第37卷第1期 佳木斯大学学报(自然科学版) Vol. 37 No. 1
2019 年01月 Journal of Jiamusi University (Natural Science Edition) Jan. 2019

文章编号:1008-1402(2019)01-0149-03

零级 Hamilton 量二重简并的量子体系能级微扰法研究[①]

张伟欣, 韩海生, 李 颖, 张海丰*

(佳木斯大学理学院,黑龙江 佳木斯 154007)

摘 要: 利用微扰法解决了零级 Hamilton 量二重简并的量子体系能级问题,利用零级能级 $E_n^{(0)}$ 及波函数求解出了二重简并体系能级的二级近似解,并对给定 H' 矩阵元应用实例进行了分析。结论表明微扰法作为典型的一种近似方法可以有效的解决量子力学当中的相关能级求解问题。

关键词: 微扰法; 二重简并; 近似解

中图分类号: O431 **文献标识码:** A

0 引 言

在量子力学中,体系的能量本征值能够精确求解的问题非常有限,除了少数体系(例如谐振子,氢原子等)外,往往不能严格求解[1]。因此,在处理各种实际问题时采用适当的近似解法,例如微扰论,变分法,自洽场方法,绝热近似,准经典近似等,其中最广泛的就是微扰论[2-5]。

1 能级 $E_n^{(0)}$ 是二重简并的体系能级二级近似解

设量子力学体系的 Hamilton 算符为

$$H = H_0 + H' \tag{1}$$

H_0 为零级 Hamilton 量,H' 为微扰。H_0 的本征函数和本征值记为 $\psi_k^{(0)}$,$E_k^{(0)}$,$k=1,2,\cdots,n,\cdots$。设能级是 $E_n^{(0)}$ 是二重简并的,相应的正交归一化的本征态记为 $\psi_{n\alpha}^{(0)}$、$\psi_{n\beta}^{(0)}$,简记为 ψ_α、ψ_β 在 H_0 表象中,微扰矩阵元记为:

$$\langle\psi_{n\alpha}^{(0)}|H'|\psi_k^{(0)}\rangle = H'_{\alpha k} \tag{2a}$$

$$\langle\psi_{n\beta}^{(0)}|H'|\psi_k^{(0)}\rangle = H'_{\beta k} \tag{2b}$$

$$\langle\psi_{n\alpha}^{(0)}|H'|\psi_{n\beta}^{(0)}\rangle = H'_{\alpha\beta} \tag{2c}$$

$$\langle\psi_{n\alpha}^{(0)}|H'|\psi_{n\alpha}^{(0)}\rangle = H'_{\alpha\alpha} = \varepsilon_\alpha \tag{2d}$$

$$\langle\psi_{n\beta}^{(0)}|H'|\psi_{n\beta}^{(0)}\rangle = H'_{\beta\beta} = \varepsilon_\beta \tag{2e}$$

等等。

设微扰作用后,能级和本征态变成

$$E_n = E_n^{(0)} + E_n^{(1)} + E_n^{(2)} + \cdots \tag{3a}$$

$$\psi_n = \psi^{(0)} + \psi^{(1)} + \psi^{(2)} + \cdots \tag{3b}$$

零级近似 $\psi^{(0)}$ 由两个简并态 ψ_α、ψ_β 组成:

$$\psi^{(0)} = C_\alpha\psi_\alpha + C_\beta\psi_\beta \tag{4}$$

规定波函数的各修正项和 $\psi^{(0)}$ 正交:

$$\langle\psi^{(0)}|\psi^{(1)}\rangle = 0 \tag{5a}$$

$$\langle\psi^{(0)}|\psi^{(2)}\rangle = 0 \tag{5b}$$

因此

$$\psi^{(1)} = \sum_k{}' C_k\psi_k^{(0)} = 0\ (k \neq n) \tag{6}$$

将(3a)、(3b)代入能量本征方程

$$H\psi_n = (H_0 + H')\psi_n = E_n\psi_n \tag{7}$$

并按能级分开,可得零级项

$$[H_0 - E_n^{(0)}]\psi^{(0)} = 0 \tag{8}$$

一级项

$$[H_0 - E_n^{(0)}]\psi^{(1)} = [E_n^{(1)} - H']\psi^{(0)} \tag{9}$$

二级项

$$[H_0 - E_n^{(0)}]\psi^{(2)} = [E_n^{(1)} - H']\psi^{(1)} + E_n^{(2)}\psi^{(0)} \tag{10}$$

其中式(8)已自动满足。以 ψ_α^* 和 ψ_β^* 分别左乘式(9),并对全空间积分,由于 ψ_α 和 ψ_β 均与 $\psi^{(1)}$ 正交,故得

$$[\varepsilon_\alpha - E_n^{(1)}]C_\alpha + H'_{\alpha\beta}C_\beta = 0 \tag{11a}$$

$$H'_{\beta\alpha}C_\alpha + [\varepsilon_\beta - E_n^{(1)}]C_\beta = 0 \tag{11b}$$

上式相当于 $\{\psi_\alpha,\psi_\beta\}$ 子空间中 H' 的本征方程,即

① 收稿日期:2018-10-30
基金项目:国家自然科学基金项目(51141009);佳木斯大学科学技术研究面上项目(Ljz2012-14;12Z1201516)。
作者简介:张伟欣(1996-),女,黑龙江讷河人,研究方向:量子物理研究。
通信作者:张海丰(1973-),男,吉林乾安人,副教授,硕士生导师,研究方向:量子理论物理研究。

?1994-2019 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved. http://www.cnki.net

$$H'\psi^{(0)} = \begin{bmatrix} \varepsilon_\alpha & H'_{\alpha\beta} \\ H'_{\beta\alpha} & \varepsilon_\beta \end{bmatrix}\begin{bmatrix} C_\alpha \\ C_\beta \end{bmatrix} = E_n^{(1)}\psi^{(1)} \tag{11c}$$

方程组(11)存在非平庸解的必要条件为

$$\begin{vmatrix} \varepsilon_\alpha - E_n^{(1)} & H'_{\alpha\beta} \\ H'_{\beta\alpha} & \varepsilon_\beta - E_n^{(1)} \end{vmatrix} = 0 \tag{12}$$

这是 $E_n^{(1)}$ 的二次方程,其解为

$$E_n^{(1)} = \frac{1}{2}[(\varepsilon_\alpha + \varepsilon_\beta)] \pm \sqrt{(\varepsilon_\alpha - \varepsilon_\beta)^2 + 4H'_{\alpha\beta}H'_{\beta\alpha}} = E_\pm^{(1)} \tag{13}$$

这结果表明,一般而言,在一级微扰近似中能级 $E_n^{(0)}$ 已发生分裂。

将 $E_n^{(1)} = E_+^{(1)}$ 和 $E_-^{(1)}$ 分别代回式(11),就可以求出相应的零级波函数 $\psi^{(0)}$,记为 $\psi_+^{(0)}$ 和 $\psi_-^{(0)}$。将 $E_+^{(1)}$、$\psi_+^{(0)}$ 或 $E_-^{(1)}$、$\psi_-^{(0)}$ 代入式(9),(10),可以求出相应的 $\psi^{(1)}$ 和 $E_n^{(2)}$,如下:

以 $\psi_k^{(0)*}$ 左乘式(9),利用式(6)并对全空间积分,即得

$$C_k = \frac{1}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}\langle\psi_k^{(0)}|H'|\psi^{(0)}\rangle = \frac{1}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}(H'_{k\alpha}C_\alpha + H'_{k\beta}C_\beta) \tag{14}$$

代入式(6),即得

$$\psi^{(1)} = \sum_k{}' \frac{1}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}\langle\psi_k^{(0)}|H'|\psi^{(0)}\rangle\psi_k^{(0)} = \sum_k{}' \frac{1}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}(H'_{k\alpha}C_\alpha + H'_{k\beta}C_\beta)\psi_k^{(0)} \tag{15}$$

以 $\psi^{(0)*}$ 左乘式(10),并对全空间积分,即得

$$E_n^{(2)} = \langle\psi^{(0)}|H'|\psi^{(1)}\rangle \tag{16}$$

式(14)、(15)、(16)形式上和非简并态微扰论公式相同。但现在 $\psi^{(0)}$ 系由两个简并态 ψ_α 和 ψ_β 叠加而成,而在非简并态公式中 $\psi^{(0)}$ 即 $\psi_n^{(0)}$。

讨论:

1)如在 $\{\psi_\alpha,\psi_\beta\}$ 子空间中 H' 的对角元不相等,而非对角元为零,即

$$\varepsilon_\alpha > \varepsilon_\beta \tag{17a}$$

$$H'_{\alpha\beta} = H'_{\beta\alpha} = 0 \tag{17b}$$

这时式(13)给出

$$E_+^{(1)} = \varepsilon_\alpha = H'_{\alpha\alpha} \tag{18a}$$

$$E_-^{(1)} = \varepsilon_\beta = H'_{\beta\beta} \tag{18b}$$

而式(11)给出 $E_n^{(1)} = E_+^{(1)} = \varepsilon_\alpha$,$C_\alpha = 1$,$C_\beta = 0$,$\psi_+^{(0)} = \psi_\alpha$;$E_n^{(1)} = E_-^{(1)} = \varepsilon_\beta$,$C_\alpha = 0$,$C_\beta = 1$,$\psi_-^{(0)} = \psi_\beta$,即两个简并态并不发生耦合,式(14)至(18)形式上均和非简并态微扰论公式相同。简言之,这种情况可按非简并态处理。

2)如果

$$\varepsilon_\alpha = \varepsilon_\beta = \varepsilon \tag{19}$$

$$H'_{\alpha\beta} = |H'_{\alpha\beta}|e^{i\delta} \neq 0 \tag{20}$$

这时式(13)给出

$$E_\pm^{(1)} = \varepsilon \pm |H'_{\alpha\beta}| \tag{21}$$

而式(11)给出

$$E_n^{(1)} = E_+^{(1)},\ C_\alpha = C_\beta e^{i\delta} \tag{22a}$$

$$\psi_+^{(0)} = \frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_\alpha + e^{-i\delta}\psi_\beta] \tag{22b}$$

$$E_n^{(1)} = E_-^{(1)},\ C_\alpha = -C_\beta e^{i\delta} \tag{22c}$$

$$\psi_-^{(0)} = \frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_\alpha - e^{-i\delta}\psi_\beta] \tag{22d}$$

在 $\psi_\pm^{(0)}$ 中 ψ_α 和 ψ_β 的成分各占一半。如选择 ψ_α 和 ψ_β 的相因子,使 $H'_{\alpha\beta} = H'_{\beta\alpha}$ = 实数,则 $E_n^{(1)} = \varepsilon \pm H'_{\alpha\beta}$,$C_\alpha = \pm C_\beta$,$\psi^{(0)} = \frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_\alpha \pm \psi_\beta]$。

3)如果

$$\varepsilon_\alpha = \varepsilon_\beta = \varepsilon,\ H'_{\alpha\beta} = H'_{\beta\alpha} = 0 \tag{23}$$

这种情况下,在 $\{\psi_\alpha,\psi_\beta\}$ 子空间中 H' 的作用和常数 ε 相同。这时 $E_n^{(1)} = \varepsilon$,在一级近似下能级并不分裂,$\psi^{(0)}$ 也因此而未能完全确定。这种情况下,确定 $\psi^{(0)}$(即求 C_α,C_β)和计算 $E_n^{(2)}$ 将同时进行,亦即能级分裂将发生在二级修正中。

2 给定 H' 取值的应用实例

设 $H'_{\alpha\alpha} = H'_{\beta\beta} = \varepsilon$,$H'_{\alpha\beta} = 0$,由式(12)或(13)给出

$$E_n^{(1)} = \varepsilon \tag{24}$$

因此无法利用式(11)确定 C_α、C_β。以 ψ_α^* 和 ψ_β^* 分别左乘上题式(10),并对全空间积分,由于 ψ_α 和 ψ_β 均与 $\psi^{(1)}$、$\psi^{(2)}$ 正交,故得

$$E_n^{(2)}C_\alpha = \sum_k{}' H'_{\alpha k}C_k \tag{25a}$$

$$E_n^{(2)}C_\beta = \sum_k{}' H'_{\beta k}C_k \tag{25b}$$

而上题式(14)代入式(25),即得

$$\left[-E_n^{(2)} + \sum_k{}' \frac{H'_{\alpha k}H'_{k\alpha}}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}\right]C_\alpha + \sum_k{}' \frac{H'_{\alpha k}H'_{k\beta}}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}C_\beta = 0 \tag{26a}$$

$$\sum_k{}' \frac{H'_{\beta k}H'_{k\alpha}}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}C_\alpha + \left[-E_n^{(2)} + \sum_k{}' \frac{H'_{\beta k}H'_{k\beta}}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}\right]C_\beta = 0 \tag{26b}$$

?1994-2019 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved. http://www.cnki.net

存在非平庸的条件为 C_α，C_β 的系数行列式等于0，即

$$\begin{vmatrix} A - E_n^{(2)} & D^* \\ D & B - E_n^{(2)} \end{vmatrix} = 0 \tag{27}$$

其中

$$A = \sum_k{}' = \frac{|H'_{k\alpha}|^2}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} \tag{28a}$$

$$B = \sum_k{}' = \frac{|H'_{k\beta}|^2}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} \tag{28b}$$

$$D = \sum_k{}' = \frac{H'_{\beta k}H'_{k\alpha}}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} \tag{28c}$$

由式(28)解出 $E_n^{(2)}$，再代回式(27)，即可求出 C_α、C_β，即求得 $\psi^{(0)}$；再代入式(26)，即可求出各 C_k，即求得 $\psi^{(1)}$。

讨论:

1)如果对于所有 $\psi_k^{(0)}$，均有 $H'_{\beta k}H'_{k\alpha} = 0$，则在二级微扰近似中，不发生 ψ_α 和 ψ_β 态的耦合。这种情况下 $D = 0$，由式(27)和(28)给出

$$E_n^{(2)} = A, C_\alpha = 1, C_\beta = 0, \psi^{(0)} = \psi_\alpha \tag{29a}$$

$$E_n^{(2)} = B, C_\alpha = 0, C_\beta = 1, \psi^{(0)} = \psi_\beta \tag{29b}$$

这些结果和非简并态微扰论的结果一样。

2)如果由于 ψ_α、ψ_β 的对称性，使 $A = B$ 而且 D 为实数，则式(27)、(28)给出 $E_n^{(2)} = A \pm D$，$C_\alpha = \pm C_\beta$，$\psi^{(0)} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_\alpha \pm \psi_\beta)$。

3)如果只有一个 $\psi_k^{(0)}$ 使 $H'_{k\alpha}$ 及 $H'_{k\beta}$ 不等于0，这时选择 ψ_α、ψ_β 及 $\psi_k^{(0)}$ 的相因子，总可以使这两个矩阵元为实数，令 $H'_{k\alpha} = a$，$H'_{k\beta} = b$，则式(27)、(28)给出 $E_n^{(2)} = 0$，$C_\alpha = -\frac{b}{a}C_\beta$

$$\psi^{(0)} = \frac{1}{\sqrt{a^2 + b^2}}(b\psi_\alpha - a\psi_\beta) \tag{30a}$$

以及 $E_n^{(2)} = \frac{a^2 + b^2}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}$，$C_\alpha = \frac{b}{a}C_\beta$

$$\psi^{(0)} = \frac{1}{\sqrt{a^2 + b^2}}(a\psi_\alpha + b\psi_\beta) \tag{30b}$$

3　结　论

通过微扰理论给出了能级 $E_n^{(0)}$ 是二重简并体系的能级二级近似解并加以讨论。同时对给定 H' 取值的应用实例进行了分析。可见，利用微扰法很好地解决了零级 Hamilton 量二重简并的能级问题，为相关类型问题的研究提供了参考方法。

参考文献:

[1] 曾谨言. 量子力学导论[M]. 北京: 北京大学出版社，1998: 50 – 184.

[2] 刘敏. 微扰论在激光自混合干涉效应中的应用[J]. 唐山学院学报，2014，27(03): 25 – 27.

[3] 周恒为. 微扰论计算 Varshni 势的能级[J]. 伊犁师范学院学报(自然科学版)，2009(03): 13 – 17.

[4] 魏明. 简并微扰论中能量和波函数的二级修正[J]. 贵州师范大学学报(自然科学版)，2006(03): 95 – 98.

[5] 张晋鲁. 简并微扰论中波函数的二级修正[J]. 汉中师范学院学报(自然科学版)，2004(06): 28 – 32.

Study of the Perturbation Method on the Double Degenerate Quantum System of Zero – order Hamiltonian

ZHANG Wei – xin，*HAN Hai – sheng*，*LI Ying*，*ZHANG Hai – feng*

(College of Natural Science，Jiamusi University，Jiamusi 154007，China)

Abstract: Using the perturbation method，the energy level problem of zero – order Hamiltonian at the double degeneracy quantum system was solved. And the second – order approximate solution of the energy level of the two – fold degeneracy system was given for zero – order energy level and wave function to solve. Finally，an analysis of the application example of given matrix element was carried out. The results show that the perturbation method，as a typical approximation method，can effectively solve the related energy level problem in quantum mechanics.

Key words: perturbation method; double degenerate; approximate solutions

?1994-2019 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved.　http://www.cnki.net