QM II – Úvodní poznámky

- zhodnocení semestru zkoušky
- letošní časy přednášek, komunikační kanály
- cvičení, domácí úkoly, podmínky zápočtu
- plán semestru:
  - přibližné metody
  - skládání momentu hybnosti
  - reprezentace fyzikálních transformací
  - systémy identických částic
  - časový vývoj a teorie rozptylu
  - různé aplikace QM

$\boxed{\text{QM II-1}}$ PŘIBLIŽNÉ METODY

1. STACIONÁRNÍ PORUCHOVÁ TEORIE

motivace: známý problém $\hat{H}_0 |n\rangle = \epsilon_n |n\rangle$ ←

porušený hamiltonián $\hat{H} = \hat{H}_0 + \lambda \hat{H}_1$

$$\hat{H} |\psi_n^{(\lambda)}\rangle = E_n^{(\lambda)} |\psi_n^{(\lambda)}\rangle \qquad (*)$$

- Rayleigh Schrödingerova teorie poruch

$$E_n = E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \dots = \epsilon_n + \Delta E_n$$

$$|\psi_n\rangle = |\psi_n^{(0)}\rangle + \lambda |\psi_n^{(1)}\rangle + \lambda^2 |\psi_n^{(2)}\rangle + \dots = |n\rangle + |\Delta\psi\rangle$$

$$(*) \quad (\underline{\hat{H}_0} + \underline{\lambda \hat{H}_1}) |\underline{\psi_n}\rangle = (\underline{\epsilon_n} + \underline{\Delta E}) |\underline{\psi_n}\rangle = E_n |\psi_n\rangle \quad \dots \lambda^n$$

$$(\lambda^0) \qquad [\hat{H}_0 - \epsilon_n] |\psi_n^{(0)}\rangle = 0 \quad \dots$$

$$(\lambda^1) \qquad [\hat{H}_0 - \epsilon_n] |\psi_n^{(1)}\rangle = (E_n^{(1)} - H_1) |\psi_n^{(0)}\rangle$$

$$(\lambda^2) \qquad [\hat{H}_0 - \epsilon_n] |\psi^{(2)}\rangle = (E_n^{(1)} - H_1) |\psi_n^{(1)}\rangle + E_n^{(2)} |\psi_n^{(0)}\rangle$$

$\vdots \qquad\qquad\qquad \vdots$

$$(\lambda^s) \quad \underline{[H_0 - \epsilon_n] |\psi_n^{(s)}\rangle} = \underline{(E_n^{(1)} - H_1) |\psi_n^{(s-1)}\rangle} + \underline{E_n^{(2)} |\psi_n^{(s-2)}\rangle + \dots + E_n^{(s)} |\psi_n^{(0)}\rangle}$$

$\cancel{\langle \psi_n | \psi_n \rangle = 1}$ $\quad \langle n | \psi_n \rangle = 1$ alternativní normaliz.

dodatečně jednoznačné určení $|\psi_n\rangle$

lze se vrátit ke standard. norm.

$|\psi_n(\lambda)\rangle$ do řady $\Rightarrow$ $\langle n | \psi_n^{(0)} \rangle = 1 \quad s=0$

$\langle n | \psi_n^{(s)} \rangle = 0 \quad \ldots \langle n | \Delta\psi_n \rangle = 0$

pro $s>0$

A) případ nedegenerovaného spektra $\hat{H}_0$: $\forall \epsilon_n \ \exists! \ |n\rangle$

$(\lambda^0) \ldots \quad E_n^{(0)} = \epsilon_n \quad |\psi_n^0\rangle = |n\rangle$

$\langle n | (\lambda^s) \quad \langle n | [H_0 - \epsilon_n] | \psi_n^{(s)} \rangle = 0 = \langle n | (E_n^{(1)} - H_1 | \psi_n^{(s-1)} \rangle + \ldots E_n^{(k)} | \psi_n^{(s-k)} \rangle$

$\epsilon_n \qquad \langle n | \psi_n^{(s-1)} \rangle$

$s=1 \quad \boxed{s>1}$

$\forall s>0 \quad 0 = -\langle n | H_1 | \psi_n^{(s-1)} \rangle + E_n^{(s)} \langle n | \psi_n^{(0)} \rangle$

$\rightarrow \quad \boxed{E_n^{(s)} = \langle n | \hat{H}_1 | \psi_n^{(s-1)} \rangle} \leftarrow$

speciálně korekce E 1. ř.: $\boxed{E_n^{(1)} = \langle n | \hat{H}_1 | n \rangle}$

vlnové funkce $\quad |\psi_n^{(s)}\rangle = \sum_{m \neq n} \langle m | \psi_n^{(s)} \rangle |m\rangle \leftarrow$

normaliz. $\langle n | \psi_n \rangle = 0$

$s=1$

$\langle m | (\lambda^1)$: $\quad m \neq n$

$(\epsilon_m - \epsilon_n) \langle m | \psi_n^{(1)} \rangle = \langle m | \cancel{E_n^{(1)}} - H_1 | n \rangle = -\langle m | \hat{H}_1 | n \rangle$

$\delta_{mn} = 0$

$\langle m | \psi_n^{(1)} \rangle = \dfrac{\langle m | H_1 | n \rangle}{\epsilon_n - \epsilon_m}$

$$\boxed{|\psi_n^{(1)}\rangle = \sum_{m \neq n} \frac{\langle m | \hat{H}_1 | n \rangle}{\epsilon_n - \epsilon_m} |m\rangle}$$

$\ldots \ |\psi\rangle = |n\rangle + \lambda |\psi_n^{(1)}\rangle + \ldots$

Energie 2. ř.:

$$\boxed{E_n^{(2)} = \langle n | \hat{H}_1 | \psi_n^{(1)} \rangle = \sum_{m \neq n} \frac{|\langle n | H_1 | m \rangle|^2}{\epsilon_n - \epsilon_m}} \leftarrow$$

pozn.: • korekce zákl. stavu $n=0$ $\quad \epsilon_0 \le \epsilon_1 \le \epsilon_2 < \dots$

$$E_n^{(2)} < 0$$

• $\hat{H}_1$ malé: $\quad E^{(1)} \quad E^{(2)}$ malé ... $|\langle m|H_1|n\rangle|^2 \ll |\epsilon_n - \epsilon_m|^2$ $\quad (H_1)_{mn}$

$\langle m|(\lambda^s)$ $\Rightarrow$

$$\langle m|\psi_n^{(s)}\rangle = \frac{\langle m|H_1|\psi_n^{(s-1)}\rangle}{\epsilon_n - \epsilon_m} - \sum_{t=0}^{s-1} \frac{E_n^{(s-t)}\langle m|\psi_n^{(t)}\rangle}{\epsilon_n - \epsilon_m}$$

B) Případ degenerovaného spektra

výchozí problém $\quad \hat{H}_0|n,r\rangle_0 = \epsilon_n|n,r\rangle_0 \quad \langle n,r|n',r'\rangle = \delta_{nn'}\delta_{rr'}$

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \lambda\hat{H}_1 \qquad \hat{H}|\psi_N(\lambda)\rangle = E_N|\psi_N(\lambda)\rangle$$

$\boxed{\lambda \to 0}$ $\quad |\psi_N(\lambda)\rangle \longrightarrow \sum_r C_{nr}|n,r\rangle_0 \equiv |\psi^{(0)}_{n,t}\rangle \equiv |n,t\rangle$

$|\psi^{(s)}\rangle\lambda^s$ $\quad E_N(\lambda) \longrightarrow \epsilon_n$

ve vl. podprostoru ϵ_n

původní báze	adaptované báze
$\{|n,r\rangle_0\}_{r=1}^{d_n}$	$\{|n,t\rangle\}_{t=1}^{d_n}$

$\lambda \to 0$

$$|\psi_N(\lambda)\rangle \equiv |\psi_{n,t}(\lambda)\rangle = \sum_{s=0}^{\infty} |\psi_{n,t}^{(s)}\rangle\lambda^s \qquad |\psi_{n,t}^{(0)}\rangle = |n,t\rangle$$

$$E_{n,t} = \sum_{s=0}^{\infty} E_{n,t}^{(s)}\lambda^s \quad \dots \quad E_{n,t}^{(0)} = \epsilon_n$$

$$H|\psi_{n,t}\rangle = E_{n,t}|\psi_{n,t}\rangle$$

$\langle n,r'|_0 \; (\lambda^1)$:

$$0 = (\epsilon_n - \epsilon_n)\,{}_0\langle n,r'|\psi_{n,t}^{(1)}\rangle =$$

$$0 = {}_0\langle n,r'|(E_n^{(1)} - H_1)|\psi^0_{n,t}\rangle$$

$$|n,t\rangle = \sum_r C_{nr}^{(t)}|n,r\rangle_0$$

$$\sum_r \underbrace{{}_0\langle n,r'|H_1|n,r\rangle_0}_{M_{r'r}} \underbrace{C_{nr}^{(t)}}_{v_r} = E_{n,t}^{(1)} \sum_r C_{nr}^{(t)}\delta_{rr'} = E_{n,t}^{(1)} C_{nr'}^{(t)}$$

$t = 1, d_n$

$\vec{v}$ jsou vl. v. $M_{r'r}$

Závěr ... vektory adaptované báze $|\underline{n,t}\rangle$ jsou

- vl. vektory matice poruchy ve vl. podpr E_n
- vl. čísla této matice $\underline{E_n^{(1)}}$ .. korekce energií E_n prvního řádu