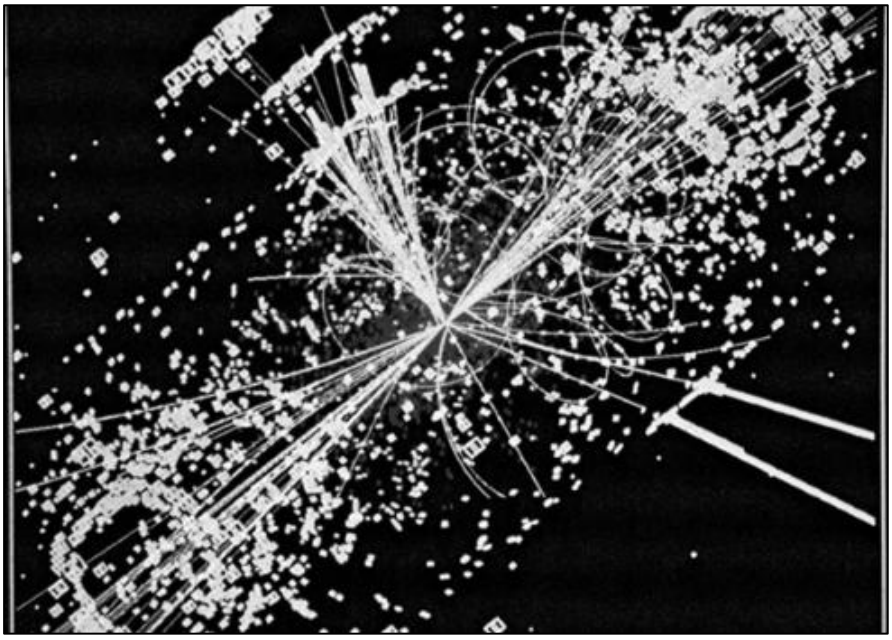
ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ
ΣΧΟΛΗ ΕΦΑΡΜΟΣΜΕΝΩΝ ΜΑΘΗΜΑΤΙΚΩΝ ΚΑΙ ΦΥΣΙΚΩΝ ΕΠΙΣΤΗΜΩΝ
ΤΟΜΕΑΣ ΦΥΣΙΚΗΣ
ΘΕΩΡΗΤΙΚΗ ΦΥΣΙΚΗ, 2025 - 2026

# Επίλυση Ασκήσεων Μαθήματος

## Θεωρητική Φυσική

## Άσκηση 4



***Ονοματεπώνυμο:*** Αναστάσιος Μπατατέγας
***Αριθμός Μητρώου:*** 09121431
***Εξάμηνο:*** $9^{ο}$
***Σχολή:*** ΕΜΦΕ
***Email:*** tasosmntdew@gmail.com , ge21431@mail.ntua.gr
***Διδάσκων:*** Ν. Τράκας

# Άσκηση 4

Δείξτε ότι ο ρυθμός μετάβασης $i \to f$ για την προσέγγιση $2^{\eta\varsigma}$ τάξης δίνεται από την σχέση:

$$W_{fi} = 2\pi\left|V_{fi}\right|^2 \rho(E_i) \qquad \text{(Χρυσός Κανόνας του Fermi)}$$

όπου το στοιχείο πίνακα $V_{fi}$ αντικαθίσταται από την σχέση:

$$V_{fi} \to V_{fi} + \sum_{n \neq i} V_{fn} \frac{1}{E_i - E_n + i\varepsilon} V_{ni}$$

Ποια είναι η σχέση για την επόμενη διόρθωση, $3^{\eta\varsigma}$ τάξης, ως προς το $V$;

## Λύση

Προς επίλυση του προβλήματος, διατυπώνουμε, σε γενικούς όρους, το πρόβλημα της μη – σχετικιστικής χρονικά εξαρτώμενης θεωρίας διαταραχών, και στην συνέχεια υπολογίζουμε τις ζητούμενες τάξεις προσέγγισης. Η ανάλυση θα γίνει στο πλαίσιο του συμβολισμού Dirac και, προς ταύτιση των αποτελεσμάτων με αυτά στο αντίστοιχο εδάφιο του βιβλίου «*Quarks & Leptons* – F. Halzen, A. D. Martin», οι αντίστοιχες σχέσεις θα προβάλλονται, όπου χρειαστεί, στην αναπαράσταση θέσης.

Θεωρούμε ένα ελεύθερο σωματίδιο με Hamiltonian $H_0$, με ιδιοτιμές $E_n$ και αντίστοιχα ορθοκανονικοποιημένα ιδιοδιανύσματα $|\varphi_n\rangle$:

$$H_0|\varphi_n\rangle = E_n|\varphi_n\rangle\,, \qquad \langle\varphi_m|\varphi_n\rangle = \delta_{mn} \tag{4.1}$$

όπου, λόγους απλότητας, θεωρούμε ότι το φάσμα της $H_0$ είναι διακριτό και μη – εκφυλισμένο, ενώ η $H_0$ θεωρείται χρονικά ανεξάρτητη, ώστε οι ιδιοκαταστάσεις της να είναι στάσιμες καταστάσεις του σωματιδίου (οι ιδιοκαταστάσεις κανονικοποιούνται στην αναπαράσταση θέσης σε *ένα* σωματίδιο ανά όγκο $V$ – box normalization). Το σωματίδιο θεωρείται ελεύθερο για $-\infty < t < 0$, και την στιγμή $t = 0$ υφίσταται αλληλεπίδραση με ένα διαταρακτικό δυναμικό[1] $V(\mathbf{x}, t)$, ώστε η Hamiltonian γίνεται:

$$H(t) = H_0 + V(\mathbf{x}, t) \equiv H_0 + \lambda \cdot \tilde{V}(\mathbf{x}, t) \tag{4.2}$$

όπου $\lambda \ll 1$ η «ισχύς» της διαταραχής, και $\tilde{V}(\mathbf{x}, t)$ είναι ένα observable[2] ίδιας τάξης μεγέθους[3] με την $H_0$, και μηδέν για χρόνους $t < 0$. Για χρονικές στιγμές $t > 0$ η κατάσταση του συστήματος, $|\psi(t)\rangle$, καθορίζεται από την εξίσωση Schrödinger (σε φυσικές μονάδες):

$$i\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{dt}}|\psi(t)\rangle = [H_0 + V(\mathbf{x}, t)]|\psi(t)\rangle\,, \qquad t > 0 \tag{4.3}$$

---

[1] Το $V(\mathbf{x}, t)$ συμβολίζει *τελεστή*, ο οποίος θεωρείται συνάρτηση του $t$ και του τελεστή θέσης $\hat{\mathbf{x}} \equiv \mathbf{x}$.

[2] Κατά τα γνωστά, ένας τελεστής είναι observable όταν, και μόνον όταν, είναι Ερμιτιανός και έχει ένα πλήρες (ως προς την μετρική που επάγεται από το εσωτερικό γινόμενο του αντίστοιχου χώρου Hilbert) σύνολο ιδιοκαταστάσεων.

[3] Με αυτό εννοείται ότι για τα αντίστοιχα στοιχεία πίνακα, στην βάση $\{|\varphi_n\rangle\}$, ισχύει ότι: $\langle\varphi_m|\tilde{V}(\mathbf{x}, t)|\varphi_n\rangle = \theta(\langle\varphi_m|H_0|\varphi_n\rangle)$, όπου το $\theta$ αναφέρεται στον συμβολισμό Landau ($\theta$ – notation).

Η (4.3) επιλύεται κατά μοναδικό τρόπο, υπό την αρχική συνθήκη:

$$|\psi(t<0)\rangle = |\varphi_i\rangle \tag{4.4}$$

για κάποια αρχική ιδιοκατάσταση $i$ του ελεύθερου σωματιδίου (ουσιαστικά, θεωρούμε το σωματίδιο ελεύθερο για χρόνους $-\infty < t < 0$, και την διαταραχή να υφίσταται για $t \geq 0$). Δεδομένου ότι το σύνολο $\{|\varphi_n\rangle\}$ αποτελεί βάση του χώρου Hilbert των καταστάσεων της $H_0$, και θεωρώντας ότι για $\lambda \ll 1$, το σύνολο αυτό αποτελεί βάση και του χώρου Hilbert των καταστάσεων της $H(t)$, κάθε λύση της (4.3) μπορεί να αναλυθεί σε αυτή την βάση ως:

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n a_n(t)\,|\varphi_n\rangle\, e^{-iE_n t} \tag{4.5}$$

όπου $a_n(t)$ συναρτήσεις του χρόνου, που πρέπει να προσδιοριστούν, εξαρτώμενες από την αρχική συνθήκη (4.4) (σημειώνεται ότι για $\lambda = 0$ οι $a_n(t)$ εκφυλίζονται σε σταθερές συναρτήσεις, όπως πρέπει). Αντικαθιστώντας την (4.5) στην (4.3) και εκτελώντας τις πράξεις, παίρνουμε:

$$i\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{dt}}\sum_n a_n(t)\,|\varphi_n\rangle\, e^{-iE_n t} = \sum_n a_n(t)\,[H_0 + V(\mathbf{x},t)]|\varphi_n\rangle\, e^{-iE_n t}$$

$$\Longrightarrow i\sum_n |\varphi_n\rangle\, e^{-iE_n t}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{dt}}a_n(t) + \sum_n a_n(t)\,|\varphi_n\rangle E_n e^{-iE_n t}$$
$$= \sum_n a_n(t)\,H_0|\varphi_n\rangle\, e^{-iE_n t} + \sum_n a_n(t)\,V(\mathbf{x},t)|\varphi_n\rangle\, e^{-iE_n t}$$

$$\overset{(4.1)}{\Longrightarrow} i\sum_n |\varphi_n\rangle\, e^{-iE_n t}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{dt}}a_n(t) = \sum_n a_n(t)\,V(\mathbf{x},t)|\varphi_n\rangle\, e^{-iE_n t}$$

$$\overset{\langle\varphi_m|}{\Longrightarrow} i\sum_n \langle\varphi_m|\varphi_n\rangle\, e^{-iE_n t}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{dt}}a_n(t) = \sum_n a_n(t)\,\langle\varphi_m|V(\mathbf{x},t)|\varphi_n\rangle\, e^{-iE_n t}$$

$$\overset{(4.1)}{\Longrightarrow} ie^{-iE_m t}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{dt}}a_m(t) = \sum_n a_n(t)\,\langle\varphi_m|V(\mathbf{x},t)|\varphi_n\rangle\, e^{-iE_n t}$$

και αλλάζοντας τους δείκτες, σύμφωνα με το σχήμα $m \to f$, λαμβάνουμε τις σχέσεις:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{dt}}a_f(t) = -i\sum_n a_n(t)\,V_{fn}(\mathbf{x},t)\,e^{i(E_f - E_n)t} \tag{4.6}$$

όπου ορίζουμε το στοιχείο πίνακα του διαταρακτικού τελεστή $V(\mathbf{x},t)$, σε σχέση με το αντίστοιχο στοιχείο πίνακα του $\tilde{V}(\mathbf{x},t)$, ως (βλ. και (4.2)):

$$V_{fn} \equiv V_{fn}(\mathbf{x},t) \coloneqq \langle\varphi_f|V(\mathbf{x},t)|\varphi_n\rangle \equiv \lambda\langle\varphi_f|\tilde{V}(\mathbf{x},t)|\varphi_n\rangle \equiv \lambda\tilde{V}_{fn} \tag{4.7}$$

στην βάση των $\{|\varphi_n\rangle\}$. Οι σχέσεις (4.6), για όλες τις πιθανές τιμές του δείκτη $f$, αποτελούν ένα σύστημα πεπλεγμένων διαφορικών εξισώσεων ισοδύναμο *ακριβώς* προς την εξίσωση Schrödinger (4.3). Για μικρές διαταραχές, $\lambda \ll 1$, αναπτύσσουμε

κάθε συντελεστή $a_f(t)$ σε μία δυναμοσειρά ως προς $\lambda$ (η οποία υποθέτουμε ότι συγκλίνει προς την ακριβή λύση της (4.6) καθώς $\lambda \to 0$):

$$a_f(t) = a_f^{(0)}(t) + \lambda a_f^{(1)}(t) + \lambda^2 a_f^{(2)}(t) + \lambda^3 a_f^{(3)}(t) + \cdots \tag{4.8}$$

και αντικαθιστώντας στην (4.6), και εξισώνοντας τους συντελεστές $\lambda^r$ μεταξύ δεξιού και αριστερού μέλους, λαμβάνουμε τα εξής:

*Προσέγγιση μηδενικής τάξης ($r = 0$):*

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{dt}} a_f^{(0)}(t) = 0 \tag{4.9}$$

*Προσέγγιση $r$-οστής τάξης ($r \geq 1$):*

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{dt}} a_f^{(r)}(t) = -i \frac{1}{\lambda} \sum_n a_n^{(r-1)}(t)\, V_{fn}(\mathbf{x}, t)\, e^{i(E_f - E_n)t}\,, \qquad r \geq 1 \tag{4.10}$$

Επομένως, η προσέγγιση μηδενικής τάξης (4.9) καθορίζεται από την αρχική συνθήκη (4.4), και αποδίδει σταθερές συναρτήσεις – συντελεστές, σε συμφωνία με την λύση (4.5) για $\lambda = 0$, ενώ μετέπειτα από τις (4.10) γίνεται αναδρομικός υπολογισμός των υψηλότερων τάξεων προσέγγισης $r \geq 1$.

Η αρχική συνθήκη (4.4), όπου το σωματίδιο θεωρείται στην στάσιμη κατάσταση $|\varphi_i\rangle$ για $-\infty < t < 0$, ισοδυναμεί, λόγω της (4.5), με την απαίτηση $a_n(t < 0) = \delta_{ni}$ (και επιπλέον τα $a_n$ είναι τότε ανεξάρτητα του χρόνου, αφού η διαταραχή είναι ακόμα μηδενική). Για $t = 0$, το διαταρακτικό δυναμικό μπορεί να παρουσιάζει ασυνέχεια, δεδομένου ότι μεταβαίνει από τον μηδενικό τελεστή σε ένα εν γένει μη-μηδενικό τελεστή $V(\mathbf{x}, 0)$, τα στοιχεία πίνακα του οποίου είναι, ωστόσο, πεπερασμένα. Το τελευταίο γεγονός, συνεπάγεται ότι η λύση (4.5) της εξίσωσης Schrödinger παραμένει συνεχής στο $t = 0$ (βασικό θεώρημα), επομένως η παραπάνω αρχική συνθήκη συνεπάγεται ότι πρέπει:

$$a_n(t = 0) = \delta_{ni}$$

η οποία, λόγω του αναπτύγματος (4.8), με την σειρά της συνεπάγεται την ισοδύναμη αρχική συνθήκη:

$$\left\{ a_n^{(0)}(0) = \delta_{ni}\,, \qquad a_n^{(r)}(0) = 0, \forall\, r \geq 1 \right\} \tag{4.11}$$

Επιλύουμε σε αυτό το σημείο τις (4.9) και (4.10), υπό τις (4.11), για την εξαγωγή των ζητούμενων αποτελεσμάτων.

*(i) Προσέγγιση μηδενικής τάξης ($r = 0$):*

Η (4.9) συνεπάγεται αμέσως, λόγω της (4.11), ότι οι συντελεστές μηδενικής τάξεως είναι:

$$\boxed{a_f^{(0)}(t) = \delta_{fi}\,, \qquad t \geq 0} \tag{4.12}$$

σχέση που αναμένεται από την συμπεριφορά της λύσης (4.5) για διαταραχή $\lambda = 0$.

*(ii) Προσέγγιση πρώτης τάξης ($r = 1$):*

Με αντικατάσταση της (4.12), η αναδρομική σχέση (4.10) συνεπάγεται ότι η προσέγγιση πρώτης τάξης ικανοποιεί την σχέση:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{dt}} a_f^{(1)}(t) = -i\frac{1}{\lambda}\sum_n \delta_{ni}\, V_{fn}(\mathbf{x},t)\, e^{i(E_f-E_n)t} = -i\frac{1}{\lambda} V_{fi}(\mathbf{x},t) e^{i(E_f-E_i)t}$$

η οποία με ολοκλήρωση, λαμβάνοντας υπόψη και την αρχική συνθήκη (4.11), δίνει:

$$\boxed{\begin{aligned} a_f^{(1)}(t) &= -i\frac{1}{\lambda}\int_0^t V_{fi}(\mathbf{x},t') e^{i(E_f-E_i)t'}\, dt' \\ &\equiv -i\frac{1}{\lambda}\int_{-T/2}^t V_{fi}(\mathbf{x},t') e^{i(E_f-E_i)t'}\, dt' \end{aligned}} \tag{4.13}$$

Δεδομένου ότι ενδιαφερόμαστε για την αλληλεπίδραση του σωματιδίου με το διαταρακτικό δυναμικό $V(\mathbf{x},t)$, είναι σκόπιμο να καθορίσουμε ένα χρονικό διάστημα εντός του οποίου το σωματίδιο νοείται σε «κατάσταση αλληλεπίδρασης». Για λόγους συμμετρικότητας (κυρίως για χειρισμό και απλοποίηση ορίων με συναρτήσεις $\delta$ Dirac) καθορίζουμε το κάτω άκρο στην (4.13) να είναι η χρονική στιγμή $-T/2$ (γεγονός που είναι μαθηματικά ορθό, δεδομένου ότι τα $V_{fi}$ είναι 0 για $t < 0$), και υπολογίζουμε την (4.13) την χρονική στιγμή $+T/2$, όπου θεωρούμε ότι η αλληλεπίδραση έχει εξασθενίσει (πρακτικά θεωρούμε το όριο $T \to \infty$). Επομένως γράφουμε, αξιοποιώντας και την λύση μηδενικής τάξης, (4.12):

$$\begin{aligned} T_{fi} \equiv a_f(T/2) &= a_f^{(0)}(T/2) + \lambda a_f^{(1)}(T/2) \\ &\equiv \lambda\, a_f^{(1)}(T/2) = -i\int_{-T/2}^{T/2} V_{fi}(\mathbf{x},t') e^{i(E_f-E_i)t'}\, dt' \end{aligned} \tag{4.14}$$

*Θεωρούμε στο εξής ότι η αρχική και τελική κατάσταση δεν ταυτίζονται, $i \neq f$, και υποθέτουμε ότι η διαταραχή $V(\mathbf{x},t)$ είναι χρονικά ανεξάρτητη*, δηλαδή ότι:

$$V(\mathbf{x},t) \equiv V(\mathbf{x}) \tag{4.15}$$

Επομένως, η (4.13) ισχύει για $i \neq f$, ενώ από την (4.14) λαμβάνουμε ότι:

$$T_{fi} \equiv \lambda\, a_f^{(1)}(T/2) \equiv -i\, V_{fi}(\mathbf{x}) \int_{-T/2}^{T/2} e^{i(E_f-E_i)t'}\, dt' = -2\pi i\, V_{fi}(\mathbf{x})\, \delta\big(E_f - E_i\big) \tag{4.16}$$

Μπορεί, κατά αυτόν τον τρόπο, να πραγματοποιηθεί υπολογισμός, σε πρώτη τάξη προσέγγισης, της πιθανότητας μετάπτωσης $i \to f$, ως εξής:

$$\mathcal{P}_{if}(t) \equiv \big|a_f(t)\big|^2 \equiv \lambda^2 \Big|a_f^{(1)}(t)\Big|^2 = \left|\int_0^t V_{fi}(\mathbf{x},t') e^{i(E_f-E_i)t'}\, dt'\right|^2 \tag{4.17}$$

όπου έχει ληφθεί υπόψη τόσο η (4.8) όσο και η (4.12). Ωστόσο, δεδομένου ότι η παραπάνω πιθανότητα μεταβάλλεται χρονικά και αποκλίνει για $T \to \infty$, η χρήσιμη ποσότητα είναι σε αυτή την περίπτωση η *πιθανότητα μετάπτωσης ανά μονάδα χρόνου*:

$$W \equiv \lim_{T\to\infty} \frac{\left|T_{fi}\right|^2}{T} \tag{4.18}$$

Λόγω της (4.16), πάντοτε υπό την υπόθεση χρονικά ανεξάρτητης διαταραχής, η τελευταία σχέση ορισμού δίνει, σε πρώτη τάξη προσέγγισης, ότι:

$$W = \lim_{T\to\infty} \frac{1}{T} (2\pi)^2 \left|V_{fi}(\mathbf{x})\right|^2 \left[\delta\left(E_f - E_i\right)\right]^2$$

Για την κατανομή $\delta$ του Dirac ισχύει η παρακάτω «ασυμπτωτική» ιδιότητα τετραγωνισμού, η οποία προκύπτει από την ανάπτυξή της κατά Fourier:

$$(2\pi)^2\left[\delta\left(E_f - E_i\right)\right]^2 \overset{T\to\infty}{\backsimeq} 2\pi \int_{-T/2}^{T/2} e^{i(E_f-E_i)t}\delta\left(E_f - E_i\right)dt = 2\pi\, T\, \delta\left(E_f - E_i\right) \tag{4.19}$$

βάσει της οποίας, ο ρυθμός πιθανότητας μετάπτωσης γράφεται, σε πρώτη τάξη, ως:

$$W = 2\pi \left|V_{fi}(\mathbf{x})\right|^2 \delta\left(E_f - E_i\right) \tag{4.20}$$

Βάσει της (4.20), και ολοκληρώνοντας σε ένα σύνολο τελικών καταστάσεων, πυκνότητας $\rho\left(E_f\right)$, λαμβάνουμε (αξιοποιώντας και τον ορισμό της $\delta$ συνάρτησης) ότι ο *ρυθμός μετάπτωσης (transition rate) σε πρώτη τάξη προσέγγισης* δίνεται από τον Χρυσό Κανόνα του Fermi και είναι:

$$\boxed{W_{fi} \equiv \int W\, \rho\left(E_f\right) dE_f = 2\pi \left|V_{fi}(\mathbf{x})\right|^2 \rho(E_i)} \tag{4.21}$$

όπου $V_{fi} \equiv V_{fi}(\mathbf{x}) \coloneqq \langle\varphi_f|V(\mathbf{x})|\varphi_i\rangle$, για $i \neq f$, είναι το στοιχείο πίνακα της διαταραχής, στην βάση των ιδιοκαταστάσεων $\{|\varphi_i\rangle\}$.

*(iii) Προσέγγιση δεύτερης τάξης ($r = 2$):*

Με αντικατάσταση της (4.13), η αναδρομική σχέση (4.10) συνεπάγεται ότι η προσέγγιση δεύτερης τάξης ικανοποιεί την σχέση:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{dt}} a_f^{(2)}(t) = (-i)^2 \frac{1}{\lambda^2} \sum_{n\neq i} \left( \int_0^t V_{ni}(\mathbf{x}, t') e^{i(E_n - E_i)t'} dt' \right) V_{fn}(\mathbf{x}, t) e^{i(E_f - E_n)t}$$

η οποία με ολοκλήρωση, λαμβάνοντας υπόψη και την αρχική συνθήκη (4.11), δίνει:

$$\boxed{a_f^{(2)}(t) = (-i)^2 \frac{1}{\lambda^2} \sum_{n\neq i} \int_0^t \left( \int_0^{\tilde{t}} V_{ni}(\mathbf{x}, t') e^{i(E_n - E_i)t'} dt' \right) V_{fn}(\mathbf{x}, \tilde{t}) e^{i(E_f - E_n)\tilde{t}} d\tilde{t}} \tag{4.22}$$

Από το άθροισμα εξαιρούνται οι όροι με $n \equiv i$, σύμφωνα με την υπόθεση $i \neq f$ που συζητήθηκε στο εδάφιο (ii), και υπό την οποία ισχύει η πρώτη προσέγγιση (4.13). Δεδομένου ότι ενδιαφερόμαστε για την αλληλεπίδραση του σωματιδίου με το διαταρακτικό δυναμικό $V(\mathbf{x}, t)$, και για λόγους συμμετρικότητας (κυρίως για χειρισμό και απλοποίηση ορίων με συναρτήσεις $\delta$ Dirac), όπως σημειώθηκε και παραπάνω, καθορίζουμε το κάτω άκρα στην (4.22) να είναι η χρονική στιγμή $-T/2$ (γεγονός που

είναι μαθηματικά ορθό, δεδομένου ότι τα $V_{fi}$ είναι 0 για $t < 0$), και υπολογίζουμε την (4.22) την χρονική στιγμή $+T/2$, όπου θεωρούμε ότι η αλληλεπίδραση έχει εξασθενίσει (πρακτικά θεωρούμε το όριο $T \to \infty$). Επομένως γράφουμε, αξιοποιώντας και τις λύσεις μηδενικής και πρώτης τάξης, (4.12), (4.13):

$$T_{fi} \equiv a_f(T/2) = a_f^{(0)}(T/2) + \lambda\, a_f^{(1)}(T/2) + \lambda^2\, a_f^{(2)}(T/2)$$

$$= -i\int_{-T/2}^{T/2} V_{fi}(\mathbf{x},t')e^{i(E_f-E_i)t'}dt' + (-i)^2\sum_{n\neq i}\int_{-T/2}^{T/2}\left(\int_{-T/2}^{\tilde{t}} V_{ni}(\mathbf{x},t')e^{i(E_n-E_i)t'}dt'\right)V_{fn}(\mathbf{x},\tilde{t})e^{i(E_f-E_n)\tilde{t}}d\tilde{t}$$

*Θεωρούμε και πάλι ότι η αρχική και τελική κατάσταση δεν ταυτίζονται, $i \neq f$, και υποθέτουμε ότι η διαταραχή $V(\mathbf{x},t)$ είναι χρονικά ανεξάρτητη*, δηλαδή ότι:

$$V(\mathbf{x},t) \equiv V(\mathbf{x}) \tag{4.23}$$

Επομένως, και η (4.22) ισχύει για $i \neq f$, ενώ από την τελευταία σχέση λαμβάνουμε, βάσει και των προηγούμενων εδαφίων ($T \to \infty$):

$$T_{fi} = -2\pi i\, V_{fi}(\mathbf{x})\,\delta\big(E_f - E_i\big) + (-i)^2\sum_{n\neq i} V_{fn}(\mathbf{x})V_{ni}(\mathbf{x})\int_{-T/2}^{T/2}\left(\int_{-T/2}^{\tilde{t}} e^{i(E_n-E_i)t'}dt'\right)e^{i(E_f-E_n)\tilde{t}}d\tilde{t} \tag{4.24}$$

Υπολογίζουμε και πάλι την *πιθανότητα μετάπτωσης ανά μονάδα χρόνου*:

$$W \equiv \lim_{T\to\infty}\frac{\left|T_{fi}\right|^2}{T} \tag{4.25}$$

ωστόσο, σε αυτή την περίπτωση, απαιτείται κάποιος επιπλέον αναλυτικός χειρισμός του ολοκληρώματος ως προς $t'$ στην (4.24), στο όριο όπου $T \to \infty$. Συγκεκριμένα, για την περίπτωση όπου $E_n \neq E_i, \forall\, n \neq i$, ισχύει ότι:

$$\int_{-T/2}^{\tilde{t}} e^{i(E_n-E_i)t'}dt' = \frac{i}{E_i-E_n}\left[e^{i(E_n-E_i)\tilde{t}} - e^{-i(E_n-E_i)T/2}\right] \overset{T\to\infty}{\rightrightarrows} \frac{i}{E_i-E_n}e^{i(E_n-E_i)\tilde{t}}$$

όπου αγνοούμε το μιγαδικό εκθετικό του $-T/2$ καθώς $T \to \infty$, το οποίο εισάγει το πολύ μία φάση (Lamb shift). Στην περίπτωση τυχαίου εκφυλισμού, $\exists\, n \neq i : E_n = E_i$, το παραπάνω ολοκλήρωμα αποκλίνει, και ειδική μνεία πρέπει να ληφθεί σε αυτή την περίπτωση (το $T_{fi}$ επίσης αποκλίνει). Τα παραπάνω συμπυκνώνονται σε μία ενιαία έκφραση με την εισαγωγή μίας πραγματικής σταθεράς, $\varepsilon > 0$, για την οποία λαμβάνεται το όριο καθώς $\varepsilon \to 0$, και αξιοποιείται το θεώρημα Fubini:

$$\begin{aligned}\int_{-T/2}^{\tilde{t}} e^{i(E_n-E_i)t'}dt' &\equiv \int_{-T/2}^{\tilde{t}} \lim_{\varepsilon\to 0} e^{i(E_n-E_i-i\varepsilon)t'}\,dt' \equiv \lim_{\varepsilon\to 0}\int_{-T/2}^{\tilde{t}} e^{i(E_n-E_i-i\varepsilon)t'}dt' \\ &= \frac{i}{E_i-E_n+i\varepsilon}\left[e^{i\left(E_n-E_i-i\varepsilon\right)\tilde{t}} - e^{-i\left(E_n-E_i-i\varepsilon\right)T/2}\right] \overset{T\to\infty}{\rightrightarrows} \frac{i}{E_i-E_n+i\varepsilon}e^{i\left(E_n-E_i-i\varepsilon\right)\tilde{t}}\end{aligned} \tag{4.26}$$

Επομένως, στο όριο $T \to \infty$, λαμβάνουμε ότι:

$$T_{fi} = -2\pi i\, V_{fi}(\mathbf{x})\,\delta\big(E_f - E_i\big) + (-i)^2 2\pi i\sum_{n\neq i}\frac{V_{fn}(\mathbf{x})V_{ni}(\mathbf{x})}{E_i-E_n+i\varepsilon}\delta\big(E_f-E_i\big) \tag{4.27}$$

όπου αξιοποιείται και η ανάπτυξη κατά Fourier του συναρτησιακού $\delta$ του Dirac (βλ. και την (4.19) παραπάνω).

Λόγω της (4.24), πάντοτε υπό την υπόθεση χρονικά ανεξάρτητης διαταραχής, η σχέση ορισμού του ρυθμού πιθανότητας μετάπτωσης δίνει, σε δεύτερη τάξη προσέγγισης, ότι:

$$W = \lim_{T\to\infty} \frac{1}{T} \left\{ (2\pi)^2 \left| V_{fi}(\mathbf{x}) + \sum_{n\neq i} \frac{V_{fn}(\mathbf{x}) V_{ni}(\mathbf{x})}{E_i - E_n + i\varepsilon} \right|^2 \right\} \left[\delta\left(E_f - E_i\right)\right]^2$$

Για την κατανομή $\delta$ του Dirac ισχύει η ιδιότητα τετραγωνισμού (4.19), η οποία προκύπτει από την ανάπτυξή της κατά Fourier, βάσει της οποίας, ο ρυθμός πιθανότητας μετάπτωσης γράφεται, σε δεύτερη τάξη, ως:

$$W = 2\pi \left| V_{fi}(\mathbf{x}) + \sum_{n\neq i} \frac{V_{fn}(\mathbf{x}) V_{ni}(\mathbf{x})}{E_i - E_n + i\varepsilon} \right|^2 \delta\left(E_f - E_i\right) \tag{4.28}$$

Βάσει της (4.28), και ολοκληρώνοντας σε ένα σύνολο τελικών καταστάσεων, πυκνότητας $\rho\left(E_f\right)$, λαμβάνουμε (αξιοποιώντας και τον ορισμό της $\delta$ συνάρτησης) ότι ο *ρυθμός μετάπτωσης (transition rate) σε δεύτερη τάξη προσέγγισης* είναι:

$$\boxed{W_{fi} \equiv \int W\, \rho\left(E_f\right) dE_f = 2\pi \left| V_{fi}(\mathbf{x}) + \sum_{n\neq i} \frac{V_{fn}(\mathbf{x}) V_{ni}(\mathbf{x})}{E_i - E_n + i\varepsilon} \right|^2 \rho(E_i)} \tag{4.29}$$

η οποία αποδεικνύει ότι ο Χρυσός Κανόνας του Fermi, (4.21), εξακολουθεί να δίνει τον ολικό ρυθμό μετάπτωσης, με την αντικατάσταση:

$$\boxed{V_{fi} \to V_{fi} + \sum_{n\neq i} V_{fn} \frac{1}{E_i - E_n + i\varepsilon} V_{ni}} \tag{4.30}$$

το οποίο είναι το ζητούμενο.

*(iv) Προσέγγιση τρίτης τάξης ($r = 3$):*

Με αντικατάσταση της (4.22), η αναδρομική σχέση (4.10) συνεπάγεται ότι η προσέγγιση τρίτης τάξης ικανοποιεί την σχέση:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{dt}} a_f^{(3)}(t) =$$

$$= (-i)^3 \frac{1}{\lambda^3} \sum_{n\neq m} \sum_{m\neq i} \left[ \int_0^t \left( \int_0^{\tilde{t}} V_{mi}(\mathbf{x}, t') e^{i(E_m - E_i)t'} dt' \right) V_{nm}(\mathbf{x}, \tilde{t}) e^{i(E_n - E_n)\tilde{t}} d\tilde{t} \right] V_{fn}(\mathbf{x}, t)\, e^{i(E_f - E_n)t}$$

η οποία με ολοκλήρωση, λαμβάνοντας υπόψη και την αρχική συνθήκη (4.11), δίνει:

$$\boxed{a_f^{(3)}(t) = (-i)^3 \frac{1}{\lambda^3} \sum_{n\neq m} \sum_{m\neq i} \int_0^t \left[ \int_0^{\hat{t}} \left( \int_0^{\tilde{t}} V_{mi}\left(\mathbf{x}, t'\right) e^{i\left(E_m - E_i\right)t'} dt' \right) V_{nm}(\mathbf{x}, \tilde{t}) e^{i\left(E_n - E_m\right)\tilde{t}} d\tilde{t} \right] V_{fn}(\mathbf{x}, \hat{t})\, e^{i\left(E_f - E_n\right)\hat{t}} d\hat{t}} \tag{4.31}$$

Από το άθροισμα εξαιρούνται οι όροι που συνεπάγονται $f \equiv i$, σύμφωνα με την υπόθεση $i \neq f$ που συζητήθηκε στα εδάφια (ii) και (iii), και υπό την οποία ισχύει η

τόσο η πρώτη τάξη προσέγγισης, (4.13), όσο και η δεύτερη τάξη προσέγγισης, (4.22). Δεδομένου ότι ενδιαφερόμαστε για την αλληλεπίδραση του σωματιδίου με το διαταρακτικό δυναμικό $V(\mathbf{x},t)$, και για λόγους συμμετρικότητας (κυρίως για χειρισμό και απλοποίηση ορίων με συναρτήσεις $\delta$ Dirac), όπως σημειώθηκε και παραπάνω, καθορίζουμε το κάτω άκρο στην (4.22) να είναι η χρονική στιγμή $-T/2$ (γεγονός που είναι μαθηματικά ορθό, δεδομένου ότι τα $V_{fi}$ είναι 0 για $t<0$), και υπολογίζουμε την (4.31) την χρονική στιγμή $+T/2$, όπου θεωρούμε ότι η αλληλεπίδραση έχει εξασθενίσει (πρακτικά θεωρούμε το όριο $T\to\infty$). Επομένως γράφουμε, αξιοποιώντας και τις λύσεις μηδενικής, πρώτης και δεύτερης τάξης, (4.12), (4.13), (4.22):

$$T_{fi}\equiv a_f(T/2)=a_f^{(0)}(T/2)+\lambda\, a_f^{(1)}(T/2)+\lambda^2\, a_f^{(2)}(T/2)+\lambda^3\, a_f^{(3)}(T/2)$$

$$=-i\int_{-T/2}^{T/2}V_{fi}(\mathbf{x},t')e^{i(E_f-E_i)t'}dt'+(-i)^2\sum_{n\neq i}\int_{-T/2}^{T/2}\left(\int_{-T/2}^{\tilde{t}}V_{ni}(\mathbf{x},t')e^{i(E_n-E_i)t'}dt'\right)V_{fn}(\mathbf{x},\tilde{t})e^{i(E_f-E_n)\tilde{t}}d\tilde{t}$$

$$+(-i)^3\sum_{n\neq m}\sum_{m\neq i}\int_{-T/2}^{T/2}\left[\int_{-T/2}^{\hat{t}}\left(\int_{-T/2}^{\tilde{t}}V_{mi}(\mathbf{x},t')e^{i(E_m-E_i)t'}dt'\right)V_{nm}(\mathbf{x},\tilde{t})e^{i(E_n-E_m)\tilde{t}}d\tilde{t}\right]V_{fn}(\mathbf{x},\hat{t})\,e^{i(E_f-E_n)\hat{t}}d\hat{t}$$

*Θεωρούμε και πάλι ότι η αρχική και τελική κατάσταση δεν ταυτίζονται, $i\neq f$, και υποθέτουμε ότι η διαταραχή $V(\boldsymbol{x},t)$ είναι χρονικά ανεξάρτητη*, δηλαδή ότι:

$$V(\mathbf{x},t)\equiv V(\mathbf{x}) \tag{4.32}$$

Επομένως, από την τελευταία σχέση λαμβάνουμε, και με βάση τα προηγούμενα εδάφια, ότι ($T\to\infty$):

$$T_{fi}=-2\pi i\,V_{fi}(\mathbf{x})\,\delta(E_f-E_i)+(-i)^2 2\pi i\sum_{n\neq i}\frac{V_{fn}(\mathbf{x})V_{ni}(\mathbf{x})}{E_i-E_n+i\varepsilon}\delta(E_f-E_i)+$$

$$+(-i)^3\sum_{n\neq m}\sum_{m\neq i}V_{fn}(\mathbf{x})V_{nm}(\mathbf{x})V_{mi}(\mathbf{x})\int_{-T/2}^{T/2}\left[\int_{-T/2}^{\hat{t}}\left(\int_{-T/2}^{\tilde{t}}e^{i(E_m-E_i)t'}dt'\right)e^{i(E_n-E_m)\tilde{t}}d\tilde{t}\right]e^{i(E_f-E_n)\hat{t}}d\hat{t} \tag{4.24}$$

Υπολογίζουμε και πάλι την *πιθανότητα μετάπτωσης ανά μονάδα χρόνου*:

$$W\equiv\lim_{T\to\infty}\frac{|T_{fi}|^2}{T} \tag{4.33}$$

χρησιμοποιώντας, και σε αυτή την περίπτωση, τον αναλυτικό χειρισμό της (4.26) στο όριο όπου $T\to\infty$. Λαμβάνουμε ότι:

$$\int_{-T/2}^{\tilde{t}}e^{i(E_m-E_i)t'}dt'\overset{T\to\infty}{\rightrightarrows}\frac{i}{E_i-E_m+i\varepsilon}e^{i(E_m-E_i-i\varepsilon)\tilde{t}}$$

$$\int_{-T/2}^{\hat{t}}\left(\int_{-T/2}^{\tilde{t}}e^{i(E_m-E_i)t'}dt'\right)e^{i(E_n-E_m)\tilde{t}}d\tilde{t}\overset{T\to\infty}{\rightrightarrows}\frac{i}{E_i-E_m+i\varepsilon}\frac{i}{E_m-E_n+i\varepsilon}e^{i(E_n-E_i-i\varepsilon)\hat{t}}$$

Επομένως, στο όριο $T\to\infty$, λαμβάνουμε ότι:

$$T_{fi} = -2\pi i\, V_{fi}(\mathbf{x})\, \delta\big(E_f - E_i\big) + (-i)^2 2\pi i \sum_{n\neq i} \frac{V_{fn}(\mathbf{x})V_{ni}(\mathbf{x})}{E_i - E_n + i\varepsilon}\, \delta\big(E_f - E_i\big) + \\ +(-i)^3 2\pi i \sum_{n\neq m}\sum_{m\neq i} V_{fn}(\mathbf{x})V_{nm}(\mathbf{x})V_{mi}(\mathbf{x}) \frac{i}{E_i - E_m + i\varepsilon}\frac{i}{E_m - E_n + i\varepsilon}\delta\big(E_f - E_i\big) \tag{4.34}$$

όπου αξιοποιείται και η ανάπτυξη κατά Fourier του συναρτησιακού $\delta$ του Dirac (βλ. και την (4.19) παραπάνω).

Λόγω της (4.34), πάντοτε υπό την υπόθεση χρονικά ανεξάρτητης διαταραχής, η σχέση ορισμού του ρυθμού πιθανότητας μετάπτωσης δίνει, σε τρίτη τάξη προσέγγισης, ότι:

$$W = \lim_{T\to\infty} \frac{1}{T} \left\{ (2\pi)^2 \left| V_{fi}(\mathbf{x}) + \sum_{n\neq i} \frac{V_{fn}(\mathbf{x})V_{ni}(\mathbf{x})}{E_i - E_n + i\varepsilon} \right.\right. \\ \left.\left. + \sum_{n\neq m}\sum_{m\neq i} V_{fn}(\mathbf{x})V_{nm}(\mathbf{x})V_{mi}(\mathbf{x}) \frac{i}{E_i - E_m + i\varepsilon}\frac{i}{E_m - E_n + i\varepsilon} \right|^2 \right\} \big[\delta\big(E_f - E_i\big)\big]^2$$

Για την κατανομή $\delta$ του Dirac ισχύει η ιδιότητα τετραγωνισμού (4.19), η οποία προκύπτει από την ανάπτυξή της κατά Fourier, βάσει της οποίας, ο ρυθμός πιθανότητας μετάπτωσης γράφεται, σε τρίτη τάξη, ως:

$$W = 2\pi \left| V_{fi}(\mathbf{x}) + \sum_{n\neq i} \frac{V_{fn}(\mathbf{x})V_{ni}(\mathbf{x})}{E_i - E_n + i\varepsilon} + \right. \\ \left. + \sum_{n\neq m}\sum_{m\neq i} V_{fn}(\mathbf{x}) \frac{i}{E_m - E_n + i\varepsilon} V_{nm}(\mathbf{x}) \frac{i}{E_i - E_m + i\varepsilon} V_{mi}(\mathbf{x}) \right|^2 \delta\big(E_f - E_i\big) \tag{4.35}$$

Βάσει της (4.28), και ολοκληρώνοντας σε ένα σύνολο τελικών καταστάσεων, πυκνότητας $\rho\big(E_f\big)$, λαμβάνουμε (αξιοποιώντας και τον ορισμό της $\delta$ συνάρτησης) ότι ο *ρυθμός μετάπτωσης (transition rate) σε τρίτη τάξη προσέγγισης* είναι:

$$\boxed{W_{fi} \equiv \int W\, \rho\big(E_f\big)\, dE_f = 2\pi \left| V_{fi}(\mathbf{x}) + \sum_{n\neq i} \frac{V_{fn}(\mathbf{x})V_{ni}(\mathbf{x})}{E_i - E_n + i\varepsilon} + \right. \\ \left. + \sum_{n\neq m}\sum_{m\neq i} V_{fn}(\mathbf{x}) \frac{i}{E_m - E_n + i\varepsilon} V_{nm}(\mathbf{x}) \frac{i}{E_i - E_m + i\varepsilon} V_{mi}(\mathbf{x}) \right|^2 \rho(E_i)} \tag{4.36}$$

η οποία αποδεικνύει ότι ο Χρυσός Κανόνας του Fermi, (4.21), εξακολουθεί να δίνει τον ολικό ρυθμό μετάπτωσης, με την αντικατάσταση:

$$\boxed{V_{fi} \to V_{fi} + \sum_{n\neq i} V_{fn} \frac{1}{E_i - E_n + i\varepsilon} V_{ni} + \\ + \sum_{n\neq m}\sum_{m\neq i} V_{fn}(\mathbf{x}) \frac{i}{E_m - E_n + i\varepsilon} V_{nm}(\mathbf{x}) \frac{i}{E_i - E_m + i\varepsilon} V_{mi}(\mathbf{x})} \tag{4.38}$$

το οποίο είναι το ζητούμενο.

Ο Χρυσός Κανόνας του Fermi, αν και στην παραπάνω ανάλυση φαίνεται να ισχύει μόνο για την περίπτωση χρονικώς ανεξάρτητου διαταρακτικού δυναμικού, εντούτοις ισχύει γενικά, για κάθε διαταραχή $V(\mathbf{x}, t)$, αρκεί το στοιχείο πίνακα που εμφανίζεται

στην (4.21), να «διορθωθεί» κατάλληλα σε υψηλότερες τάξεις προσέγγισης. Γενικά, οι επιπλέον όροι στην έκφραση του «διορθωμένου» στοιχείου πίνακα, αντιστοιχούν σε επιπλέον κόμβους στο αντίστοιχο διάγραμμα Feynmann της αλληλεπίδρασης.

*(ν) Γενίκευση για προσέγγιση $r$-οστής τάξης ($r \geq 1$):*

Από την παραπάνω ανάλυση, εύκολα μπορεί να προκύψει η γενική μορφή της «διόρθωσης» του στοιχείου πίνακα $V_{fi}(\mathbf{x})$ στην (4.21), για προσέγγιση τάξης $r \geq 1$. Συγκεκριμένα, ο Χρυσός Κανόνας του Fermi, (4.21), εξακολουθεί να δίνει τον ολικό ρυθμό μετάπτωσης, με την αντικατάσταση:

$$\begin{aligned} V_{fi} \to V_{fi} &+ \sum_{n\neq i} V_{fn}\frac{1}{E_i - E_n + i\varepsilon}V_{ni} + \\ &+ \sum_{n\neq m}\sum_{m\neq i} V_{fn}(\mathbf{x})\frac{i}{E_m - E_n + i\varepsilon}V_{nm}(\mathbf{x})\frac{i}{E_i - E_m + i\varepsilon}V_{mi}(\mathbf{x}) + \cdots \\ &\quad\vdots \\ &\quad + \\ &\quad\vdots \\ &+ \sum_{\substack{n_{(1)}\neq i \\ n_{(2)}\neq n_{(1)} \\ \vdots \\ n_{(r-1)}\neq n_{(r-2)}}} \prod_{\substack{j=1 \\ n_{(j)}\equiv f \\ n_{(0)}\equiv i}}^{r} \frac{i}{(-1)^j\left(E_{n_{(j)}} - E_{n_{(j-1)}}\right) + i\varepsilon} V_{n_{(j)}n_{(j-1)}}(\mathbf{x}) \end{aligned} \tag{4.39}$$

Η παραπάνω σχέση αποδεικνύεται, σχετικά εύκολα, με αυστηρή επαγωγή (strict induction) επί της τάξης προσέγγισης $r \in \{0,1,2,\dots\}$, και παραλείπεται για λόγους οικονομίας χρόνου. ■