

Квантова механіка. Фізичний факультет, 4 курс, 7 семестр.

Заняття №12. Теорія збурень (ТЗ): стаціонарна ТЗ для невідроджених рівнів, стаціонарна ТЗ при наявності виродження.

1. Теорія збурень.

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

\hat{H}_0 – основний гамільтоніан, для якого відомий точний розв'язок стаціонарного рівняння Шредінгера, \hat{V} – оператор збурення.

$$\frac{\partial \hat{V}}{\partial t} = 0 \text{ – стаціонарна ТЗ, } \frac{\partial \hat{V}}{\partial t} \neq 0 \text{ – нестаціонарна ТЗ (див. заняття № 13).}$$

2. Стаціонарна теорія збурень для невідроджених рівнів.

$$\hat{H}\psi = E\psi,$$

$$E = E_n^{(0)} + E_n^{(1)} + E_n^{(2)} + \dots; \quad \psi = \psi_n^{(0)} + \psi_n^{(1)} + \psi_n^{(2)} + \dots$$

$$\begin{cases} E_n^{(1)} = V_{nn}; \\ \psi_n^{(1)} = \sum_{m \neq n} \frac{V_{mn}}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \psi_m^{(0)}; \end{cases} \quad E_n^{(2)} = \sum_{m \neq n} \frac{|V_{mn}|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}};$$

$V_{mn} = (\psi_m^{(0)}, \hat{V} \psi_n^{(0)})$ – матричні елементи оператора збурення.

$|V_{mn}| \ll |E_m^{(0)} - E_n^{(0)}|$ – умова придатності ТЗ.

Задача 1. Для частинки, що знаходиться в нескінченно глибокій потенційній ямі ширини a ($0 < x < a$) знайти в першому порядку ТЗ зміщення енергетичних

рівнів під дією збурення вигляду $V(x) = \frac{V_0}{a}(a - |2x - a|)$. (ГКК № 8.1 (а))

Задача 2. Матричні елементи оператора збурення, що діє на лінійний осцилятор з власною частотою ω , мають вигляд $V_{mn} = \alpha \delta_{m,n+1} + \beta \delta_{m,n-1}$. Знайти поправки до енергії осцилятора в перших двох порядках теорії збурень $E_n^{(1)}$, $E_n^{(2)}$.

3. Стаціонарна ТЗ за наявності виродження. Секулярне рівняння.

$$\hat{H}_0 \psi_n^{(0)} = E_n^{(0)} \psi_n^{(0)}; \quad \underbrace{\psi_n^{(0)}, \psi_{n'}^{(0)}, \dots, \psi_{n''}^{(0)}}_s \quad (s\text{-кратно вироджений рівень})$$

$$\sum_{n'=1}^s (V_{nn'} - E^{(1)} \delta_{n,n'}) C_{n'}^{(0)} = 0.$$

Секулярне рівняння

$$\text{Det}(V_{nn'} - E^{(1)} \delta_{n,n'}) = 0,$$

$$\psi = \sum_{n=1}^s C_n^{(0)} \psi_n^{(0)} \quad \text{— правильні хвильові функції нульового наближення.}$$

Задача 3. Визначити поправки першого наближення до власного значення і правильні хвильові функції нульового приближення для двократно виродженого рівня $s = 2$.

Задача 4. Плоский ротор з моментом інерції I і дипольним моментом \vec{d} розміщений в однорідному електричному полі, що лежить в площині обертання. Знайти в перших двох порядках теорії збурень зсув і розщеплення енергетичних рівнів збуджених станів ротора.

Для розв'язку знадобиться уточнена формула ТЗ для вироджених рівнів, котра враховує у другому порядку ТЗ матричні елементи для переходів в стани з іншими енергіями (див. ЛЛ §39, ф-ла (39.4))

$$\sum_{n'=1}^s \left(V_{nn'} + \sum_k \frac{V_{nk} V_{kn'}}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} - E^{(2)} \delta_{n,n'} \right) C_{n'}^{(0)} = 0.$$

Домашнє завдання . ГКК 8.1 (б), 8.3, 8.4, 8.5, 8.9, ЛЛ 39(1) (закінчити), 8.10 (закінчити), 8.11.

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