmy, że w granicy $\lambda \rightarrow 0$ odtwarzamy stan własny $|n\rangle_0$ i energię $E_n^{(0)}$ niezaburzonego hamiltonianu \hat{H}_0 . Założymy też, że dla $r \neq 0$ $c_{nn}^{(r)} = 0$. W ten sposób unikniemy

podwójnego liczenia stanu $|n\rangle_0$ w szeregu (13.3). Podstawiając (13.4) i (13.3) do (13.2) otrzymujemy równanie

$$\begin{aligned} & \left(\hat{H}_0 + \lambda \hat{H}' \right) \left(|n\rangle_0 + \lambda \sum_{m \neq n} c_{mn}^{(1)} |m\rangle_0 + \lambda^2 \sum_{m \neq n} c_{mn}^{(2)} |m\rangle_0 + \dots \right) \\ &= \left(E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \dots \right) \left(|n\rangle_0 + \lambda \sum_{m \neq n} c_{mn}^{(1)} |m\rangle_0 + \lambda^2 \sum_{m \neq n} c_{mn}^{(2)} |m\rangle_0 + \dots \right). \end{aligned} \quad (13.5)$$

Przemnażając przez siebie szeregi występujące w (13.5) i porównując stronami wyrazy przy tych samych potęgach λ otrzymujemy układ równań:

$$\begin{aligned} \hat{H}_0 |n\rangle_0 &= E_n^{(0)} |n\rangle_0, \\ \hat{H}' |n\rangle_0 + \sum_{m \neq n} E_m^{(0)} c_{mn}^{(1)} |m\rangle_0 &= E_n^{(1)} |n\rangle_0 + E_n^{(0)} \sum_{m \neq n} c_{mn}^{(1)} |m\rangle_0, \\ \sum_{m \neq n} c_{mn}^{(1)} \hat{H}' |m\rangle_0 + \sum_{m \neq n} E_m^{(0)} c_{mn}^{(2)} |m\rangle_0 &= E_n^{(2)} |n\rangle_0 + E_n^{(1)} \sum_{m \neq n} c_{mn}^{(1)} |m\rangle_0 + E_n^{(0)} \sum_{m \neq n} c_{mn}^{(2)} |m\rangle_0, \\ &\dots \end{aligned} \quad (13.6)$$

13.1.1 Pierwszy rząd rachunku zaburzeń

Pierwsze z równań (13.6) jest po prostu równaniem własnym układu nie zaburzonego. Pozostałe równania dają się rozwiązać ze względu na $E_n^{(i)}$ i $c_{mn}^{(i)}$. W tym celu pomnożmy drugie z równań (13.6) przez ${}_0\langle n|$ i weźmy iloczyn skalarny

$${}_0\langle n| \hat{H}' |n\rangle_0 = E_n^{(1)}. \quad (13.7)$$

W ten sposób otrzymaliśmy wzór na pierwszą poprawkę do energii własnej. Mnożąc (13.6) przez ${}_0\langle k|$, gdzie $k \neq n$ otrzymujemy:

$${}_0\langle k| \hat{H}' |n\rangle_0 + E_k^{(0)} c_{kn}^{(1)} = E_n^{(0)} c_{kn}^{(1)}, \quad (13.8)$$

skąd

$$c_{kn}^{(1)} = -\frac{{}_0\langle k| \hat{H}' |n\rangle_0}{E_k^{(0)} - E_n^{(0)}}. \quad (13.9)$$

Zatem w rzędzie λ funkcja falowa ma postać:

$$|n\rangle = |n\rangle_0 - \lambda \sum_{m \neq n} |m\rangle_0 \frac{{}_0\langle m| \hat{H}' |n\rangle_0}{E_m^{(0)} - E_n^{(0)}} + \mathcal{O}(\lambda^2). \quad (13.10)$$

Sprawdźmy, czy stan $|n\rangle$ jest unormowany:

$$\begin{aligned}\langle n | n \rangle &= {}_0 \langle n' | n \rangle_0 + \lambda^2 \sum_{m \neq n} \sum_{k \neq n} \frac{{}_0 \langle n | \hat{H}' | k \rangle_0} {E_k^{(0)} - E_n^{(0)}} {}_0 \langle k | m \rangle_0 \frac{{}_0 \langle m | \hat{H}' | n \rangle_0} {E_m^{(0)} - E_n^{(0)}} \\ &= 1 + \lambda^2 \sum_{m \neq n} \frac{{}_0 \langle n | \hat{H}' | m \rangle_{00} \langle m | \hat{H}' | n \rangle_0} {(E_m^{(0)} - E_n^{(0)})^2} = 1 + \lambda^2 W\end{aligned}\quad (13.11)$$

Zatem stan $|n\rangle$ należy pomnożyć przez pierwiastek odwrotności z wyrażenia (13.11). Ponieważ jednak wszystkie wielkości rozwijamy w potęgę λ musimy także rozwinąć pierwiastek:

$$|n\rangle \rightarrow \frac{|n\rangle}{\sqrt{1 + \lambda^2 W}} = |n\rangle \left(1 - \frac{1}{2} \lambda^2 W + \dots \right).\quad (13.12)$$

Ponieważ jednak stan $|n\rangle$ znany z tylko dokładnością do wyrazu liniowego w λ , człon kwadratowy w rozwinięciu czynnika normalizacyjnego musimy pominąć. Trzeba jednak pamiętać, że da on przyczynek w drugim rzędzie rachunku zaburzeń.

13.1.2 Drugi rząd rachunku zaburzeń

Mnożąc trzecie z równań (13.6) przez stan $\langle n |$ otrzymujemy

$$\begin{aligned}E_n^{(2)} &= \sum_{m \neq n} c_{mn}^{(1)} {}_0 \langle n | \hat{H}' | m \rangle_0 = - \sum_{m \neq n} \frac{{}_0 \langle n | \hat{H}' | m \rangle_{00} \langle m | \hat{H}' | n \rangle_0} {E_m^{(0)} - E_n^{(0)}} \\ &= - \sum_{m \neq n} \frac{|{}_0 \langle m | \hat{H}' | n \rangle_0|^2} {E_m^{(0)} - E_n^{(0)}}.\end{aligned}\quad (13.13)$$

Warto zauważyć, że druga poprawka do stanu podstawowego jest zawsze ujemna.

Drugą poprawkę do funkcji falowej otrzymujemy mnożąc trzecie z równań (13.6) przez stan ${}_0 \langle k |$, $k \neq n$:

$$\sum_{m \neq n} c_{mn}^{(1)} {}_0 \langle k | \hat{H}' | m \rangle_0 + E_k^{(0)} c_{kn}^{(2)} = E_n^{(1)} c_{kn}^{(1)} + E_n^{(0)} c_{kn}^{(2)}.\quad (13.14)$$

Stąd $c_{kn}^{(2)}$ przyjmuje postać

$$\begin{aligned}c_{kn}^{(2)} &= \sum_{m \neq n} c_{mn}^{(1)} \frac{{}_0 \langle k | \hat{H}' | m \rangle_0} {E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} - c_{kn}^{(1)} \frac{E_n^{(1)}} {E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} \\ &= \sum_{m \neq n} \frac{{}_0 \langle n | \hat{H}' | m \rangle_{00} \langle m | \hat{H}' | n \rangle_0} {(E_k^{(0)} - E_n^{(0)}) (E_m^{(0)} - E_n^{(0)})} - \frac{{}_0 \langle k | \hat{H}' | n \rangle_{00} \langle n | \hat{H}' | n \rangle_0} {(E_k^{(0)} - E_n^{(0)})^2}.\end{aligned}\quad (13.15)$$

13.1.3 Oscylator harmoniczny zaburzony stałą siłą

Aby zilustrować metodę rachunku zaburzeń rozpatrzmy znany nam już jednowymiarowy oscylator harmoniczny poddany działaniu stałej siły F :

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{\omega^2 m}{2} \hat{x}^2 + F \hat{x}. \quad (13.16)$$

Po pierwsze warto zauważyć, że poprzez prostą zmianę zmiennych

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \frac{1}{2} \left(\frac{\hat{p}_x^2}{m} + \omega^2 m \left(\hat{x}^2 + 2 \frac{F}{\omega^2 m} \hat{x} + \frac{F^2}{\omega^4 m^2} - \frac{F^2}{\omega^4 m^2} \right) \right) \\ &= \frac{1}{2} \left(\frac{\hat{p}_y^2}{m} + \omega^2 m \hat{y}^2 \right) - \frac{F^2}{2\omega^2 m}, \end{aligned} \quad (13.17)$$

gdzie $y = x + F/\omega^2 m$ hamiltonian (13.16) daje się sprowadzić do sumy hamiltonianu opisującego oscylator bez zaburzenia i stałego (ujemnego) członu proporcjonalnego do kwadratu siły F . Energię takiego układu możemy napisać natychmiast, korzystając ze wzoru (9.28):

$$E_n = \hbar\omega \left(\frac{1}{2} + n \right) - \frac{F^2}{2\omega^2 m}. \quad (13.18)$$

Aby zastosować do hamiltonianu (13.16) rachunek zaburzeń, przyjmiemy jako H_0 hamiltonian oscylatora niezaburzonego, zaś jako H' :

$$\hat{H}' = F \hat{x}. \quad (13.19)$$

W poprzednim rozdziale wyliczyliśmy już element macierzowy operatora \hat{x} między stanami własnymi H_0 . Stąd

$${}_0 \langle m | \hat{H}' | n \rangle_0 = F \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \left(\sqrt{n+1} \delta_{m,n+1} + \sqrt{n} \delta_{m,n-1} \right). \quad (13.20)$$

Jak widać ze wzoru (13.20) element diagonalny operatora \hat{H}' znika i dlatego pierwsza poprawka do energii jest też równa 0. Natomiast nie znika druga poprawka do energii

$$\begin{aligned} E_n^{(2)} &= -\frac{\hbar F^2}{2m\omega} \sum_{m \neq n} \frac{(\sqrt{n+1} \delta_{m,n+1} + \sqrt{n} \delta_{m,n-1})^2}{\hbar\omega(m-n)} \\ &= -\frac{F^2}{2m\omega^2} ((n+1) - n) \\ &= -\frac{F^2}{2m\omega^2}. \end{aligned} \quad (13.21)$$

Widać stąd, że druga poprawka całkowicie odtwarza stałą ze wzoru (13.18). Zatem drugi rząd rachunku zaburzeń daje dokładny wynik na poziomy energetyczne zaburzonego stałą siłą oscylatora harmonicznego.

13.2 Przypadek z degeneracją

13.2.1 Pierwszy rząd rachunku zaburzeń

Zajmiemy się teraz przypadkiem, kiedy jednej wartości własnej hamiltonianu H_0 odpowiada kilka stanów własnych:

$$\hat{H}_0 |n, i\rangle_0 = E_n^{(0)} |n, i\rangle_0, \quad (13.22)$$

gdzie i zmienia się od 1 do I_n . W niektórych przypadkach lepiej jest przyjąć, że i zmienia się w granicach I_n^{\min} do I_n^{\max} ; wtedy wystarczy przesunąć i o wartość $-I_n^{\min} + 1$, aby dolna granica była 1. Zwróćmy uwagę, że dowolna kombinacja liniowa

$$\sum_{i=1}^{I_n} a_n^i |n, i\rangle_0 \quad (13.23)$$

jest też stanem własnym do energii $E_n^{(0)}$.

Pełne równanie Schrödingera przyjmuje wówczas postać

$$(H_0 + \lambda H') |n\rangle = E_n |n\rangle, \quad (13.24)$$

gdzie

$$|n\rangle = \sum_m \sum_{i=0}^{I_m} c_{mn}^j |m, i\rangle_0, \quad (13.25)$$

przy czym wskaźnik n oznacza tu jeden konkretny stan o energii E_n . Trzeba jednak pamiętać, że mając do dyspozycji I_n stanów możemy utworzyć I_n ortogonalnych kombinacji (13.25). Stąd index n należałoby uzupełnić dodatkowym indeksem numerującym te kombinacje, o ile miałyby one tę samą energię E_n .

Zastanówmy się, co może się stać w wyniku „włączenia” zaburzenia. Wyobraźmy sobie stan trzykrotnie zdegenerowany. Po pierwsze może się zdarzyć, że – podobnie jak w poprzednim przypadku bez degeneracji – energia *wszystkich* stanów $|m, j\rangle_0$ przesunie się o małą poprawkę. Wówczas degeneracja się nie zmienia, a n występujące w (13.25) oznacza zespół 2 liczb $n \rightarrow (n, i)$, gdzie $i = 1, 2, 3$. Jednakże, i to jest najczęstszy przypadek, degeneracja zostaje usunięta częściowo: Energia 2 stanów przesunie się o Δ_1 : $E_{n_1} = E_n^{(0)} + \Delta_1$, a energia trzeciego stanu o Δ_2 : $E_{n_2} = E_n^{(0)} + \Delta_2$. Wówczas mamy dwa stany o energii E_{n_1} i wtedy $n \rightarrow (n_1, 1), (n_1, 2)$ i jeden stan o energii E_{n_2} , czyli $n \rightarrow n_2$ (bez dodatkowego indeksu). Wreszcie każdy z trzech poziomów niezaburzonych może przesunąć się o różną wartość $\Delta_{1,2,3}$ i wtedy mówimy, że degeneracja została zniesiona całkowicie, $n \rightarrow n_1, n_2$ lub n_3 . We wszystkich trzech przypadkach granicy $\lambda \rightarrow 0$ porawki znikną $\Delta_i \rightarrow 0$, ale stany własne odpowiadające $E_{n_k} = E_n^{(0)} + \Delta_k$ dążyć będą na ogół nie do wyjściowych stanów $|n, i\rangle_0$ ale do ich kombinacji liniowych (13.23).

Postępując podobnie jak w przypadku niezdegenerowanym

$$c_{mn}^j = c_m^{j(0)} \delta_{mn} + \lambda c_{mn}^{j(1)} + \lambda^2 c_{mn}^{j(2)} + \dots \quad (13.26)$$

musimy założyć, że $c_{mn}^{j(0)} = c_m^{j(0)} \delta_{mn}$ ponieważ w granicy $\lambda \rightarrow 0$ stan $|n\rangle$ będzie na ogół przechodził w pewną kombinację liniową stanów $|n, i\rangle_0$. Pozostałe $c_{mn}^{j(r)} = 0$ dla $m = n$. Stąd równania (13.6) przyjmują postać

$$\begin{aligned} \hat{H}_0 \sum_i c_n^{i(0)} |n, i\rangle_0 &= E_n^{(0)} \sum_i c_n^{i(0)} |n, i\rangle_0, \\ \hat{H}' \sum_i c_n^{i(0)} |n, i\rangle_0 + \sum_{m \neq n} E_m^{(0)} \sum_j c_{mn}^{j(1)} |m, j\rangle_0 &= E_n^{(1)} \sum_i c_n^{i(0)} |n, i\rangle_0 + E_n^{(0)} \sum_{m \neq n} \sum_j c_{mn}^{j(1)} |m, j\rangle_0, \\ &\dots \end{aligned} \quad (13.27)$$

Podobnie jak poprzednio pierwsze równanie (13.27) odtwarza po prostu widmo niezaburzonego hamiltonianu. Mnożąc drugie z równań (13.27) przez stan ${}_0\langle n, k|$ otrzymujemy:

$$\sum_i {}_0\langle n, k| \hat{H}' |n, i\rangle_0 c_n^{i(0)} = E_n^{(1)} c_n^{k(0)}. \quad (13.28)$$

Równanie to warto przepisać jako:

$$\sum_i \left({}_0\langle n, k| \hat{H}' |n, i\rangle_0 - E_n^{(1)} \delta_{ki} \right) c_n^{i(0)} = 0. \quad (13.29)$$

Z algebraicznego punktu widzenia jest to *równanie własne* jakie otrzymalibyśmy próbując zdiagnozować macierz hamiltonianu zaburzającego. Otrzymane w ten sposób wartości własne $E_n^{(1)}$ są szukanymi poprawkami do energii problemu niezaburzonego. Jeżeli wszystkie wartości własne w równaniu (13.29) wyjdą różne, wtedy mówimy o całkowitym zniesieniu degeneracji. Jeżeli jednak wyjdzie kilka równych wartości własnych to zniesienie degeneracji będzie tylko częściowe. Wektory własne $c_n^{i(0)}$ określą nam kombinacje liniowe stanów $|n, i\rangle_0$ do których zredukuje się stan $|n\rangle$ w granicy $\lambda \rightarrow 0$.

Aby wyliczyć poprawkę do funkcji falowej, musimy pomnożyć drugie z równań (13.27) przez stan ${}_0\langle m', k|$ ($m' \neq n$). Po opuszczeniu znaku ' otrzymujemy:

$$\sum_i c_i^{(0)} {}_0\langle m', k| \hat{H}' |n, i\rangle_0 + E_m^{(0)} c_{mn}^{k(1)} = E_n^{(0)} c_{mn}^{k(1)}, \quad (13.30)$$

co daje

$$c_{mn}^{k(1)} = - \sum_i \frac{{}_0\langle m', k| \hat{H}' |n, i\rangle_0}{E_m^{(0)} - E_n^{(0)}} c_n^{i(0)} \quad (13.31)$$

13.2.2 Dwuwymiarowy oscylator harmoniczny z zaburzeniem xy

Omówioną w poprzednim paragrafie metodę warto zilustrować przykładem. Weźmy w charakterze wyjściowego układu niezaburzonego dwuwymiarowy oscylator harmoniczny

$$H_0 = H_{x,0} + H_{y,0} = \frac{1}{2} \left(\frac{\hat{p}_x^2}{m} + \omega^2 m \hat{x}^2 \right) + \frac{1}{2} \left(\frac{\hat{p}_y^2}{m} + \omega^2 m \hat{y}^2 \right). \quad (13.32)$$

Stany własne takiego układu są *iloczynem* stanów własnych oscylatora w zmiennej x i w zmiennej y . Będziemy je oznaczać jako

$$|n_x\rangle |n_y\rangle. \quad (13.33)$$

Rzeczywiście, ponieważ $H_{x,0}$ i $H_{y,0}$ komutują, stany (13.33) stanowią zupełny układ stanów. Odpowiadające im energie są sumą energii pochodzących od każdego oscylatora

$$E_{n_x n_y} = \hbar\omega (n_x + n_y + 1). \quad (13.34)$$

Jak widać z powyższego wzoru stany własne, poza stanem podstawowym, są zdegenerowane. Np. pierwszy stan wzbudzony o energii $E = 2\hbar\omega$ jest zdegenerowany dwukrotnie

$$|1\rangle |0\rangle \text{ i } |0\rangle |1\rangle, \quad (13.35)$$

a drugi stan wzbudzony o energii $E = 3\hbar\omega$ jest trzykrotnie zdegenerowany

$$|2\rangle |0\rangle, |1\rangle |1\rangle \text{ i } |0\rangle |2\rangle. \quad (13.36)$$

W charakterze zaburzenia weźmy potencjał

$$\hat{H}' = \hat{V} = 2\varepsilon \left(\frac{\hat{x}}{l} \right) \left(\frac{\hat{y}}{l} \right), \quad (13.37)$$

gdzie l jest charakterystyczną długością jaką można utworzyć ze stałych wymiarowych oscylatora harmonicznego

$$l = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}},$$

natomiast ε jest stałą o wymiarze energii określającą siłę zaburzenia. Warto wyrazić \hat{V} przez operatory kreacji i anihilacji, przy czym będziemy teraz mieli dwa typy takich operatorów: operatory działające w przestrzeni stanów pierwszego oscylatora (oscylatora „ x -owego”) i w przestrzeni drugiego („ y -owego”), gdzie

$$\frac{\hat{x}}{l} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{a}_x^\dagger + \hat{a}_x), \quad \frac{\hat{y}}{l} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{a}_y^\dagger + \hat{a}_y)$$

Mamy więc

$$\begin{aligned} \hat{V} &= \varepsilon (\hat{a}_x^\dagger + \hat{a}_x) (\hat{a}_y^\dagger + \hat{a}_y) \\ &= \varepsilon (\hat{a}_x^\dagger \hat{a}_y^\dagger + \hat{a}_x^\dagger \hat{a}_y + \hat{a}_x \hat{a}_y^\dagger + \hat{a}_x \hat{a}_y). \end{aligned} \quad (13.38)$$

Działając operatorem \hat{V} na dowolny stan (13.33) otrzymujemy:

$$\begin{aligned} \hat{V} |n_x\rangle |n_y\rangle &= \varepsilon (\hat{a}_x^\dagger \hat{a}_y^\dagger + \hat{a}_x^\dagger \hat{a}_y + \hat{a}_x \hat{a}_y^\dagger + \hat{a}_x \hat{a}_y) |n_x\rangle |n_y\rangle \\ &= \varepsilon \left\{ \sqrt{(n_x+1)(n_y+1)} |n_x+1\rangle |n_y+1\rangle + \sqrt{(n_x+1)n_y} |n_x+1\rangle |n_y-1\rangle \right. \\ &\quad \left. + \sqrt{n_x(n_y+1)} |n_x-1\rangle |n_y+1\rangle + \sqrt{n_x n_y} |n_x-1\rangle |n_y-1\rangle \right\}. \end{aligned} \quad (13.39)$$

Z powyższego wzoru widać, że operator \hat{V} przetrzuca dany stan w stan o energii większej lub mniejszej o $\hbar\omega$, ale także *miesza* różne stany odpowiadające tej samej energii (tzn. ma niezerowe elementy między tymi stanami).

Dla przykładu rozpatrzmy poprawkę do energii pierwszego stanu wzbudzonego. Niech n oznacza sumę $n = n_x + n_y$, a za wskaźnik degeneracji przyjmijmy np. $i = n_y + 1$. Dla pierwszego stanu wzbudzonego $n = 1$ a $i = 0, 1$. Stąd:

$$|1\rangle |0\rangle = |1, 1\rangle, \quad |0\rangle |1\rangle = |1, 2\rangle. \quad (13.40)$$

Otrzymujemy

$$\begin{aligned} \hat{V} |1, 1\rangle &= \varepsilon \{ \dots + 0 |1, 1\rangle + |1, 2\rangle + \dots \}, \\ \hat{V} |1, 2\rangle &= \varepsilon \{ \dots + |1, 1\rangle + 0 |1, 2\rangle + \dots \} \end{aligned}$$

i równanie (13.29) przyjmuje postać

$$\begin{aligned} & \begin{bmatrix} \langle 1, 1 | \hat{V} |1, 1\rangle & \langle 1, 1 | \hat{V} |1, 2\rangle \\ \langle 1, 2 | \hat{V} |1, 1\rangle & \langle 1, 2 | \hat{V} |1, 2\rangle \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c^{1(0)} \\ c^{2(0)} \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} E_1^{(1)} & 0 \\ 0 & E_1^{(1)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c^{1(0)} \\ c^{2(0)} \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} -E_1^{(1)} & \varepsilon \\ \varepsilon & -E_1^{(1)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c^{1(0)} \\ c^{2(0)} \end{bmatrix} = 0. \end{aligned} \quad (13.41)$$

Wyznacznik macierzy występującej w (13.41) wynosi

$$\left(E_1^{(1)} \right)^2 - \varepsilon^2 = 0, \quad (13.42)$$

co daje

$$E_1^{(1)} = \mp \varepsilon. \quad (13.43)$$

Widzimy zatem, że już w pierwszym rzędzie rachunku zaburzeń nastąpiło zniesienie degeneracji.

Unormowane wektory własne do wartości własnych (13.43) przyjmują postać:

$$\begin{bmatrix} c_{1\mp}^{0(0)} \\ c_{1\mp}^{1(0)} \end{bmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ \mp 1 \end{bmatrix}. \quad (13.44)$$

A zatem stany własne do których dążą pełne stany wyliczone w pierwszym rzędzie rachunku zaburzeń, są następującymi kombinacjami stanów wyjściowych:

$$\begin{aligned} |1, -\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|1\rangle |0\rangle - |0\rangle |1\rangle) \\ |1, +\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|1\rangle |0\rangle + |0\rangle |1\rangle). \end{aligned} \quad (13.45)$$

Jak łatwo się przekonać, są to stany znormalizowane i wzajemnie ortogonalne. Dla odróżnienia od stanów wyjściowych oznaczyliśmy je jako $|1, \mp\rangle$.

Aby wyliczyć poprawkę do funkcji falowej musimy wyliczyć elementy macierzowe \hat{V} od stanów $|1, 0\rangle$ i $|0, 1\rangle$ do wszystkich stanów o innych energiach. W naszym przypadku rzut oka na równanie (13.39) pozwala stwierdzić, że są to stany:

$$\begin{aligned} |1\rangle |0\rangle &\rightarrow \sqrt{2} |2\rangle |1\rangle, \\ |0\rangle |1\rangle &\rightarrow \sqrt{2} |1\rangle |2\rangle \end{aligned}$$

o energii $E = 4\hbar\omega$.