Квантовая механика. Физический факультет, 4 курс, 7 семестр.

Занятие №13. ***Теория возмущений (ТВ): нестационарная ТВ.***

1. Теория возмущений (окончание).

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}; \quad \hat{H}_0 \psi_n^{(0)} = E_n^{(0)} \psi_n^{(0)};$$

$\hat{H}_0$ – основной гамильтониан, для которого известно точное решение стационарного уравнения Шредингера, $\hat{V}$ – оператор возмущения.

$\dfrac{\partial \hat{V}}{\partial t} = 0$ – стационарная ТВ (см. занятие № 12), $\dfrac{\partial \hat{V}}{\partial t} \neq 0$ – нестационарная ТВ.

2. Нестационарная ТВ.

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(q,t)}{\partial t} = \left(\hat{H}_0 + \hat{V}(t) \right) \Psi(q,t);$$

$$\Psi(q,t) = \sum_k a_k(t) \Psi_k^{(0)}(q,t); \quad \Psi_k^{(0)}(q,t) = \psi_k^{(0)}(q) e^{-iE_k^{(0)} t/\hbar},$$

$$i\hbar \frac{da_m}{\partial t} = \sum_k V_{mk}(t) a_k, \qquad .$$

$$V_{mk}(t) = \left(\Psi_m^{(0)}, \hat{V} \Psi_k^{(0)} \right) = V_{mk} e^{i\omega_{mk} t}, \quad \omega_{mk} = \frac{E_m^{(0)} - E_k^{(0)}}{\hbar}$$

$$a_{kn} \approx \delta_{k,n} + a_{kn}^{(1)}(t), \quad a_{kn}^{(1)} = -\frac{i}{\hbar} \int V_{kn} e^{i\omega_{kn} t} dt.$$

2.1. Вероятность перехода под влиянием возмущения, действующего в течение конечного времени

$$w_{k \leftarrow n} = | a_{kn}^{(1)} |^2 = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_{-\infty}^{\infty} V_{kn} e^{i\omega_{kn} t} dt \right|^2 .$$

__Задача 1.__ На частицу, находящуюся при $t \to -\infty$ в основном состоянии в бесконечно глубокой яме ширины a $(0 < x < a)$, накладывается слабое однородное поле, изменяющееся во времени по закону $V(x,t) = -xF_0 e^{-t^2/\tau^2}$. Вычислить в первом порядке ТВ вероятности возбуждения различных состояний частицы при $t \to \infty$. (ГКК № 8.23 (а))

3. Обсуждение индивидуальных расчетных заданий. Сведения о спецфункциях, которые могут быть полезными при выполнении этих заданий.

3.1. Гипергеометрическая функция.

Гипергеометрический ряд (обобщение понятия геометрической прогрессии)

$$F(\alpha,\beta,\gamma,z)=1+\frac{\alpha\cdot\beta}{\gamma\cdot 1}z+\frac{\alpha\cdot(\alpha+1)\cdot\beta\cdot(\beta+1)}{\gamma\cdot(\gamma+1)\cdot 1\cdot 2}z^2$$
$$+\frac{\alpha\cdot(\alpha+1)\cdot(\alpha+2)\cdot\beta\cdot(\beta+1)\cdot(\beta+2)}{\gamma\cdot(\gamma+1)\cdot(\gamma+2)\cdot 1\cdot 2\cdot 3}z^3+\dots;$$

Ряд сходится при $|z|\le 1$, является симметричным по α,β. Ряд обрывается, если α или β является целым отрицательным числом. Это одно из решений гипергеометрического уравнения

$$z(1-z)\frac{d^2U}{dz^2}+\left[\gamma-(\alpha+\beta+1)z\right]\frac{dU}{dz}-\alpha\beta U=0.$$

Два линейно независимых решения в случае, когда γ не является целым числом,

$$U_1(z)=F(\alpha,\beta,\gamma,z);$$
$$U_2(z)=z^{1-\gamma}F(\alpha-\gamma+1,\beta-\gamma+1,2-\gamma,z).$$

Через гипергеометрическую функцию выражаются полные эллиптические интегралы, интегралы от цилиндрических функций, полиномы Лежандра, функции Лежандра, шаровые функции и присоединенные полиномы Лежандра, полиномы Чебышева, полиномы Якоби. Например,

$$P_n(z)=\frac{(2n-1)!!}{n!}z^nF\left(-\frac{n}{2},\frac{1-n}{2},\frac{1}{2}-n,\frac{1}{z^2}\right);$$
$$P_n(\cos\varphi)=F\left(n+1,-n,1,\sin^2\varphi\right).$$

3.2. Вырожденная гипергеометрическая функция.

Вырожденный гипергеометрический ряд

$$F(\alpha,\gamma,z)=1+\frac{\alpha}{\gamma}\cdot\frac{z}{1!}+\frac{\alpha\cdot(\alpha+1)}{\gamma\cdot(\gamma+1)}\cdot\frac{z^2}{2!}+\frac{\alpha\cdot(\alpha+1)\cdot(\alpha+2)}{\gamma\cdot(\gamma+1)\cdot(\gamma+2)}\cdot\frac{z^3}{3!}+\dots;$$

Ряд сходится при $|z|\le 1$. Ряд обрывается, если α является целым отрицательным числом. Это одно из решений вырожденного гипергеометрического уравнения

$$z\frac{d^2U}{dz^2}+(\gamma-z)\frac{dU}{dz}-\alpha U=0.$$

Если γ не является целым числом, то два линейно независимых решения вырожденного гипергеометрического уравнения имеют вид:

$$U_1(z)=F(\alpha,\gamma,z);$$
$$U_2(z)=z^{1-\gamma}F(\alpha-\gamma+1,2-\gamma,z).$$

Через вырожденную гипергеометрическую функцию выражаются интеграл вероятности, интегралы от цилиндрических функций, полиномы Эрмита, полиномы Лягерра.

Подробнее о свойствах гипергеометрической функции и вырожденной гипергеометрической функции можно узнать в справочниках: И.С.Градштейн, И.М.Рыжик «Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений», А.П.Прудников, Ю.А.Брычков, О.И.Маричев «Интегралы и ряды. Специальные функции. Т. 2», М.Абрамовиц, И.Стиган «Справочник по специальным функциям», а также в математических дополнениях в учебнике «Квантовая механика» Л.Д.Ландау, И.М.Лифшица.

Домашнее задание . ГКК 8.23(б, в)–8.26.

Задача 1. На частицу, находящуюся при $t \to -\infty$ в основном состоянии в бесконечно глубокой яме шириной a, накладывается слабое однородное поле, изменяющееся во времени по закону:

б) $V(x,t) = -xF_0 \exp(-|t|/\tau)$;

в) $V(x,t) = -xF_0 / \left[(1+(t/\tau)^2\right]$.

Вычислить в первом порядке теории возмущений вероятности возбуждения различных состояний частицы при $t \to \infty$. Указать условия применимости полученных результатов.

(ГКК 8.23(б, в))

Задача 2. Линейный осциллятор подвергается воздействию однородного электрического поля, изменяющегося во времени по закону:

а) $\mathrm{E}(t) = \mathrm{E}_0 \exp[(-t/\tau)^2]$;

б) $\mathrm{E}(t) = \mathrm{E}_0 \exp(-|t|/\tau)$.

Считая, что до включения поля (при $t \to -\infty$) осциллятор находился в n-м стационарном состоянии, найти в первом порядке теории возмущений вероятности возбуждения различных его состояний при $t \to \infty$. (ГКК 8.24)

Задача 3. Решить предыдущую задачу для поля, изменяющегося по закону

$\mathrm{E}(t) = [1+(t/\tau)^2]^{-1}$, при заданном импульсе силы P_0. Обсудить предельные случаи $\omega\tau << 1 \quad и \quad \omega\tau >> 1$. (ГКК 8.25)

Задача 4. На плоский ротатор, имеющий дипольный момент ***d***, накладывается однородное, переменное во времени электрическое поле $\mathrm{E}(t) = f(t)\mathrm{E}_0$. До включения поля ротатор имел определенное значение *m* проекции момента. Вычислить в первом порядке теории возмущений вероятности различных значений проекции момента и энергии ротатора при $t \to \infty$. Рассмотреть конкретные зависимости $\mathrm{E}(t)$ вида, указанного в условии задачи 8.24. (ГКК 8.26)

ГКК - Галицкий Е.М., Карнаков Б.М., Коган В.И. Задачи по квантовой механике, 1981; ЛЛ – Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Квантовая механика