

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

Занятие №12. Теория возмущений (ТВ): стационарная ТВ для невырожденных уровней, стационарная ТВ при наличии вырождения.

1. Теория возмущений.

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

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

$$\frac{\partial \hat{V}}{\partial t} = 0 \text{ – стационарная ТВ, } \frac{\partial \hat{V}}{\partial t} \neq 0 \text{ – нестационарная ТВ (см. занятие № 13).}$$

2. Стационарная теория возмущений для невырожденных уровней.

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

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

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

$V_{mn} = (\psi_m^{(0)}, \hat{V} \psi_n^{(0)})$ – матричные элементы оператора возмущения.

$|V_{mn}| \ll |E_m^{(0)} - E_n^{(0)}|$ – условие применимости ТВ.

Задача 1. Для частицы, находящейся в бесконечно глубокой потенциальной яме ширины a ($0 < x < a$) найти в первом порядке ТВ смещение энергетических уровней под действием

возмущения вида $V(x) = \frac{V_0}{a}(a - |2x - a|)$. (ГКК № 8.1 (а))

Задача 2. Матричные элементы оператора возмущения, которое действует на линейный осциллятор с собственной частотой ω , имеют вид $V_{mn} = \alpha \delta_{m,n+1} + \beta \delta_{m,n-1}$. Найти поправки к энергии осциллятора в первых двух порядках теории возмущений $E_n^{(1)}, E_n^{(2)}$.

3. Стационарная ТВ при наличии вырождения. Секулярное уравнение.

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

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

Секулярное уравнение

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

$\psi = \sum_{n=1}^s C_n^{(0)} \psi_n^{(0)}$ – правильные волновые функции нулевого приближения.

Задача 3. Определить поправки первого приближения к собственному значению и правильные волновые функции нулевого приближения для двукратно вырожденного уровня $s = 2$.

Задача 4. Плоский ротор с моментом инерции I и дипольным моментом \vec{d} помещен в однородное электрическое поле, лежащее в плоскости вращения. Найти в первых двух порядках теории возмущений сдвиг и расщепление энергетических уровней *возбужденных* состояний ротора.

Для решения понадобится уточненная формула ТВ для вырожденных уровней, которая учитывает во втором порядке ТВ матричные элементы для переходов в состояния с другими энергиями (см. ЛЛ §39, ф-ла (39.4))

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

Домашнее задание . ГКК 8.1 (б), 8.3, 8.4, 8.5, 8.9, ЛЛ 39(1) (закончить), 8.10 (закончить), 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