3

Θεωρία διαταραχών

3.1 Διαταραχή μη εκφυλισμένων καταστάσεων

3.1.1 Τοποθέτηση του προβλήματος

Θέλουμε να λύσουμε με τη θεωρία των διαταραχών το πρόβλημα των ιδιοτιμών και ιδιοσυναρτήσεων ενός συστήματος το οποίο μπορούμε να χωρίσουμε σε δύο επιμέρους προβλήματα, ανάλογα με το μέγεθος συνεισφοράς στην ενέργεια. Έχουμε ότι η *συνολική* χαμιλτονιανή του συστήματος είναι

$$H = H_0 + V$$

Υποθέτουμε **πρώτον** ότι μπορούμε να λύσουμε ακριβώς το πρόβλημα με μόνο τον H_0 και **δεύτερον** ότι η μεταβολή στις στάθμες ενέργειας $E_n^{(0)}$ του H_0 λόγω του V είναι μικρότερη από τη διαφορά ενέργειας για οποιεσδήποτε δύο διαδοχικές στάθμες $E_k^{(0)}$ και $E_{k\pm1}^{(0)}$.
Σημείωση: Τα προβλήματα που λύνονται ακριβώς είναι ελάχιστα.
Λύνουμε πρώτα το πρόβλημα ιδιοτιμών και ιδιοσυναρτήσεων του H_0.

$$\hat{H}_0\Psi_n^{(0)} = E_n^{(0)}\Psi_n^{(0)}$$

η χαμιλτονιανή H_0 έχουμε υποθέσει ότι έχει ένα διακριτό μη εκφυλισμένο φάσμα ιδιοτιμών. Το σύνολο των ιδιοσυναρτήσεων είναι **πλήρες** και **ορθοκανονικό**.

$$\langle\Psi_n^{(0)}, \Psi_m^{(0)}\rangle = \delta_{nm}$$

Η χαμιλτονιανή του πραγματικού προβλήματος είναι:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$$

Ο τελεστής $\hat{V}$ της πρόσθετης δυναμικής ενέργειας ονομάζεται τελεστής διαταραχής. Η ιδιοσυνάρτηση της πλήρους χαμιλτονιανής είναι:

$$(H_0 + V)\Phi_n = E_n\Phi_n$$

Λύνουμε αυτήν την εξίσωση με διαδοχικές προσεγγίσεις φθίνουσας σημασίας:

$$\Phi_n = \Psi_n^{(0)} + \Psi_n^{(1)} + \Psi_n^{(2)} + \dots$$

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

όπου $E_n^{(1)} > E_n^{(2)} > E_n^{(3)} > \dots$. Σε πρώτη προσέγγιση μπορούμε να δεχτούμε ότι

$$\Phi_n \simeq \Psi_n^{(0)} \quad \text{και} \quad E_n \simeq E_n^{(0)}$$

διαταραχή μηδενικής τάξης. Για καλύτερη προσέγγιση μπορούμε να πάρουμε έναν ακόμη όρο στο ανάπτυγμα

$$\Phi_n \simeq \Psi_n^{(0)} + \Psi_n^{(1)}$$

$$E_n \simeq E_n^{(0)} + E_n^{(1)}$$

διαταραχή πρώτης τάξης
ή

$$\Phi_n \simeq \Psi_n^{(0)} + \Psi_n^{(1)} + \Psi_n^{(2)}$$
$$E_n \simeq E_n^{(0)} + E_n^{(1)} + E_n^{(2)}$$

διαταραχή δεύτερης τάξης
και συνεχίζουμε έτσι! Στην πράξη σταματάμε όταν η μεταβολή δεν είναι πλέον αισθητή. Συνήθως έχουμε διαταραχή πρώτης τάξης μόνο. Εάν το $E_n^{(1)} = 0$ τότε παίρνουμε οπωσδήποτε το $E_n^{(2)}$. Το μαθηματικό πρόβλημα γίνεται πολύ δύσκολο καθώς αυξάνουμε την τάξη προσέγγισης, και επειδή οι $\Psi_n^{(0)}$ του αδιατάραχτου συστήματος φτιάχνουν ένα πλήρες σύνολο συναρτήσεων, οι προσεγγιστικές λύσεις λόγω της διαταραχής θα είναι γραμμικοί συνδυασμοί των $\Psi_k^{(0)}$.

Για να γίνει ποσοτική η προσεγγιστική αυτή μέθοδος εισάγουμε μια παράμετρο λ έτσι ώστε να παραμετροποιήσουμε την ένταση της πρόσθετης αλληλεπίδρασης.

Η λύση λοιπόν του φυσικού προβλήματος δίνεται από τις λύσεις της χαμιλτονιανής

$$(H_0 + \lambda V)\Phi_n = E_n\Phi_n, \text{ για } \lambda = 1,$$

ενώ για $\lambda = 0$ έχουμε

$$H_0\Psi_n^{(0)} = E_n^{(0)}\Psi_n^{(0)}$$

και άρα οι Φ_n, E_n είναι συναρτήσεις του λ.

$$\Phi_n = \Psi_n^{(0)} + \sum_{k\neq n} C_{nk}(\lambda)\Psi_k^{(0)}$$

Αναπτύσουμε τους συντελεστές $C_{nk}(\lambda)$ σε σειρά ως προς λ και έχουμε

$$\Phi_n = \Psi_n^{(0)} + \lambda\sum_{k\neq n} \alpha_{nk}\Psi_k^{(0)} + \lambda^2\sum_{k\neq n} b_{nk}\Psi_k^{(0)} + \dots$$

δηλαδή

$$\Phi_n = \Psi_n^{(0)} + \lambda\Psi_n^{(1)} + \lambda^2\Psi_n^{(2)} + \dots$$

Αναπτύσουμε και την ενέργεια σε σειρά ως προς λ:

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

Υποθέτουμε ότι οι σειρές συγκλίνουν για κάθε $0 \leq \lambda \leq 1$. Άρα οι συντελεστές πρέπει να ελαττώνονται από τάξη σε τάξη.

Υπολογισμός των διαδοχικών όρων στην προσέγγιση: Αντικαθιστούμε στην εξίσωση $(H_0+\lambda V)\Phi_n = E_n\Phi_n$ τις εκφράσεις των Φ_n και E_n και εξισώνουμε τους συντελεστές των ίδιων δυνάμεων του λ, διότι οι ισότητες ισχύουν για κάθε λ.

$$\Rightarrow (H_0 + \lambda V)\left\{\Psi_n^{(0)} + \lambda\Psi_n^{(1)} + \lambda^2\Psi_n^{(2)} + \dots\right\} =$$
$$\left\{E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \dots\right\}\cdot\left\{\Psi_n^{(0)} + \lambda\Psi_n^{(1)} + \lambda^2\Psi_n^{(2)} + \dots\right\}$$
$$\Rightarrow H_0\Psi_n^{(0)} = E_n^{(0)}\Psi_n^{(0)} \qquad \text{τάξης } \lambda^0 = 1$$
$$\Rightarrow V\Psi_n^{(0)} + H_0\Psi_n^{(1)} = E_n^{(0)}\Psi_n^{(1)} + E_n^{(1)}\Psi_n^{(0)} \qquad \text{τάξης } \lambda$$
$$V\Psi_n^{(1)} + H_0\Psi_n^{(2)} = E_n^{(0)}\Psi_n^{(2)} + E_n^{(1)}\Psi_n^{(1)} + E_n^{(2)}\Psi_n^{(0)} \qquad \text{τάξης}\lambda^2$$
$$\vdots$$

Σε πολλά φυσικά προβλήματα έχουμε περισσότερες της μίας αλληλεπιδράσεις με διαφορετική ισχύ π.χ. $V = V_1 + V_2$ με $V_1 > V_2$. Μπορούμε να συμπεριλάβουμε την V_1 στην διαταραχή πρώτης τάξης, ενώ η V_2 μπορεί να εμφανιστεί σαν διαταραχή δεύτερης τάξης για το V_1. Πρακτικά μπορούμε να αντιμετωπίσουμε το πρόβλημα ως εξής:

$$V = \lambda V_1 + \lambda^2 V_2$$

3.1.2 Διαταραχή πρώτης τάξης

Έχουμε να λύσουμε την εξίσωση:

$$V\Psi_n^{(0)} + H_0\Psi_n^{(1)} = E_n^{(0)}\Psi_n^{(1)} + E_n^{(1)}\Psi_n^{(0)}$$

όπου σύμφωνα με όσα έχουμε πει για την πληρότητα του συστήματος των αδιατάρακτων κυματοσυναρτήσεων έχουμε:

$$\Psi_n^{(1)} = \sum_k a_{nk}\Psi_k^{(0)}, \quad \text{με } k \neq n$$

$$\Rightarrow V\Psi_n^{(0)} + \sum_{k\neq n} a_{nk}E_k^{(0)}\Psi_k^{(0)} = E_n^{(0)}\sum_{l\neq n} a_{nl}\Psi_l^{(0)} + E_n^{(1)}\Psi_n^{(0)} \tag{3.1}$$

Πολλαπλασιάζουμε από αριστερά την (3.1) με $\Psi_n^{*(0)}$ και ολοκληρώνουμε

$$\Rightarrow \langle\Psi_n^{(0)}, V\Psi_n^{(0)}\rangle + 0 = 0 + E_n^{(1)}\langle\Psi_n^{(0)}, \Psi_n^{(0)}\rangle$$

αλλά $\langle\Psi_n^{(0)}, \Psi_n^{(0)}\rangle = 1$ και $\langle\Psi_n^{(0)}, \Psi_k^{(0)}\rangle = 0$ για $k \neq n$

$$E_n^{(1)} = \langle\Psi_n^{(0)}, V\Psi_n^{(0)}\rangle \tag{3.2}$$

Πολλαπλασιάζουμε από αριστερά την (3.1) με $\Psi_m^{*(0)}$ με $m \neq n$ και ολοκληρώνουμε

$$\Rightarrow \langle\Psi_m^{(0)}, V\Psi_n^{(0)}\rangle + a_{nm}E_m^{(0)} = E_n^{(0)}a_{nm}$$

$$\Rightarrow a_{nm} = \frac{\langle\Psi_m^{(0)}, V\Psi_n^{(0)}\rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \tag{3.3}$$

Εάν υπολογίσουμε τον πίνακα που προκύπτει από τη διαταραχή V και τις ιδιοσυναρτήσεις $\Psi_n^{(0)}$ έχουμε

$$V_{kn} = \langle\Psi_k^{(0)}, V\Psi_n^{(0)}\rangle$$

$$\Rightarrow V = \begin{pmatrix} V_{11} & V_{12} & \cdots & V_{1N} \\ V_{21} & V_{22} & \cdots & V2N \\ \vdots & \vdots & & \\ V_{N1} & V_{N2} & \cdots & V_{NN} \end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow \Phi_n = \Psi_n^{(0)} + \sum_{k\neq n}\frac{V_{kn}}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}\Psi_k^{(0)} \tag{3.4}$$

και

$$E_n = E_n^{(0)} + V_{nn} \tag{3.5}$$

Η προσέγγιση έχει νόημα όταν

$$\begin{cases} |V_{nn}| & \ll & |E_n^{(0)} - E_{n+1}^{(0)}| \\ \\ |V_{nn}| & \ll & |E_n^{(0)} - E_{n-1}^{(0)}| \end{cases}$$

Ο παρονομαστής στα a_{kn} δεν γίνεται ποτέ μηδέν διότι έχουμε πάντοτε $E_k^{(0)} \neq E_n^{(0)}$ για $k \neq n$, μη εκφυλισμένες ιδιοτιμές.

3.1.3 Διαταραχή δεύτερης τάξης

Για την επόμενης τάξης προσέγγιση της ενέργειας και της κυματοσυνάρτησης του συστήματος έχουμε να λύσουμε την εξίσωση:

$$V\Psi_n^{(1)} + H_0\Psi_n^{(2)} = E_n^{(0)}\Psi_n^{(2)} + E_n^{(1)}\Psi_n^{(1)} + E_n^{(2)}\Psi_n^{(0)} \tag{3.6}$$

με

$$\Psi_n^{(1)} = \sum_{k\neq n} a_{nk}\Psi_k^{(0)}, \quad a_{nk} = \text{ γνωστό}$$

και

$$\Psi_n^{(2)} = \sum_{l\neq n} b_{nl}\Psi_l^{(0)}, \quad E_n^{(1)} = \text{ γνωστό}$$

Πολλαπλασιάζουμε από αριστερά την (3.6) με $\Psi_n^{(0)}$ και ολοκληρώνουμε

$$\Rightarrow \langle \Psi_n^{(0)}, V\Psi_n^{(1)}\rangle + 0 = 0 + 0 + E_n^{(2)}\langle \Psi_n^{(0)}, \Psi_n^{(0)}\rangle$$

$$\Rightarrow E_n^{(2)} = \langle \Psi_n^{(0)}, V\Psi_n^{(1)}\rangle$$

$$E_n^{(2)} = \sum_{k\neq n} a_{nk}\langle \Psi_n^{(0)}, V\Psi_k^{(0)}\rangle$$

$$\Rightarrow E_n^{(2)} = \sum_{k\neq n} \frac{\langle \Psi_k^{(0)}, V\Psi_n^{(0)}\rangle\langle \Psi_n^{(0)}, V\Psi_k^{(0)}\rangle}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}$$

$$\Rightarrow E_n^{(2)} = \sum_{k\neq n} \frac{V_{kn}V_{nk}}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}$$

Υπολογισμός της κυματοσυνάρτησης

Πολλαπλασιάζουμε από αριστερά την (3.6) με $\Psi_k^{(0)}$ για $k \neq n$ και ολοκληρώνουμε:

$$\langle \Psi_k^{(0)}, V\Psi_n^{(1)}\rangle + \langle \Psi_k^{(0)}, H_0\Psi_n^{(2)}\rangle =$$

$$= E_n^{(0)}\langle \Psi_k^{(0)}, \Psi_n^{(2)}\rangle + E_n^{(1)}\langle \Psi_k^{(0)}, \Psi_n^{(1)}\rangle + E_n^{(2)}\langle \Psi_k^{(0)}, \Psi_n^{(0)}\rangle$$

$$\Rightarrow \sum_{l\neq n} a_{nl}V_{kl} + E_k^{(0)}b_{nk} = E_n^{(0)}b_{nk} + E_n^{(1)}a_{nk} + 0$$

$$b_{nk}(E_n^{(0)} - E_k^{(0)}) = \sum_{l\neq n} a_{nl}V_{kl} - E_n^{(1)}a_{nk} + 0$$

με

$$E_n^{(1)} = \langle \Psi_n^{(0)}, V\Psi_n^{(0)}\rangle = V_{nn}$$

και

$$a_{nl} = \frac{\langle \Psi_l^{(0)}, V\Psi_n^{(0)}\rangle}{E_n^{(0)} - E_l^{(0)}\rangle} = \frac{V_{ln}}{E_n^{(0)} - E_l^{(0)}}$$

$$\Rightarrow b_{nk} = \sum_{l\neq n} \frac{V_{kl}V_{ln}}{(E_n^{(0)} - E_k^{(0)})(E_n^{(0)} - E_l^{(0)})} - \frac{V_{nn}V_{kn}}{(E_n^{(0)} - E_k^{(0)})^2}$$

Συνθήκη εφαρμογής της θεωρίας διαταραχών

$$|V_{kn}| \ll |E_k^{(0)} - E_n^{(0)}| \qquad \text{για κάθε } k, n$$

Άρα η σειρά συγκλίνει, διότι οι όροι ελαττώνονται καθώς αυξάνουμε την τάξη προσέγγισης.

Εναλλακτικός τρόπος υπολογισμού της $\Psi_n^{(1)}$

$$V\Psi_n^{(0)} + H_0\Psi_n^{(1)} = E_n^{(0)}\Psi_n^{(1)} + E_n^{(1)}\Psi_n^{(0)}$$

$$\Rightarrow (H_0 - E_n^{(0)})\Psi_n^{(1)} = (E_n^{(1)} - V)\Psi_n^{(0)}$$

όπου $H_0, E_n^{(0)}, \Psi_n^{(0)}, V, E_n^{(1)}$ γνωστά. Άρα λύνουμε αυτή τη διαφορική εξίσωση ως προς $\Psi_n^{(1)}$, και μετά υπολογίζουμε την $E_n^{(2)} = \langle \Psi_n^{(0)}, V\Psi_n^{(1)}\rangle$.

3.1.4 Εφαρμογές

1. *Η δυναμική ενέργεια ενός σωματιδίου δίνεται από τις σχέσεις:*

$$V(x) = \begin{cases} \infty, & \text{για } x < 0 \quad \text{και} \quad x > 2a \\ \\ bx, & \text{για } 0 \leq x \leq 2a \end{cases}$$

Να υπολογιστεί η ενέργεια E_n του σωματιδίου σε πρώτη τάξη της θεωρίας διαταραχών.

Για $b = 0$ έχουμε το άπειρο πηγάδι δυναμικού με

$$E_n^{(0)} = n^2 \frac{\pi^2 \hbar^2}{8ma^2} \qquad \text{και} \qquad \Psi_n^{(0)} = \sqrt{\frac{1}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{2a}\right)$$

$$E_n^{(1)} = \langle \Psi_n^{(0)}, V \Psi_n^{(0)} \rangle = b\frac{1}{a} \int_0^{2a} x \sin^2\left(\frac{n\pi x}{2a}\right) \mathrm{d}x$$

$$= \frac{b}{a} \frac{4a^2}{n^2\pi^2} \int_0^{n\pi} y \sin^2 y \mathrm{d}y = ba$$

$$\int y \sin^2 y \mathrm{d}y = \frac{1}{4}\left(\sin^2 y - 2y \sin y \cos y\right) + \frac{y^2}{4}$$

2. *Αναρμονικός Ταλαντωτής*

Η δυναμική ενέργεια ενός σωματιδίου μάζας m δίνεται από τις σχέσεις:

$$V(x) = \begin{cases} \infty, & \text{για } x < 0 \\ \\ \frac{1}{2}kx^2 + bx^3, & \text{για } x > 0 \end{cases}$$

Να υπολογίσετε διαταρακτικά την ενέργεια της θεμελιώδους στάθμης σε πρώτη τάξη της θεωρίας διαταραχών.

Θεωρούμε τον όρο $U(x) = bx^3$ σαν διαταραχή στον αρμονικό ταλαντωτή

$$V_0(x) = \frac{1}{2}kx^2 = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$$

Οι κυματοσυναρτήσεις του αρμονικού ταλαντωτή και οι ιδιοενέργειες είναι

$$\Psi_n(x) = C \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} H_n(\xi) \mathrm{e}^{-\xi^2/2}$$

όπου

$$C = \sqrt[4]{\frac{m\omega}{\pi\hbar}} \qquad \text{και} \qquad \xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x = \sqrt{a} x$$

με ενέργειες $E_n = \hbar\omega\left(n + \dfrac{1}{2}\right)$. Επειδή η δυναμική ενέργεια απειρίζεται για $x = 0$ εκεί η κυματοσυνάρτηση μηδενίζεται.

Τα πολυώνυμα του Hermite είναι άρτια για άρτιο n και περιττά για περιττό n και μηδενίζονται στο μηδέν. Οι λύσεις λοιπόν στο αδιατάρακτο πρόβλημα είναι οι λύσεις του αρμονικού ταλαντωτή για περιττό $n = 2k + 1$ με $k = 0, 1, 2, \ldots$

Η θεμελιώδης στάθμη είναι για $k = 0$

$$\Psi_1(x) = \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt[4]{\frac{m\omega}{\pi\hbar}} (2\sqrt{a}x) \mathrm{e}^{-ax^2/2}$$

με ενέργεια $E_1 = \frac{3}{2}\hbar\omega$.

Σε πρώτη τάξη της θεωρίας διαταραχών η διόρθωση της ενέργειας είναι:

$$\begin{aligned}\Delta E_1 &= \int_0^\infty \Psi_1(x)U(x)\Psi_1(x)\mathrm{d}x = U_{11}\\ &= \frac{4}{2}\sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}}\frac{m\omega}{\hbar}b\int_0^\infty x^5\mathrm{e}^{-ax^2}\mathrm{d}x\end{aligned}$$

$$\int_0^\infty x^k\mathrm{e}^{-ax^2}\mathrm{d}x = \frac{\Gamma\left(\frac{k+1}{2}\right)}{2a^{(k+1)/2}}$$

όπου η συνάρτηση $\Gamma(z)$ ορίζεται από τις σχέσεις:

$$\Gamma(z+1) = z\Gamma(z) \qquad \text{και} \qquad \Gamma\left(\frac{1}{2}\right) = \sqrt{\pi}$$

$$\int_0^\infty x^5\mathrm{e}^{-ax^2/2}\mathrm{d}x = \frac{\Gamma(6/2)}{2a^{6/2}} = \frac{\Gamma(3)}{2a^3} = \frac{2!}{2a^3} = \frac{1}{a^3}$$

$$\begin{aligned}\Rightarrow \Delta E_1 &= 2b\sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}}\frac{m\omega}{\hbar}\left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^3\\ &= \frac{b}{\sqrt{\pi}}\left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^{3/2}\end{aligned}$$

Για να ισχύει η προσέγγιση θα πρέπει:

$$\begin{aligned}|\Delta E_1| &\ll 2\hbar\omega\\ \Rightarrow \frac{3b}{\sqrt{\pi}}\left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^{3/2} &\ll \hbar\omega\end{aligned}$$

3.2 Διαταραχή εκφυλισμένων καταστάσεων

Μέχρι τώρα υποθέσαμε ότι οι καταστάσεις του αρχικού (βασικού) αδιατάραχτου συστήματος είναι μη εκφυλισμένες. Αλλά στη φύση συνήθως συναντάμε σε όλα τα κβαντικά συστήματα εκφυλισμό. Τα πραγματικά συστήματα δεν είναι μονοδιάστατα. Όταν υπαρχει εκφυλισμός τότε σε διαταραχή ήδη πρώτης τάξης συναντάμε στον παρονομαστή την ενεργειακή διαφορά $E_n^{(0)} - E_k^{(0)}$ όταν υπολογίζουμε τη διόρθωση στη στάθμη E_n. Εάν λοιπόν συμβαίνει η στάθμη n να είναι εκφυλισμένη τότε κάποια στιγμή στο άθροισμα, έχουμε και τη συνεισφορά από την εκφυλισμένη κατάσταση $E_k^{(0)}$, οπότε $E_n^{(0)} - E_k^{(0)} = 0$ και ο όρος αυτός απειρίζεται. Αλλά το πρόβλημα αυτό είναι τεχνικό – οφείλεται δηλαδή σε παθογένεια της μεθόδου.
Θα αναπτύξουμε λοιπόν μία μέθοδο για την άρση του εκφυλισμού. Θα υποθέσουμε ότι έχουμε στο αδιατάραχτο σύστημα δύο μόνο εκφυλισμένες καταστάσεις, την $\Psi_n^{(0)} = |n\rangle$ και την $\Psi_l^{(0)} = |l\rangle$, για ευκολία. Η μέθοδος γενικεύεται κατ' ευθείαν για εκφυλισμό N. Η χαμιλτονιανή είναι $H = H_0 + V$ και

$$H_0|k\rangle = E_k^{(0)}|k\rangle, \quad k = 1, 2, \ldots, \underbrace{n, l}_{E_n^{(0)}=E_l^{(0)}}, \ldots$$

σε πρώτης τάξης προσέγγιση για αυτές τις δύο στάθμες έχουμε:

$$\Phi_n = \Psi_n^{(0)} + \sum_{k\neq n} a_{nk}\Psi_k^{(0)} = \underbrace{\Psi_n^{(0)} + a_{nl}\Psi_l^{(0)}} + \Psi_n^{(1)}$$

$$\Phi_l = \Psi_l^{(0)} + \sum_{k\neq l} a_{lk}\Psi_l^{(0)} = \underbrace{\Psi_l^{(0)} + a_{ln}\Psi_n^{(0)}} + \Psi_l^{(1)}$$

$$\begin{cases}\Psi_n^{(1)} = \sum_{k\neq n,l} a_{nk}\Psi_k^{(0)}, & \Psi_l^{(1)} = \sum_{k\neq l,n} a_{lk}\Psi_k^{(0)}\\ a_{mk} = \dfrac{V_{km}}{E_m^{(0)} - E_k^{(0)}}, & V_{km} = \langle\Psi_k^{(0)}|V|\Psi_m^{(0)}\rangle\end{cases}$$

Έχουμε ξεχωρίσει λοιπόν τις εκφυλισμένες στάθμες $\Psi_n^{(0)}, \Psi_l^{(0)}$ και ορίζουμε τώρα δύο νέες κανονικοποιημένες καταστάσεις Ψ_n, Ψ_l σαν ιδιοσυναρτήσεις της συνολικής χαμιλτονιανής $\hat{H}$ σε προσέγγιση μέχρι πρώτης τάξης για την ενέργεια. Διαγωνιοποιούμε δηλαδή την $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$ στον 2 διαστάσεων υποχώρο των κυματοσυναρτήσεων της $\hat{H}_0$. Εάν μπορούσαμε να το κάνουμε συνολικά θα λύναμε πλήρως το πρόβλημα. Ουσιαστικά αντί για $\Psi_n^{(0)}$ και $\Psi_l^{(0)}$ θα μπορούσαμε να πάρουμε οποιονδήποτε γραμμικό συνδυασμό:

$$\Rightarrow \begin{cases} \Psi_n = c_{nn}\Psi_n^{(0)} + c_{nl}\Psi_l^{(0)} \\ \\ \Psi_l = c_{ll}\Psi_l^{(0)} + c_{ln}\Psi_n^{(0)} \end{cases}$$

και

$$(H_0 + V)\Psi_n = E_n\Psi_n, \quad (H_0 + V)\Psi_l = E_l\Psi_l$$

εάν ο εκφυλισμός θεωρηθεί μεγαλύτερος τότε:

$$\Psi_n = \sum_{i=1}^{N} c_{ni}\Psi_i^{(0)}, \quad n = 1, 2, \ldots, N$$

Όλες οι καταστάσεις $\Psi_i^{(0)}$ έχουν την ίδια ενέργεια.
Αντικαθιστώντας στην εξίσωση ιδιοτιμών $(H_0 + V)\Psi_n = E_n\Psi_n$ έχουμε, αφού πολλαπλασιάσουμε από αριστερά με την $\Psi_k^{(0)}$ και ολοκληρώσουμε:

$$\langle k|H_0|\Psi_n\rangle + \langle k|V|\Psi_n\rangle = E_n\langle k|\Psi_n\rangle$$

$$\Rightarrow \sum_i E_n^{(0)} c_{ni}\langle k|i\rangle + \sum_i c_{ni}\langle k|V|i\rangle = E_n \sum_i c_{ni}\langle k|i\rangle$$

$$\Rightarrow E_n^{(0)} c_{nk} - E_n c_{nk} = -\sum_i c_{ni}V_{ki}$$

$$\Rightarrow c_{nk}(E_n - E_n^{(0)}) = \sum_i c_{ni}V_{ki} = c_{nk}V_{kk} + \sum_{i\neq k} c_{ni}V_{ki}$$

$$\Rightarrow \boxed{c_{nk}\Big[V_{kk} + E_n^{(0)} - E_n\Big] + \sum_{i\neq k} c_{ni}V_{ki} = 0}$$

όπου $n = 1, 2, \ldots, N$ και $k = 1, 2, \ldots, N$.
Κρατώντας σταθερό το n για $k = 1$ έχουμε τη σχέση:

$$c_{n1}\Big[V_{11} + E_n^{(0)} - E_n\Big] + c_{n2}V_{12} + c_{n3}V_{13} + \ldots + C_{nN}V_{1N} = 0$$

Για $k = 2$ έχουμε τη σχέση:

$$c_{n1}V_{21} + c_{n2}\Big[V_{22}E_n^{(0)} - E_n\Big] + c_{n3}V_{23} + \ldots + c_{nN}V_{2n} = 0$$

Για $k = 3$ έχουμε τη σχέση:

$$c_{n1}V_{31} + c_{n2}V_{32} + c_{n3}\Big[V_{33}E_n^{(0)} - E_n\Big] + \ldots + c_{nN}V_{3N} = 0$$

$\vdots$

Για $k = N$ έχουμε τη σχέση:

$$c_{n1}V_{N1} + c_{n2}V_{N2} + c_{n3}V_{N3} + \ldots + C_{nN}\Big[V_{NN} + E_n^{(0)} - E_n\Big] = 0$$

$$\Rightarrow \begin{pmatrix} \Big[V_{11} + E_n^{(0)} - E_n\Big] & V_{12} & V_{13} & \ldots V_{1N} \\ V_{21} & \Big[V_{22} + E_n^{(0)} - E_n\Big] & V_{23} & \ldots V_{2N} \\ V_{31} & V_{32} & \Big[V_{33} + E_n^{(0)} - E_n\Big] & \ldots V_{3N} \\ & \vdots & & \\ V_{N1} & V_{N2} & V_{N3} & \cdots \Big[V_{NN} + E_n^{(0)} - E_n\Big] \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{n1} \\ c_{n2} \\ c_{n3} \\ \vdots \\ c_{nN} \end{pmatrix} = 0$$

Έχουμε λοιπόν ένα σύστημα $N \times N$ ομογενές, με $N+1$ αγνώστους τους E_n, c_{n1}, ..., c_{nN}. Για να έχει μια μη-τετριμμένη λύση το σύστημα, θα πρέπει η ορίζουσά του να είναι μηδέν:

$$\det\left|V + (E_n^{(0)} - E_n)\mathbb{1}\right| = 0 \Rightarrow N \text{ ιδιοτιμές για την ενέργεια } E_n \Rightarrow N \text{ ιδιοδιανύσματα.}$$

Τα c_n είναι ορθογώνια μεταξύ τους, με μία απροσδιόριστη σταθερά, τη βρίσκουμε κανονικοποιώντας.

Επιστρέφουμε τώρα στο διδιάστατο αρχικό πρόβλημα.

$$\langle n|H_0|\Psi_n\rangle + \langle n|V|\Psi_n\rangle = E_n\langle n|\Psi_n\rangle$$
$$c_{nn}E_n^{(0)} + c_{nn}V_{nn} + c_{nl}V_{nl} = c_{nn}E_n$$
$$\langle l|H_0|\Psi_n\rangle + \langle l|V|\Psi_n\rangle = E_n\langle l|\Psi_n\rangle$$
$$c_{nl}E_n^{(0)} + c_{nn}V_{ln} + c_{nl}V_{ll} = E_n c_{nl}$$
$$\Rightarrow \begin{cases} c_{nn}V_{nn} + c_{nl}V_{nl} = c_{nn}(E_n - E_n^{(0)}) \\ c_{nn}V_{ln} + c_{nl}V_{ll} = c_{nl}(E_n - E_n^{(0)}) \end{cases}$$
$$\Rightarrow \left\{ \begin{pmatrix} V_{nn} & V_{nl} \\ V_{ln} & V_{ll} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{nn} \\ c_{nl} \end{pmatrix} = W_n \begin{pmatrix} c_{nn} \\ c_{nl} \end{pmatrix} \right.$$

όπου

$$W_n = E_n - E_n^{(0)}$$

Εξίσωση ιδιοτιμών W_n και ιδιοσυναρτήσεων (ιδιοδιανυσμάτων) για τον 2×2 πίνακα V του διαταρακτικού δυναμικού. Το σύστημα έχει μη μηδενική λύση εάν η ορίζουσα είναι μηδέν:

$$\det\begin{vmatrix} V_{nn} - W_n & V_{nl} \\ V_{ln} & V_{ll} - W_n \end{vmatrix} = 0 \Rightarrow \begin{matrix} \text{δύο ιδιοτιμές} \\ \text{δύο ιδιοδιανύσματα} \end{matrix}$$
$$\Rightarrow (V_{nn} + E_n^{(0)} - E_n)(V_{ll} + E_n^{(0)} - E_n) - V_{nl}V_{ln} = 0$$

Έχουμε ένα τριώνυμο δευτέρου βαθμού, άρα έχουμε δύο λύσεις.

$$E_{n(\pm)} = E_n^{(0)} + \frac{1}{2}(V_{nn} + V_{ll}) \pm \frac{1}{2}\Big[(V_{nn} - V_{ll})^2 + 4V_{nl}V_{ln}\Big]^{1/2}$$

Η ενεργειακή ιδιοτιμή $E_{n(+)}$ αντιστοιχεί στην κυματοσυνάρτηση

$$|\Psi_n\rangle = c_{nn}|\Psi_n^{(0)}\rangle + c_{nl}|\Psi_l^{(0)}\rangle$$

και η ενεργειακή ιδιοτιμή $E_{n(-)}$ αντιστοιχεί στην κυματοσυνάρτηση

$$|\Psi_l\rangle = c_{ll}|\Psi_l^{(0)}\rangle + c_{ln}|\Psi_n^{(0)}\rangle$$

Τα διανύσματα (c_{nn}, c_{nl}) και (c_{ll}, c_{ln}) είναι ιδιοδιανύσματα του πίνακα V με τιμές του E_n ίσον με $E_{n(+)}$ και $E_{n(-)}$ αντίστοιχα. Επειδή το σύστημα είναι ομογενές, προσδιορίζουμε το c_{nl} μέσω του c_{nn} κάθε φορά. Κανονικοποιώντας στη μονάδα, βρίσκουμε και το c_{nn}. Θέτουμε

$$E_n = E_{n(+)} \quad \text{και} \quad E_l = E_{n(-)}$$

Οι δύο κυματοσυναρτήσεις Ψ_n, Ψ_l που προκύπτουν είναι μεταξύ τους ορθογώνιες.

$$(H_0 + V)\Psi_n = E_n\Psi_n \Rightarrow V\Psi_n = E_n\Psi_n - H_0\Psi_n = E_n\Psi_n - E_n^{(0)}\Psi_n = W_n\Psi_n$$

και $V\Psi_l = W_l\Psi_l$ αντίστοιχα, όπου $W_n = E_n - E_n^{(0)}$, $W_l = E_l - E_n^{(0)}$.
Έχουμε λοιπόν:

$$V|\Psi_n\rangle = W_n|\Psi_n\rangle, \qquad V|\Psi_l\rangle = W_l|\Psi_l\rangle$$
$$\text{και} \qquad \langle\Psi_l|V = W_l\langle\Psi_l|, \quad V \text{ ερμιτιανός}$$
$$\Rightarrow \langle\Psi_l|V|\Psi_n\rangle = \begin{cases} W_n\langle\Psi_l|\Psi_n\rangle \\ W_l\langle\Psi_l|\Psi_n\rangle \end{cases}$$
$$W_l \neq W_n \Rightarrow \langle\Psi_l|\Psi_n\rangle = 0$$

Άρα η διαταραχή V είναι διάγωνια σε αυτή τη βάση. Και

$$E_n^{(1)} = W_n = \langle\Psi_n|V|\Psi_n\rangle = V_{nn}$$
$$E_l^{(1)} = W_l = \langle\Psi_l|V|\Psi_l\rangle = V_{ll}$$

Εφαρμογή

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}\right) + \frac{1}{2}m\omega^2(x^2+y^2) + cxy, \qquad c \ll m\omega^2$$

(α) Να υπολογιστούν οι ενέργειες E_n και οι κυματοσυναρτήσεις Ψ_n του σωματιδίου για $c = 0$.
(β) Αν $c \neq 0$, να υπολογιστούν σε πρώτη τάξη της θεωρίας διαταραχών οι ενέργειες και σε μηδενική τάξη οι κυματοσυναρτήσεις για τη μικρότερη ενέργεια με εκφυλισμό.

Λύση:

(α) $\Psi_n(x,y) = \Psi_{n1}(x)\Psi_{n2}(y)$

$$E_n = E_{n1} + E_{n2}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi_{n1}}{\partial x^2} + \frac{m\omega^2}{2}x^2\Psi_{n1} = E_{n1}\Psi_{n1} \quad \text{και} \quad \frac{-\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi_{n2}}{\partial y^2} + \frac{m\omega^2}{2}y^2\Psi_{n2} = E_{n2}\Psi_{n2}$$

όπου

$$E_{n1} = \hbar\omega\left(n_1 + \frac{1}{2}\right), \quad E_{n2} = \hbar\omega\left(n_2 + \frac{1}{2}\right)$$

και $E_n = \hbar\omega(n+1)$

$$n = n_1 + n_2, \quad \begin{cases} n_1 = 0,1,2\ldots \\ n_2 = 0,1,2,\ldots \end{cases}$$

$$\Rightarrow n = 0,1,2,\ldots$$

Για την ενέργεια $E_0 = \hbar\omega$, έχουμε μόνο μία ιδιοσυνάρτηση, την $\Psi_0(x,y) = \Psi_0(x)\Psi_0(y)$.
Για την ενέργεια $E_1 = 2\hbar\omega$ έχουμε δύο ιδιοσυναρτήσεις

$$\begin{cases} \Psi_{10}(x,y) = \Psi_1(x)\Psi_0(y) = \Phi_1 \\ \Psi_{01}(x,y) = \Psi_0(x)\Psi_1(y) = \Phi_2 \end{cases} \Rightarrow \text{ εκφυλισμός}$$

Για ορισμένο n με ενέργεια $E_n^{(0)} = \hbar\omega(n+1)$, το n_1 μπορεί να πάρει τις τιμές $n_1 = 0,1,2,\ldots,n$, δηλαδή έχουμε $n+1$ διαφορετικές καταστάσεις με την ίδια ενέργεια.

(β) Ιδιοτιμές της ενέργειας και ιδιοσυναρτήσεις

$$V_{11} = \langle\Phi_1|V|\Phi_1\rangle = \int \Psi_1^*(x)\Psi_0^*(y)cxy\Psi_1(x)\Psi_0(y)\mathrm{d}x\mathrm{d}y$$

$$V_{11} = 0, \quad V_{22} = 0$$

$$\begin{aligned} V_{12} = \langle\Phi_1|V|\Phi_2\rangle &= c\int \Psi_1^*(x)\Psi_0^*(y)xy\Psi_0(x)\Psi_1(y)\mathrm{d}x\mathrm{d}y \\ &= c\left(\int_{-\infty}^{+\infty}\Psi_1(x)x\Psi_0(x)\mathrm{d}x\right)^2 = c\left(\int_{-\infty}^{+\infty}\Psi_1(x)\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\Psi_1(x)\mathrm{d}x\right)^2 \\ &= c\frac{\hbar}{2m\omega} = V_{21} \end{aligned}$$

διότι

$$x\Psi_0(x) = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\Psi_1(x)$$

$$\Rightarrow \det\begin{vmatrix} 2\hbar\omega - E_1 & \dfrac{c\hbar}{2m\omega} \\ \dfrac{c\hbar}{2m\omega} & 2\hbar\omega - E_1 \end{vmatrix} = 0$$

$$(2\hbar\omega - E_1)^2 - \frac{c^2\hbar^2}{4m^2\omega^2} = 0 \Rightarrow \left[2\hbar\omega - E_1 - \frac{c\hbar}{2m\omega}\right]\left[2\hbar\omega - E_1 + \frac{c\hbar}{2m\omega}\right] = 0$$

$$\Rightarrow \begin{cases} E_1^{(+)} = 2\hbar\omega + \dfrac{c\hbar}{2m\omega} \\ \\ E_1^{(-)} = 2\hbar\omega - \dfrac{c\hbar}{2m\omega} \end{cases}$$

$$\Phi^{(+)} = c_1^{(+)}\Phi_1 + c_2^{(+)}\Phi_2, \qquad E_1^{(+)} = E_1^{(0)} + W$$

$$\Phi^{(-)} = c_1^{(-)}\Phi_1 + c_2^{(-)}\Phi_2, \qquad E_1^{(-)} = E_1^{(0)} - W$$

$$\Rightarrow \begin{pmatrix} 0 & \dfrac{c\hbar}{2m\omega} \\ \dfrac{c\hbar}{2m\omega} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1^{(+)} \\ c_2^{(+)} \end{pmatrix} = W \begin{pmatrix} c_1^{(+)} \\ c_2^{(+)} \end{pmatrix}, \qquad W = \frac{c\hbar}{2m\omega}$$

$$\Rightarrow \frac{c\hbar}{2m\omega} c_2^{(+)} = \frac{c\hbar}{2m\omega} c_1^{(+)} \Rightarrow c_1^{(+)} = c_2^{(+)}$$

Ομοίως για την αρνητική ιδιοτιμή έχουμε:

$$\Rightarrow \begin{pmatrix} 0 & \dfrac{c\hbar}{2m\omega} \\ \dfrac{c\hbar}{2m\omega} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1^{(-)} \\ c_2^{(-)} \end{pmatrix} = -W \begin{pmatrix} c_1^{(-)} \\ c_2^{(-)} \end{pmatrix} \Rightarrow c_2^{(-)} = -c_1^{(-)}$$

Κανονικοποιώντας $|c_1|^2 + |c_2|^2 = 1$ παίρνουμε $|c_1| = |c_2| = 1/\sqrt{2}$.

3.3 Θεωρία διαταραχών εξαρτώμενη από το χρόνο

Η διαταραχή στο σύστημα γίνεται από ένα πεδίο που εξαρτάται από το χρόνο.

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + V(\mathbf{r}, t) = \hat{H}_0 + V(t)$$

Υποθέτουμε ότι η εξωτερική διαταραχή $V(t)$ είναι περαστική στο χρόνο, δηλαδή έχει ένα πεπερασμένο χρονικά διάστημα εφαρμογής.
Πριν και μετά από τη διαταραχή το σύστημα θα περιγράφεται από την αδιατάρακτη χαμιλτονιανή H_0, την οποία μπορούμε να λύσουμε ακριβώς με ιδιοσυναρτήσεις $\Psi_k^{(0)}$, ιδιοτιμές $E_k^{(0)}$.
Υποθέτουμε για απλότητα ότι η διαταραχή αρχίζει να δρα για $t = 0$, οπότε το σύστημα ήταν στην κατάσταση $\Psi_n^{(0)} = \Psi(0)$ και ζητάμε την $\Psi(t)$ για $t > 0$, δηλαδή το πλάτος μετάβασης του συστήματος από την $|n\rangle \to |m\rangle$.
Έχουμε γενικά, εφόσον τα $\Psi_n^{(0)}$ φτιάχνουν ένα πλήρες σύστημα ιδιοσυναρτήσεων, ότι:

$$\Psi(t) = \sum_m c_m(t) \Psi_m^{(0)}$$

Εάν δεν είχαμε τη διαταραχή θα βρίσκουμε $c_m(t) = \mathrm{e}^{-iE_m^{(0)}t/\hbar}\delta_{mn}$.
Με τη διαταραχή στη χαμιλτονιανή, τα $c_m(t)$ θα έχουν μια άλλη χρονική εξάρτηση, την οποία γράφουμε ως εξής:

$$\Psi(t) = \sum_m a_m(t) \mathrm{e}^{-iE_m^{(0)}t/\hbar} \Psi_m^{(0)}$$

και

$$\Big(H_0 + V(t)\Big)\Psi = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}$$

με αρχική συνθήκη: $a_n(0) = 1, a_k(0) = 0$ για $k \neq n$.
Πλάτος μετάβασης: $c_m(t) = \langle \Psi_m^{(0)} | \Psi(t) \rangle$
Πιθανότητα μετάβασης στην κατάσταση $|m\rangle$, αρχίζοντας από τη $|n\rangle$, σε χρόνο t:

$$P_{n\to m}(t) = \left| \langle \Psi_m^{(0)} | \Psi(t) \rangle \right|^2$$

3.3.1 Προσεγγιστικός υπολογισμός της πιθανότητας μετάβασης διαταρακτικά σε πρώτης τάξης προσέγγιση, διακριτό φάσμα

$$
\begin{aligned}
c_m(t) &= \langle \Psi_m^{(0)}, \Psi(t) \rangle \\
\frac{\mathrm{d}c_m}{\mathrm{d}t} &= \langle \Psi_m^{(0)}, \frac{\partial \Psi}{\partial t} \rangle = \frac{1}{i\hbar} \langle \Psi_m^{(0)}, H\Psi \rangle
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
\Rightarrow i\hbar \frac{\mathrm{d}c_m}{\mathrm{d}t} &= \sum_k c_k(t) \langle \Psi_m^{(0)} | H \Psi_k^{(0)} \rangle \\
&= \sum_k c_k(t) E_k^{(0)} \langle \Psi_m^{(0)} | \Psi_k^{(0)} \rangle + \sum_k c_k(t) \langle \Psi_m^{(0)} | V(t) \Psi_k^{(0)} \rangle
\end{aligned}
$$

$$
\Rightarrow \boxed{i\hbar \frac{\mathrm{d}c_m}{\mathrm{d}t} = E_m^{(0)} c_m(t) + \sum_k V_{mk} c_k(t)}
$$

$$
c_k(t) = a_k(t) \mathrm{e}^{-iE_k^{(0)} t/\hbar}
$$

$$
\Rightarrow i\hbar \frac{\mathrm{d}a_m}{\mathrm{d}t} \mathrm{e}^{-iE_m^{(0)} t/\hbar} + (i\hbar) \left(-i \frac{E_m^{(0)}}{\hbar} \right) \cancelto{0}{c_m(t)} = E_m^{(0)} \cancelto{0}{c_m(t)} + \sum_k V_{mk} c_k(t)
$$

$$
\Rightarrow \boxed{i\hbar \frac{\mathrm{d}a_m(t)}{\mathrm{d}t} = \sum_k V_{mk} a_k(t) \mathrm{e}^{i(E_m^{(0)} - E_k^{(0)}) t/\hbar}}
$$

Αναπτύσσουμε διαταρακτικά:

$$
a_m(t) = a_m^{(0)}(t) + a_m^{(1)}(t) + a_m^{(2)}(t) + \ldots
$$

Αρχικές συνθήκες:

$$
a_n^{(0)}(t) = 1, \; a_k^{(0)}(t) = 0 \text{ για } k \neq n
$$

και

$$
a_m^{(1)}(t=0) = 0, \quad a_m^{(2)}(t=0) = 0 \quad \forall m
$$

$$
\Rightarrow \begin{cases}
i\hbar \dfrac{\mathrm{d}a_m^{(0)}}{\mathrm{d}t} = 0 \Rightarrow a_m^{(0)} = \text{ σταθερά } = 0, \; m \neq n \\[2ex]
i\hbar \dfrac{\mathrm{d}a_m^{(1)}}{\mathrm{d}t} = \displaystyle\sum_k V_{mk} \mathrm{e}^{iw_{mk} t} a_k^{(0)}, \quad w_{mk} = \dfrac{E_m^{(0)} - E_k^{(0)}}{\hbar}
\end{cases}
$$

Από την εξίσωση για τους συντελεστές σε πρώτης τάξης διαταραχή έχουμε:

$$
i\hbar \frac{\mathrm{d}a_m^{(1)}}{\mathrm{d}t} = V_{mn}(t) \mathrm{e}^{iw_{mn} t}
$$

$$
\Rightarrow \boxed{a_m^{(1)}(t) = -\frac{i}{\hbar} \int_0^t V_{mn}(t') \mathrm{e}^{iw_{mn} t'} \mathrm{d}t'}
$$

$$
\boxed{V_{mn}(t) = \int \Psi_m^{(0)*}(\mathbf{r}) V(\mathbf{r}, t) \Psi_n^{(0)}(\mathbf{r}) \mathrm{d}^3 x = \langle \Psi_m^{(0)} | V(t) | \Psi_n^{(0)} \rangle}
$$

Πιθανότητα μετάβασης:

$$
P_{nm} = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_0^t V_{mn}(t') \mathrm{e}^{iw_{mn} t'} \mathrm{d}t' \right|^2
$$

Παράδειγμα: Η διαταραχή διαρκεί χρονικό διάστημα T και είναι σταθερή για $0 < t' < T$.

$$
\begin{aligned}
&\Rightarrow V_{mn}(t) = V_{mn} = \langle \Psi_m^{(0)} | V(\mathbf{r}) | \Psi_n^{(0)} \rangle \\
&\Rightarrow a_m^{(1)}(t) = \frac{V_{mn}}{\hbar w_{mn}} \left(1 - \mathrm{e}^{iw_{mn} t} \right) \\
&\Rightarrow P_{nm} = |a_m^{(1)}(t)|^2 = \frac{4 |V_{mn}|^2}{(E_m^{(0)} - E_n^{(0)})^2} \sin^2 \left[\frac{E_m^{(0)} - E_n^{(0)}}{2\hbar} t \right]
\end{aligned}
$$