ՀԱՅԱՍՏԱՆԻ ԳԻՏՈՒԹՅՈՒՆՆԵՐԻ ԱԶԳԱՅԻՆ ԱԿԱԴԵՄԻԱՅԻ ԶԵԿՈՒՅՑՆԵՐ
ДОКЛАДЫ НАЦИОНАЛЬНОЙ АКАДЕМИИ НАУК АРМЕНИИ

Том 94 1993 № 2

ФИЗИКА

УДК 530.145.6

Член-корреспондент НАН Армении В. А. Джрбашян

Суммирование рядов теории возмущений в случае двух уровней

(Представлено 31/VII 1992)

В большинстве практических задач уравнения Шредингера

$$\hat{H}\psi = (\hat{H}_0 + \hat{V})\psi = E\psi \tag{1}$$

точно не решаются. Если, однако, поправка $\hat{V}$ к «невозмущенному» оператору $\hat{H}_0$ мала, то теория возмущений ([1]) дает приближенные решения уравнений (1). Они представляются в виде бесконечных рядов, выраженных через известные точные решения уравнения

$$\hat{H}_0\psi^{(0)} = E^{(0)}\psi^{(0)}. \tag{2}$$

Выпишем несколько известных первых членов ([1]), полученных теорией возмущений, для собственных значений энергии (штрих у знака суммы означает, что при суммировании по l надо опустить член с $l = i$)

$$E_i = E_i^{(0)} + V_{ii} + \sum_k{}' \frac{|V_{ik}|^2}{E_i^{(0)} - E_k^{(0)}} + \sum_k{}' \sum_l{}' \frac{V_{il} V_{lk} V_{ki}}{(E_i^{(0)} - E_l^{(0)})(E_k^{(0)} - E_i^{(0)})} -$$

$$- V_{ii} \sum_k{}' \frac{|V_{ik}|^2}{(E_k^{(0)} - E_i^{(0)})^2} + \cdots \tag{3}$$

и для собственных функций

$$\psi_{ik} = \psi_i^{(0)} + \sum_k{}' \frac{V_{ki}}{E_i^{(0)} - E_k^{(0)}}\psi_k^{(0)} + \sum_k{}' \left\{ \sum_l{}' \frac{V_{kl} V_{li}}{(E_i^{(0)} - E_k^{(0)})(E_i^{(0)} - E_l^{(0)})} - \right.$$

$$\left. - \frac{V_{ii} V_{ki}}{(E_i^{(0)} - E_k^{(0)})^2} \right\} \psi_k^{(0)} - \frac{1}{2} \sum_k{}' \frac{|V_{ki}|^2}{(E_i^{(0)} - E_k^{(0)})^2}\psi_i^{(0)} + \cdots \tag{4}$$

Прерывая ряды (3) и (4), мы ограничиваемся определенным приближением. Рассмотрим суммирование этих рядов в простейшем случае, когда имеются всего два уровня. Суммирование бесконечных рядов, эквивалентно нахождению точных собственных значений энергий E_i и собственных функций ψ_i. С этой целью разложим искомые функции ψ_i по собственным функциям $\psi_l^{(0)}$ $(l = i,\ k)$ невозмущенного оператора

$$\psi = \sum_l c_l \psi_l^{(0)}. \tag{5}$$

Подставляя это разложение в (1), получим

$$\sum_l c_l (E_l^{(0)} + \hat{V}) \psi_l^{(0)} = \sum_l c_l E \psi_l^{(0)}. \tag{6}$$

В результате умножения на $\psi_i^{(0)*}$ и интегрирования отсюда найдем

$$(E_i^{(0)} + V_{ii} - E) c_i + V_{ik} c_k = 0. \tag{7}$$

Если взамен $\psi_i^{(0)*}$ использовать $\psi_k^{(0)*}$, то придем к равенству

$$V_{ki} c_i + (E_k^{(0)} + V_{kk} - E) c_k = 0. \tag{8}$$

Система однородных линейных уравнений (7, 8) имеет отличные от нуля решения при равенстве нулю детерминанта

$$\begin{vmatrix} E_i^{(0)} + V_{ii} - E & V_{ik} \\ V_{ki} & E_k^{(0)} + V_{kk} - E \end{vmatrix} = 0. \tag{9}$$

Секулярное уравнение (9) представляет собой уравнение второй степени по E. Его корни являются искомыми собственными значениями энергии в (1)

$$E = \frac{1}{2}\left\{E_i^{(0)} + V_{ii} + E_k^{(0)} + V_{kk} \pm \left[(E_i^{(0)} + V_{ii} + E_k^{(0)} + V_{kk})^2 - \right.\right.$$

$$\left.\left. - 4 (E_i^{(0)} + V_{ii})(E_k^{(0)} + V_{kk}) + 4 |V_{ik}|^2 \right]^{1/2}\right\}. \tag{10}$$

Отсюда в более компактном виде

$$E = \frac{1}{2}\left\{E_i^{(0)} + V_{ii} + E_k^{(0)} + V_{kk} \pm (E_i^{(0)} + V_{ii} - E_k^{(0)} - V_{kk}) \times \right.$$

$$\left. \times \left\{1 + \left[\frac{2|V_{ik}|}{E_i^{(0)} + V_{ii} - E_k^{(0)} - V_{kk}}\right]^2\right\}^{1/2}\right\}. \tag{11}$$

Выбирая знак в этом выражении, тем самым мы выбираем, к какому из двух уровней относится энергия. При знаке + в (11) мы имеем энергию i-го уровня

$$E_i = \frac{1}{2}\left\{E_i^{(0)} + V_{ii} + E_k^{(0)} + V_{kk} + (E_i^{(0)} + V_{ii} - E_k^{(0)} - V_{kk}) \times \right.$$

$$\left. \times \left\{1 + \left[\frac{2|V_{ik}|}{E_i^{(0)} + V_{ii} - E_k^{(0)} - V_{kk}}\right]^2\right\}^{1/2}\right\}. \tag{12}$$

Действительно, положив поправку V равной нулю, получаем $E_i = E_i^{(0)}$, т. е. энергия равна энергии невозмущенной системы. Аналогично, выбирая знак — в (11), получим энергию k-го уровня

$$E_k = \frac{1}{2}\Big\{E_i^{(0)} + V_{ii} + E_k^{(0)} + V_{kk} - (E_i^{(0)} + V_{ii} - E_k^{(0)} - V_{kk}) \times$$

$$\times \left\{1 + \left[\frac{2\,|V_{ik}|}{E_i^{(0)} + V_{ii} - E_i^{(0)} - V_{kk}}\right]^2\right\}^{1/2}\Big\}. \quad (13)$$

Ряды теории возмущений (3) и (4) применимы при условии

$$|V_{mn}| \ll |E_n^{(0)} - E_m^{(0)}|, \quad (14)$$

т. е. матричные элементы оператора $\hat{V}$ должны быть малы по сравнению с соответствующими разностями невозмущенных уровней энергии. Принимая условие применимости теории возмущений (14), разложим выражение (12) для энергии i-го уровня

$$E_i = E_i^{(0)} + V_{ii} + \frac{|V_{ik}|^2}{E_i^{(0)} - E_k^{(0)}} + \frac{|V_{ik}|^2}{E_i^{(0)} - E_k^{(0)}}\left[-\frac{V_{ii} - V_{kk}}{E_i^{(0)} - E_k^{(0)}}\right] +$$

$$+ \frac{|V_{ik}|^2}{(E_i^{(0)} - E_k^{(0)})^3}\left[-|V_{ik}|^2 + (V_{kk} - V_{ii})^2\right] + \cdots \quad (15)$$

Сравнивая правую часть (3) в случае двух уровней (i, k) с правой частью (15), легко убедиться, что они совпадают. Во второй строке выражения (15) приведена поправка четвертого приближения к собственному значению энергии. Она не приведена, как видно из (3), в книге ([1]), но автором вычислена и по теории возмущений. Подставим в систему уравнений (7, 8) для энергии E найденное точное выражение i-го уровня E_i (12).

В результате решения этой однородной системы получим коэффициенты c и следовательно точное решение уравнения (1) для волновой функции i-го уровня:

$$\psi_i = \frac{1}{\sqrt{2}}\left\{\left[1 + \frac{E_i^{(0)} + V_{ii} - E_k^{(0)} - V_{kk}}{\sqrt{(E_i^{(0)} + V_{ii} - E_i^{(0)} - V_{kk})^3 + 4\,|V_{ik}|^2}}\right]^{1/2}\psi_i^{(0)} +\right.$$

$$\left.+ \frac{V_{ki}}{|V_{ik}|}\left[1 - \frac{E_i^{(0)} + V_{ii} - E_k^{(0)} - V_{kk}}{\sqrt{(E_i^{(0)} + V_{ii} - E_k^{(0)} - V_{kk})^2 + 4\,|V_{i,k}|^2}}\right]^{1/2}\psi_k^{(0)}\right\}. \quad (16)$$

Разлагая (16) в ряд, в области применимости теории возмущений (14) имеем

$$\psi_i = \psi_i^{(0)} + \frac{V_{ki}}{E_i^{(0)} - E_k^{(0)}}\psi_k^{(0)} + \frac{(V_{kk} - V_{ii})\,V_{ki}}{(E_i^{(0)} - E_k^{(0)})^2}\psi_k^{(0)} +$$

$$- \frac{1}{2}\,\frac{|V_{ki}|}{(E_i^{(0)} - E_k^{(0)})^2}\psi_i^{(0)} + \cdots \quad (17)$$

Легко убедиться в том, что правые части (17) и (4) в случае двух уровней совпадают. Следовательно, в выражениях (12) и (16) мы нашли суммы рядов теории возмущений (3) и (4). Поскольку (12) и (16) аналитические функции, то они являются энергией и волновой функцией также при нарушении условия (14).

Поправка $\hat{V}$ к «невозмущенному» оператору большая, в частности, при сильных взаимодействиях, из-за величины константы связи.

Формула (12) дает некоторое представление о характере зависимости E_i от $\hat{V}$ также в случаях, когда число уровней произвольно.

При

$$|V_{mn}| \gg |E_n^{(0)} - E_m^{(0)}|, \tag{18}$$

$$|V_{mm} - V_{nn}| \gg |V_{mn}|, \tag{19}$$

$$E_i = E_i^{(0)} + V_{ii} + \cdots \tag{20}$$

Таким образом, энергия с точностью до первого приближения включительно дается формулой (20), как при малых $\hat{V}$ (14), так и при больших, когда соблюдаются условия (18) и (19).

Если имеет место

$$|V_{mn}| \gg |V_{mm} - V_{nn}| \gg |E_n^{(0)} - E_m^{(0)}|, \tag{21}$$

то

$$E_i = \frac{1}{2}\left[E_i^{(0)} + V_{ii} + E_k^{(0)} + V_{kk} + \mathrm{sign}\,(V_{ii} - V_{kk})\,2\,|V_{ik}|\right] + \cdots,$$

где $\mathrm{sign}\,(V_{ii} - V_{kk})$ — знак действительной величины $V_{ii} - V_{kk}$.

Способ вывода выражений (12) и (16) позволяет понять причину невозможности получения точных формул для сумм рядов в теории возмущений, когда число уровней произвольно. Эта возможность упирается в известную невозможность точного решения алгебраических уравнений произвольной степени.

Ереванский физический институт

Հայաստանի ԳԱԱ թղթակից անդամ Վ. Հ. ՋՐԲԱՇՅԱՆ

Խոտորումների տեսության շարքերի գումարումը երկու մակարդակների դեպքում

Կատարվել է էներգիայի սեփական արժեքների և սեփական ֆունկցիաների համար խոտորումների տեսության տված հայտնի անվերջ շարքերի գումարումը, երբ կան միայն երկու մակարդակներ։ Գտնված բանաձևը որոշ պատկերացում է տալիս V-ից E_i-ի կախման բնույթի մասին նաև այն դեպքում, երբ մակարդակների թիվը կամավոր է։ Էներգիան, մինչև առաջին մոտավորությունը ներառյալ, տրվում է $E_i = E_i^{(0)} + V_{ii}$ բանաձևով ոչ միայն

$|V_{lk}| \ll |E_l^{(0)} - E_k^{(0)}|$ պայմանի, այլ նաև հակադարձ $|V_{lk}| \gg |E_l^{(0)} - E_k^{(0)}|$ պայմանի դեպքում, եթե $|V_{lk}| \ll |V_{ll} - V_{kk}|$։ Այս հանգամանքը կարող է օգտակար լինել մասնավորապես ուժեղ փոխազդեցություններ դիտարկելիս։

ЛИТЕРАТУРА — ԳՐԱԿԱՆՈՒԹՅՈՒՆ

1 *Л. Д. Ландау, Е. Е. Лифшиц*, Квантовая механика, ГИФМЛ, М., 1963.