

Seria 3: RACHUNEK ZABURZEŃ

Grzegorz Jaczewski

Niniejsza notatka może zawierać błędy i nieścisłości. Zachęcam do dzielenia się wszelkimi uwagami.

Wprowadzenie

Zasadniczo w mechanice kwantowej mamy niewiele układów które jesteśmy w stanie rozwiązać w sposób analityczny. Musimy zatem traktować nasz problem w sposób przybliżony. Zapiszmy ogólny hamiltonian

$$H = H_0 + \lambda H', \quad (1)$$

gdzie H_0 to hamiltonian który jesteśmy w stanie rozwiązać - znamy stany ψ_n i energie $E_n^{(0)}$ takie że:

$$H_0 |\psi_n\rangle = E_n^{(0)} |\psi_n\rangle, \quad (2)$$

a $\lambda H'$ to niewielkie zaburzenie które dodajemy do naszego układu. Zakładamy, że stany i energie własne hamiltonianu H

$$H |\phi_n\rangle = E_n |\phi_n\rangle, \quad (3)$$

możemy rozwinąć w szereg ze względu na mały parametr λ

$$\begin{aligned} E_n(\lambda) &= \sum_{i=0}^{\infty} \lambda^i E_n^{(i)}, \\ |\phi_n(\lambda)\rangle &= \sum_{i=0}^{\infty} \lambda^i |\phi_n^{(i)}\rangle, \end{aligned} \quad (4)$$

gdzie

$$\begin{aligned} \lim_{\lambda \rightarrow 0} E_n(\lambda) &= E_n^{(0)}, \\ \lim_{\lambda \rightarrow 0} |\phi_n(\lambda)\rangle &= |\phi_n^{(0)}\rangle = |\psi_n\rangle. \end{aligned} \quad (5)$$

W pierwszym rzędzie rachunku zaburzeń mamy (wyprowadzenie: *Deriving 1st Order Perturbation Theory (Energy and Wavefunction Corrections)*)

$$\begin{aligned} E_n &= E_n^{(0)} + E_n^{(1)} = E_n^{(0)} + \langle \psi_n | H' | \psi_n \rangle, \\ |\phi_n\rangle &= |\phi_n^{(0)}\rangle + |\phi_n^{(1)}\rangle = |\psi_n\rangle + \sum_{k \neq n} \frac{\langle \psi_k | H' | \psi_n \rangle}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} |\psi_k\rangle. \end{aligned} \quad (6)$$

W tym miejscu pojawia się następujący problem: co jeśli dla pewnego $k \neq n$ energie są takie same, $E_k^{(0)} = E_n^{(0)}$? Widzimy, że powyższa metoda zaczyna trzeszczeć jeśli mamy do czynienia ze stanami zdegenerowanymi. Załóżmy, że

$$H_0 |\psi_{na}\rangle = E_n^{(0)} |\psi_{na}\rangle, \quad (7)$$

gdzie a przebiega od 1 do g_n . Mamy zatem g_n stanów o energii $E_n^{(0)}$. Oczekujemy, że wprowadzenie zaburzenia zniesie degenerację choćby częściowo

$$\begin{aligned} H |\phi_{nb}\rangle &= E_n |\phi_{nb}\rangle, \\ b &= 1 \dots g'_n, \\ g'_n &\leq g_n \end{aligned} \quad (8)$$

Nie jest jednak oczywiste do jakiej kombinacji liniowej

$$|\phi_{nb}^{(0)}\rangle = \sum_{a=1}^{g_n} C_{ba} |\psi_{na}\rangle \quad (9)$$

będzie zbiegał stan $\phi_{nb}(\lambda)$ przy $\lambda \rightarrow 0$. Za chwilę to ustalimy. Dodatkowo zakładamy, że poprawki są ortogonalne do stanu niezaburzonego

$$\langle \phi_{nb}^{(0)} | \phi_{nb}^{(k)} \rangle = 0, \quad (10)$$

dla $k \geq 1$. Zapisujemy zatem równanie własne

$$H |\phi_{nb}\rangle = E_n |\phi_{nb}\rangle, \quad (11)$$

$$(H_0 + \lambda H') \sum_{i=0}^{\infty} \lambda^i |\phi_{nb}^{(i)}\rangle = \sum_{j=0}^{\infty} \lambda^j E_n^{(j)} \sum_{i=0}^{\infty} \lambda^i |\phi_{nb}^{(i)}\rangle \quad (12)$$

Wyrazy proporcjonalne do λ^0

$$H_0 |\phi_{nb}^{(0)}\rangle = E_n^{(0)} |\phi_{nb}^{(0)}\rangle \quad (13)$$

odtwarzają niezaburzone równanie własne. Nas będą interesowały poprawki pierwszego rzędu, a więc przyjrzymy się dokładniej wyrazom proporcjonalnym do λ^1

$$H_0 |\phi_{nb}^{(1)}\rangle + H' |\phi_{nb}^{(0)}\rangle = E_n^{(0)} |\phi_{nb}^{(1)}\rangle + E_n^{(1)} |\phi_{nb}^{(0)}\rangle. \quad (14)$$

Pomnóżmy lewostronnie przez $\langle \psi_{na} |$ i uporządkujmy wszystko

$$\langle \psi_{na} | (H_0 - E_n^{(0)}) |\phi_{nb}^{(1)}\rangle + \langle \psi_{na} | (H' - E_n^{(1)}) |\phi_{nb}^{(0)}\rangle = 0. \quad (15)$$

Na mocy równania (7) pierwszy wyraz znika i zostaje

$$\langle \psi_{na} | (H' - E_n^{(1)}) |\phi_{nb}^{(0)}\rangle = 0. \quad (16)$$

Zapiszmy teraz $\phi_{nb}^{(0)}$ jako kombinację liniową stanów własnych H_0 o energii $E_n^{(0)}$

$$\langle \psi_{na} | (H' - E_n^{(1)}) \sum_{a'=1}^{g_n} C_{ba'} |\psi_{na'}\rangle = 0, \quad (17)$$

$$\sum_{a'=1}^{g_n} C_{ba'} \langle \psi_{na} | H' | \psi_{na'} \rangle = \sum_{a'=1}^{g_n} C_{ba'} E_n^{(1)} \langle \psi_{na} | \psi_{na'} \rangle. \quad (18)$$

Wprowadźmy oznaczenie

$$W_{aa'}^{(n)} \equiv \langle \psi_{na} | H' | \psi_{na'} \rangle. \quad (19)$$

Mamy zatem

$$\sum_{a'=1}^{g_n} W_{aa'}^{(n)} C_{ba'} = \sum_{a'=1}^{g_n} C_{ba'} E_n^{(1)} \langle \psi_{na} | \psi_{na'} \rangle, \quad (20)$$

$$\sum_{a'=1}^{g_n} W_{aa'}^{(n)} C_{ba'} = \sum_{a'=1}^{g_n} C_{ba'} E_n^{(1)} \delta_{aa'}, \quad (21)$$

$$\sum_{a'=1}^{g_n} W_{aa'}^{(n)} C_{ba'} = E_n^{(1)} C_{ba}. \quad (22)$$

Możemy zapisać to równanie w postaci macierzowej

$$W^{(n)} C_b = E_n^{(1)} C_b, \quad (23)$$

gdzie $W^{(n)}$ jest macierzą $g_n \times g_n$, a C_b wektorem o g_n składowych. Widzimy zatem, że aby otrzymać poprawki pierwszego rzędu do energii stanu zdegenerowanego musimy zbudować macierz W (zrzutować hamiltonian H' na podprzestrzeń rozpiętą przez zdegenerowane stany własne H_0 o takiej samej energii), a następnie znaleźć jej wartości własne.

Zadanie 1

Układ poziomów energetycznych jednoelektronowego stanu $n = 2$ w atomie litu różni się istotnie od obserwowanego w atomie wodoru. Występujące ekranowanie jądra przez zamkniętą powłokę $n = 1$ powoduje zaburzenie potencjału kulombowskiego i zdjęcie przypadkowej degeneracji stanów o danym n ale różnych l . Dla atomu wodoropodobnego energia potencjalna elektronu w pobliżu jądra może zostać przybliżona przez potencjał

$$-\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \quad (24)$$

natomiast w dużej odległości od jądra przez potencjał

$$-\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \quad (25)$$

więc prostym przybliżeniem takiego potencjału jest funkcja:

$$H' = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} - \frac{(Z-1)e^2}{4\pi\epsilon_0 r} e^{-b\frac{r}{a}} \quad (26)$$

gdzie b jest parametrem, który należy dobrać na podstawie danych doświadczalnych, a a to promień Bohra. Znaleźć zaburzenie energii stanów $n = 2$ atomu wodoropodobnego o $Z = 3$ wywołane powyższą modyfikacją energii kulombowskiej. Wyznaczone doświadczalnie energie stanów w atomie litu wynoszą: $E_{2p} = -3.53$ eV, $E_{2s} = -5.37$ eV, $E_{3s} = -2.00$ eV, $E_{3p} = -1.54$ eV, $E_{3d} = -1.51$ eV. Funkcje falowe atomu wodoru

$$\begin{aligned} \psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) &= R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta, \varphi) \\ R_{10}(r) &= 2\sqrt{\frac{1}{a^3}} \exp\left(-\frac{r}{a}\right) \\ R_{20}(r) &= 2\sqrt{\frac{1}{(2a)^3}} \left(1 - \frac{r}{2a}\right) \exp\left(-\frac{r}{2a}\right) \\ R_{21}(r) &= \frac{2}{\sqrt{3}} \sqrt{\frac{1}{(2a)^3}} \frac{r}{2a} \exp\left(-\frac{r}{2a}\right) \\ Y_{00}(\theta, \varphi) &= \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \\ Y_{10}(\theta, \varphi) &= \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta \\ Y_{1\pm 1}(\theta, \varphi) &= \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{\pm i\varphi} \end{aligned} \quad (27)$$

Przydatna całka

$$\int_0^\infty r^n e^{-cr} dr = \frac{n!}{c^{n+1}} \quad (28)$$

Jak wiemy z wprowadzenia, żeby znaleźć poprawki do energii stanu zdegenerowanego musimy najpierw zbudować macierz zaburzenia. Dla liczby kwantowej $n = 2$ szukamy zatem wartości wyrażenia

$$\langle 2lm | H' | 2l'm' \rangle. \quad (29)$$

Jako, że H' zależy jedynie od zmiennej r to mamy

$$\langle 2lm | H' | 2l'm' \rangle = \delta_{ll'} \delta_{mm'} \langle R_{2l} | H' | R_{2l'} \rangle \equiv H'_{2l}. \quad (30)$$

Widzimy zatem, że nasza macierz zaburzenia będzie miała jedynie elementy diagonalne. Dodatkowo będą one zależały jedynie od liczby kwantowej l (dla ustalonego $n = 2$). Możemy zatem zapisać macierz zaburzenia jako

$$W = \begin{pmatrix} H'_{20} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & H'_{21} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & H'_{21} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & H'_{21} \end{pmatrix}, \quad (31)$$

gdzie przyjmujemy następującą kolejność stanów: $|200\rangle, |210\rangle, |21-1\rangle, |211\rangle$. Jako, że nasza macierz jest już diagonalna to elementy H'_{20} oraz H'_{21} od razu dają nam poprawki pierwszego rzędu. Widzimy zatem, że stan z $l = 0$ dostaje inną poprawkę od stanów z $l = 1$ - degeneracja z 4-krotnej zmienia się w 3-krotną. Pozostaje teraz wyznaczyć wartości tych poprawek.

$$\begin{aligned} H'_{20} &= \langle R_{20} | H' | R_{20} \rangle = \int_0^\infty R_{20}^*(r) R_{20}(r) H'(r) r^2 dr = \\ &= -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \int_0^\infty \left(r - \frac{r^2}{a} + \frac{r^3}{4a^2} \right) \exp\left(-\frac{b+1}{a}r\right) dr. \end{aligned} \quad (32)$$

Powyższą całkę możemy robić na sumę trzech całek i każdą z nich obliczyć używając wzoru (28). Ostatecznie dostajemy wynik

$$H'_{20} = -Ry \frac{2b^2 + 1}{(b+1)^4}, \quad (33)$$

gdzie Ry to stała Rydberga

$$Ry = \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 a} \approx 13,6 \text{ eV}. \quad (34)$$

Analogicznie obliczamy H'_{21}

$$\begin{aligned} H'_{21} &= \langle R_{21} | H' | R_{21} \rangle = \int_0^\infty R_{21}^*(r) R_{21}(r) H'(r) r^2 dr = \\ &= -\frac{e^2}{48\pi\epsilon_0 a^5} \int_0^\infty r^3 \exp\left(-\frac{b+1}{a}r\right) dr = -Ry \frac{1}{(b+1)^4}. \end{aligned} \quad (35)$$

Pozostaje teraz wyznaczyć wartość parametru b . Jako, że nasz model najlepiej radzi sobie z opisem stanów o małej gęstości w pobliżu jądra, posłużymy się energiami wyznaczonymi doświadczalnie dla stanów $2p$. Dla litu mamy

$$E_{2p}^{Z=3} = -3,53 \text{ eV}, \quad (36)$$

a dla wodoru

$$E_{n=2}^{Z=1} = -\frac{\text{Ry}}{n^2} = -3,38 \text{ eV}. \quad (37)$$

Widzimy, że różnica między energią stanu niezaburzonego (stan $n = 2$ atomu wodoru), a energią stanu zaburzonego (stan $2p$ atomu litu) wynosi

$$E_{2p}^{Z=3} - E_{n=2}^{Z=1} = -0,15 \text{ eV}. \quad (38)$$

Żądamy, żeby zachodziło

$$H'_{21} = -0,15 \text{ eV}. \quad (39)$$

Podstawiamy H'_{21} i otrzymujemy

$$-\text{Ry} \frac{1}{(b+1)^4} = -0,15 \text{ eV}, \quad (40)$$

$$b = 2,08. \quad (41)$$

Teraz możemy podstawić b do wyrażenia na H'_{20} i dostajemy

$$H'_{20} = -1,43 \text{ eV}. \quad (42)$$

Mamy zatem

$$E_{2s}^{Z=3} = E_{2s}^{Z=1} + H'_{20} = -4,83 \text{ eV}, \quad (43)$$

gdzie wartość mierzona eksperymentalnie wynosi $E_{2s,exp}^{Z=3} = -5,37 \text{ eV}$. Po użyciu tego samego potencjału i wartości b do obliczenia poprawek stanu $n = 3$ otrzymujemy:

Stan	Eksperyment	Teoria
2s	-5,37 eV	-4,83 eV
3s	-2,00 eV	-1,77 eV
3p	-1,54 eV	-1,53 eV
3d	-1,51 eV	-1,51 eV

Czyli potencjał ten dobrze opisuje poprawki do stanów p i d , a raczej słabo do stanów s .

Zadanie 2

Atom litu został umieszczony w stałym, jednorodnym polu elektrycznym $\vec{E} \parallel \hat{z}$. Posługując się modelem atomu litu opisywanego zaburzeniem do potencjału atomu wodoru

$$H' = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} - \frac{(Z-1)e^2}{4\pi\epsilon_0 r} e^{-b\frac{z}{a}} \quad (44)$$

Znaleźć rozszczepienie 4-krotnie zdegenerowanego poziomu odpowiadającemu głównej liczbie kwantowej $n = 2$. Przedyskutować przypadek słabego i silnego pola elektrycznego. Potencjał zaburzający pochodzący od pola elektrycznego można przedstawić w postaci:

$$H'' = e\mathcal{E}z = e\mathcal{E}r \cos \theta. \quad (45)$$

Harmoniki sferyczne można zapisać w rozseparowanej postaci $Y_{lm}(\theta, \varphi) = \Theta_{lm}(\theta)\Phi_m(\varphi)$, gdzie

$$\begin{aligned}\Theta_{00}(\theta) &= \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \Theta_{10}(\theta) &= \sqrt{\frac{3}{2}} \cos \theta \\ \Theta_{1\pm 1}(\theta) &= \sqrt{\frac{3}{4}} \sin \theta \\ \Phi_0(\varphi) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \\ \Phi_{\pm 1}(\varphi) &= \mp \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{\pm i\varphi}\end{aligned}\tag{46}$$

W tym wypadku na zaburzenie składają się dwa człony: H' i H'' . Macierz zaburzenia pochodząca od H' znaleźliśmy już w poprzednim zadaniu:

$$W = \begin{pmatrix} H'_{20} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & H'_{21} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & H'_{21} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & H'_{21} \end{pmatrix}\tag{47}$$

, gdzie

$$\begin{aligned}H'_{20} &= -1,43 \text{ eV} \\ H'_{21} &= -0,15 \text{ eV}.\end{aligned}\tag{48}$$

Potrzebujemy jeszcze macierzy pochodzącej od H'' , a więc szukamy elementów macierzowych

$$\langle 2lm | H'' | 2l'm' \rangle = e\mathcal{E} \langle R_{2l} | r | R_{2l'} \rangle \langle \Theta_{lm} | \cos \theta | \Theta_{l'm'} \rangle \delta_{mm'}.\tag{49}$$

Okazuje się, że wszystkie elementy diagonalne będą znikły:

$$\begin{aligned}\langle \Theta_{00} | \cos \theta | \Theta_{00} \rangle &= \frac{1}{2} \int_0^\pi \cos \theta \sin \theta d\theta = 0 \\ \langle \Theta_{10} | \cos \theta | \Theta_{10} \rangle &= \frac{3}{2} \int_0^\pi \cos^3 \theta \sin \theta d\theta = 0 \\ \langle \Theta_{1\pm 1} | \cos \theta | \Theta_{1\pm 1} \rangle &= \frac{3}{4} \int_0^\pi \cos \theta \sin^3 \theta d\theta = 0.\end{aligned}\tag{50}$$

Zostają zatem jedynie elementy pozadiagonalne odpowiadające stanom o równej liczbie kwantowej m :

$$\langle 210 | H'' | 200 \rangle = \langle 200 | H'' | 210 \rangle = -3e\mathcal{E}a.\tag{51}$$

Możemy zatem zapisać kompletną macierz zaburzenia

$$W = \begin{pmatrix} H'_{20} & -3e\mathcal{E}a & 0 & 0 \\ -3e\mathcal{E}a & H'_{21} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & H'_{21} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & H'_{21} \end{pmatrix}\tag{52}$$

Widzimy, że dodatkowe zaburzenie w pierwszym rzędzie nie wpływa na stany $|21 \pm 1\rangle$ i pozostają one zdegenerowane. Żeby znaleźć poprawki do energii musimy zdiagnozować macierz

$$\begin{pmatrix} H'_{20} & -3e\mathcal{E}a \\ -3e\mathcal{E}a & H'_{21} \end{pmatrix} \quad (53)$$

Szukamy zatem wartości własnych λ

$$(H'_{20} - \lambda)(H'_{21} - \lambda) - 9e^2\mathcal{E}^2a^2 = 0, \quad (54)$$

$$\lambda^2 - \lambda(H'_{20} + H'_{21}) + H'_{20}H'_{21} - 9e^2\mathcal{E}^2a^2 = 0, \quad (55)$$

$$\begin{aligned} \lambda_{\pm} &= \frac{H'_{20} + H'_{21} \pm \sqrt{(H'_{20} + H'_{21})^2 - 4(H'_{20}H'_{21} - 9e^2\mathcal{E}^2a^2)}}{2} \\ &= \frac{H'_{20} + H'_{21} \pm \sqrt{(H'_{20} - H'_{21})^2 + 36e^2\mathcal{E}^2a^2}}{2}. \end{aligned} \quad (56)$$

Poświęćmy teraz chwilę na analizę wyrażenia

$$\sqrt{(H'_{20} - H'_{21})^2 + 36e^2\mathcal{E}^2a^2}. \quad (57)$$

W przypadku gdy pole elektryczne jest silne

$$6e\mathcal{E}a \gg |H'_{20} - H'_{21}|, \quad (58)$$

możemy zapisać

$$\begin{aligned} \sqrt{(H'_{20} - H'_{21})^2 + 36e^2\mathcal{E}^2a^2} &= 6e\mathcal{E}a \sqrt{1 + \frac{(H'_{20} - H'_{21})^2}{36e^2\mathcal{E}^2a^2}} \approx \\ &\approx 6e\mathcal{E}a \left(1 + \frac{1}{2} \frac{(H'_{20} - H'_{21})^2}{36e^2\mathcal{E}^2a^2} \right), \end{aligned} \quad (59)$$

gdzie skorzystaliśmy z przybliżenia funkcji $\sqrt{1+x}$ przez pierwsze dwa wyrazy szeregu Taylora

$$\sqrt{1+x} \approx 1 + \frac{1}{2}x. \quad (60)$$

Dla silnego pola elektrycznego dominuje człon $6e\mathcal{E}a$ - poprawka do energii zależy zatem w sposób liniowy od pola elektrycznego - mamy zatem do czynienia z liniowym efektem Starka. Możemy postąpić podobnie dla przypadku słabego pola elektrycznego

$$6e\mathcal{E}a \ll |H'_{20} - H'_{21}|, \quad (61)$$

$$\begin{aligned} \sqrt{(H'_{20} - H'_{21})^2 + 36e^2\mathcal{E}^2a^2} &= |H'_{20} - H'_{21}| \sqrt{1 + \frac{36e^2\mathcal{E}^2a^2}{(H'_{20} - H'_{21})^2}} \approx \\ &\approx |H'_{20} - H'_{21}| \left(1 + \frac{1}{2} \frac{36e^2\mathcal{E}^2a^2}{(H'_{20} - H'_{21})^2} \right). \end{aligned} \quad (62)$$

Dla słabego pola elektrycznego poprawka zależy od kwadratu pola elektrycznego - jest to kwadratowy efekt Starka. Warto również rozważyć jakie stany będą stanami własnymi macierzy W . Będą to z pewnością stany $|21 - 1\rangle$ i $|211\rangle$, jako że macierz W jest diagonalna w podprzestrzeni $\text{span}\{|21 - 1\rangle, |211\rangle\}$. A więc pozostają one stanami własnymi hamiltonianu nawet po wprowadzeniu zaburzenia. Macierz W ma jednak elementy pozadiagonalne w sektorze odpowiadającym podprzestrzeni $\text{span}\{|200\rangle, |210\rangle\}$. Oznacza to, że nowe wektory własne będą jakimiś kombinacjami stanów $|200\rangle, |210\rangle$. Dla ułatwienia rachunków wróćmy do reżimu silnego pola elektrycznego $6e\mathcal{E}a \gg |H'_{20} - H'_{21}|$. Musimy zatem wyznaczyć stany własne macierzy danej wyrażeniem (53)

$$\begin{pmatrix} H'_{20} - \lambda_{\pm} & -3e\mathcal{E}a \\ -3e\mathcal{E}a & H'_{21} - \lambda_{\pm} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (63)$$

Dostajemy układ równań

$$\begin{cases} (H'_{20} - \lambda_{\pm})v_1 - 3e\mathcal{E}av_2 & = 0 \\ -3e\mathcal{E}av_1 + (H'_{21} - \lambda_{\pm})v_2 & = 0 \end{cases} \quad (64)$$

$$\begin{cases} v_2 & = \frac{H'_{20} - \lambda_{\pm}}{3e\mathcal{E}a} v_1 \\ v_2 & = \frac{3e\mathcal{E}a}{H'_{21} - \lambda_{\pm}} v_1. \end{cases} \quad (65)$$

$$\begin{cases} v_2 & = \frac{H'_{20} - \frac{1}{2}(H'_{20} + H'_{21} \pm 6e\mathcal{E}a)}{3e\mathcal{E}a} v_1 \\ v_2 & = \frac{3e\mathcal{E}a}{H'_{21} - \frac{1}{2}(H'_{20} + H'_{21} \pm 6e\mathcal{E}a)} v_1. \end{cases} \quad (66)$$

$$\begin{cases} v_2 & = \frac{\frac{1}{2}(H'_{20} - H'_{21}) \mp 3e\mathcal{E}a}{3e\mathcal{E}a} v_1 \\ v_2 & = \frac{3e\mathcal{E}a}{\frac{1}{2}(H'_{21} - H'_{20}) \mp 3e\mathcal{E}a} v_1. \end{cases} \quad (67)$$

Jako, że zakładamy $6e\mathcal{E}a \gg |H'_{20} - H'_{21}|$, to ostatecznie otrzymujemy

$$\begin{cases} v_2 & = \mp v_1 \\ v_2 & = \mp v_1. \end{cases} \quad (68)$$

Oznacza to, że poprawce do energii λ_+ odpowiada stan

$$\frac{|200\rangle - |210\rangle}{\sqrt{2}}, \quad (69)$$

a poprawce λ_-

$$\frac{|200\rangle + |210\rangle}{\sqrt{2}}. \quad (70)$$