ЛЕКЦИЯ 16(4). 21.09.2001

ТЕОРИЯ ВОЗМУЩЕНИЙ

Задача о собственных значениях

$$\hat{\mathcal{H}}\Psi \quad = \quad E\Psi$$

с произвольным оператором $\hat{\mathcal{H}}$, как правило, неразрешима аналитически.

Однако, при решении многих физически важных задач достаточно менее общих рассуждений. Пусть гамильтониан системы можно представить в форме

$$\hat{\mathcal{H}} \quad = \quad \hat{\mathcal{H}}_0 \quad + \quad \lambda\hat{\mathcal{H}}_1, \qquad \lambda << 1,$$

где $\hat{\mathcal{H}}_0$ – оператор с чисто дискретным спектром, причем все его собственные значения и собственные векторы известны.

ВОЗМУЩЕНИЯ НЕВЫРОЖДЕННОГО СПЕКТРА

Сначала для простоты предположим, все собственные значения это оператора невырождены:

$$\hat{\mathcal{H}}_0\Phi_n \quad = \quad E_{0n}\Phi_n,$$

$$< \Phi_m|\Phi_n > \quad = \quad \delta_{mn}, \qquad \forall\Psi \in H \quad \Psi \quad = \quad \sum_n \Phi_n < \Phi_n|\Psi > .$$

Принимая во внимание связь операторов $\hat{\mathcal{H}}$ и $\hat{\mathcal{H}}_0$, можно сказать, что E_{0n} и Φ_n – приближенные решения точной задачи:

$$\Psi_n \quad = \quad \Phi_n \quad + \quad O(\lambda), \qquad E_n \quad = \quad E_{0n} \quad + \quad O(\lambda).$$

Нетрудно уточнить структуру поправочных слагаемых в этих формулах. Можно рассудить так: поскольку оператор H аналитически зависит от параметра λ, можно ожидать, что это будет справедливо и для собственных значений и собственных векторов. Поэтому можно представить величины E_n и Ψ_n в форме

$$E_n \quad = \quad E_{0n} \quad + \quad \lambda E_{1n} \quad + \quad O(\lambda^2),$$

$$\Psi_n \quad = \quad \Phi_n \quad + \quad \lambda\Phi^{(1)}{}_n \quad + \quad O(\lambda^2).$$

Подставляя эти выражения в уравнения для собственных значений, получим соотношение

$$\hat{\mathcal{H}}_0\Phi_0 \quad + \quad \lambda\hat{\mathcal{H}}_0\Phi^{(1)}{}_n \quad + \quad \lambda\hat{\mathcal{H}}_1\Phi_n \quad =$$

$$E_{0n}\Phi_n \quad + \quad \lambda E_{n0}\Phi^{(1)}{}_n \quad + \quad \lambda E_{1n}\Phi_n \quad + \quad O(\lambda^2).$$

Поскольку векторы Φ_n – решения уравнений

$$(\hat{\mathcal{H}}_0 - E_{0n})\Phi_n \quad = \quad 0,$$

то полученное равенство удовлетворится с точностью до слагаемых второго порядка по λ, если вектор $\Phi^1{}_n$ будет решением уравнения

$$(\hat{\mathcal{H}}_0 - E_{0n})\Phi^{(1)}{}_n \quad = \quad F_1,$$

где

$$F_1 \quad = \quad E_{1n}\Phi_n \quad - \quad \hat{\mathcal{H}}_1\Phi_n.$$

Умножив обе части уравнения скалярно на вектор Φ_n, получим

$$< \Phi_n|F_1 > \quad = \quad < \Phi_n|(\hat{\mathcal{H}}_0 - E_{0n})\Phi^{(1)}{}_n > \quad = \quad < (\hat{\mathcal{H}}_0 - E_{0n})\Phi_n|\Phi^{(1)}{}_n > \quad = \quad 0.$$

Таким образом, равенства

$$< \Phi_n|F_1 > \quad = \quad 0$$

представляют собой условия разрешимости уравнений первого приближения к точному решению. Они определяют значения поправок к уровням энергии в первом порядке по параметру λ:

$$E_{1n} \quad = \quad < \Phi_n|\hat{\mathcal{H}}_1|\Phi_n > .$$

Решение уравнения

$$(\hat{\mathcal{H}}_0 - E_{0n})\Phi^{(1)}{}_n \quad = \quad F_1,$$

если оно существует, определено с точностью до слагаемого, пропорционального вектору Φ_n. Распорядимся им так, чтобы векторы Φ_n и $\Phi^{(1)}{}_n$ были ортогональными друг другу. Это означает, что должно быть справедливым разложение

$$\Phi^{(1)}{}_n \quad = \quad \sum_{m \neq n} \Phi_m C_{mn}.$$

Подстановка этого разложения в уравнение для $\Phi^{(1)}{}_n$ приводит к явным выражениям коэффициентов C_{mn}:

$$C_{mn} \quad = \quad \frac{< \Phi_m|\hat{\mathcal{H}}_1|\Phi_n >}{E_{0n} - E_{0m}}.$$

Заметим, что коэффициенты C_{mn} антисимметричны по индексам m и n. В силу этого векторы

$$\Psi^{(1)}{}_n \quad = \quad \Phi_n \quad + \quad \lambda \sum_{m \neq n} \Phi_m C_{mn}$$

с точностью до второго порядка по λ попарно ортогональны:

$$< \Psi^1{}_m|\Psi^1{}_n > \quad = \quad \delta_{mn} \quad + \quad O(\lambda^2).$$

Иначе говоря, преобразование

$$\Psi^0{}_n \quad = \quad \Phi_n \quad \Longrightarrow \quad \Psi^1{}_n$$

унитарно с точностью до первого порядка по λ.

Полезно помнить, что процедура вычисления собственных значений и собственных векторов в первом приближении по параметру λ естественным образом распалась на два этапа:

1) сначала выяснялись условия разрешимости уравнений приближения; в результате была найдена поправка к уровням энергии E_{0n} в первом порядке по величине λ;

2) после этого оказалось возможным найти вектор состояния, которое оказывается стационарном при учете эффектов первого порядка, связанных с энергией $\lambda\hat{\mathcal{H}}_1$.

Эта схема останется верной и при учете возмущения высших порядков. Рассмотрим, например, схему второго порядка. В этом случае в уравнения для собственных значений следует подставить такие разложения собственных значений и собственных векторов:

$$E_n \quad = \quad E_{0n} \quad + \quad \lambda E_{1n} \quad + \quad \lambda^2 E_{2n} \quad + \quad O(\lambda^3),$$
$$\Psi_n \quad = \quad \Phi_n \quad + \quad \lambda\Phi^{(1)}{}_n \quad + \quad \lambda^2\Phi^{(2)}{}_n \quad + \quad O(\lambda^3).$$

Если в качестве величин E_{1n} и $\Phi^{(1)}{}_n$ взять значения, найденные при решении уравнений в первом порядке по λ, то уравнение $\hat{\mathcal{H}}\Psi = E\Psi$ примет вид:

$$\lambda^2(\hat{\mathcal{H}}_0\Phi^{(2)}{}_n \quad + \quad \hat{\mathcal{H}}_1\Phi^{(1)}{}_n) \quad =$$
$$\lambda^2(E_{0n}\Phi^{(2)}{}_n \quad + \quad E_{1n}\Phi^{(1)}{}_n \quad + \quad E_{2n}\Phi_n) \quad + \quad O(\lambda^3).$$

Пренебрегая последним слагаемым в правой части, получим уравнения определяющие поправки к собственной энергии и собственному вектору во втором порядке по величине λ:

$$(\hat{\mathcal{H}}_0 - E_{0n})\Phi^{(2)}{}_n \quad = \quad F_2,$$
$$F_2 \quad = \quad E_{2n}\Phi_n \quad + \quad E_{1n}\Phi^{(1)}{}_n \quad - \quad \hat{\mathcal{H}}_1\Phi^{(1)}{}_n.$$

Условие разрешимости этих уравнений, $< \Phi_n|F_2 >= 0$, определяет поправку к уровню энергии:

$$E_{2n} \quad = \quad < \Phi_n|\hat{\mathcal{H}}_1|\Phi^{(1)}{}_n > .$$

Подстановка явного значения вектора $\Phi^{(1)}{}_n$ приводит к формуле

$$E_{2n} \quad = \quad \sum_{m\neq n} \frac{|< \Phi_m|\hat{\mathcal{H}}_1|\Phi_n >|^2}{E_{0n} - E_{0m}}.$$

Нетрудно показать, что таким же образом можно получить поправки любого порядка по λ. Каждый раз будет получаться уравнение вида

$$(\hat{\mathcal{H}}_0 - E_{0n})\Phi^{(k)}{}_n \quad = \quad F_k,$$

в котором функция F_k содержит всего лишь неизвестный параметр – значение энергии E_{kn}. Условие разрешимости уравнения этот параметр фиксирует, после чего находится и функция $\Phi^{(k)}{}_n$.

ВОЗМУЩЕНИЯ ВЫРОЖДЕННОГО СПЕКТРА

Случай вырожденного спектра гамильтониана $\hat{\mathcal{H}}_0$ требует более тщательного анализа. Предположим, что один из базисов в пространстве состояний образуют собственные векторы этого гамильтониана:

$$\hat{\mathcal{H}}_0\Phi_{n\alpha} = E_{0n}\Phi_{n\alpha}, \quad \alpha = 1, ..., s_n.$$

Подстановка в уравнение

$$(\hat{\mathcal{H}}_0 + \lambda\hat{\mathcal{H}}_1)\Psi_{n\alpha} = E_{n\alpha}\Psi_{n\alpha}$$

выражений

$$E_{n\alpha} = E_{0n} + \lambda E_{1n\alpha} + O(\lambda^2),$$
$$\Psi_{n\alpha} = \Phi_{n\alpha} + \Phi^{(1)}{}_{n\alpha} + O(\lambda^2)$$

приводит к соотношениям

$$(\hat{\mathcal{H}}_0 - E_{0n})\Phi_{n\alpha} + \lambda((\hat{\mathcal{H}}_0 - E_{0n})\Phi^{(1)}_{n\alpha} + \hat{\mathcal{H}}_1\Phi_{n\alpha} - E_{1n\alpha}\Phi_{n\alpha}) + O(\lambda^2) = 0.$$

Пренебрежем слагаемыми второго порядка по λ и приравняем к нулю по отдельности слагаемые нулевого и первого порядков по λ. Два уравнения

$$(\hat{\mathcal{H}}_0 - E_{0n})\Phi_{n\alpha} = 0$$

и

$$(\hat{\mathcal{H}}_0 - E_{0n})\Phi^{(1)}_{n\alpha} = E_{1n\alpha}\Phi_{n\alpha} - \hat{\mathcal{H}}_1\Phi_{n\alpha},$$

как и в случае невырожденного спектра, должны определить поправки к уровням энергии и к векторам стационарных состояний. Однако, на этом шаге требуется преодолеть еще одну трудность. Условие разрешимости уравнений первого порядка по λ,

$$< \Phi_{n\beta}|E_{1n\alpha}\Phi_{n\alpha} > = < \Phi_{n\beta}|\hat{\mathcal{H}}_1|\Phi_{n\alpha} >,$$

вообще говоря, внутренне противоречиво, поскольку левая часть равенства всегда диагональна по индексам α и β, а правая часть в случае произвольных решений нулевого порядка может содержать и недиагональные слагаемые. Чтобы избежать противоречия, сформулируем правило выбора векторов $\Phi_{n\alpha}$ следующим образом:

векторы $\Phi_{n\alpha}$ должны удовлетворять условиям

$$(\hat{\mathcal{H}}_0 - E_{0n})\Phi_{n\alpha} = 0,$$

и

$$< \Phi_{n\alpha}|\hat{\mathcal{H}}_1|\Phi_{n\beta} > \quad = \quad h_\alpha \delta_{\alpha\beta}.$$

НЕПРИВОДИМЫЕ ТЕНЗОРЫ

Сферические гармоники Y_{lm} можно определить соотношениями

$$\hat{l}_3 Y_{lm} \quad = \quad m Y_{lm},$$

$$\hat{l}_\pm Y_{lm} \quad = \quad \sqrt{(l \mp m)(l \pm m + 1)} Y_{l,m\pm 1}.$$

Если $\hat{l}_\alpha$ реализуются как дифференциальные операторы, то эти равенства можно представить как перестановочные соотношения

$$[\hat{l}_3, Y_{lm}] \quad = \quad m Y_{lm},$$

$$[\hat{l}_\pm, Y_{lm}] \quad = \quad \sqrt{(l \mp m)(l \pm m + 1)} Y_{l,m\pm 1}.$$

Этому образцу следует определние неприводимых тензоров.

Неприводимый тензор ранга j – это совокупность 2j + 1 операторов

$$\hat{T}_{jm}, \quad -j \le m \le j,$$

удовлетворяющих перестановочным соотношениям

$$[\hat{j}_3, \hat{T}_{jm}] \quad = \quad m \hat{T}_{jm},$$

$$[\hat{j}_\pm, \hat{T}_{jm}] \quad = \quad \sqrt{(j \mp m)(j \pm m + 1)} \hat{T}_{j,m\pm 1}.$$

Справедливы правила отбора:

$$1) \qquad < \gamma_1, j_1, m_1|\hat{T}_{jm}|\gamma_2, j_2, m_2 > \quad \neq \quad 0, \quad \text{\textit{если}} \quad m_1 \neq m + m_2,$$

$$2) \qquad < \gamma_1, j_1, m_1|\hat{T}_{jm}|\gamma_2, j_2, m_2 > \quad = \quad < \gamma_1, j_1|T_j|\gamma_2, j_2 >< j_2 m_2 j m|j_2 j j_1 m_1 >,$$

где $< j_2 m_2 j m|j_2 j j_1 m_1 >$ – коэффициенты Клебша-Гордона – скалярные произведения, реализующие разложение собственных векторов операторов ${J_1}^2$, ${J_2}^2$, J^2, J_3 по собственным векторам операторов ${J_1}^2$, J_{13}, ${J_2}^2$, J_{23}:

$$|j_1 j_2 j m > \quad = \quad \sum_{m_1 m_2} |j_1 m_1 j_2 m_2 >< j_1 m_1 j_2 m_2|j_1 j_2 j m > .$$

Этим соотношения можно перефразировать так, чтобы не использовать коэффициенты Клебша–Гордона явно. Предположим, что существует такой неприводимый тензор $\hat{Q}_{jm}$, матричные элементы которого $< \gamma_1, j_1, m_1|\hat{Q}_{jm}|\gamma_2, j_2, m_2 >$ не равны нулю. В этом случае справедлива формула

$$< \gamma_1, j_1, m_1|\hat{T}_{jm}|\gamma_2, j_2, m_2 > \quad = \quad C(\gamma_1, \gamma_2, j_1, j_2) < \gamma_1, j_1, m_1|\hat{Q}_{jm}|\gamma_2, j_2, m_2 > .$$

Существенно, что подобные соотношения справедливы и для декартовых составляющих неприводимых тензоров.

Неприводимый тензор нулевого ранга $\hat{T}$ удовлетворяет перестановочным соотношениям

$$[\hat{J}_\alpha, \hat{T}] = 0,$$

что совпадает с принятым ранее определением скаляра.

Декартовы составляющие вектора A_α удовлетворяют перестановочным соотношениям

$$[J_\alpha, A_\beta] = i\epsilon_{\alpha\beta\gamma}A_\gamma.$$

Три величины

$$\hat{T}_{1,-1} = b(\hat{A}_1 - i\hat{A}_2), \qquad \hat{T}_{1,0} = d\hat{A}_3, \qquad \hat{T}_{1,1} = c(\hat{A}_1 + i\hat{A}_2)$$

удовлетворяют перестановочным соотношениям

$$[J_3, \hat{T}_{1m}] = m\hat{T}_{1m}.$$

Их можно считать составляющими неприводимого тензора первого ранга в том случае, если выполнены соотношения

$$[\hat{J}_+, \hat{T}_{1,0}] = -d(\hat{A}_1 + i\hat{A}_2) = -\frac{d}{c}\hat{T}_{1,1} = \sqrt{(1-0)(1+0+1)}\hat{T}_{1,1},$$

$$[\hat{J}_+, \hat{T}_{1,-1}] = -2ib\hat{A}_3 = -\frac{d}{c}\hat{T}_{1,0} = \sqrt{(1+1)(1-1+1)}\hat{T}_{1,0}.$$

Эти равенства позволяют свести коэффициенты b и c к d:

$$\hat{T}_{1,-1} = \frac{d}{\sqrt{2}}(\hat{A}_1 - i\hat{A}_2), \qquad \hat{T}_{1,0} = d\hat{A}_3, \qquad \hat{T}_{1,1} = -\frac{d}{\sqrt{2c}}(\hat{A}_1 + i\hat{A}_2).$$

Коэффициент d удобно выбрать таким, чтобы фазы тензоров $\hat{T}_{1m}$ совпали с фазами сферических гармоник Y_{1m}. Ранее сферические гармоники были определены формулой

$$Y_{lm}(\vec{n}) = (-1)^{\frac{m+|m|}{2}} i^l \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}\frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}} P_l^{\hat{|}m|}(cos\theta)e^{im\phi},$$

поэтому естественно выбрать определение

$$\hat{T}_{1,-1} = \frac{i}{\sqrt{2}}(\hat{A}_1 - i\hat{A}_2), \qquad \hat{T}_{1,0} = i\hat{A}_3, \qquad \hat{T}_{1,1} = -\frac{i}{\sqrt{2c}}(\hat{A}_1 + i\hat{A}_2).$$

Декартов тензор второго ранга можно инвариантно относительно поворотов разбить на симметричную и антисимметричную части:

$$A_{\alpha\beta} = \frac{1}{2}(A_{\alpha\beta} + A_{\beta\alpha}) + \frac{1}{2}(A_{\alpha\beta} - A_{\beta\alpha}).$$

Антисимметричная часть сводится к вектору, т.е. представляет собой неприводимый тензор первого ранга. Симметричный тензор второго ранга можно представить в форме

$$A_{\alpha\beta} = \frac{1}{3}\delta_{\alpha\beta}TrA \quad + \quad \Big(A_{\alpha\beta} - \frac{1}{3}\delta_{\alpha\beta}TrA\Big).$$

Поскольку след тензора не изменяется при поворотах, то первое слагаемое представляет собой скаляр, а второе – симметричный тензор второго порядка с нулевым следом – определяется пятью числами и представляет собой декартов неприводимый тензор второго ранга. Нетрудно найти явные формулы, переводящие декартовы составляющие в составляющие $\hat{T}_{2,m}$:

$$T_{2,0} = -\sqrt{\frac{3}{2}}T_{33}, \quad T_{2,\pm1} = \pm(T_{13} \pm iT_{23}), \quad T_{2,\pm2} = -\frac{1}{2}(T_{11} - T_{22} \pm 2iT_{12}).$$

$$T_{\alpha\beta} = T_{\beta\alpha}, \quad \sum_{\alpha} T_{\alpha\alpha} = 0.$$

Эти соотношения особенно удобны, если тензор $\hat{Q}_{jm}$ построен из составляющих оператора момента количества движения. Прежде чем привести явные формулы, заметим, что они справедливы лишь при $j_1 = j_2$, так как в противном случае правая часть равенства тождественно равна нулю (в силу перестановочных соотношений $[\vec{J}^2, J_\alpha] = 0$).

1) Неприводимый тензор нулевого ранга $\hat{T}$ удовлетворяет перестановочным соотношениям

$$[\hat{J}_\alpha, \hat{T}] \quad = \quad 0,$$

что совпадает с принятым ранее определением скаляра.

В качестве тензора $\hat{Q}_{jm}$ можно взять единичный оператор $\hat{E}$, поэтому

$$< \gamma_1, j, m_1|\hat{T}|\gamma_2, j, m_2 > \quad = \quad C(\gamma_1, \gamma_2, j) < j, m_1|\hat{E}|j, m_2 > \quad = \quad C(\gamma_1, \gamma_2, j)\delta_{m_1 m_2}.$$