

Семинар по теме: «Теория возмущений»

11 апреля 2019 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 $\langle b| = (|b\rangle)^\dagger$:

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

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:

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

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} , соответствующий 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:

$$H_{nm} \equiv \langle n | \hat{H} | m \rangle = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_N)$$

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 $\{|n^{(0)}\rangle\}_{n=1}^N$ из его собственных векторов:

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

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

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

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

Невырожденный случай

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

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

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:

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

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

$$\tilde{V}_{ab} = \langle n_a^{(0)} | \hat{V} | n_b^{(0)} \rangle = \begin{pmatrix} V_{n_1 n_1} & V_{n_1 n_2} & \cdots & V_{n_1 n_s} \\ V_{n_2 n_1} & V_{n_2 n_2} & \cdots & V_{n_2 n_s} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ V_{n_s n_1} & V_{n_s n_2} & \cdots & V_{n_s n_s} \end{pmatrix}, \quad V_{n_i n_j} \equiv \langle n_i^{(0)} | \hat{V} | n_j^{(0)} \rangle$$

Затем эту матрицу нужно диагонализировать стандартным образом в базисе из $\{|n_k^{(0)}\rangle\}_{k=1}^s$ (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

$$\det(\tilde{V} - v\hat{\mathbb{I}}) \equiv \det \begin{pmatrix} V_{n_1 n_1} - v & V_{n_1 n_2} & \cdots & V_{n_1 n_s} \\ V_{n_2 n_1} & V_{n_2 n_2} - v & \cdots & V_{n_2 n_s} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ V_{n_s n_1} & V_{n_s n_2} & \cdots & V_{n_s n_s} - v \end{pmatrix} = 0$$

затем находятся s его собственных чисел $\{v_a\}_{a=1}^s$ и s его собственных векторов $\{|\tilde{n}_k\rangle\}_{a=1}^s$. 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 $\{|n_a^{(0)}\rangle\}_{a=1}^s$ к базису из $\{|\tilde{n}_a\rangle\}_{a=1}^s$; 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 \tilde{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 [1], §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:

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

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:

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

Отсюда,

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

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

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

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

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

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

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

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

Это воспроизводит в главном приближении ответ вырожденной теории возмущений (с точностью до членов порядка $a - b \ll \epsilon$). Таким образом, переход от невырожденной теории возмущений к вырожденной происходит при $\epsilon \sim a - b$. 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 $n = 1, 2, \dots$; при фиксированном n , число $l = 0, 1, \dots, n - 1$, а при фиксированных n и l , число $m = -l, \dots, l$. Энергия же состояния атома водорода зависит только от числа n (и выражается как $E = -\frac{\text{Rd}}{n^2}$, где Rd называется постоянной Ридберга); тем самым, состояние с $n = 2$ оказывается четырёхкратно вырожденным по энергии (энергии $E_2 = -\frac{\text{Rd}}{4}$ 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 четырёхкратно вырожденный уровень энергии E_2 , и имеются четыре собственных вектора:

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

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

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

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:

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

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

и тривиально $|\tilde{3}^{(0)}\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ и $|\tilde{4}^{(0)}\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$. Напомним, вектора $|\tilde{k}^{(0)}\rangle$ называются «правильными векторами ведущего приближения», и далее необходимо перейти к базису из этих векторов. В частности, первый порядок теории возмущений даст поправки, совпадающие с 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 собственные значения E_1^0, \dots, E_n^0 и нормированные собственные векторы $|\psi_1^0\rangle, \dots, |\psi_n^0\rangle$ 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 $\epsilon \rightarrow 0$, ищем собственные векторы и значения этой матрицы в виде

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

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

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, найдите с точностью до ϵ^2 собственные значения матрицы $H + \epsilon V$, $\epsilon \rightarrow 0$ (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 $\psi'(x)$:

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

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 механике 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 собственное 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 $\lambda \rightarrow +0$
- После всех этих процедур собственная функция найдена с точностью до общего множителя, а собственное 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 $\hat{V} = \sum_{i=-\infty}^{\infty} \delta(x - i)$, $\epsilon \rightarrow 0$.

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 собственное значение полного оператора в виде $E = E^0 + \epsilon E^1 + \dots$, где E^0 - собственное 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

Вывести поправку третьего порядка к собственным значениям и второго порядка к собственным векторам в невырожденном случае.

Список литературы

- [1] Л.Д.Ландау и Е.М.Лифшиц *Курс теоретической физики. В 10 т. Т.3 Квантовая механика (нерелятивистская теория).*