# 13 Stacjonarny rachunek zaburzeń

## 13.1 Przypadek bez degeneracji

Dyskutowane w poprzednich rozdziałach potencjały dopuszczały dokładne rozwiązanie problemu własnego. Jednak bardzo często nie potrafimy analitycznie uzyskać takich rozwiązań. Dlatego w takich przypadkach musimy szukać przybliżonych metod znajdywania 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 $\lambda$, który posłuży nam jako parametr rozwinięcia

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}' = \hat{H}_0 + \lambda \hat{H}'. \tag{13.1}$$

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):

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

Stany $|n\rangle$ są szukanymi stanami własnymi pełnego hamiltonianu. Stan $|n\rangle_0$ to stan, do którego redukuje się stan $|n\rangle$ w granicy $\lambda \to 0$. 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

$$|n\rangle = \sum_m c_{mn}\,|m\rangle_0\,. \tag{13.3}$$

O współczynikach $c_{mn}$ i energiach własnych $E_n$ założymy, że mają postać szeregu potęgowego w $\lambda$:

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

Zauważmy, że w granicy $\lambda \to 0$ 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

$$
\begin{aligned}
&\left(\hat{H}_0 + \lambda \hat{H}'\right) \left( |n\rangle_0 + \lambda \sum_{m\neq n} c^{(1)}_{mn} |m\rangle_0 + \lambda^2 \sum_{m\neq n} c^{(2)}_{mn} |m\rangle_0 + \ldots \right) \\
= &\left(E^{(0)}_n + \lambda\, E^{(1)}_n + \lambda^2\, E^{(2)}_n + \ldots\right) \left( |n\rangle_0 + \lambda \sum_{m\neq n} c^{(1)}_{mn} |m\rangle_0 + \lambda^2 \sum_{m\neq n} c^{(2)}_{mn} |m\rangle_0 + \ldots \right).
\end{aligned} \tag{13.5}
$$

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

$$
\begin{aligned}
\hat{H}_0 |n\rangle_0 &= E^{(0)}_n |n\rangle_0 , \\
\hat{H}' |n\rangle_0 + \sum_{m\neq n} E^{(0)}_m c^{(1)}_{mn} |m\rangle_0 &= E^{(1)}_n |n\rangle_0 + E^{(0)}_n \sum_{m\neq n} c^{(1)}_{mn} |m\rangle_0 , \\
\sum_{m\neq n} c^{(1)}_{mn} \hat{H}' |m\rangle_0 + \sum_{m\neq n} E^{(0)}_m c^{(2)}_{mn} |m\rangle_0 &= E^{(2)}_n |n\rangle_0 + E^{(1)}_n \sum_{m\neq n} c^{(1)}_{mn} |m\rangle_0 + E^{(0)}_n \sum_{m\neq n} c^{(2)}_{mn} |m\rangle_0 , \\
&\ldots
\end{aligned} \tag{13.6}
$$

### 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 $E^{(i)}_n$ i $c^{(i)}_{mn}$. W tym celu pomnóżmy drugie z równań (13.6) przez ${}_0\langle n|$ i weźmy iloczyn skalarny

$$
{}_0\langle n| \hat{H}' |n\rangle_0 = E^{(1)}_n. \tag{13.7}
$$

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

$$
{}_0\langle k| \hat{H}' |n\rangle_0 + E^{(0)}_k c^{(1)}_{kn} = E^{(0)}_n c^{(1)}_{kn}, \tag{13.8}
$$

skąd

$$
c^{(1)}_{kn} = -\frac{{}_0\langle k| \hat{H}' |n\rangle_0}{E^{(0)}_k - E^{(0)}_n}. \tag{13.9}
$$

Zatem w rzędzie $\lambda$ funkcja falowa ma postać:

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

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

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

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

$$|n\rangle \to \frac{|n\rangle}{\sqrt{1+\lambda^2 W}} = |n\rangle\left(1-\frac{1}{2}\lambda^2 W+\ldots\right). \tag{13.12}$$

Ponieważ jednak stan $|n\rangle$ znamy z tylko dokładnością do wyrazu liniowego w $\lambda$, 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

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

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

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

Stąd $c_{kn}^{(2)}$ przyjmuje postać

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

Pełna poprawka do funkcji falowej w drugim rzędzie rachunku zaburzeń, po uwzględnieniu poprawki na normę ma postać

$$
\begin{aligned}
|n\rangle &= \left[1 - \frac{1}{2}\lambda^2 \sum_{m\neq n} \frac{{}_0\langle n|\,\hat{H}'\,|m\rangle_{00}\,\langle m|\,\hat{H}'\,|n\rangle_0}{\left(E_m^{(0)} - E_n^{(0)}\right)^2}\right] |n\rangle_0 \\
&\quad -\lambda \sum_{m\neq n} |m\rangle_0 \frac{{}_0\langle m|\,\hat{H}'\,|n\rangle_0}{E_m^{(0)} - E_n^{(0)}} \left(1 + \lambda \frac{{}_0\langle n|\,\hat{H}'\,|n\rangle_0}{E_m^{(0)} - E_n^{(0)}}\right) \\
&\quad +\lambda^2 \sum_{\substack{n\neq n \\ k\neq n}} |m\rangle_0 \frac{{}_0\langle m|\,\hat{H}'\,|k\rangle_{00}\,\langle k|\,\hat{H}'\,|n\rangle_0}{\left(E_m^{(0)} - E_n^{(0)}\right)\left(E_k^{(0)} - E_n^{(0)}\right)}. \qquad (13.16)
\end{aligned}
$$

SPRAWDZIC!!!!!!!!!!

### 13.1.3 Oscylator harmoniczny zaburzony stałą siłą

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

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{\omega^2 m}{2}\hat{x}^2 + F\,\hat{x}. \qquad (13.17)$$

Po pierwsze warto zauważyć, że poprzez prostą zmianę zmiennych

$$
\begin{aligned}
\hat{H} &= \frac{1}{2}\left(\frac{\hat{p}_x^2}{m} + \omega^2 m \left(\hat{x}^2 + 2\frac{F}{\omega^2 m}\,\hat{x} + \frac{F^2}{\omega^4 m^2} - \frac{F^2}{\omega^4 m^2}\right)\right) \\
&= \frac{1}{2}\left(\frac{\hat{p}_y^2}{m} + \omega^2 m\,\hat{y}^2\right) - \frac{F^2}{2\omega^2 m}, \qquad (13.18)
\end{aligned}
$$

gdzie $y = x + F/\omega^2 m$ hamiltonian (13.17) 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 (???)

$$E_n = \hbar\omega\left(\frac{1}{2} + n\right) - \frac{F^2}{2\omega^2 m}. \qquad (13.19)$$

Aby zastosować do hamiltonianu (13.17) rachunek zaburzeń, przyjmiemy jako $H_0$ hamiltonian oscylatora niezaburzonego, zaś jako $H'$:

$$\hat{H}' = F\,\hat{x}. \qquad (13.20)$$

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

$${}_0\langle m|\,\hat{H}'\,|n\rangle_0 = \sqrt{\frac{\hbar F^2}{2m\omega}}\left(\sqrt{n+1}\,\delta_{m,n+1} + \sqrt{n}\,\delta_{m,n-1}\right). \qquad (13.21)$$

Jak widać ze wzoru (13.21) element diagonalny operatora $\hat{H}'$ znika i dlatego pierwsza poprawka do energii jest też równa 0. Natomiast nie znika druga poprawka do energii

$$\begin{aligned} E_n^{(2)} &= -\frac{\hbar F^2}{2m\omega}\sum_{m\neq n}\frac{\left(\sqrt{n+1}\delta_{m,n+1}+\sqrt{n}\delta_{m,n-1}\right)^2}{\hbar\omega\,(m-n)} \\ &= -\frac{F^2}{2m\omega^2}\left((n+1)-n\right) \\ &= -\frac{F^2}{2m\omega^2}. \end{aligned} \tag{13.22}$$

Widać stąd, że druga poprawka całkowicie odtwarza stałą ze wzoru (13.19). 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:

$$\hat{H}_0\,|n,i\rangle_0 = E_n^{(0)}\,|n,i\rangle_0\,, \tag{13.23}$$

gdzie $i$ zmienia się on 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

$$\sum_{i=1}^{I_n} a_n^i\,|n,i\rangle_0 \tag{13.24}$$

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

Pełne równanie Schrödingera przyjmuje wówczas postać

$$(H_0+\lambda H')\,|n\rangle = E_n\,|n\rangle\,, \tag{13.25}$$

gdzie

$$|n\rangle = \sum_m\sum_{i=0}^{I_m} c_{mn}^j\,|m,i\rangle_0\,, \tag{13.26}$$

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 (13.26). 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 zmieni, a $n$ występujące w (13.26) oznacza zespół 2 liczb $n \to (n,i)$, gdzie $i = 1,2,3$. Jednakże, i to jest najczęstszy przypadek, degenaracja zostaje usunięta częściowo: Energia 2 stanów przsunie się o $\Delta_1$: $E_{n_1} = E_n^{(0)} + \Delta_1$, a energia trzeciego stanu o $\Delta_2$: $E_{n_2} = E_n^{(0)} + \Delta_2$. Wówczas mamy dwa stany o energii $E_{n_1}$ i wtedy $n \to (n_1,1),(n_1,2)$ i jeden stan o energii $E_{n_2}$, czyli $n \to n_2$ (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, $n \to n_1$, $n_2$ lub $n_3$. We wszystkich trzech przypadkach granicy $\lambda \to 0$ porawki znikną $\Delta_i \to 0$, ale stany własne odpowiadające $E_{n_k} = E_n^{(0)} + \Delta_k$ dążyć bedą na ogół nie do wyjściowych stanów $|n,i\rangle_0$ ale do ich kombinacji liniowych (13.24).

Postępując podobnie jak w przypadku niezdegenerowanym

$$c_{mn}^{j} = c_m^{j(0)}\delta_{mn} + \lambda\, c_{mn}^{j(1)} + \lambda^2\, c_{mn}^{j(2)} + \ldots \tag{13.27}$$

musimy założyć, że $c_{mn}^{j(0)} = c_m^{j(0)}\delta_{mn}$ ponieważ w granicy $\lambda \to 0$ 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

$$\begin{aligned} \hat{H}_0 \sum_i c_n^{i(0)}\,|n,i\rangle_0 &= E_n^{(0)} \sum_i c_n^{i(0)}\,|n,i\rangle_0\,, \\ \hat{H}' \sum_i c_n^{i(0)}\,|n,i\rangle_0 + \sum_{m\neq n} E_m^{(0)} \sum_j c_{mn}^{j(1)}\,|m,j\rangle_0 &= E_n^{(1)} \sum_i c_n^{i(0)}\,|n,i\rangle_0 + E_n^{(0)} \sum_{m\neq n}\sum_j c_{mn}^{j(1)}\,|m,j\rangle_0\,, \\ &\ldots \end{aligned} \tag{13.28}$$

Podobnie jak poprzednio pierwsze równanie (13.28) odtwarza po prostu widmo niezaburzonego hamiltonianu. Mnożąc drugie z równań (13.28) przez stan ${}_0\langle n,k|$ otrzymujemy:

$$\sum_i {}_0\langle n,k|\,\hat{H}'\,|n,i\rangle_0\; c_n^{i(0)} = E_n^{(1)} c_n^{k(0)}. \tag{13.29}$$

Równanie to warto przepisać jako:

$$\sum_i \left({}_0\langle n,k|\,\hat{H}'\,|n,i\rangle_0 - E_n^{(1)}\delta_{ki}\right) c_n^{i(0)} = 0. \tag{13.30}$$

Z algebraicznego punktu widzenia jest to *równanie własne* jakie otrzymalibyśmy próbując zdiagonalizować macierz hamiltonianu zaburzającego. Otrzymany w ten sposób wartości własne $E_n^{(1)}$ są szukanymi poprawkami do energii problemu niezaburzonego. Jeżeli wszystkie wartości własne w równaniu (13.30) wyjdą różne, wtedy mówimy o całkowitym zniesieniu degeneracji. Jeżeli jednak wyjdzie kilka równych wartości własnych to zniesienie degeneracji będzie tylko częściowe. Wektory własne $\vec{c}_n^{(0)}$ określą nam kombinacje liniowe stanów $|n,i\rangle_0$ do których zredukuje się stan $|n\rangle$ w granicy $\lambda \to 0$.

Aby wyliczyć poprawkę do funkcji falowej, musimy pomnożyć drugie z równań (13.28) przez stan ${}_0\langle m',k|$ ( $m' \neq n$ ). Po opuszczeniu znaku $'$ otrzymujemy:

$$\sum_i c_i^{(0)}\;{}_0\langle m,k|\,\hat{H}'\,|n,i\rangle_0 + E_m^{(0)}\, c_{mn}^{k(1)} = E_n^{(0)} c_{mn}^{k(1)}, \tag{13.31}$$

co daje

$$c_{mn}^{k(1)} = -\sum_i \frac{{}_0\langle m,k|\,\hat{H}'\,|n,i\rangle_0}{E_m^{(0)} - E_n^{(0)}} c_n^{i(0)} \tag{13.32}$$

### 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

$$H_0 = H_{x,0} + H_{y,0} = \frac{1}{2}\left(\frac{\hat{p}_x^2}{m} + \omega^2 m\,\hat{x}^2\right) + \frac{1}{2}\left(\frac{\hat{p}_y^2}{m} + \omega^2 m\,\hat{y}^2\right). \tag{13.33}$$

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

$$|n_x\rangle\,|n_y\rangle\,. \tag{13.34}$$

Rzeczywiście, ponieważ $H_{x,0}$ i $H_{y,0}$ komutują, stany (13.34) stanowią zupełny układ stanów. Odpowiadające im energie są sumą energii pochodzących od każdego oscylatora

$$E_{n_x\,n_y} = \hbar\omega\,(n_x + n_y + 1)\,. \tag{13.35}$$

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

$$|1\rangle\,|0\rangle \;\text{ i }\; |0\rangle\,|1\rangle\,, \tag{13.36}$$

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

$$|2\rangle\,|0\rangle\,,\; |1\rangle\,|1\rangle \;\text{ i }\; |0\rangle\,|2\rangle\,. \tag{13.37}$$

W charakterze zaburzenia weźmy potencjał

$$\hat{H}' = \hat{V} = 2\varepsilon\left(\frac{\hat{x}}{l}\right)\left(\frac{\hat{y}}{l}\right), \tag{13.38}$$

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

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

natomiast $\varepsilon$ 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

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

Mamy więc

$$\begin{aligned}\hat{V} &= \varepsilon\left(\hat{a}_x^\dagger + \hat{a}_x\right)\left(\hat{a}_y^\dagger + \hat{a}_y\right) \\ &= \varepsilon\left(\hat{a}_x^\dagger \hat{a}_y^\dagger + \hat{a}_x^\dagger \hat{a}_y + \hat{a}_x \hat{a}_y^\dagger + \hat{a}_x \hat{a}_y\right). \end{aligned} \tag{13.39}$$

Działając operatorem $\hat{V}$ na dowolny stan (13.34) otrzymujemy:

$$\begin{aligned}\hat{V}\,|n_x,n_y\rangle &= \varepsilon\left(\hat{a}_x^\dagger \hat{a}_y^\dagger + \hat{a}_x^\dagger \hat{a}_y + \hat{a}_x \hat{a}_y^\dagger + \hat{a}_x \hat{a}_y\right)|n_x\rangle\,|n_y\rangle \\ &= \varepsilon\left\{\sqrt{(n_x+1)(n_y+1)}\,|n_x+1\rangle\,|n_y+1\rangle + \sqrt{(n_x+1)n_y}\,|n_x+1\rangle\,|n_y-1\rangle\right. \\ &\quad \left. +\sqrt{n_x(n_y+1)}\,|n_x-1\rangle\,|n_y+1\rangle + \sqrt{n_x n_y}\,|n_x-1\rangle\,|n_y-1\rangle\right\}. \end{aligned} \tag{13.40}$$

Z powyższego wzoru widać, że operator $\hat{V}$ przerzuca dany stan w stan o energii większej lub mniejszeh 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:

$$|1\rangle\,|0\rangle = |1,1\rangle\,, \quad |0\rangle\,|1\rangle = |1,2\rangle\,. \tag{13.41}$$

Równanie (13.30) przyjmuje postać

$$\begin{aligned}&\left[\begin{array}{cc}\langle 1,0|\,\hat{V}\,|1,0\rangle & \langle 1,0|\,\hat{V}\,|0,1\rangle \\ \langle 1,0|\,\hat{V}\,|0,1\rangle & \langle 0,1|\,\hat{V}\,|0,1\rangle\end{array}\right]\left[\begin{array}{c}c^{1(0)} \\ c^{2(0)}\end{array}\right] - \left[\begin{array}{cc}E_1^{(1)} & 0 \\ 0 & E_1^{(1)}\end{array}\right]\left[\begin{array}{c}c^{1(0)} \\ c^{2(0)}\end{array}\right] \\ =\; &\left[\begin{array}{cc}-E_1^{(1)} & \varepsilon \\ \varepsilon & -E_1^{(1)}\end{array}\right]\left[\begin{array}{c}c^{1(0)} \\ c^{2(0)}\end{array}\right] = 0. \end{aligned} \tag{13.42}$$

Wyznacznik macierzy występującej w (13.42) wynosi

$$\left(E_1^{(1)}\right)^2 - \varepsilon^2 = 0, \tag{13.43}$$

co daje

$$E_1^{(1)} = \mp\varepsilon. \tag{13.44}$$

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

Unormowane wektory własne do wartości własnych (13.44) przyjmują postać:

$$\left[\begin{array}{c}c_{1\mp}^{0(0)} \\ c_{1\mp}^{1(0)}\end{array}\right] = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\begin{array}{c}1 \\ \mp 1\end{array}\right]. \tag{13.45}$$

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

$$\begin{aligned} |1,-\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|1\rangle\,|0\rangle - |0\rangle\,|1\rangle\right) \\ |1,+\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|1\rangle\,|0\rangle + |0\rangle\,|1\rangle\right). \end{aligned} \tag{13.46}$$

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 (13.40) 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 enrgii $E = 4\hbar\omega$.