

Wigner-féle $2n+1$ tétel. II.

(1)

A pontos $2n+1$ -edrendű energiakorrekció meghatározása a hullámfüggvény első n korrekciója ismeretében.

Legyen

$$\hat{H} = \hat{H}^0 + \lambda \hat{W}$$

$$\Psi_i = \Psi_i^0 + \sum_{l=1}^{\infty} \lambda^l \Psi_i^{(l)}$$

$$E_i = E_i^0 + \sum_{j=1}^{\infty} \lambda^j E_i^{(j)}$$

és alkalmasunk a korrekciós (közvetlen) normálást: $\langle \Psi_i^0 | \Psi_i^0 \rangle = 1$, $\langle \Psi_i^0 | \Psi_i^{(l)} \rangle = 0$ ($l \geq 1$).

Behelyettesítve a $\hat{H}\Psi_i = E_i\Psi_i$ Schrödinger-egyenletbe. Mivel ~~továbbá~~ minden kifejezés az "i"-edik nívóra vonatkozik, az "i" alsó indexet a továbbiakban elhagyjuk. Kapjuk:

$$(\hat{H}^0 + \lambda \hat{W})(\Psi^0 + \sum_{l=1}^{\infty} \lambda^l \Psi^{(l)}) = (E^0 + \sum_{k=1}^{\infty} \lambda^k E^{(k)})(\Psi^0 + \sum_{j=1}^{\infty} \lambda^j \Psi^{(j)})$$

Gyűjtjük össze mindkét oldalon a λ^p ($p \geq 1$) melletti koefficienseket. A jobboldalon a két összeg szorzatánál fellépnek mindazon tagok, amelyekre $k+j=p$. Ezt írhatjuk $k=p-j$, és összegezni kell $j=1$ -től $j=p-1$ -ig. Kapjuk:

$$\hat{H}^0 \Psi^{(p)} + \hat{W} \Psi^{(p-1)} = E^{(p)} \Psi^0 + E^0 \Psi^{(p)} + \sum_{j=1}^{p-1} E^{(p-j)} \Psi^{(j)} \quad (1)$$

(Ha $p=1$, az utolsó tag természetesen hiányzik.)

(1)-et megszorozva Ψ^{0*} -gal és integrálva (2) kapjuk az ismert eredményt:

$$E^{(p)} = \langle \Psi^0 | \hat{W} | \Psi^{(p-1)} \rangle \quad (2)$$

Vigyünk át (1)-ben $E^0 \Psi^{(p)}$ -t a baloldalra:

$$(\hat{H}^0 - E^0) \Psi^{(p)} + \hat{W} \Psi^{(p-1)} = E^{(p)} \Psi^0 + \sum_{j=1}^{p-1} E^{(p-j)} \Psi^{(j)} \quad (3)$$

Ez egy teljesen általános kifejezés, bármely $p \geq 1$ -re. ($p=1$ esetén az utolsó összeg elhagyandó.) Szorozzuk meg (3)-at $\Psi^{(1)*}$ -gal és integráljuk ($\langle \Psi^{(1)} | \Psi^0 \rangle = 0$)

$$\langle \Psi^{(1)} | \hat{H}^0 - E^0 | \Psi^{(p)} \rangle + \langle \Psi^{(1)} | \hat{W} | \Psi^{(p-1)} \rangle = \sum_{j=1}^{p-1} E^{(p-j)} \langle \Psi^{(1)} | \Psi^{(j)} \rangle$$

Írjuk fel (3)-at $p=1$ -re (az összeg elhagyandó),⁽⁴⁾

$$(\hat{H}^0 - E^0) \Psi^{(1)} + \hat{W} \Psi^0 = E^{(1)} \Psi^{(0)},$$

szorozzuk meg $\Psi^{(p)*}$ -gal ($p \geq 1$) és integráljuk. ($\langle \Psi^{(p)} | \Psi^{(0)} \rangle = 0$):

$$\langle \Psi^{(p)} | \hat{H}^0 - E^0 | \Psi^{(1)} \rangle + \langle \Psi^{(p)} | \hat{W} | \Psi^0 \rangle = 0$$

Komplex konjugáltját véve és átrendezve

$$\langle \Psi^{(1)} | \hat{H}^0 - E^0 | \Psi^{(p)} \rangle = - \langle \Psi^0 | \hat{W} | \Psi^{(p)} \rangle$$

Behelyettesítve (4)-be kapjuk

$$- \langle \Psi^0 | \hat{W} | \Psi^{(p)} \rangle + \langle \Psi^{(1)} | \hat{W} | \Psi^{(p-1)} \rangle = \sum_{j=1}^{p-1} E^{(p-j)} \langle \Psi^{(1)} | \Psi^{(j)} \rangle$$

azaz, (2) kiszámoláshoz:

$$E^{(p+1)} = \langle \Psi^0 | \hat{W} | \Psi^{(p)} \rangle = \langle \Psi^{(1)} | \hat{W} | \Psi^{(p-1)} \rangle - \sum_{j=1}^{p-1} E^{(p-j)} \langle \Psi^{(1)} | \Psi^{(j)} \rangle \quad (5)$$

Látható, hogy E^{p+1} kiszámításához már nincs szükség $\Psi^{(p)}$ -re; a legfontosabbnak nullánfüggvény-kiszámítás a jobboldalon $\Psi^{(p-1)}$. Témakörünk meg est az eljárás!

Írjuk fel (3)-at p helyett $p-1$ -re [mivel (3) levezetése (3) és $p \geq 1$ volt, itt $p \geq 2$]:

$$(\hat{H}^0 - E^0) \psi^{(p-1)} + \hat{W} \psi^{(p-2)} = E^{(p-1)} \psi^0 + \sum_{j=1}^{p-2} E^{(p-1-j)} \psi^{(j)},$$

mostanuk meg $\psi^{(2)*}$ -gal is integráljuk ($\langle \psi^{(2)} | \psi^{(0)} \rangle = 0$):

$$\langle \psi^{(2)} | \hat{H}^0 - E^0 | \psi^{(p-1)} \rangle + \langle \psi^{(2)} | \hat{W} | \psi^{(p-2)} \rangle = \sum_{j=1}^{p-2} E^{(p-1-j)} \langle \psi^{(2)} | \psi^{(j)} \rangle \quad (6)$$

Írjuk fel (3)-at $p=2$ -re:

$$(\hat{H}^0 - E^0) \psi^{(2)} + \hat{W} \psi^{(1)} = E^{(2)} \psi^0 + E^{(1)} \psi^{(1)}$$

Mostanuk meg $\psi^{(p-1)*}$ -gal is integráljuk ($\langle \psi^{(p-1)} | \psi^0 \rangle = 0$, mivel $p \geq 2$):

$$\langle \psi^{(p-1)} | \hat{H}^0 - E^0 | \psi^{(2)} \rangle + \langle \psi^{(p-1)} | \hat{W} | \psi^{(1)} \rangle = E^{(1)} \langle \psi^{(p-1)} | \psi^{(1)} \rangle \quad (7)$$

Vegyük (7) komplex konjugáltját és rendezzük át:

$$\langle \psi^{(2)} | \hat{H}^0 - E^0 | \psi^{(p-1)} \rangle = -\langle \psi^{(1)} | \hat{W} | \psi^{(p-1)} \rangle + E^{(1)} \langle \psi^{(1)} | \psi^{(p-1)} \rangle$$

Behelyettesítve (6)-ba kapjuk átrendezve

$$\begin{aligned} \langle \psi^{(1)} | \hat{W} | \psi^{(p-1)} \rangle &= \langle \psi^{(2)} | \hat{W} | \psi^{(p-2)} \rangle + E^{(1)} \langle \psi^{(1)} | \psi^{(p-1)} \rangle - \\ &\quad - \sum_{j=1}^{p-2} E^{(p-1-j)} \langle \psi^{(2)} | \psi^{(j)} \rangle \end{aligned} \quad (8)$$

(8)-at behelyettesítjük (5) jobb oldalába:

$$\begin{aligned} E^{(p+1)} &= \langle \psi^0 | \hat{W} | \psi^{(p)} \rangle = \langle \psi^{(2)} | \hat{W} | \psi^{(p-2)} \rangle + E^{(1)} \langle \psi^{(1)} | \psi^{(p-1)} \rangle - \\ &\quad - \sum_{j=1}^{p-2} E^{(p-1-j)} \langle \psi^{(2)} | \psi^{(j)} \rangle - \sum_{j=1}^{p-1} E^{(p-j)} \langle \psi^{(1)} | \psi^{(j)} \rangle \end{aligned}$$

Az utolsó ömlesztet kihasználásával a $j=p-1$ tagot, ami épp kiejt a jobb oldal második tagját, és a két ömlesztet megfelelően összevonjuk:

$$\langle \psi^0 | \hat{W} | \psi^{(p)} \rangle = \langle \psi^{(2)} | \hat{W} | \psi^{(p-2)} \rangle - \sum_{j=1}^{p-2} \sum_{l=1}^2 E^{(p+1-l-j)} \langle \psi^{(l)} | \psi^{(j)} \rangle \quad (9)$$

(5)-öt és (9)-et összehasonlítva, megkapjuk a

adjunk a következő sejtést:

(9)

$$\langle \psi^0 | \hat{W} | \psi^{(p)} \rangle = \langle \psi^{(k)} | \hat{W} | \psi^{(p-k)} \rangle - \sum_{j=1}^{p-k} \sum_{l=1}^k E^{(p+1-l-j)} \langle \psi^{(l)} | \psi^{(j)} \rangle \quad (10)$$

Segédleml

A (10) önállóan álló bármely k -re $(1 < k < p)$ érvényes.

Bizonyítás teljes indukcióval

Tegyük fel, hogy (10) teljesül valamely k -re, és keressük ismét újra a már kért bebizonyított állítást.

Írjuk fel (3)-at p helyett $p-k+1$ helyettesítve:

$$(\hat{H}^0 - E^0) \psi^{(p-k)} + \hat{W} \psi^{(p-k-1)} = E^{(p-k)} \psi^0 + \sum_{j=1}^{p-k-1} E^{(p-k-j)} \psi^{(j)} \quad (\langle \psi^{(k+1)} | \psi^0 \rangle = 0)$$

Ezt megszorozzuk $\psi^{(k+1)*}$ -gal és integráljuk:

$$\begin{aligned} \langle \psi^{(k+1)} | \hat{H}^0 - E^0 | \psi^{(p-k)} \rangle + \langle \psi^{(k+1)} | \hat{W} | \psi^{(p-k-1)} \rangle &= \\ &= \sum_{j=1}^{p-k-1} E^{(p-k-j)} \langle \psi^{(k+1)} | \psi^{(j)} \rangle \end{aligned} \quad (11)$$

Írjuk fel (3)-at $p = k+1$ -re

$$(\hat{H}^0 - E^0) \psi^{(k+1)} + \hat{W} \psi^{(k)} = E^{(k+1)} \psi^0 + \sum_{j=1}^k E^{(k+1-j)} \psi^{(j)}$$

~~meg~~ megszorozzuk meg $\psi^{(p-k)*}$ -gal és integráljuk. $(\langle \psi^{(p-k)} | \psi^0 \rangle = 0)$:

$$\begin{aligned} \langle \psi^{(p-k)} | \hat{H}^0 - E^0 | \psi^{(k+1)} \rangle + \langle \psi^{(p-k)} | \hat{W} | \psi^{(k)} \rangle &= \\ &= \sum_{j=1}^k E^{(k+1-j)} \langle \psi^{(p-k)} | \psi^{(j)} \rangle \end{aligned}$$

(5)

Vegyük a komplex konjugáltját:

$$\langle \psi^{(k+1)} | \hat{H}^0 - E^0 | \psi^{(p-k)} \rangle + \langle \psi^{(k)} | \hat{W} | \psi^{(p-k)} \rangle = \\ = \sum_{j=1}^k E^{(k+1-j)} \langle \psi^{(j)} | \psi^{(p-k)} \rangle$$

Kivonva ebből (11)-et és egy tagot átvive, jobboldalra kapjuk

$$\langle \psi^{(k)} | \hat{W} | \psi^{(p-k)} \rangle = \langle \psi^{(k+1)} | \hat{W} | \psi^{(p-k-1)} \rangle + \\ + \sum_{j=1}^k E^{(k+1-j)} \langle \psi^{(j)} | \psi^{(p-k)} \rangle - \sum_{j=1}^{p-k-1} E^{(p-k-j)} \langle \psi^{(k+1)} | \psi^{(j)} \rangle$$

Helyettesítsük be (10)-be ezt a $\langle \psi^{(k)} | \hat{W} | \psi^{(p-k)} \rangle$ -ra kapott kifejezést:

$$\langle \psi^0 | \hat{W} | \psi^{(p)} \rangle = \langle \psi^{(k+1)} | \hat{W} | \psi^{(p-k-1)} \rangle + \\ + \sum_{j=1}^k E^{(k+1-j)} \langle \psi^{(j)} | \psi^{(p-k)} \rangle - \sum_{j=1}^{p-k-1} E^{(p-k-j)} \langle \psi^{(k+1)} | \psi^{(j)} \rangle - \\ - \sum_{j=1}^{p-k} \sum_{l=1}^k E^{(p+1-l-j)} \langle \psi^{(l)} | \psi^{(j)} \rangle$$

Az első összegben a j összegzés index helyett l -et írunk, az utolsóban leválasztjuk a külső összegzés felső határánál megfelelő $j = p-k$ tagot [$p+1-l-(p-k) = k+1-l$]:

$$\langle \psi^0 | \hat{W} | \psi^{(p)} \rangle = \langle \psi^{(k+1)} | \hat{W} | \psi^{(p-k-1)} \rangle + \\ + \sum_{l=1}^k E^{(k+1-l)} \langle \psi^{(l)} | \psi^{(p-k)} \rangle - \sum_{j=1}^{p-k-1} E^{(p-k-j)} \langle \psi^{(k+1)} | \psi^{(j)} \rangle - \\ - \sum_{j=1}^{p-k-1} \sum_{l=1}^k E^{(p+1-l-j)} \langle \psi^{(l)} | \psi^{(j)} \rangle - \sum_{l=1}^k E^{(k+1-l)} \langle \psi^{(l)} | \psi^{(p-k)} \rangle$$

Az első és utolsó összeg kiejt egymást, a megmar-

radó két összeg ömlesztése: az előbbi az utóbbi- (6)
 hoz egy $l = k+1$ -edik tagot ad $[p+1-(k+1)-j = p-k-j]$.

Kapjuk:

$$\langle \psi^0 | \hat{W} | \psi^{(p)} \rangle = \langle \psi^{(k+1)} | \hat{W} | \psi^{[p-(k+1)]} \rangle - \\
 - \sum_{j=1}^{p-(k+1)} \sum_{l=1}^{k+1} E^{(p+1-l-j)} \langle \psi^{(l)} | \psi^{(j)} \rangle$$

Tehát feltételezve (10) érvényességét valamely k -ra, bevezettük, hogy akkor érvényes kell legyen $k+1$ -re is. Mivel, mint láttuk, (10) teljesül $k=1$ -re és $k=2$ -re, valamennyi $k < p$ -re érvényes. Q. E. D.

Mivel $\langle \psi^0 | \hat{W} | \psi^{(p)} \rangle = E^{(p+1)}$, írhatjuk (10)-at mint

$$E^{(p+1)} = \langle \psi^{(k)} | \hat{W} | \psi^{(p-k)} \rangle - \sum_{j=1}^{p-k} \sum_{l=1}^k E^{(p+1-l-j)} \langle \psi^{(l)} | \psi^{(j)} \rangle, \quad (12)$$

és teljesítenünk $0 < k < p$ választással. (Ha $k=0$ vagy $k=p$, akkor a jobboldalon szereplő összeg elhagyandó - határai ügységtelenül értelmezhetők.)

Az $E^{(2n)}$ és $E^{(2n+1)}$ -edik energiabőlcső kifejezése:

Legyen (12)-ben $p+1 = 2n$ (páros szám), azaz $p = 2n-1$ (páratlan), és válasszuk $k = n-1$ -et.

Akkor $p-k = 2n-1-(n-1) = n$, és

$$E^{(2n)} = \langle \psi^{(n-1)} | \hat{W} | \psi^{(n)} \rangle - \sum_{j=1}^n \sum_{l=1}^{n-1} E^{(2n-l-j)} \langle \psi^{(l)} | \psi^{(j)} \rangle \quad (13)$$

Legyen (12)-ben $p+1=2n+1$ (páratlan szám), (7) azaz $p=2n$ (páros), és válasszuk $k=n$ -et. Képezzük $(p-k=2n-n=n)$:

$$E^{(2n+1)} = \langle \psi^{(n)} | \hat{W} | \psi^{(n)} \rangle - \sum_{j=1}^n \sum_{l=1}^n E^{(2n+1-l-j)} \langle \psi^{(l)} | \psi^{(j)} \rangle \quad (14)$$

Látható, hogy a ^{rendű} $2n$ -as $\psi^{(n)}$ hullámfüggvény-konkrete, ami fellép (13)-ban és (14)-ben az n -edik, $\psi^{(n)}$. Szintén van még az energia-konkrete, köztük n -nél magasabbrendűek is. Itt $\psi^{(1)}, \psi^{(2)}, \dots, \psi^{(n)}$ hullámfüggvény-konkreteket ismeretében azonban csak rendre meghatározható (13) és (14) ismételt alkalmazásával:

$n=0$ $E^{(1)} = \langle \psi^{(0)} | \hat{W} | \psi^{(0)} \rangle$

$n=1$ $E^{(2)} = \langle \psi^{(0)} | \hat{W} | \psi^{(1)} \rangle$

$$E^{(3)} = \langle \psi^{(1)} | \hat{W} | \psi^{(1)} \rangle - E^{(1)} \langle \psi^{(1)} | \psi^{(1)} \rangle$$

$n=2$ $E^{(4)} = \langle \psi^{(1)} | \hat{W} | \psi^{(2)} \rangle - \sum_{j=1}^2 \sum_{l=1}^1 E^{(4-l-j)} \langle \psi^{(l)} | \psi^{(j)} \rangle =$

$$= \langle \psi^{(1)} | \hat{W} | \psi^{(2)} \rangle - E^{(2)} \langle \psi^{(1)} | \psi^{(1)} \rangle - E^{(1)} \langle \psi^{(1)} | \psi^{(2)} \rangle$$

$$E^{(5)} = \langle \psi^{(2)} | \hat{W} | \psi^{(2)} \rangle - \sum_{j=1}^2 \sum_{l=1}^2 E^{(5-l-j)} \langle \psi^{(l)} | \psi^{(j)} \rangle =$$

$$= \langle \psi^{(2)} | \hat{W} | \psi^{(2)} \rangle - E^{(3)} \langle \psi^{(1)} | \psi^{(1)} \rangle -$$

$$- E^{(2)} \langle \psi^{(2)} | \psi^{(1)} \rangle - E^{(2)} \langle \psi^{(1)} | \psi^{(2)} \rangle - E^{(1)} \langle \psi^{(2)} | \psi^{(2)} \rangle$$

266.