IIβ) Θεωρία διαταράξεως - Ἐκφυλισμένες καταστάσεις

Τό ἀδιατάρακτο πρόβλημα εἶναι ἐκφυλισμένο, γράφουμε

$$\hat{\mathcal{H}}_0 \Psi^{(0)}_{\mu j} = E^{(0)}_{\mu} \Psi^{(0)}_{\mu j} , \quad j=1,2\cdots g_\mu \qquad (67)$$

ὅπου g_μ ὁ βαθμός ἐκφυλισμοῦ τῆς καταστάσεως μ.
Ἄς δοῦμε ποιό εἶναι τό πρόβλημα τό ὁποῖο εἰσάγει ὁ ἐκφυλισμός. Ἐξετάζουμε τὴν πρώτη τῶν ἐξισώσεων (46)

$$(N=1) \qquad (\hat{\mathcal{H}}_0 - E^{(0)}_\mu)\Psi^{(1)}_\mu = -\mathcal{H}^{(1)}\Psi^{(0)}_\mu + E^{(1)}_\mu \Psi^{(0)}_\mu$$

Μέ τὴν προϋπόθεση ὅτι ἡ προηγούμενη ἰσχύει καί στὴν περίπτωση τοῦ ἐκφυλισμοῦ γράφουμε

$$(\hat{\mathcal{H}}_0 - E^{(0)}_\mu)\Psi^{(1)}_{\mu j} = -\hat{\mathcal{H}}^{(1)}\Psi^{(0)}_{\mu j} + E^{(1)}_{\mu j}\Psi^{(0)}_{\mu j} \qquad (68)$$
$$j=1,2,\cdots g_\mu .$$

Πολλαπλασιάζουμε τὴν (68) ἐξ ἀριστερῶν μέ τὴν $\Psi^{(0)*}_{\mu k}$ καί ὁλοκληρώνουμε

$$\langle \Psi^{(0)}_{\mu k} | (\mathcal{H}_0 - E^{(0)}_\mu) | \Psi^{(1)}_{\mu j} \rangle = -\langle \Psi^{(0)}_{\mu k} | \mathcal{H}^{(1)} | \Psi^{(0)}_{\mu j} \rangle + E^{(1)}_{\mu j} \langle \Psi^{(0)}_{\mu k} | \Psi^{(0)}_{\mu j} \rangle$$

ἤ

$$0 = -\langle \Psi^{(0)}_{\mu k} | \hat{\mathcal{H}}^{(1)} | \Psi^{(0)}_{\mu j} \rangle + E^{(1)}_{\mu j}\delta_{kj}$$

καί ἐάν $k \neq j$

$$\langle \Psi^{(0)}_{\mu k} | \hat{\mathcal{H}}^{(1)} | \Psi^{(0)}_{\mu j} \rangle = 0 \qquad (69)$$

Τό ἀποτέλεσμα (69) εἶναι ἀδύνατο. Δέν ὑπάρχει λόγος ἡ διαταραχή $\mathcal{H}^{(1)}$ νά μή συζεύγνει τὶς ἀδιατάρακτες καταστάσεις ποτέ. Δηλ. ἐάν τυχαίνει $\langle \Psi^{(0)}_{\mu k} | \mathcal{H}^{(1)} | \Psi^{(0)}_{\mu j} \rangle = 0$ τότε μποροῦμε νά προχωρήσουμε κανονικά, σύμφωνα μέ τὴν μή ἐκφυλισμένη θεωρία διαταράξεως, ἐάν ὅμως $\langle \Psi^{(0)}_{\mu k} | \mathcal{H}^{(1)} | \Psi^{(0)}_{\mu j} \rangle \neq 0$

"ἐκμεταλλευόμενοι" τόν ἐκφυλισμό μποροῦμε νά πάρωμε γραμμικό συνδυασμό τῶν $\{\Phi_{\mu j}\}_j$ ἔτσι ὥστε ἡ (69) νά ἰσχύη. Ἡ καινούργια συνάρτησις (συναρτήσεις) τήν ὁποία βρίσκουμε, ἡ προκύπτουσα ἀπό τόν γραμμικό συνδυασμό, θά εἶναι καί ἡ συνάρτησις μηδενικῆς τάξεως ἡ ὁποία θά χρησιμοποιηθῆ στίς ἐξισώσεις διαταραχῆς. Γενικῶς ἔχουμε:

$$\hat{\mathcal{H}}_0 \Phi_{\mu j}^{(0)} = E_\mu^{(0)} \Phi_{\mu j}^{(0)}, \quad \begin{matrix} \mu = 1, 2, 3 \dots \infty \\ j = 1, 2, \dots g_\mu \end{matrix} \qquad (70)$$

ὅπου

$$\Phi_{\mu j}^{(0)} = \sum_{k=1}^{g_\mu} c_{kj,\mu} \varphi_{\mu k}^{(0)} = \boldsymbol{\varphi}_\mu^{(0)} \vec{c}_{j,\mu} \qquad (71)$$

Ἐξηγοῦμε τά σύμβολα: $\boldsymbol{\varphi}_\mu^{(0)}$ εἶναι "μήτρα" γραμμῆς g_μ στηλῶν

$$\boldsymbol{\varphi}_\mu = (\varphi_{\mu 1}\ \varphi_{\mu 2}\ \varphi_{\mu 3} \dots \varphi_{\mu g_\mu}). \qquad (72)$$

$\vec{c}_{j,\mu}$ εἶναι "μήτρα" στήλης g_μ γραμμῶν

$$\vec{c}_{j,\mu} = \begin{pmatrix} c_{1j,\mu} \\ c_{2j,\mu} \\ \vdots \\ c_{g_\mu j,\mu} \end{pmatrix} \qquad (73)$$

Ἄς παρατηρηθῆ ὅτι ὁ δείκτης μ χωρίζεται ἀπό τούς "τρέχοντες" δείκτες k ἤ j ἤ ... μέ κόμμα.
Ἡ ἐξίσωσις διαταραχῆς πρώτης τάξεως, (68), γράφεται

$$(\hat{\mathcal{H}}_0 - E_\mu^{(0)}) \Phi_{\mu j}^{(0)} + (\mathcal{H}^{(1)} - E_{\mu j}^{(1)}) \Phi_{\mu j}^{(0)} = 0 \qquad (74)$$

Πολλαπλασιάζουμε ἐξ ἀριστερῶν τήν (74) μέ $\Phi_{\mu k}^{(0)*}$ καί ὁλοκληρώνουμε.

$$\langle \Phi_{\mu k}^{(0)} | (\hat{\mathcal{H}}_0 - \cancel{E_\mu^{(0)}}) | \phi_{\mu j}^{(1)} \rangle + \langle \Phi_{\mu k}^{(0)} | (\hat{\mathcal{H}}^{(1)} - E_{\mu j}^{(1)}) | \Phi_{\mu j}^{(0)} \rangle = 0$$

διότι $\quad \hat{\mathcal{H}}_0 \phi_{\mu k}^{(0)} = E_\mu^{(0)} \phi_{\mu k}^{(0)}$, άρα

$$\langle \Phi_{\mu k}^{(0)} | \hat{\mathcal{H}}^{(1)} | \Phi_{\mu j}^{(0)} \rangle = E_{\mu j}^{(1)} \delta_{jk} \qquad (75)$$

Αντικαθιστώντας στην (75) την (71) έχουμε

$$\langle \sum_{\rho=1}^{g_\mu} \varphi_{\mu\rho}^{(0)} c_{\rho k,\mu} | \hat{\mathcal{H}}^{(1)} | \sum_{\sigma=1}^{g_\mu} \varphi_{\mu\sigma}^{(0)} c_{\sigma j,\mu} \rangle = E_{\mu j}^{(1)} \delta_{jk} \quad , \text{ή}$$

$$\sum_{\rho}^{g_\mu} \sum_{\sigma} c_{\rho k,\mu}^{*} c_{\sigma j,\mu} \langle \varphi_{\mu\rho}^{(0)} | \hat{\mathcal{H}}^{(1)} | \varphi_{\mu\sigma}^{(0)} \rangle = E_{\mu j}^{(1)} \delta_{jk} \qquad (76)$$

Ορίζουμε τώρα τον μήτρα $\mathbb{H}_\mu^{(1)}$ με μητροστοιχεία

$$(\mathbb{H}^{(1)})_{\rho\sigma,\mu} \equiv \langle \varphi_{\mu\rho}^{(0)} | \hat{\mathcal{H}}^{(1)} | \varphi_{\mu\sigma}^{(0)} \rangle \qquad (77)$$

Λόγω των (71), (72), (73) και (77) η (76) γράφεται

$$\vec{\mathbb{C}}_{k,\mu}^{+} \mathbb{H}_\mu^{(1)} \mathbb{C}_{j,\mu} = E_{\mu j}^{(1)} \delta_{jk}, \; j = 1,2, \cdots g_\mu \qquad (78)$$

όπου $\vec{\mathbb{C}}_{k,\mu}^{+} = (c_{1k,\mu}^{*} \;\; c_{2k,\mu}^{*} \;\; \cdots \;\; c_{g_\mu k,\mu}^{*})$. Η (78) γράφεται

$$\mathbb{C}_\mu^{+} \mathbb{H}_\mu^{(1)} \mathbb{C}_\mu = \mathbb{E}_\mu^{(1)} \qquad (79)$$

ή

$$\mathbb{H}_\mu^{(1)} \mathbb{C}_\mu = \mathbb{C}_\mu \mathbb{E}_\mu^{(1)} \qquad (80)$$

όπου $\mathbb{E}_\mu^{(1)}$ διαγώνιος μήτρα

$$\mathbb{E}_\mu^{(1)} = \begin{pmatrix} E_{\mu 1}^{(1)} & & & \mathbb{O} \\ & E_{\mu 2}^{(1)} & & \\ & & \ddots & \\ \mathbb{O} & & & E_{\mu g_\mu}^{(1)} \end{pmatrix}$$

καί

$$\mathbf{C}_\mu = (\vec{\mathbf{c}}_{1\mu} \;\; \vec{\mathbf{c}}_{2\mu} \cdots \mathbf{c}_{g_\mu \mu}) = \begin{pmatrix} c_{11,\mu} & c_{12,\mu} \cdots & c_{1g_\mu,\mu} \\ c_{21,\mu} & c_{22,\mu} \cdots & c_{2g_\mu,\mu} \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ c_{g_\mu 1,\mu} & c_{g_\mu 2,\mu} & c_{g_\mu g_\mu,\mu} \end{pmatrix}.$$

Οἱ συναρτήσεις μηδενικῆς τάξεως $\{\phi_{\mu j}^{(0)}\}_j^{g_\mu}$ προσδιορίζονται ὡς ἰδιοδιανύσματα τῆς μήτρας διαταράξεως $\mathbb{H}_\mu^{(1)}$, ἐνῶ οἱ ἐνέργειες διαταράξεως πρώτης τάξεως, $\{E_{\mu j}^{(1)}\}$, εἶναι οἱ ἀντίστοιχες ἰδιοτιμές $\mathbb{E}_\mu^{(1)}$.
Ἀπό τίς ἐξ. (78) ἤ (80) εἶναι προφανές ὅτι τό πρόβλημα εἶναι ἡ διαγωνιοποίησις τῆς μήτρας διαταράξεως $\mathbb{H}_\mu^{(1)}$. Σέ πιό "συνήθη" γλώσσα ἔχουμε νά λύσουμε τό ὁμογενές σύστημα ἐξισώσεων

$$\begin{aligned} (H_{11,\mu}^{(1)} - E_\mu^{(1)}) c_{1\mu} + H_{12,\mu}^{(1)} c_{2,\mu} + \cdots & H_{1g_\mu,\mu}^{(1)} c_{g_\mu,\mu} = 0 \\ H_{21,\mu}^{(1)} c_{1\mu} + (H_{22,\mu}^{(1)} - E_\mu^{(1)}) c_{2\mu} + \cdots & H_{2g_\mu,\mu}^{(1)} c_{g_\mu,\mu} = 0 \\ \vdots \qquad\qquad\qquad \vdots \qquad\qquad & \vdots \\ H_{g_\mu 1,\mu}^{(1)} c_{1\mu} + H_{g_\mu 2,\mu}^{(1)} c_{2\mu} + \cdots & (H_{g_\mu g_\mu,\mu}^{(1)} - E_\mu^{(1)}) c_{g_\mu,\mu} = 0 \end{aligned} \qquad (81)$$

Τό σύστημα (81) ἔχει λύση (διάφορη τῆς μηδενικῆς ἐάν ἡ ὁρίζουσα τῶν συντελεστῶν τῶν ἀγνώστων εἶναι μηδέν.

$$\begin{vmatrix} H_{11,\mu}^{(1)} - E_\mu^{(1)} & H_{12,\mu}^{(1)} & \cdots & H_{1g_\mu,\mu}^{(1)} \\ H_{21,\mu}^{(1)} & H_{22,\mu}^{(1)} - E_\mu^{(1)} & \cdots & H_{2g_\mu,\mu}^{(1)} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ H_{g_\mu 1,\mu}^{(1)} & H_{g_\mu 2,\mu}^{(1)} & \cdots & H_{g_\mu g_\mu,\mu}^{(1)} - E_\mu^{(1)} \end{vmatrix} = 0 \qquad (82)$$

Ἡ (82) εἶναι γνωστὴ ὡς σεκουλαρικὴ ἐξίσωσις. Τὰ μητροστοιχεῖα δίνονται ἀπὸ τὴν σχέση (77). Ἡ (82) εἶναι πολυώνυμο βαθμοῦ g_p μὲ ἀγνώστους τὶς $E_p^{(1)}$

$$(E_p^{(1)})^{g_p} + F_1[H^{(1)}_{kj,p}](E_p^{(1)})^{g_p-1} + F_2[H^{(1)}_{kj,p}](E_p^{(1)})^{g_p-2} + \cdots$$

$$+ F_{g_p-1}[H^{(1)}_{kj,p}](E_p^{(1)}) + F_{g_p}[H^{(1)}_{kj,p}] = 0 \qquad (83)$$

ὅπου $F[H^{(1)}_{kj,p}]$ γνωστοὶ ἀριθμοί. Ἡ λύσις τῆς (83) μᾶς δίνει g_p ρίζες (ὄχι ὅλες ἀπαραιτήτως διαφορετικές) τὶς

$E^{(1)}_{p1}, E^{(1)}_{p2}, \dots E^{(1)}_{pg_p}$. Ἐὰν ὅλες οἱ ρίζες $E_p^{(1)}$ εἶναι

διαφορετικές, ἡ διαταραχὴ $H^{(1)}$ ἐπροκάλεσε (πλήρη) ἄρση τοῦ ἐκφυλισμοῦ καὶ ἡ (ἐκφυλισμένη) ἐνέργεια $E_p^{(0)}$ διαχωρίζεται σὲ g_p ἐνεργειακὰ ἐπίπεδα τιμῶν
$E_p^{(0)}+E_{p1}^{(1)}, E_p^{(0)}+E_{p2}^{(1)}, \dots E_p^{(0)}+E_{pg_p}^{(1)}$