

III(a) Θεωρία Διαταράξεων - Μία Στελλοειδής Κατασκευή

Η δόξαση γενική προσεγγιστική μέθοδος είναι η θεωρία διαταράξεων. Η μέθοδος ξεκινάει από γνωστή λύση (ή γνωστή προσεγγιστική λύση) μέρους της Χαμιλιτωναίας Ηλ για την επίλυση άλλων σχεδίου του προβλήματος. Το υπόλοιπο πρόβλημα είναι

$$\hat{H} \psi = E_p \psi \quad (32)$$

Υποθέτουμε ότι η Χαμιλιτωναία Ηλ χωρίζεται ως

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}^{(1)} \quad (33)$$

όπου $\hat{H}^{(1)}$ " διατάραξις ". Η \hat{H}_0 είναι μη αναστρέψιμη Χαμιλιτωναία της οποίας συνδέουμε ότι οι λύσεις είναι γνωστές, δηλ. συνδέουμε ότι γνωρίζουμε τις λύσεις της

$$\hat{H}_0 \psi_p^{(0)} = E_p^{(0)} \psi_p^{(0)} \quad (34)$$

$\{\psi_p^{(0)}\}_p \rightarrow$ είναι ανεξάρτητων γνωστών. Το πρώτο της θεωρίας διαταράξεων είναι η προσέγγιση ως προς από $\{\psi_p^{(0)}\}_p$ είναι επίλυση της (32). Από βιβλίο ή τις προτιμάμε ότι το μέρος της διαταράξεως $\hat{H}^{(1)}$ δεν είναι μεγάλο σε σχέση με την \hat{H}_0 . Η "βασική" ανάλυση της προηγούμενης προτάσεως είναι ότι οι λύσεις $\{\psi_p\}$ παύουν "σχεδόν" με τις γνωστές $\{\psi_p^{(0)}\}$. Εξισώσαμε τώρα την παράσταση η λύση της σχέσεως

$$\hat{H}(\eta) = \hat{H}_0 + \eta \hat{H}^{(1)} \quad (35)$$

→ Από την (35) παίρνουμε

$$\left. \begin{aligned} \hat{H}(0) &= H_0 \\ \hat{H}(1) &= H \end{aligned} \right\} \quad (36)$$

Συνήθως με την (35) ή (32) γράφεται

$$\hat{H}(\lambda) \psi_p(\lambda) = E_p(\lambda) \psi_p(\lambda) \quad (37)$$

Γράφουμε

$$\psi_p(\lambda) = \sum_{N=0}^{\infty} \left(\frac{\partial^N \psi_p}{\partial \lambda^N} \right)_{\lambda=0} \frac{\lambda^N}{N!} = \sum_{N=0}^{\infty} \psi_p^{(N)} \frac{\lambda^N}{N!} \quad (38)$$

Η διίστασις (38) γίνεται γύρω από το $\lambda=0$, δηλ. γύρω από την $\psi_p^{(0)}$. > Επίσης

και

$$\lim_{\lambda \rightarrow 0} \psi_p(\lambda) = \psi_p(0) \equiv \psi_p^{(0)}$$

$$H_0 \psi_p^{(0)} = E_p(0) \psi_p^{(0)} = E_p^{(0)} \psi_p^{(0)} \quad (39)$$

> Επίσης

$$E_p(\lambda) = \sum_{N=0}^{\infty} \left(\frac{d^N E_p}{d\lambda^N} \right)_{\lambda=0} \frac{\lambda^N}{N!} = \sum_{N=0}^{\infty} E_p^{(N)} \frac{\lambda^N}{N!} \quad (40)$$

> Από την (35) έχουμε

$$(H_0 + \lambda H^{(1)}) \psi_p = E_p \psi_p \quad (41)$$

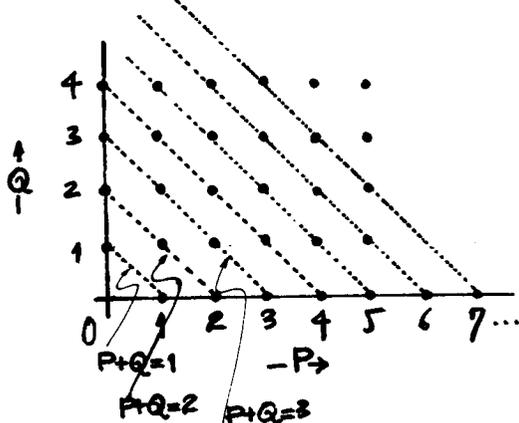
Η (41) γύρω από (38) και (40) γράφεται

$$(H_0 + \lambda H^{(1)}) \sum_{N=0}^{\infty} \psi_p^{(N)} \frac{\lambda^N}{N!} = \sum_{P=0}^{\infty} E_p^{(P)} \lambda^P \sum_{Q=0}^{\infty} \psi_p^{(Q)} \frac{\lambda^Q}{Q!} \quad (42)$$

Το αποτέλεσμα $\sum_P \sum_Q \lambda^{P+Q} E_p^{(P)} \psi_p^{(Q)}$ μπορεί να γραφεί

με διαφορετικό τρόπο, ώστε το αποτέλεσμα να γραφεί και ως άθροισμα μέλων της (42) να είναι αβέβαια. Το έργο-

μνο διττότητα με ποσότητες στην περιοχή διακον.



Θέτουμε $P+Q=k$, τότε το παραγόμενο διπλό άθροισμα γράφεται:

$$\sum_{P=0}^{\infty} \sum_{Q=0}^{\infty} \lambda^{P+Q} F_P^{(P)} \psi_P^{(Q)} = \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{Q=0}^k \lambda^k F_P^{(k-Q)} \psi_P^{(Q)}$$

(Αθροίζουμε από $Q=0$ μέχρι την περιοχή όπου η οποία είναι $k-P_{min}=k$ διότι $P_{min}=0$). Βρίσκω τον παραγόμενο της (42)

γράφεται

$$(\hat{H}_0 + \lambda \hat{H}^{(1)}) \sum_{N=0}^{\infty} \psi_P^{(N)} \lambda^N = \sum_{N=0}^{\infty} \lambda^N \sum_{Q=0}^N F_P^{(N-Q)} \psi_P^{(Q)} \quad \text{γ} \quad \text{η}$$

$$\hat{H}_0 \sum_{N=0}^{\infty} \psi_P^{(N)} \lambda^N + \hat{H}^{(1)} \sum_{N=0}^{\infty} \psi_P^{(N)} \lambda^{N+1} = \sum_{N=0}^{\infty} \lambda^N \sum_{Q=0}^N F_P^{(N-Q)} \psi_P^{(Q)} \quad (43)$$

Είναι και

$$\sum_{N=0}^{\infty} \psi_P^{(N)} \lambda^{N+1} = \sum_{M=1}^{\infty} \psi_P^{(M-1)} \lambda^M = \sum_{M=0}^{\infty} \psi_P^{(M-1)} \lambda^M (1 + \delta_{M0})$$

$$= \sum_{N=0}^{\infty} \psi_P^{(N-1)} \lambda^N (1 - \delta_{N0}). \quad \text{Από την (43) γράφεται}$$

$$\sum_{N=0}^{\infty} \lambda^N \left\{ \hat{H}_0 \psi_P^{(N)} + \hat{H}^{(1)} \psi_P^{(N-1)} (1 - \delta_{N0}) - \sum_{Q=0}^N F_P^{(N-Q)} \psi_P^{(Q)} \right\} = 0$$

Για να έχουμε ως αποτέλεσμα σχέσης με σχέση για κάθε λ απαιτούμε:

$$\hat{H}_0 \Psi_p^{(N)} + \hat{H}^{(1)} \Psi_p^{(N-1)} (1 - \delta_{N0}) = \sum_{\alpha=0}^N E_p^{(N-\alpha)} \Psi_p^{(\alpha)}, \quad (44)$$

$N=0, 1, 2, 3, \dots$

Μέχρι αυτής στιγμής δεν έχουμε κάνει καμία προσέγγιση. Το σύστημα των εξισώσεων (44) (ή οποιες αναπλάσεις και εξισώσεις διαταραχής Rayleigh-Schrödinger) είναι μηδενικού βαθμού με την (52). Για $N=0$ παίρνουμε την εξίσωση μηδενικού βαθμού, για $N=1$ την πρώτη εξίσωση κ.τ.λ. Για $N=0$ η (44) γράφεται

$$\hat{H}_0 \Psi_p^{(0)} = E_p^{(0)} \Psi_p^{(0)} \quad N=0$$

η οποία είναι το χαρακτηριστικό πρόβλημα του δρομίου ή της διαταραχής γωνίας. Άρα αν $N=0$ δεν με απασχολεί κανένα πρόβλημα. Για $N \neq 0$ ο δεύτερος όρος του πρώτου μέλους της (44) γράφεται

$$\hat{H}^{(1)} \Psi_p^{(N-1)} (1 - \delta_{N0}) = \hat{H}^{(1)} \Psi_p^{(N-1)}, \quad N \neq 0.$$

Άρα για $N \neq 0$ η (44) γράφεται

$$\hat{H}_0 \Psi_p^{(N)} + \hat{H}^{(1)} \Psi_p^{(N-1)} = \sum_{j=0}^{N-1} E_p^{(N-j)} \Psi_p^{(j)} + E_p^{(0)} \Psi_p^{(N)}$$

Όπου στο δεξιό μέλος διαχωρίσαμε τους τέρμους N στο \hat{H}_0 και το $\hat{H}^{(1)}$, ή

$$\boxed{(\hat{H}_0 - E_p^{(0)}) \Psi_p^{(N)} = -\hat{H}^{(1)} \Psi_p^{(N-1)} + \sum_{j=0}^{N-1} E_p^{(N-j)} \Psi_p^{(j)}} \quad (45)$$

$N=1, 2, 3, \dots$

Στην εξ. (45) η οποία γράφεται ως εξίσωση διαταραχής N βαθμού, παρατηρούμε ότι το δεξιό μέλος των μελών των δεξιών μελών είναι $(\hat{H}_0 \equiv E_p^{(0)})$ είναι πινάκας N . Διαφορές διαφορών αυτές στο N ($N \neq 0$) παίρνουμε κατά εξισώσεις ως ο-

προς πρώτην ή δεύτερη. π.χ.

$$\begin{aligned}
 N=1 &\Rightarrow (\hat{H}_0 - E_1^{(0)})\Phi_1^{(1)} = -\hat{H}^{(1)}\Phi_1^{(0)} + E_1^{(1)}\Phi_1^{(0)} \\
 N=2 &\Rightarrow (\hat{H}_0 - E_1^{(0)})\Phi_1^{(2)} = -\hat{H}^{(1)}\Phi_1^{(1)} + E_1^{(2)}\Phi_1^{(1)} + E_1^{(1)}\Phi_1^{(2)} \\
 N=3 &\Rightarrow (\hat{H}_0 - E_1^{(0)})\Phi_1^{(3)} = -\hat{H}^{(1)}\Phi_1^{(2)} + E_1^{(2)}\Phi_1^{(2)} + E_1^{(1)}\Phi_1^{(3)} + E_1^{(1)}\Phi_1^{(3)} \\
 &\vdots
 \end{aligned} \tag{46}$$

Λύνοντας εις εξ. (46) αναζητούμε ως προσομοίωσις $\Phi_1^{(1)}, \Phi_1^{(2)}, \Phi_1^{(3)}, \dots$ και $E_1^{(1)}, E_1^{(2)}, E_1^{(3)}, \dots$ από τών (39) και διά $\lambda=1$ έχουμε

$$\Phi_1 = \Phi_1^{(0)} + \Phi_1^{(1)} + \Phi_1^{(2)} + \Phi_1^{(3)} + \dots \text{ και από τών (40)}$$

$$E_1 = E_1^{(0)} + E_1^{(1)} + E_1^{(2)} + E_1^{(3)} + \dots$$

Όπως θα δείτε η μέθοδος γίνεται εύκολα μηχανική ως προς $\Phi_1^{(3)}$ και την ίδια διαδικασία μπορείς να γίνεις. Τις επόμενες φορές αρκεί να είναι πρώτα εύκολα προσομοίωσις είναι απλή, δηλ. γράψουμε $\Phi_1 = \Phi_1^{(0)} + \Phi_1^{(1)}$. Εάν μπορείς τον υπολογισμό να παύσεις είναι καλύτερα όπως είπαμε να δείξουμε. Πριν αναζητήσουμε την έκταση του εξ. (46) θα παύσουμε με χρηστή έκφραση για τών διαλογισμό ως $E_1^{(N)}$.

Προσπαθούμε τών (45) εξ' αριστερών με τών $(\Phi_1^{(0)})^*$ και εξακριβώνουμε ως προς όλο τών κατάλληλο άπο

$$\begin{aligned}
 \langle \Phi_1^{(0)} | (\hat{H}_0 - E_1^{(0)}) | \Phi_1^{(N)} \rangle &= -\langle \Phi_1^{(0)} | \hat{H}^{(1)} | \Phi_1^{(N-1)} \rangle + \sum_{j=0}^{N-1} E_1^{(N-j)} \langle \Phi_1^{(0)} | \Phi_1^{(j)} \rangle \\
 \langle \Phi_1^{(0)} | (\hat{H}_0 - E_1^{(0)}) | \Phi_1^{(N)} \rangle &= \langle (\hat{H}_0 - E_1^{(0)}) \Phi_1^{(0)} | \Phi_1^{(N)} \rangle = 0, \text{ Άρα γράψουμε}
 \end{aligned}$$

$$-\langle \Phi_p^{(0)} | \hat{H}^{(0)} | \Phi_p^{(N-1)} \rangle + \sum_{j=0}^{N-1} E_p^{(N-j)} \langle \Phi_p^{(0)} | \Phi_p^{(j)} \rangle = 0 \quad (47)$$

Δίχως βρήκα ως γενικότερες μορφές να περιέχουμε
 συναρτήσεις Φ_p τέτοιες ώστε

$$\langle \Phi_p^{(0)} | \Phi_p \rangle = 1 \quad (48)$$

$$\langle \Phi_p^{(0)} | \Phi_p \rangle = \sum_{N=0}^{\infty} \langle \Phi_p^{(0)} | \Phi_p^{(N)} \rangle \lambda^N = \langle \Phi_p^{(0)} | \Phi_p^{(0)} \rangle + \sum_{N=1}^{\infty} \langle \Phi_p^{(0)} | \Phi_p^{(N)} \rangle \lambda^N = 1$$

$$\text{Άρα } \langle \Phi_p^{(0)} | \Phi_p^{(0)} \rangle = 1, \text{ άρα } \sum_{N=1}^{\infty} \langle \Phi_p^{(0)} | \Phi_p^{(N)} \rangle \lambda^N = 0$$

Ο μόνος τρόπος για να είναι το προηγούμενο ως προς λ πολλαπλάσιο
 μηδέν είναι όταν οι συντελεστές του να είναι μηδέν, άρα
 $\langle \Phi_p^{(0)} | \Phi_p^{(N)} \rangle = 0, N=1, 2, 3, \dots$ ή $\langle \Phi_p^{(0)} | \Phi_p^{(N)} \rangle = \delta_{N0}$. Άρα
 οι (47) γίνονται

$$-\langle \Phi_p^{(0)} | \hat{H}^{(0)} | \Phi_p^{(N-1)} \rangle + \sum_{j=0}^{N-1} E_p^{(N-j)} \delta_{j0} = 0$$

Ο μόνος όρος ο οποίος υπάρχει στο \sum είναι ο $j=0$,
 άρα

$$E_p^{(N)} = \langle \Phi_p^{(0)} | \hat{H}^{(0)} | \Phi_p^{(N-1)} \rangle \quad (49)$$

Η εξ. (49) είναι ίσως η απλούστερη σχέση-αποτέλεσμα της
 άμεσης διασποράς. Από την (49) προκύπτει ότι η διάδοση
 πιθανώς εξαρτάται ως προς την ενέργεια είναι

$$E_p^{(1)} = \langle \Phi_p^{(0)} | \hat{H}^{(0)} | \Phi_p^{(0)} \rangle \quad (50)$$

$$E_p^{(2)} = \langle \hat{H}^{(0)} \rangle_{\Phi_p^{(0)}} + \dots \quad (50a)$$

H^c (50a) που εφ' ου \hat{H}^c είναι η μέση αξία, η αναμενόμενη τιμή επί ορισμένη, του μεγέθους διαταραχής $H^c(1)$ ως προς την κατάσταση $\Psi_p^{(0)}$ η οποία είναι γνωστή. Λόγω της

(50) (ή (50a)) προσαρτά \hat{H}^c ή $H^c(1)$ να ανατοχιστεί επί $\Psi_p^{(1)}$ και να γράψουμε $\hat{H}^c \Psi_p^{(1)} = E_p^{(1)} \Psi_p^{(1)}$. Από την (49) βρίσκουμε ότι πρέπει να γράψουμε την $(N-1)$ -τάξεως διαταραχική αντιστροφή $\Psi_p^{(N-1)}$ ώστε να παρασφύρι να ανατοχιστεί επί $\Psi_p^{(N)}$. Όπως ήδη έχουμε αναφέρει η πραγματική κατάσταση είναι ενοικίο-τερη. \Rightarrow Ας δούμε π.χ. την $\Psi_p^{(3)}$. Από την εξ. (49) έχουμε

$$E_p^{(3)} = \langle \Psi_p^{(0)} | \hat{H}^c(1) | \Psi_p^{(2)} \rangle = \langle \hat{H}^c(1) \Psi_p^{(0)} | \Psi_p^{(2)} \rangle \quad (51)$$

διότι $\hat{H}^c(1)$ είναι Ερμιτιανός μεγέθους. Από την πρώτη όπως εξ. (46) παίρνουμε

$$\hat{H}^c(1) \Psi_p^{(0)} = E_p^{(1)} \Psi_p^{(0)} - (\hat{H}_0 - E_p^{(0)}) \Psi_p^{(1)}, \text{ ή } \hat{H}^c(1) \Psi_p^{(0)} = E_p^{(1)} \Psi_p^{(0)} \quad (51)$$

επειδή

$$E_p^{(3)} = \langle E_p^{(1)} \Psi_p^{(0)} - (\hat{H}_0 - E_p^{(0)}) \Psi_p^{(1)} | \Psi_p^{(2)} \rangle = -\langle (\hat{H}_0 - E_p^{(0)}) \Psi_p^{(1)} | \Psi_p^{(2)} \rangle + E_p^{(1)} \langle \Psi_p^{(0)} | \Psi_p^{(2)} \rangle$$

Αφού $\langle \Psi_p^{(0)} | \Psi_p^{(2)} \rangle = 0$ λόγω της (48). \Rightarrow Αρα

$$E_p^{(3)} = -\langle \Psi_p^{(1)} | (\hat{H}_0 - E_p^{(0)}) \Psi_p^{(2)} \rangle \quad (52)$$

διότι ο μεγέθους $(\hat{H}_0 - E_p^{(0)})$ είναι Ερμιτιανός. Τότε από την δύση των εξ. (46) αντικαθιστούμε την κατάσταση $(\hat{H}_0 - E_p^{(0)}) \Psi_p^{(2)}$ και έχουμε

$$(52) \Rightarrow E_p^{(3)} = -\langle \Psi_p^{(1)} | \hat{H}^c(1) \Psi_p^{(1)} + E_p^{(2)} \Psi_p^{(0)} + E_p^{(1)} \Psi_p^{(1)} \rangle, \text{ ή}$$

$$E_p^{(3)} = \langle \Psi_p^{(1)} | \hat{H}^{(2)} | \Psi_p^{(1)} \rangle - E_p^{(2)} \langle \Psi_p^{(1)} | \Psi_p^{(1)} \rangle - E_p^{(1)} \langle \Psi_p^{(1)} | \Psi_p^{(1)} \rangle$$

↓ 0

ή τελικά

$$E_p^{(3)} = \langle \Psi_p^{(1)} | (\hat{H}^{(2)} - E_p^{(2)}) | \Psi_p^{(1)} \rangle \quad (53)$$

> Από την (53) είναι φανερό ότι προς υπολογισμό της $E_p^{(3)}$ χρειαζόμαστε το $\Psi_p^{(1)}$ (ή $E_p^{(2)}$ υπολογίζεται από την (50)) μόνον. Συνικριτικά μπορεί να δειχθεί ότι οι συναρτήσεις $\Psi_p^{(0)}, \Psi_p^{(1)}, \dots, \Psi_p^{(N)}$ είναι ιδανικές για τον προσδιορισμό διαδοχικών ενεργειών μέχρι και τάξεως $2N+1$, $E_p^{(2N+1)}$. Αυτό είναι πιθανό εφόσον διότι οι συναρτήσεις $\Psi_p^{(N)}$ παρά δέκατα εμφανίζονται. Είναι τότε ενδιαφέρον να υπολογιστεί και την $E_p^{(2)}$

$$(49) \Rightarrow E_p^{(2)} = \langle \Psi_p^{(0)} | \hat{H}^{(1)} | \Psi_p^{(1)} \rangle = \langle \hat{H}^{(1)} \Psi_p^{(0)} | \Psi_p^{(1)} \rangle$$

Λύνοντας και πάλι την πρώτη των (46) ως προς $\hat{H}^{(1)} \Psi_p^{(0)}$ και αντικαθιστώντας τον προκύπτον τύπο:

$$E_p^{(2)} = \langle -(\hat{H}_0 - E_p^{(0)}) \Psi_p^{(1)} + E_p^{(1)} \Psi_p^{(0)} | \Psi_p^{(1)} \rangle =$$

$$= - \langle (\hat{H}_0 - E_p^{(0)}) \Psi_p^{(1)} | \Psi_p^{(1)} \rangle + E_p^{(1)} \langle \Psi_p^{(0)} | \Psi_p^{(1)} \rangle$$

↓ 0

$$\Rightarrow E_p^{(2)} = - \langle \Psi_p^{(1)} | \hat{H}_0 - E_p^{(0)} | \Psi_p^{(1)} \rangle \quad (54)$$

> Εάν $\mu=0$, δηλ. υπολογίσουμε την δευτερεύουσα κεραιότητα, από την (54) φαίνεται φανερό ότι διατηρείται παρόμοιο ότι $E_p^{(2)} \leq 0$.

Προκύπτει τότε είναι επίλυση των εξισώσεων με βάση (46) με σκοπό να φέρουμε τις διαδοχικές συναρτήσεις διαφόρων τάξεων. > Αρχίζουμε από την πρώτη των (46):

$$(46) \Rightarrow (\hat{H}_0 - E_p^{(0)}) \Phi_p^{(1)} = -\hat{H}^{(1)} \Phi_p^{(0)} + E_p^{(1)} \Phi_p^{(0)} \quad \ddagger$$

$$(\hat{H}_0 - E_p^{(0)}) \Phi_p^{(1)} = -(\hat{H}^{(1)} - E_p^{(1)}) \Phi_p^{(0)} \quad (46a)$$

$$\text{πὲρ } E_p^{(1)} = \langle \Phi_p^{(0)} | \hat{H}^{(1)} | \Phi_p^{(0)} \rangle$$

Ἀπὸ τὴν εἰς. (46a) ἀφ' ἧς ἡ ποσότητα εἶναι γνωστὴ ἴσως εἰς $\Phi_p^{(1)}$. Ἡ (46a) εἶναι πρὸς ὁμογενῆς διαφορικῆς ἑξίσωσος εἰς μορφήν

$$\hat{G} \Phi = \chi \quad (55)$$

ὅπου $\hat{G} \equiv (\hat{H}_0 - E_p^{(0)})$, $\Phi \equiv \Phi_p^{(1)}$ καὶ $\chi \equiv -(\hat{H}^{(1)} - E_p^{(1)}) \Phi_p^{(0)}$, ὅπου Φ ἡ ἀγνωστὴ ἀντίκρισις. Ἡ (55) (δηλ. ἡ (46a)) εἰς ὁμογενῆς περιπτώσει εἶναι δυνατόν νὰ ζητῆ λύση κατὰ τὴν ἀντιθέτως εἰς ἀντιθέτως εἰς ἀντιθέτως, ἢ ὡς τὸ ἔκτακτον εἰς τὴν μέθοδον Rayleigh-Schrödinger. Κατ' ἐπίσης πρὸς νὰ προσέχεται εἰς τὴν (55) πρέπει νὰ εἴδωμεν τὸ εἰσέροστον τῶν τελεστῶν \hat{G} , δηλ. εἰς

$$G = \hat{G}^{-1} \chi \quad (56)$$

Τίτω εἰσέροστον εἰς ἀντιθέτως (τὸ γνωστὸ) τῶν ἀντιθέσεων $\{\Phi_p^{(0)}\}$ εἶναι πρὸς μορφήν νὰ εἴδωμεν

$$\Phi_p^{(1)} = \sum_{j=0}^{\infty} c_{jm} \Phi_j^{(0)} (= \hat{c}_p \Phi^{(0)})^\dagger \quad (57)$$

Ἀπὸ τὴν (57) εἶναι προφανὲς ὅτι εἰς εἰς μετακρίθεται εἰς ἀντιθέτως εἰς ἀντιθέτως $\{c_{jm}\}$. Ἀπὸ τὸ εἰσέροστον τῶν ἀντιθέσεων $\{\Phi_p^{(0)}\}$ εἶναι δυνατόν νὰ εἴδωμεν εἰς ἀντιθέτως εἰς ἀντιθέτως νὰ χρησιμοποιηθῆται εἰς εἰς (57), ὡς τὸ προσέχεται ὡς εἰς: † Ἐάν εἴδωμεν τὸ εἰσέροστον εἰς τελεστῶν \hat{G} ,

Η πρώτη νόηση είναι και το αποτέλεσμα της πρώτης ή της
 επόμενης των ενεργειών ως προς κάποιο άνω συστήμα, είναι
 προφανής περίπτωση το $\{\Phi_p^{(1)}\}$. Για να είναι το αποτέλεσμα
 της πρώτης G και της επόμενης G ή άλλων της $G, |G|$
 πρέπει να είναι $\neq 0$. Έπειτα η επόμενη (ή αλλιώς οι επόμε-
 γοίτες) είναι το γινόμενο των ιδιοτήτων της πρώτης G ,
 παρακάτω οι ιδιοτήτες της G να είναι όλες $\neq 0$. Όπως
 $\hat{G} = (\hat{H}_0 - E_p^{(0)})$ και $(\hat{H}_0 - E_p^{(0)})\Phi_p^{(1)} = \hat{G}\Phi_p^{(1)} = 0$. Άρα
 η πρώτη νόηση αποτελεί η ιδιοσυνάρτηση $\Phi_p^{(1)}$ της πρώτης
 ιδιοσυνάρτησης τα ιδιοσυνάρτησης προφανώς στο ενεργειακό
 επίπεδο της πρώτης ενεργειακής, όπου το μ (ή το σύστημα
 με αυτό υποστήριξη της $\Phi_p^{(1)}$ δεν είναι και στο ενεργειακό,
 αλλά δεν έχει ιδιαίτερη σημασία αλλιώς είναι. Η πρώτη
 και από την πρώτη για πρώτη νόηση αποτελεί η ενεργειακή
 αυτή από το πρόβλημα (57). Γίνεται γαμήλιο με την
 την (57)

$$\Phi_p^{(1)} = \sum_{\substack{j=0 \\ (j \neq p)}}^{\infty} G_{jp} \Phi_j^{(0)} \quad (57a)$$

Αντικαθιστούμε την (57a) στην (46a) ή έχουμε

$$\sum_{j(\neq p)} G_{jp} (\hat{H}_0 - E_p^{(0)}) \Phi_j^{(1)} = - (\hat{H}_0 - E_p^{(0)}) \Phi_p^{(1)}$$

Αντικαθιστούμε και οι δύο μέρη της ανωτέρω εξίσωσης με
 $\Phi_j^{(1)*}$ ($j \neq p$) και ολοκληρώνουμε

$$\sum_{j(\neq p)} G_{jp} \langle \Phi_j^{(1)} | (\hat{H}_0 - E_p^{(0)}) | \Phi_j^{(1)} \rangle = - \langle \Phi_j^{(1)} | (\hat{H}_0 - E_p^{(0)}) | \Phi_p^{(1)} \rangle$$

\Rightarrow

$$\sum_{j(\neq p)} G_{jp} (E_j^{(0)} - E_p^{(0)}) \langle \Phi_j^{(1)} | \Phi_j^{(1)} \rangle = - \langle \Phi_j^{(1)} | (\hat{H}_0 - E_p^{(0)}) | \Phi_p^{(1)} \rangle$$

Από την ιδιότητα $\langle \Phi_j^{(0)} | \Phi_j^{(0)} \rangle = \delta_{ij}$, οι παραπάνω γράφονται

$$\sum_{j \neq k} C_{jk} (E_j^{(0)} - E_k^{(0)}) \delta_{ij} = - \langle \Phi_j^{(0)} | \hat{H}^{(1)} - E_k^{(0)} | \Phi_k^{(0)} \rangle, \quad j \neq k.$$

Πόσω πιο περίπλοκο, δ_{ij} ο πολλαπλασιασμός επιπέδων όμοιοι με αποτέλεσμα διαφοροποίηση είναι ο $j = i$. Πιν γίνονται οι διέξοι μέγος γράφονται

$$- \langle \Phi_j^{(0)} | \hat{H}^{(1)} | \Phi_j^{(0)} \rangle + E_k^{(0)} \langle \Phi_j^{(0)} | \Phi_k^{(0)} \rangle = - \langle \Phi_j^{(0)} | \hat{H}^{(1)} | \Phi_k^{(0)} \rangle$$

Αρα

$$C_{jk} (E_j^{(0)} - E_k^{(0)}) = - \langle \Phi_j^{(0)} | \hat{H}^{(1)} | \Phi_k^{(0)} \rangle$$

και

$$C_{jk} = \frac{\langle \Phi_j^{(0)} | \hat{H}^{(1)} | \Phi_k^{(0)} \rangle}{E_k^{(0)} - E_j^{(0)}}, \quad j \neq k \quad (58)$$

Από την εξ. (58) είναι φανερό γιατί από την αρχή μη-υπέροπε $j \neq k$. Χρησιμοποιώντας την (58) στην (57a) έχουμε την τελική διαμόρφωση της διαταραχής

$$\Phi_j^{(1)} = \sum_{k \neq j} \frac{\langle \Phi_j^{(0)} | \hat{H}^{(1)} | \Phi_k^{(0)} \rangle}{E_k^{(0)} - E_j^{(0)}} \Phi_k^{(0)} \quad (59)$$

Από τις (59) μπορούμε να υπολογίσουμε εύκολα τις τις διόσεις (49) και (59) τις $E_p^{(2)}$ και $E_p^{(2)}$. Πράγματι από την (49) δι' απαδείας αντικατάστασης τις (59) παίρνουμε

$$E_p^{(2)} = \langle \Phi_p^{(0)} | \hat{H}^{(1)} | \Phi_p^{(0)} \rangle = \sum_{j \neq p} \frac{\langle \Phi_p^{(0)} | \hat{H}^{(1)} | \Phi_j^{(0)} \rangle \langle \Phi_j^{(0)} | \hat{H}^{(1)} | \Phi_p^{(0)} \rangle}{E_p^{(0)} - E_j^{(0)}}$$

η επανά $\langle \Psi^{(10)} | \hat{H}^{(1)} | \Psi^{(10)} \rangle = \langle \Phi_p^{(10)} | \hat{H}^{(1)} | \Phi_p^{(10)} \rangle^*$

$$E_p^{(2)} = \sum_{\gamma \neq p} \frac{|\langle \Psi_p^{(10)} | \hat{H}^{(1)} | \Phi_p^{(10)} \rangle|^2}{E_p^{(1)} - E_\gamma^{(1)}} \quad (60)$$

Η εφεξής (60) μας δίνει, επίσης, ότι εάν παραίτηται ότι $\mu=0$ (ωστόσο $\gamma \neq 0$), $E_2^{(1)} < E_p^{(1)} \rightarrow E_0^{(1)} - E_\gamma^{(1)} < 0$, τότε

$E_0^{(2)} < 0$, και πάλι ήδη γυμνάσει.

Στο επόμενο αυτό ποσοστό να γράψουμε σύμφωνα με τις προηγούμενες

και
$$\Psi_p \approx \Phi_p^{(10)} + \sum_{\gamma \neq p} \frac{H_{\gamma p}^{(1)}}{E_p^{(1)} - E_\gamma^{(1)}} \Phi_\gamma^{(10)} \quad (61)$$

$$E_p = E_p^{(1)} + H_{pp}^{(1)} + \sum_{\gamma \neq p} \frac{|H_{\gamma p}^{(1)}|^2}{E_p^{(1)} - E_\gamma^{(1)}} + E_p^{(3)}$$

όπου $H_{\gamma p}^{(1)} = \langle \Psi_\gamma^{(10)} | \hat{H}^{(1)} | \Phi_p^{(10)} \rangle$

Από την γνώση $\Phi_p^{(10)}$ όπως ήδη αναφέραμε ποσοστό να υπολογίσουμε και την $E_p^{(3)}$, όπως οι ενέργειες γίνονται δεκάκι πομπώδεις πλέον. Στο επόμενο αυτό θα αναφέραμε λίγο τις σχέσεις (61). Από την πρώτη των (61) παρατηρούμε ότι η συνάρτηση ως διακατάσταση $\hat{H}^{(1)}$ είναι διαφορετικό συνάρτηση $\Phi_p^{(10)}$ ενώ να αναμειγνύει ζεύγος καταστάσεων $\{\Phi_p^{(10)}, \Phi_\gamma^{(10)}\}$, με ποσοστό $\frac{H_{\gamma p}^{(1)}}{E_p^{(1)} - E_\gamma^{(1)}}$ όπως με ανεξαρτησία "βαρύτητας". Επειδή οι ανεξαρτησίες αυτές είναι αντίθετες με $1 / (E_p^{(1)} - E_\gamma^{(1)})$, η σταθερότητα ανεξαρτησία από τον αναμετασχηματισμό $\{\Phi_p^{(10)}\}$ θα προέρχεται από καταστάσεις πλησιέστερες των καταστάσεων μ . Τότε η διάφορα πάλι σχέση των ενεργειών είναι όπως και πριν

Έχουμε παρά να αναγορίσουμε το εδαφίωμα $H^{(u)}$ όπως ε
 δυνάμεις ϵ^2 είναι διαδοχικές, η $E_p^{(u)}$ δίνονται μόνο εν διαδο-
 χικό των μετασχηματισμών $H^{(u)}$ μεταξύ των καταστάσεων μ και
 ν των υποστηλών, όπου και την έκφραση του αντίστροφου εδαφίωματος.
 Στις περιπτώσεις των παραπάνω ο αντίστροφος διαμορφωτής της
 $E_p^{(2)}$ είναι δύνατος. Ακόμα μία παρατήρηση: τα εδαφί-
 ωματα της ες. (61) είναι εδαφίωματα ως προς "καταστάσεις"
 και όχι ως προς υποστηλώνες ταίρια. Αυτό σημαίνει ότι
 εάν έχουμε (και οκείδη πίνυοτε έχουμε) εδαφίωματες καταστά-
 σεων (έκτος βέβαια ως μ) στα εδαφίωματα πρέπει να αντιστοι-
 χίσουν έως οι χαρακτηριστικές αντιστροφές αντιστοιχίας του αντιστοι-
 χου εδαφίωου.

ως δούμε τώρα την δυνάμει των εδαφίωματων (46)

$$(H_0 - E_p^{(1)}) \Phi_p^{(2)} = -H^{(1)} \Phi_p^{(1)} + E_p^{(2)} \Phi_p^{(1)} + E_p^{(1)} \Phi_p^{(1)}, \quad \eta$$

$$(H_0 - E_p^{(1)}) \Phi_p^{(2)} = E_p^{(2)} \Phi_p^{(1)} + (E_p^{(1)} - H^{(1)}) \Phi_p^{(1)} \quad (62)$$

Η (62), καθώς και όλες οι εξισώσεις του είδους (46), η
 γενικότερη η (45) είναι του είδους $A\Phi = \chi$ όπου χ γνωστά
 ανήκοντα, δίνει όλες τις ποσότητες του δεξιού μέλους ως (62)
 είναι γνωστές. Αξίζει να αναγορίσουμε από τον (62) την
 $\Phi_p^{(2)}$. Γράφουμε όπως και προηγουμένως

$$\Phi_p^{(2)} = \sum_{j=0}^{\infty} C_{jp} \Phi_j^{(1)} \quad (63)$$

Οιων και της παραπάνω επί του εδαφίωματος. Αναπα-
 ραστάς ως (63) στην (62), πολλαπλασιαστικός ες' αντι-
 στροφών με την $(\Phi_p^{(1)})^*$ και εδαφίωματες με δ_{ij}

$$\sum_{j=0}^{\infty} C_{j\mu} (E_j^{(0)} - E_{\mu}^{(0)}) \langle \Phi_j^{(0)} | \Phi_j^{(0)} \rangle = E_{\mu}^{(2)} \langle \Phi_{\mu}^{(0)} | \Phi_{\mu}^{(0)} \rangle + E_{\mu}^{(1)} \langle \Phi_{\mu}^{(0)} | \Phi_{\mu}^{(1)} \rangle - \langle \Phi_{\mu}^{(0)} | \hat{H}^{(1)} | \Phi_{\mu}^{(0)} \rangle, \quad \alpha$$

$$\sum_{j=0}^{\infty} C_{j\mu} (E_j^{(0)} - E_{\mu}^{(0)}) \delta_{j\mu} = E_{\mu}^{(2)} \delta_{\mu\mu} + E_{\mu}^{(1)} \langle \Phi_{\mu}^{(0)} | \Phi_{\mu}^{(1)} \rangle - \langle \Phi_{\mu}^{(0)} | \hat{H}^{(1)} | \Phi_{\mu}^{(0)} \rangle,$$

$$\Rightarrow C_{\mu\mu} (E_{\mu}^{(0)} - E_{\mu}^{(0)}) = E_{\mu}^{(2)} \delta_{\mu\mu} + E_{\mu}^{(1)} \langle \Phi_{\mu}^{(0)} | \Phi_{\mu}^{(1)} \rangle - \langle \Phi_{\mu}^{(0)} | \hat{H}^{(1)} | \Phi_{\mu}^{(0)} \rangle \quad (64)$$

> Εξισώνουμε δύο περιπτώσεις, (α) $\nu = \mu$ και (β) $\nu \neq \mu$.
 Όταν ισχύει η διαίρεση στην περίπτωση (α) δηλ. μας παρέχει στοιχεία εὐκατάλυτο, ενώ η (β) μας δίνει τα συντελεστές $C_{\nu\mu}^{(2)}$
 (α) $\nu = \mu$. Η (64) μας παρέχει

$$0 = E_{\mu}^{(2)} + E_{\mu}^{(1)} \langle \Phi_{\mu}^{(0)} | \Phi_{\mu}^{(1)} \rangle - \langle \Phi_{\mu}^{(0)} | \hat{H}^{(1)} | \Phi_{\mu}^{(0)} \rangle$$

$$\Rightarrow E_{\mu}^{(2)} = \langle \Phi_{\mu}^{(0)} | \hat{H}^{(1)} | \Phi_{\mu}^{(0)} \rangle$$

και στην περίπτωση (β) είναι γενική σχέση (64) για μία περίπτωση $N=2$.

$$(β) \quad \nu \neq \mu. \quad C_{\nu\mu} (E_{\nu}^{(0)} - E_{\mu}^{(0)}) = - \langle \Phi_{\nu}^{(0)} | \hat{H}^{(1)} | \Phi_{\mu}^{(0)} \rangle$$

$$\Rightarrow C_{\nu\mu} = \frac{\langle \Phi_{\nu}^{(0)} | \hat{H}^{(1)} | \Phi_{\mu}^{(0)} \rangle}{E_{\mu}^{(0)} - E_{\nu}^{(0)}}, \quad \nu \neq \mu \quad (65)$$

$H^{(1)}$ (65) γόγω της (59) γράφεται

$$C_{np} = \frac{\langle \hat{\Psi}_p^{(1)} | \hat{H}^{(1)} | \hat{\Psi}_p^{(1)} \rangle}{E_p^{(1)} - E^{(0)}} + \sum_{k \neq p} \frac{\langle \hat{\Psi}_k^{(0)} | \hat{H}^{(1)} | \hat{\Psi}_p^{(1)} \rangle \langle \hat{\Psi}_p^{(0)} | \hat{H}^{(1)} | \hat{\Psi}_k^{(0)} \rangle}{(E_p^{(1)} - E_k^{(0)})(E_p^{(0)} - E_k^{(0)})} \quad n \neq p$$

$$= \frac{\langle \hat{\Psi}_p^{(0)} | \hat{H}^{(1)} | \hat{\Psi}_p^{(0)} \rangle}{(E_p^{(1)} - E^{(0)})^2} + \sum_{k \neq p} \frac{\langle \hat{\Psi}_k^{(0)} | \hat{H}^{(1)} | \hat{\Psi}_p^{(0)} \rangle \langle \hat{\Psi}_p^{(0)} | \hat{H}^{(1)} | \hat{\Psi}_k^{(0)} \rangle}{(E_p^{(1)} - E_k^{(0)})(E_p^{(0)} - E_k^{(0)})} \quad n \neq p$$

2
n

$$C_{np} = \frac{E_p^{(1)} \langle \hat{\Psi}_p^{(0)} | \hat{H}^{(1)} | \hat{\Psi}_p^{(0)} \rangle}{(E_p^{(1)} - E^{(0)})^2} + \frac{1}{(E_p^{(1)} - E^{(0)})} \sum_{k \neq p} \frac{\langle \hat{\Psi}_k^{(0)} | \hat{H}^{(1)} | \hat{\Psi}_p^{(0)} \rangle \langle \hat{\Psi}_p^{(0)} | \hat{H}^{(1)} | \hat{\Psi}_k^{(0)} \rangle}{E_p^{(0)} - E_k^{(0)}} \quad n \neq p$$

(65a)

> Ανακρίνοντας την (65a) στην (63) παρατηρείται ότι την $\hat{\Psi}_p^{(2)}$

$$\hat{\Psi}_p^{(2)} = \sum_{j \neq p} \frac{E_j^{(1)} H_{jp}^{(1)}}{(E_p^{(0)} - E_j^{(0)})} \hat{\Psi}_j^{(0)} + \sum_{j \neq p} \sum_{k \neq p} \frac{H_{jk}^{(1)} H_{kp}^{(1)}}{(E_p^{(0)} - E_j^{(0)})(E_p^{(0)} - E_k^{(0)})} \hat{\Psi}_j^{(0)}$$

(66)

οπότε

$$H_{ps}^{(1)} \equiv \langle \hat{\Psi}_p^{(0)} | \hat{H}^{(1)} | \hat{\Psi}_s^{(0)} \rangle$$

> Από την σχέση (65a) ο συντελεστής της (63) C_{np} δεν είναι άνωθεν να προσδιοριστεί, αλλά γόγω της $\langle \hat{\Psi}_p^{(0)} | \hat{\Psi}_p^{(0)} \rangle = \delta_{0N}$ προδικάζεται, όπως και προαναφέρθηκε ότι $C_{pp} = 0$.
 Η $E_p^{(2)}$ "αναλογίζεται" σύμφωνα με την ανακρίνοντας την (66) στην (49) ($N=3$).

Από την (66) είναι δυνατόν να υπολογιστούν εύκολα
 διαταραχές πλάτος και φάσης τ'όπως. Στο παρόν λόγο δι
 εσφαλμένα την αντίστροφη της (για έκθεση) συμπί
 διαταραχές διότι ήδη κεντρικά οι κυριότερα σφάλματα της.
 Ο κύριος λόγος της συμπί διαταραχής ο οποίος αντιστ
 ρητά είναι υπολογισμός Rayleigh-Schwinger και αν είναι
 βιβλίο ο μοναδικός, π.χ. άλλου είδους συμπί της 2ης
 και της προηγούμενης οδηγία των συμπί διαταραχής τα
 οι Wigner-Briellouin.