第五章 微扰理论

Monday, June 17, 2019 12:16

1、非简并定态微扰. $\hat{H} = \hat{H}^{(0)} + \hat{H}'$

能量一级修正：$E_n^{(1)} = \int \psi_n^{(0)*} \hat{H}' \psi_n^{(0)} d\tau = H'_{nn}$

波函数一级修正：$\psi_n^{(1)} = \sum_m{}' \frac{H'_{mn}}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \psi_m^{(0)}$

能量二级修正：$E_n^{(2)} = \sum_l{}' \frac{|H'_{ln}|^2}{E_n^{(0)} - E_l^{(0)}}$

受微扰体系的能量：$E_n = E_n^{(0)} + E_n^{(1)} + E_n^{(2)} + \cdots$

微扰方法只能用于计算低能级的修正.

2、简并微扰论

0级近似波函数：$\psi_n^{(0)} = \sum_{i=1}^{k} c_i^{(0)} \phi_i$

$$(\hat{H}^{(0)} - E_n^{(0)})\psi_n^{(1)} = E_n^{(1)} \sum_{i=1}^{k} c_i^{(0)} \phi_i - \sum_{i=1}^{k} c_i^{(0)} \hat{H}' \phi_i$$

$$\sum_{i=1}^{k} (\hat{H}'_{li} - E_n^{(1)} \delta_{li}) c_i^{(0)} = 0 \qquad (l = 1, 2, \cdots, k)$$

解 $\det |H'_{li} - E_n^{(1)} \delta_{li}| = 0$

若无重根，则简并完全消除.

3、变分法.

$\hat{H}$ 本征值 $E_0, E_1, E_2, \cdots$

本征函数 $\psi_0, \psi_1, \psi_2, \cdots$

任一态 $\psi = \sum_n a_n \psi_n$

因为可以推出：$E_0 \leq \int \psi^* \hat{H} \psi d\tau$

所以可以选取很多 ψ 并算出 $\hat{H}$ 的期望值，这些期望值中最小的一个最接近于 E_0

步骤：① 选取含有参量 λ 的尝试波函数 $\psi(\lambda)$，计算 $\bar{H} = \int \psi^* H \psi d\tau$

② $\frac{d\bar{H}(\lambda)}{d\lambda} = 0$

③ 求出 $H(\lambda)$ 最小值，结果就是 E_0 的近似值.

4、含时微扰论. $\hat{H}(t) = \hat{H}_0 + \hat{H}'(t)$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Phi = \hat{H}(t) \Phi$$

$$\Phi = \sum_n a_n(t) \Phi_n$$

$\Phi_n = \phi_n e^{-\frac{i}{\hbar}\varepsilon_n t}$ 是 $\hat{H}_0$ 的定态波函数

$$i\hbar \frac{d a_m(t)}{dt} = \sum_n a_n(t) H'_{mn}(t) e^{i\omega_{mn} t}$$

$\omega_{mn} = \frac{1}{\hbar}(\varepsilon_m - \varepsilon_n)$

方程的一级近似解：

$$a_m^{(1)}(t) = \frac{1}{i\hbar} \int_0^t H'_{mk}(t') e^{i\omega_{mk} t'} dt' \qquad (|k\rangle \to |m\rangle)$$

微扰下由 $\Phi_k \to \Phi_m$ 的概率为

$$W_{k\to m} = |a_m^{(1)}(t)|^2$$

5. 跃迁概率

单位时间内的跃迁概率（Fermi 黄金定则）：

$$w = \frac{W}{t} = \frac{2\pi}{\hbar} |H'_{mk}|^2 \rho(m)$$

$W = \sum_m |a_m^{(1)}(t)|^2 \to \int_{-\infty}^{\infty} |a_m^{(1)}(t)|^2 \rho(m) d\varepsilon_m$

共振现象：只有当外界微扰含有频率 ω_{mk} 时，体系才能从 Φ_k 态跃迁到 Φ_m 态.
这时吸收能量 $\hbar\omega_{mk}$

6、选择定则：

$$\begin{cases} \Delta l = l' - l = \pm 1 \\ \Delta m = m' - m = 0, \pm 1 \end{cases}$$