Семинар по теме: «Теория возмущений»

11 апреля 2018 г.

Обозначения

Линейные операторы (то есть матрицы) мы будем обозначать как $\hat{H}$:

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} 1 & 5 & 4 \\ 5 & 1 & 3 \\ 4 & 3 & 2 \end{pmatrix}$$

Вектора линейного пространства, на которые эти операторы действуют, мы будем обозначать как $|a\rangle$:

$$|a\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Эрмитово сопряжённые вектора (операция эрмитового сопряжения - это транспонирование и комплексное сопряжение) мы будем обозначать как $\langle b| = (|b\rangle)^\dagger$:

$$|b\rangle = \begin{pmatrix} 5 \\ 1 \\ 3 \end{pmatrix} \Rightarrow \langle b| = \begin{pmatrix} 5 & 1 & 3 \end{pmatrix}$$

Таким образом, например, действие оператора на вектор обозначается как:

$$\hat{H}\,|a\rangle = \begin{pmatrix} 1 & 5 & 4 \\ 5 & 1 & 3 \\ 4 & 3 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 11 \\ 7 \\ 10 \end{pmatrix}$$

и скалярное произведение обозначается как:

$$\langle b|a\rangle = \begin{pmatrix} 5 & 1 & 3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 0 \end{pmatrix} = 7$$

Эти обозначения пришли из квантовой механики, в которой чаще всего и применяется алгебраическая теория возмущений.

Общие сведения

Говорят, что вектор $|a\rangle$ - собственный вектор для оператора $\hat{H}$, сооветствующий собственному числу λ, если:

$$\hat{H}\,|a\rangle = \lambda\,|a\rangle$$

Матрица $\hat{H}$ называется эрмитовой, если $\hat{H}^\dagger = \hat{H}$. В частности, если матрица вещественна, то эрмитовость для неё означает симметричность. Известно, что для любого эрмитового оператора можно выбрать базис пространства, состоящий из его собственных векторов. Это эквивалентно утверждению о том, что существует базис $\{|n\rangle\}_{n=1}^{N}$, такой, что матрица $\hat{H}$, записанная в этом базисе диагональна:

$$H_{nm} \equiv \left\langle n \left| \hat{H} \right| m \right\rangle = \operatorname{diag}(\lambda_1, \ldots, \lambda_N)$$

Этот базис можно выбрать ортонормированным, так что:

$$\langle n|m\rangle = \delta_{nm} = \begin{cases} 1, & n = m \\ 0, & n \neq m \end{cases}$$

Теория возмущений

Постановка задачи

Пусть имеется линейный оператор $\hat{H}_0$, для которого известен ортонормированный базис $\left\{ \left| n^{(0)} \right\rangle \right\}_{n=1}^{N}$ из его собственных векторов:

$$\hat{H}_0 \left| n^{(0)} \right\rangle = E_n^{(0)} \left| n^{(0)} \right\rangle$$

Теория возмущений решает задачу о (приближенном) нахождении собственных векторов и собственных значений матрицы $\hat{H} = \hat{H}_0 + \epsilon \hat{V}$, где параметр $\epsilon \ll 1$, в виде разложения по малости параметра ϵ:

$$\hat{H} |n\rangle = E_n |n\rangle$$

при этом

$$E_n = E_n^{(0)} + \epsilon E_n^{(1)} + \epsilon^2 E_n^{(2)} + \ldots$$

$$|n\rangle = \left| n^{(0)} \right\rangle + \epsilon \left| n^{(1)} \right\rangle + \epsilon^2 \left| n^{(2)} \right\rangle + \ldots$$

Невырожденный случай

Если собственное число $E_n^{(0)}$ оказывается невырожденным (это означает, что ему соответствует ровно один собственный вектор $\left| n^{(0)} \right\rangle$), то в первом порядке теории возмущений поправка к нему дается выражением:

$$E_n^{(1)} = V_{nn} \equiv \left\langle n^{(0)} \left| \hat{V} \right| n^{(0)} \right\rangle$$

а во втором порядке теории возмущений - выражением:

$$E_n^{(2)} = \sum_{k \neq n} \frac{V_{kn} V_{nk}}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} = \sum_{k \neq n} \frac{|V_{nk}|^2}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}$$

Поправки к собственному вектору в первом порядке теории возмущений даются выражением:

$$\left| n^{(1)} \right\rangle = \sum_{k \neq n} \frac{V_{kn}}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} \left| k^{(0)} \right\rangle$$

Видно, что если имеется случай, когда $V_{kn} \neq 0$, но $E_k^{(0)} = E_n^{(0)}$, то имеется проблема, связанная с делением на ноль. Это соответствует вырождению собственного числа (то есть одному собственному числу соответствуют два собственных вектора), и такие случаи нужно рассматривать отдельно.

Вырожденный случай

Пусть собственное число $E_n^{(0)}$ является s-кратно вырожденным (что означает, что среди набора $\left\{\left|n^{(0)}\right\rangle\right\}_{n=1}^N$ имеются s различных векторов $\left\{\left|n_k^{(0)}\right\rangle\right\}_{k=1}^s$, соответствующих этому собственному числу), то схема действия следующая. Сперва запишем проекцию матрицы $\hat{V}$ на вырожденное собственное подпространство. Это значит, что нужно рассмотреть матрицу $\hat{\tilde{V}}$ размера $s \times s$, которая записывается как:

$$\widetilde{V}_{ab} = \left\langle n_a^{(0)} \middle| \hat{V} \middle| n_b^{(0)} \right\rangle = \begin{pmatrix} V_{n_1n_1} & V_{n_1n_2} & \dots & V_{n_1n_s} \\ V_{n_2n_1} & V_{n_2n_2} & \dots & V_{n_2n_s} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ V_{n_sn_1} & V_{n_sn_2} & \dots & V_{n_sn_s} \end{pmatrix}, \quad V_{n_in_j} \equiv \left\langle n_i^{(0)} \middle| \hat{V} \middle| n_j^{(0)} \right\rangle$$

Затем эту матрицу нужно диагонализовать стандартным образом в базисе из $\left\{\left|n_k^{(0)}\right\rangle\right\}_{k=1}^s$ (что гораздо проще - исходная матрица была размера $N \times N$, а эта матрица - размера $s \times s$; как правило, кратность вырождения s - не очень большое число).Для этого записывается секулярное уравнение

$$\det(\hat{\tilde{V}} - v\hat{\mathbb{I}}) \equiv \det \begin{pmatrix} V_{n_1n_1} - v & V_{n_1n_2} & \dots & V_{n_1n_s} \\ V_{n_2n_1} & V_{n_2n_2} - v & \dots & V_{n_2n_s} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ V_{n_sn_1} & V_{n_sn_2} & \dots & V_{n_sn_s} - v \end{pmatrix} = 0$$

затем находятся s его собственных чисел $\{v_a\}_{a=1}^s$ и s его собственных векторов $\{|\widetilde{n}_k\rangle\}_{a=1}^s$. Эти вектора называются «правильными векторами главного (ведущего) приближения». Они были выбраны таким образом, что они тоже являются собственными векторами исходного оператора $\hat{H}_0$, с собственным числом $E_n^{(0)}$, и, кроме того, образуют базис вырожденного собственного подпространства. Далее необходимо перейти от базиса исходных векторов $\left\{\left|n_a^{(0)}\right\rangle\right\}_{a=1}^s$ к базису из $\{|\widetilde{n}_a\rangle\}_{a=1}^s$; и в новом базисе уже можно применять стандартные формулы для невырожденной теории возмущений. В частности, случая, когда происходит деление на ноль ($V_{kn} \neq 0$ но $E_k^{(0)} = E_n^{(0)}$) уже не будет.

Заметим, что при этом числа $\{v_a\}_{a=1}^s$ (которые являлись собственными числами матрицы $\widetilde{V}$) будут играть роль первой поправки $E_n^{(1)}$ к собственному числу $E_n^{(0)}$; кроме того, поскольку этих чисел s, и они в общем случае различны, то говорят о снятии вырождения возмущением - число $E_n^{(0)}$ перестаёт быть вырожденным, происходит расщепление.

Замечание Параметр ϵ был введён лишь для того, чтобы аккуратно следить за тем, какой порядок теории возмущений рассматривается. Оказывается, что в k-м порядке теории возмущений, матрица $\hat{V}$ входит ровно k раз (и этот порядок домножается на ϵ^k); это позволяет нам формально положить параметр $\epsilon = 1$ во всех выражениях, и просто считать саму матрицу $\hat{V}$ малой.

Литература [?], §38 (“возмущения, не зависящие от времени”) и §39 (“секулярное уравнение”).

Задача 1

Считая параметр $a > b$ и $\epsilon \ll 1$, исследуем с помощью теории возмущений матрицу

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} a & \epsilon \\ \epsilon & b \end{pmatrix}$$

Невырожденная теория возмущений

Невозмущенные собственные вектора и собственные значения матрицы $\hat{H}_0$ записываются тривиально как:

$$\begin{cases} |1\rangle &= \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \Rightarrow \lambda_1^{(0)} = a \\ |2\rangle &= \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \Rightarrow \lambda_2^{(0)} = b \end{cases}$$

Следуя теории возмущений, первая поправка к собственным числам $\lambda_1^{(0)}$ записываются как:

$$\begin{cases} \lambda_1^{(1)} &= V_{11} = \left\langle 1 \middle| \hat{V} \middle| 1 \right\rangle = 0 \\ \lambda_2^{(1)} &= V_{22} = \left\langle 2 \middle| \hat{V} \middle| 2 \right\rangle = 0 \end{cases}$$

Эти поправки оказались нулевыми, поэтому необходимо исследовать следующий порядок теории возмущений. Он даёт нам:

$$\begin{cases} \lambda_1^{(2)} &= \sum_{k\neq 1} \frac{|V_{k1}|^2}{\lambda_1^{(0)} - \lambda_k^{(0)}} = \frac{|V_{21}|^2}{a-b} = \frac{\epsilon^2}{a-b} \\ \lambda_2^{(2)} &= \sum_{k\neq 2} \frac{|V_{k2}|^2}{\lambda_2^{(0)} - \lambda_k^{(0)}} = \frac{|V_{12}|^2}{b-a} = -\frac{\epsilon^2}{a-b} \end{cases}$$

Таким образом, приближенно спектр записывается как:

$$\begin{cases} \lambda_1 &\approx a + \frac{\epsilon^2}{a-b} \\ \lambda_2 &\approx b - \frac{\epsilon^2}{a-b} \end{cases}$$

Вырожденная теория возмущений

Попробуем решить эту задачу, пользуясь вырожденной теорией возмущений (положив $a = b$). Имеем:

$$\det \begin{pmatrix} -\lambda & \epsilon \\ \epsilon & -\lambda \end{pmatrix} = \lambda^2 - \varepsilon^2 = 0$$

Отсюда,

$$\begin{cases} \lambda_1 &\approx a + \varepsilon \\ \lambda_2 &\approx a - \varepsilon \end{cases}$$

Точное решение Эту задачу можно решить точно. Уравнение на собственные значения для матрицы $\hat{H}$ записывается как:

$$\det\left(\hat{H} - \lambda\right) = \det \begin{pmatrix} a-\lambda & \epsilon \\ \epsilon & b-\lambda \end{pmatrix} = (a-\lambda)(b-\lambda) - \epsilon^2 = 0$$

$$\lambda_{1,2} = \frac{a + b \pm \sqrt{(a-b)^2 + 4\epsilon^2}}{2}$$

Представим ответ в виде разложения по ϵ, считая, что $a - b \gg \varepsilon$:

$$\lambda_{1,2} = \frac{1}{2}\left(a + b \pm (a-b)\sqrt{1 + \frac{4\epsilon^2}{(a-b)^2}}\right) \approx \frac{1}{2}\left(a + b \pm (a-b)\left(1 + \frac{2\epsilon^2}{(a-b)^2}\right)\right) = \begin{cases} a + \frac{\epsilon^2}{a-b} \\ b - \frac{\epsilon^2}{a-b} \end{cases}$$

Видно, что воспроизвёлся ответ невырожденной теории возмущений. А теперь пусть $|a - b| \ll \varepsilon \ll 1$:

$$\lambda_{1,2}\frac{1}{2}(a+b) \pm \varepsilon$$

Это воспроизводит в главном приближении ответ вырожденной теории возмущений (с точностью до членов порядка $a - b \ll \varepsilon$). Таким образом, переход от невырожденной теории возмущений к вырожденной происходит при $\varepsilon \sim a - b$. Действительно, именно тогда поправка невырожденной теории возмущений становится порядка 1, т.е. перестаёт быть малой.

Задача 2 (эффект Штарка)

В атоме водорода энергетические уровни нумеруются тремя квантовыми числами n, l и m. При этом число $n = 1, 2, \ldots,$; при фиксированном n, число $l = 0, 1, \ldots, n-1$, а при фиксированных n и l, число $m = -l, \ldots, l$. Энергия же состояния атома водорода зависит только от числа n (и выражается как $E = -\frac{\mathrm{Rd}}{n^2}$, где Rd называется постоянной Ридберга); тем самым, состояние с $n = 2$ оказывается четырёхкратно вырожденным по энергии (энергии $E_2 = -\frac{\mathrm{Rd}}{4}$ соответствуют состояния $|n, l, m\rangle \in \{|2,0,0\rangle, |2,1,-1\rangle, |2,1,0\rangle, |2,1,1\rangle\}$. Наложение электрического поля воспринимается в этой задаче как возмущение; при этом возмущенный оператор энергии (гамильтониан), записывается как:

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} E_2 & V & 0 & 0 \\ V^* & E_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & E_2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & E_2 \end{pmatrix}$$

Собственные значения этого оператора в квантовой механике играют роль допустимых значений энергии системы. Требуется найти поправки при наложении такого возмущения.

Решение

В данном случае у невозмущенного оператора $\hat{H}_0$ имеется четырехкратно вырожденный уровень энергии E_2, и имеются четыре собственных вектора:

$$\left|1^{(0)}\right\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \left|2^{(0)}\right\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \left|3^{(0)}\right\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \left|4^{(0)}\right\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Поскольку имеется вырождение, то необходимо применять вырожденный случай теории возмущений. Следуя ему, необходимо записать секулярное уравнение:

$$\det\left(\hat{V} - v\right) = \det\begin{pmatrix} -v & V & 0 & 0 \\ V^* & -v & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -v & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -v \end{pmatrix} = v^2\left(v^2 - |V|^2\right) = 0 \Rightarrow \begin{cases} v_{1,2} & = \pm|V| \\ v_{3,4} & = 0 \end{cases}$$

Далее, необходимо найти собственные вектора, соответствующие этим собственным значениям. Пусть $V = |V|\, e^{i\varphi}$ (V - комплексное число). Тогда, уравнения на собственные вектора записываются как:

$$\begin{pmatrix} -|V| & |V|\, e^{i\varphi} & 0 & 0 \\ |V|\, e^{-i\varphi} & -|V| & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -|V| & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -|V| \end{pmatrix} \begin{pmatrix} m_{11} \\ m_{12} \\ m_{13} \\ m_{14} \end{pmatrix} = 0 \Rightarrow \left| \widetilde{1}^{(0)} \right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{i\varphi} \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} |V| & |V|\, e^{i\varphi} & 0 & 0 \\ |V|\, e^{-i\varphi} & |V| & 0 & 0 \\ 0 & 0 & |V| & 0 \\ 0 & 0 & 0 & |V| \end{pmatrix} \begin{pmatrix} m_{21} \\ m_{22} \\ m_{23} \\ m_{24} \end{pmatrix} = 0 \Rightarrow \left| \widetilde{2}^{(0)} \right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{i\varphi} \\ -1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

и тривиально $\left| \widetilde{3}^{(0)} \right\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ и $\left| \widetilde{4}^{(0)} \right\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$. Напомним, вектора $\left| \widetilde{k}^{(0)} \right\rangle$ называются «правильными векторами ведущего приближения», и далее необходимо перейти к базису из этих векторов.В частности, первый порядок теории возмущений даст поправки, совпадающиес собственными числами v_k:

$$\begin{cases} E_{2;1} & = E_2 - |V| \\ E_{2;2} & = E_2 + |V| \\ E_{2;3,4} & = E_2 \end{cases}$$

Таким образом, уже в первом порядке теории возмущений, вырождение частично снялось (вместо четырехкратно вырожденного уровня энергии E_2 мы получаем однократно вырожденный уровень энергии $E_2 + |V|$, однократно вырожденный уровень $E_2 - |V|$ и двукратно вырожденный уровень E_2). Кроме того, расщепление линейно по возмущению $|V|$; это - прямое следствие вырождения в этой задаче. В квантовой механике это явление называется линейным эффектом Штарка. Если бы вырождения не было, то ведущая поправка была бы лишь во втором порядке теории возмущений, и поправки к уровням энергии были бы квадратичны по $|V|$ (как в первой задаче).

Задачи для домашнего решения

Упражнение 1

Рассматриваются эрмитовы матрицы (операторы) $\hat{H}$ и $\hat{V}$ размера $n \times n$, при этом все собстенные значения $E_1^0, ..., E_n^0$ и нормированные собственные векторы $|\psi_1^0\rangle, ..., |\psi_n^0\rangle$ матрицы $\hat{H}$ считаются известными, более того $E_i^0 \neq E_j^0$ при $i \neq j$ (невырожденный случай). Далее составляется матрица $\hat{H} + \epsilon\hat{V}$. При $\epsilon \to 0$, ищем собственные векторы и значения этой матрицы в виде

$$E_i = E_i^0 + \epsilon E_i^1 + \epsilon^2 E_i^2 + ...$$

$$|\psi_i\rangle = |\psi_i^0\rangle + \epsilon|\psi_i^1\rangle + \epsilon^2|\psi_i^2\rangle + ...$$

На семинаре было доказано, что $E_i^1 = \langle\psi_i^0|V|\psi_i^0\rangle$. Получите формулы для $|\psi_i^1\rangle$ и для E_i^2. Не забудьте, что мы рассматриваем нормированные векторы, т.е. при выводе есть дополнительное условие $\langle\psi_i|\psi_j\rangle = \langle\psi_i^0|\psi_j^0\rangle = \delta_{ij}$.

Упражнение 2

Матрицы Паули определены как

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Для матрицы $\hat{H} + \epsilon\hat{V}$ найдите поправки к собственным значениям вплоть до второго порядка по ϵ и к собственным векторам вплоть до первого порядка для следующих случаев:

$$\hat{H} = \sigma_x, \quad \hat{V} = \sigma_x; \quad \hat{H} = \sigma_x, \quad \hat{V} = \sigma_y; \quad \hat{H} = \sigma_x, \quad \hat{V} = \sigma_z$$

Упражнение 3
Матрицы $\hat{H}$ и $\hat{V}$ имеют вид:

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} 2 & 0 & 1 \\ 0 & 2 & 0 \\ 1 & 0 & 2 \end{pmatrix}, \quad \hat{V} = \begin{pmatrix} 0 & 3 & 0 \\ 3 & 2 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Используя теорию возмущений, найдтите с точностью до ϵ^2 собственные значения матрицы $H + \epsilon V$, $\epsilon \to 0$ (собственные векторы искать не нужно).

Задача 1 (Большая задача про квантовую механику)
Часть один
Любой дифференциальный оператор $\hat{H}$ можно рассматривать, как матрицу в функциональном пространстве. Т.е. для обычных матриц $n \times n$ при действии матрицы на вектор получался какой-то другой вектор: $\hat{H}|\psi\rangle = |\psi'\rangle$. Точно также, дифференциальный оператор $\hat{H}$, действуя на какую-нибудь функцию одной переменной $\psi(x)$, возвращает какую-то другую функцию $\psi'(x)$:

$$\hat{H}\psi(x) = \left(a_0(x) + a_1(x)\frac{d}{dx} + a_2(x)\frac{d^2}{dx^2} + ... + a_N(x)\frac{d^N}{dx^N}\right)\psi(x) = \psi'(x).$$

Дальше мы будем рассматривать оператор

$$\hat{H} = -\frac{d^2}{dx^2} - \kappa\delta(x),$$

где $\kappa > 0$.
Собственные функции (векторы) такого оператора определены обычным образом

$$\hat{H}\psi(x) = E\psi(x).$$

Это уравнение на собственные значения и функции в квантовой механики называется стационарным уравнением Шредингера. Скалярное произведение определено как

$$(\psi(x) \cdot \phi(x)) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi^*(x)\phi(x).$$

Эта формула очень сильно напоминает формулу для n-компонентных векторов: $(\vec{\psi} \cdot \vec{\phi}) = \langle\psi|\phi\rangle = \sum_{i=1}^{n} \psi_i^* \phi_i$. Найдите собственную функцию $\hat{H}$, которая спадает в ноль на $\pm\infty$ и соответствующее ей собстенное значение E. Тут нужно действовать так:

- Найдите общее решение уравнения Шредингера при $x > 0$ и $x < 0$ по отдельности для произвольного E. В итоге у вас получится 4 неизвестных коэффициента, которые нужно определить, а также определить нужно E. Теперь потребуем убывания функций на бесконечностях. Какие условия это требование накладывает на неизвестные коэффициенты и на величину E?

- Теперь нужно "обработать" точку $x = 0$. Первое условие, которое накладывается на нашу функцию в этой точке - непрерывность. Чтобы получить еще одно условие, которое позволит явно найти E необходимо учесть наличие δ-функции в операторе. Чтобы получить это условие, проинтегрируйте уравнение Шредингера в пределах от $-\lambda$ до λ, а затем возьмите предел $\lambda \to +0$

- После всех этих процедур собственная функция найдена с точностью до общего множителя, а собстенное число E - определено. Отнормируйте собственную функцию на единицу, т.е. потребуйте $(\psi(x) \cdot \psi(x)) = 1$.

Часть два

Найдите поправку к найденному собственному значению, получающуюся при рассмотрении слабо отличающегося дифференциального оператора $\hat{H} + \epsilon\hat{V}$, где $\hat{V} = \sum_{i=-\infty}^{\infty} \delta(x-i)$, $\epsilon \to 0$.

Оказывается, что все остальные собственные функции для исходного оператора $\hat{H}$ (а их бесконечно много) имеют другой знак E, т.е. ситуация невырожденная. Тогда можно воспользоваться теорией возмущений для матриц. Как всегда, ищем собстевнное значение полного оператора в виде $E = E^0 + \epsilon E^1 + \ldots$, где E^0 - собстенное значение $\hat{H}$ определенное в первой части задачи. Тогда E^1 можно найти по формуле

$$(\psi \cdot \hat{V}\psi) = \int_{-\infty}^{\infty} dx\psi(x)\hat{V}\psi(x)$$

где $\psi(x)$ также был найден в первой части задачи.

Задача 2 (операторные функции Грина и теория возмущений)

Для случая невырожденных собственных значений существует несколько другая техника получения поправок к энергии. Центральный объект в этой технике - операторная функция Грина, определяемая следующим образом:

$$\hat{G}(E) = \left(E - \hat{H}\right)^{-1}$$

Рассмотрим матричный элемент $\langle n|\hat{G}^{-1}|n\rangle = E - E_n$ (собственные вектора нормированы на 1). Как легко видеть, он равен 0 при $E \to E_n$, т.е. в точке, отвечающей спектру системы. Это свойство мы и будем использовать в дальнейшем.

1. Как обычно, пусть $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$, где V мало. Докажите следующее разложение для $\hat{G}(E)$:

$$\hat{G}(E) = \hat{G}_0(E) + \hat{G}_0(E)\hat{V}\hat{G}_0(E) + \hat{G}_0(E)\hat{V}\hat{G}_0(E)\hat{V}\hat{G}_0(E) + \ldots$$

2.