```
> restart;
```

```
===============================================================
|              РЕШЕНИЕ ЗАДАЧ ПО КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ             |
|           (В.М.ГАЛИЦКИЙ, Б.М.КОРНАКОВ, В.И.КОГАН.           |
|                 ЗАДАЧИ ПО КВАНТОВОЙ МЕХНИКЕ                  |
|                        Журавлев В.М.                         |
|          Ульяновский государственный университет, 2020      |
===============================================================
```

СТАЦИОНАРНАЯ ТЕОРИЯ ВОЗМУЩЕНИЙ БЕЗ ВЫРОЖДЕНИЯ

```
> with(plots):
  with(plottools):
```

Формат графиков

```
> frm:=axes=boxed,gridlines=true,labeldirections=[horizontal,vertical],labelfont=[TIMES,BOLD,16],titlefont=
  [TIMES,BOLD,20],font=[TIMES,BOLD,20],symbol=solidcircle,symbolsize=18,legendstyle=[font=["TIMES",BOLD,18],
  location=bottom],size=[900,600];
```

$$frm := axes = boxed, gridlines = true, labeldirections = [horizontal, vertical], labelfont = [TIMES, BOLD, 16], titlefont = [TIMES, BOLD, 20], font = [TIMES, BOLD, 20], symbol = solidcircle, symbolsize = 18, legendstyle = [font = ["TIMES", BOLD, 18], location = bottom], size = [900, 600] \quad (1)$$

ТЕОРИЯ ВОЗМУЩЕНИЙ БЕЗ ВЫРОЖДЕНИЯ

Возмущенное уравнение Шредингера

1. Будем называть стационарное уравнение Шредингера возмущенным, если его можно представить в таком общем виде:

$$\hat{H}\,\psi = \left(\hat{H}_0 + \hat{W}\right)\psi = E\psi,$$

где $\hat{H}_0$ – оператор Гамильтона невозмущенной системы, а $\hat{W}$ - оператор энергии возмущенной системы.

Будем рассматривать квантовые частицы в потенциальной яме.

Смысл представлять полную энергию системы в таком виде возникает тогда, когда имеется возможность точно решить уравнение Шредингера невозмущенной системы, т.е. уравнение:

$$\hat{H}_0\psi_n^{(0)} = E_n^{(0)}\psi_n^{(0)},$$

величина энергии возмущения является величиной первого порядка малости $\left|E_n^{(0)}\right| >> \left|\hat{W}\right|$

В этом случае можно воспользоваться методами общей теории возмущений для получения приближенных решений уравнений Шредингера исходной возмущенной задачи.

2. Для удобства будем представлять оператор энергии возмущения $\hat{W}$ в таком виде:
$\hat{W} = \epsilon\,\hat{V}$, где ϵ – числовой коэффициент первого порядка малости.
Тогда исходное уравнение можно записать в таком виде :

$$\left(\hat{H}_0 + \epsilon\,\hat{V}\right)\psi(x,\epsilon) = E(\epsilon)\psi(x,\epsilon)$$

Будем искать решение этого уравнения в виде рядов по малому параметру ϵ. Будем полагать :

$$\psi(x,\epsilon) = \psi_n(x,\epsilon) = \psi_n^{(0)}(x) + \epsilon\psi_n^{(1)}(x) + \epsilon^2\psi_n^{(2)}(x) + ...$$

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

В эти выражения входит номер уровня n, для которого ищется поправки первого, второго и т.д., порядка теории возмущений . Важным обстоятельством является то,
что **теория возмущений не должна приводить к перепутыванию уровней возмущенной задачи.**
Это означает, что **поправки к энергии должны быть значительно меньше разности энергий уровней.**
Подставляя ряды разложения $\psi_n(x,\epsilon)$ и $E_n(\epsilon)$ в уравнение Шредингера, находим :

$$\left(\hat{H}_0 + \epsilon\,\hat{V}\right)\left(\psi_n^{(0)}(x) + \epsilon\psi_n^{(1)}(x) + \epsilon^2\psi_n^{(2)}(x) + ...\right) =$$
$$= \left(E_n^{(0)} + \epsilon E_n^{(1)} + \epsilon^2 E_n^{(2)} + ...\right)\left(\psi_n^{(0)}(x) + \epsilon\psi_n^{(1)}(x) + \epsilon^2\psi_n^{(2)}(x) + ...\right)$$

Приравнивая нулю отдельные слагаемые этого уравнения при одинаковых степенях ϵ, находим :

$$(0):\ \hat{H}_0\psi_n^{(0)} = E_n^{(0)}\psi_n^{(0)},$$

$$(1):\ \hat{H}_0\psi_n^{(1)} + \hat{V}\,\psi_n^{(0)} = E_n^{(0)}\psi_n^{(1)} + E_n^{(1)}\psi_n^{(0)},$$

$$(2):\ \hat{H}_0\psi_n^{(2)} + \hat{V}\,\psi_n^{(1)} = E_n^{(0)}\psi_n^{(2)} + E_n^{(1)}\psi_n^{(1)} + E_n^{(2)}\psi_n^{(0)},$$

....

Уравнение в нулевом порядке соответствует невозмущенной задаче, решение которой, будем предполагать, нам известно.

Решение этих уравнений относительно $\psi_n^{(1)}(x), \psi_n^{(2)}(x)$, ...

будем искать в виде разложения этих функций по решениям невозмущенной задачи.

$$\psi_n^{(p)}(x) = \sum_{k=1}^{\infty} C_k^{(p)} \psi_k^{(0)}(x), \; p = 1, 2,$$

Первый порядок теории возмущений

Уравнение для первого порядка будет иметь такой вид :

$$\hat{H}_0 \sum_{k=1}^{\infty} C_k^{(1)} \psi_k^{(0)}(x) + \hat{V}\psi_n^{(0)} = E_n^{(0)} \sum_{k=1}^{\infty} C_k^{(1)} \psi_k^{(0)}(x) + E_n^{(1)}\psi_n^{(0)}.$$

Учитывая уравнение невозмущенной задачи, получаем :

$$\sum_{k=1}^{\infty} C_k^{(1)} \hat{H}_0 \psi_k^{(0)}(x) + \hat{V}\psi_n^{(0)} = E_n^{(0)} \sum_{k=1}^{\infty} C_k^{(1)} \psi_k^{(0)}(x) + E_n^{(1)}\psi_n^{(0)}$$

или

$$\sum_{k=1}^{\infty} C_k^{(1)} E_k^{(0)} \psi_k^{(0)}(x) + \hat{V}\psi_n^{(0)} = E_n^{(0)} \sum_{k=1}^{\infty} C_k^{(1)} \psi_k^{(0)}(x) + E_n^{(1)}\psi_n^{(0)}.$$

$$\sum_{k=1}^{\infty} C_k^{(1)} \left(E_k^{(0)} - E_n^{(0)}\right) \psi_k^{(0)}(x) = E_n^{(1)}\psi_n^{(0)} - \hat{V}\psi_n^{(0)}.$$

Умножим это уравнение на $\left(\psi_m^{(0)}(x)\right)^*$ и проинтегрируем по всему доступному пространству.

Это означает, что от уравнения вычисляется скалярное произведение на состояния $\psi_m^{(0)}(x)$.

Имеем :

$$\sum_{k=1}^{\infty} C_k^{(1)} \left(E_k^{(0)} - E_n^{(0)}\right) \int_{-\infty}^{\infty} \left(\psi_m^{(0)}(x)\right)^* \psi_k^{(0)}(x)\,dx =$$

$$= E_n^{(1)} \int_{-\infty}^{\infty} \left(\psi_m^{(0)}(x)\right)^* \psi_n^{(0)}(x)\,dx - \int_{-\infty}^{\infty} \left(\psi_m^{(0)}(x)\right)^* \hat{V}\psi_n^{(0)}(x)\,dx.$$

В другой форме записи :

$$\sum_{k=1}^{\infty} C_k^{(1)} \left(E_k^{(0)} - E_n^{(0)}\right) \left(\psi_m^{(0)}, \psi_k^{(0)}\right) = E_n^{(1)} \left(\psi_m^{(0)}, \psi_k^{(0)}\right) - \left(\psi_m^{(0)}, \hat{V}\psi_k^{(0)}\right)$$

Согласно основным постулатам, функции $\psi_m^{(0)}(x)$ ортонормированы, т.е.:

$$\left(\psi_m^{(0)}, \psi_k^{(0)}\right) = \int_{-\infty}^{\infty} \left(\psi_m^{(0)}(x)\right)^* \psi_n^{(0)}(x)\,dx = \delta_{mk} = \begin{cases} 1, & m = k \\ 0, & m \neq k \end{cases}.$$

Введем обозначение :

$$V_{mn} = \left(\psi_m^{(0)}, \hat{V}\psi_n^{(0)}\right) = \int_{-\infty}^{\infty} \left(\psi_m^{(0)}(x)\right)^* \hat{V}\psi_n^{(0)}(x)\,dx$$

Величины V_{km} называются матричными элементами оператора $\hat{V}$ в базисе волновых функций $\psi_m^{(0)}(x)$ невозмущенной задачи.

Теперь уравнение в первом порядке теории возмущений можно записать так :

$$\sum_{k=1}^{\infty} C_{k(n}^{(1)} \left(E_k^{(0)} - E_n^{(0)}\right) \delta_{mk} = E_n^{(1)}\delta_{nm} - V_{mn}$$

или

$$C_{m(n}^{(1)} \left(E_m^{(0)} - E_n^{(0)}\right) = E_n^{(1)}\delta_{nm} - V_{mn}$$

В случае $m = n$ эта система приводит к следующему уравнению :

$$E_n^{(1)} = V_{nn}. \qquad (1)$$

В случае $m \neq n$**, находим :**

$$C_{m(n}^{(1)} = -\frac{V_{mn}}{\left(E_m^{(0)} - E_n^{(0)}\right)}$$

Первое из этих уравнений позволяет вычислить поправку первого порядка к энергии :

$$E_n(\epsilon) \approx E_n^{(0)} + \epsilon E_n^{(1)} = E_n^{(0)} + \epsilon V_{nn}$$

Второе уравнение позволяет вычислить поправку к волновой функции. Именно :

$$\psi_n^{(1)}(x) = \sum_{m=1,\ m\neq n}^{\infty} C_{m(n}{}^{(1)}\,\psi_m^{(0)}(x) = \sum_{m=1,\ m\neq n}^{\infty} \frac{V_{mn}}{\left(E_n^{(0)} - E_m^{(0)}\right)}\,\psi_m^{(0)}(x)$$

$$\psi`n`(\epsilon, x) \approx \psi_n^{(0)}(x) + \epsilon\psi_n^{(1)}(x).$$

Второй порядок теории возмущений

$$\hat H_0\psi_n^{(2)} + \hat V\psi_n^{(1)} = E_n^{(0)}\psi_n^{(2)} + E_n^{(1)}\psi_n^{(1)} + E_n^{(2)}\psi_n^{(0)}$$

$$\sum_{k=1}^{\infty} C_{k(n)}{}^{(2)}\left(E_k^{(0)} - E_n^{(0)}\right)\psi_k^{(0)}(x) = E_n^{(2)}\psi_n^{(0)} + E_n^{(1)}\psi_n^{(1)} - \hat V\psi_n^{(1)}.$$

$$\sum_{k=1}^{\infty} C_{k(n}{}^{(2)}\left(E_k^{(0)} - E_n^{(0)}\right)\left(\psi_m^{(0)},\ \psi_k^{(0)}\right) =$$

$$= E_n^{(2)}\left(\psi_m^{(0)},\ \psi_n^{(0)}\right) + E_n^{(1)}\sum_{k=1,\ k\neq n}^{\infty} C_{k(n)}{}^{(1)}\left(\psi_m^{(0)}, \psi_k^{(0)}\right) - \sum_{k=1,\ k\neq n}^{\infty} C_{k(n)}{}^{(1)}\left(\psi_m^{(0)},\ \hat V\ \psi_k^{(0)}\right)$$

$$C_{m(n}{}^{(2)}\left(E_m^{(0)} - E_n^{(0)}\right) = E_n^{(2)}\ \delta_{nm} + E_n^{(1)} C^{(1)}`\_m(n)` - \sum_{k=1,\ k\neq n}^{\infty} C_{k(n)}{}^{(1)} V_{mk}$$

Подставляя выражения для $E_n^{(1)}$ и $C_{m(n)}{}^{(1)}$ из решения для первого порядка, находим :

$$C_{m(n}{}^{(2)}\left(E_m^{(0)} - E_n^{(0)}\right) = E_n^{(2)}\ \delta_{nm} + V_{nn}\frac{V_{mn}\left(1 - \delta_{nm}\right)}{\left(E_n^{(0)} - E_m^{(0)}\right)} - \sum_{k=1}^{\infty}\frac{V_{kn}}{\left(E_n^{(0)} - E_k^{(0)}\right)} V_{mk}$$

В случае $m = n$ **:**

$$E_n^{(2)} = -\sum_{k=1,\ k\neq n}^{\infty}\frac{V_{nk}V_{kn}}{\left(E_n^{(0)} - E_k^{(0)}\right)} = -\sum_{k=1,\ k\neq n}^{\infty}\frac{\left|V_{nk}\right|^2}{\left(E_n^{(0)} - E_k^{(0)}\right)}$$

В случае $m \neq n$:

$$C_{m(n}{}^{(2)} = -\sum_{k=1,\ k\neq n}^{\infty}\frac{V_{mk}V_{kn}}{\left(E_n^{(0)} - E_k^{(0)}\right)\left(E_n^{(0)} - E_m^{(0)}\right)}$$

ПРИМЕРЫ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ

Заготовки функций

```
> U0:=(x,a,b,U0,U1)->piecewise(x<-a,U0,-a<=x and x<=b, U1,U0);
  UW1:=(x,a,b,c,U0,U1,U2)->piecewise(x<a,U0,a<=x and x<=b,U1,b<=x and x<=c, U2,U0);
  UW2:=(x,a,b,U0,U1)->piecewise(x<-a,U0,-a<=x and x<=b, U1*sin(Pi*x/(b-a)),U0);
  UW3:=(x,a,b,U0,U1)->piecewise(x<-a,U0,-a<=x and x<=(b+a)/2,U0+U1*(x-a),(b+a)/2<x and x<=b,U0+U1*(b-x),U0);
  UW4:=(x,a,b,U0,U1)->piecewise(x<-a,U0,-a<=x and x<=b, U1*(cos(Pi*x/(b-a)))^2,U0);
```

$$U0 := (x, a, b, U0, U1) \rightarrow piecewise(x < -a, U0, -a \leq x \textbf{ and } x \leq b, U1, U0)$$

$$UW1 := (x, a, b, c, U0, U1, U2) \rightarrow piecewise(x < a, U0, a \leq x \textbf{ and } x \leq b, U1, b \leq x \textbf{ and } x \leq c, U2, U0)$$

$$UW2 := (x, a, b, U0, U1) \rightarrow piecewise\left(x < -a, U0, -a \leq x \textbf{ and } x \leq b, U1\sin\left(\frac{\pi x}{b-a}\right), U0\right)$$

$$UW3 := (x, a, b, U0, U1) \rightarrow piecewise\left(x < -a, U0, -a \leq x \textbf{ and } x \leq \frac{1}{2}b + \frac{1}{2}a, U0 + U1(x-a), \frac{1}{2}b + \frac{1}{2}a < x \textbf{ and } x \leq b, U0 + U1(b-x), U0\right)$$

$$UW4 := (x, a, b, U0, U1) \rightarrow piecewise\left(x < -a, U0, -a \leq x \textbf{ and } x \leq b, U1\cos\left(\frac{\pi x}{b-a}\right)^2, U0\right) \qquad (2)$$

```
> PicU0:=plot(U0(x,0,4,6,0),x=-3..7,frm,color=blue,filled=true,thickness=5,transparency=0.5,labels=["x","U(x)"],
  view=[-3..7,0..5]):
  PicUW1:=plot(UW1(x,1,3,6,0,1,0),x=0..7,frm,color=gold,filled=true,thickness=5,transparency=0.7,title=
  "Возмущенная б.г.я., задача 8.1b",labels=["x","U(x)"]):
  PicUW2:=plot(UW2(x,0,4,0,1),x=0..7,frm,color=magenta,filled=true,thickness=5,transparency=0.7,title=
  "Возмущенная б.г.я., дополнительная задача",labels=["x","U(x)"]):
  PicUW3:=plot(UW3(x,0,4,0,0.5),x=0..7,frm,color=magenta,filled=true,thickness=5,transparency=0.7,title=
  "Возмущенная б.г.я, задача 8.1a ",labels=["x","U(x)"]):
  PicUW4:=plot(UW4(x,0,4,0,0.5),x=0..7,frm,color=magenta,filled=true,thickness=5,transparency=0.7,title=
  "Возмущенная б.г.я, задача 8.5 ",labels=["x","U(x)"]):
```

Решение задач

Задача 8.1a,b ГКК

8.1. Для частицы, находящейся в бесконечно глубокой потенциальной яме ширины a $(0 < x < a)$, найти в первом

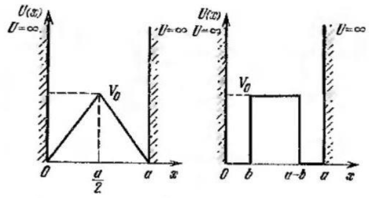


Рис. 16.

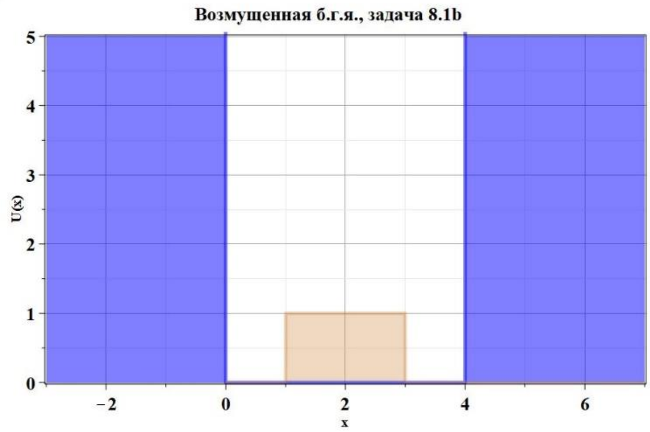
порядке теории возмущений смещение энергетических уровней под действием возмущения вида (рис. 16):

а) $V(x) = \frac{V_0}{a}(a - |2x - a|)$;

б) $V(x) = \begin{cases} V_0, & b < x < a - b, \\ 0, & 0 < x < b, \quad a - b < x < a. \end{cases}$

Указать условия применимости полученного результата,

```
> display(PicU0,PicUW1);
```



Собственные ортонормированные волновые функции для бесконечно глубокой ямы и собственные энергии будут решениями для нулевого порядка:

$$\psi_n^{(0)}(x; E) = \sqrt{\frac{2}{a}} \cdot \sin\left(\frac{\pi n}{a} x\right)$$

$$E_n^{(0)} = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\pi n}{a}\right)^2$$

Поправка к потенциальной энергии имеет такой вид :

$$V(x) = \begin{cases} V0, & b \le x \le a - b \\ 0, \ 0 < x < b, & b - a < x < a \end{cases}$$

Вычисляем матричные элементы для задачи 8.1 a для случая $\boldsymbol{m \neq n}$. По определению :

$$V_{mn} = \left(\psi_m^{(0)}, \ \widehat{V}\ \psi_n^{(0)}\right) = \int_0^a \left(\psi_m^{(0)}(x)\right)^* V(x)\psi_n^{(0)}(x)\,\mathrm{d}x = \frac{2}{a} V0 \int_b^{a-b} \sin\left(\frac{\pi n}{a} x\right)\sin\left(\frac{\pi m}{a} x\right)\mathrm{d}x$$

Используем тригонометрическое тождество :

$$\sin\left(\frac{\pi n}{a} x\right)\sin\left(\frac{\pi m}{a} x\right) = \frac{1}{2}\left[\cos\left(\frac{\pi n}{a} x - \frac{\pi m}{a} x\right) - \cos\left(\frac{\pi n}{a} x + \frac{\pi m}{a} x\right)\right]$$

Тогда :

$$V_{mn}=\frac{1}{a}V0\int_b^{a-b}\left[\cos\left(\frac{\pi(n-m)}{a}x\right)-\cos\left(\frac{\pi(n+m)}{a}x\right)\right]dx=$$

$$=\frac{1}{a}V0\frac{a}{\pi(n-m)}\left[\sin\left(\frac{\pi(n-m)\cdot(a-b)}{a}\right)-\sin\left(\frac{\pi(n-m)\cdot b}{a}\right)\right]-$$

$$-\frac{1}{a}V0\frac{a}{\pi(n+m)}\left[\sin\left(\frac{\pi(n+m)\cdot(a-b)}{a}\right)-\sin\left(\frac{\pi(n+m)\cdot b}{a}\right)\right]$$

Воспользуемся тождествами :

===

$$\sin\left(\frac{\pi(n-m)\cdot(a-b)}{a}\right)=\sin(\pi(n-m))\cos\left(\frac{\pi(n-m)\cdot b}{a}\right)-\cos(\pi(n-m))\sin\left(\frac{\pi(n-m)\cdot b}{a}\right)=$$

$$=-(-1)^{n-m}\sin\left(\frac{\pi(n-m)\cdot b}{a}\right),$$

$$\sin\left(\frac{\pi(n+m)\cdot(a-b)}{a}\right)=\sin(\pi(n+m))\cos\left(\frac{\pi(n+m)\cdot b}{a}\right)-\cos(\pi(n+m))\sin\left(\frac{\pi(n+m)\cdot b}{a}\right)=$$

$$=-(-1)^{n+m}\sin\left(\frac{\pi(n+m)\cdot b}{a}\right).$$

$$\sin(\pi(n-m))=\sin(\pi(n+m))=0\ (\textit{для целых } m \text{ и } n).$$

Тогда имеем :

$$V_{mn}=\frac{1}{a}V0\left(\frac{a}{\pi(n-m)}\left[1-(-1)^{n-m}\right]\sin\left(\frac{\pi(n-m)\cdot b}{a}\right)-\right.$$

$$\left.-\frac{a}{\pi(n+m)}\left[1-(-1)^{n+m}\right]\sin\left(\frac{\pi(n+m)\cdot b}{a}\right)\right)=$$

$$=\frac{1}{a}V0\left(\frac{a}{\pi(n-m)}\sin\left(\frac{\pi(n-m)\cdot b}{a}\right)-\frac{a}{\pi(n+m)}\sin\left(\frac{\pi(n+m)\cdot b}{a}\right)\right)\left[1-(-1)^{n+m}\right]$$

Здесь использовано тождество : $\left[1-(-1)^{n+m}\right]=\left[1-(-1)^{n-m}\right]$ (числа $m+n$ и $n-m$ одновременно являются либо четными, либо нечетными) .

Следовательно, коэффициенты поправки к волновой функции уровня с номером n будут иметь такой вид :

$$C_{m(n}^{(1)}=\frac{V_{mn}}{\left(E_n^{(0)}-E_m^{(0)}\right)}=$$

$$=\frac{2\,m\,V0}{\hbar^2}\,\frac{\left(\frac{1}{\pi(n-m)}\sin\left(\frac{\pi(n-m)\cdot b}{a}\right)-\frac{1}{\pi(n+m)}\sin\left(\frac{\pi(n+m)\cdot b}{a}\right)\right)\left[1-(-1)^{n+m}\right]}{\pi^2\left(n^2-m^2\right)}$$

Поправка первого порядка к энергии :

$$E_n^{(1)}=V_{nn}=\left(\psi_n^{(0)},\ \hat{V}\ \psi_n^{(0)}\right)=\int_0^a\left(\psi_n^{(0)}(x)\right)^*V(x)\psi_n^{(0)}(x)dx=\frac{2}{a}V0\int_b^{a-b}\left(\sin\left(\frac{\pi n}{a}x\right)\right)^2dx=$$

$$=\frac{1}{a}V0\int_b^{a-b}\left(1-\cos\left(\frac{2\pi n}{a}x\right)\right)dx=\frac{1}{a}V0(a-2b)-\frac{1}{a}V0\frac{a}{2\pi n}\left[\sin\left(\frac{2\pi n}{a}(a-b)\right)-\sin\left(\frac{2\pi n}{a}b\right)\right]=$$

$$=V0\left(1-\frac{2b}{a}\right)-\frac{V0}{2\pi n}\left[-\cos(2\pi n)\sin\left(\frac{2\pi n}{a}b\right)-\sin\left(\frac{2\pi n}{a}b\right)\right]$$

Окончательно, поскольку :

$$\cos(2\pi n)=1$$

находим :

$$E_n^{(1)}=V0\left(1-\frac{2b}{a}\right)+\frac{V0}{\pi n}\sin\left(\frac{2\pi n}{a}b\right)$$

Проверям:

```
> assume(n,'integer'); # Указываем, что n - целое число
  assume(m,'integer'); # Указываем, что m - целое число
> K[1,n]:=combine[trig]((2*V0/a)*int(sin(Pi*n*x/a)*sin(Pi*m*x/a),x=b..a-b));
```

$$K_{1,n\sim} := \frac{1}{\pi m\sim^2 - \pi n\sim^2}\left(-(-1)^{m\sim+n\sim} V0\, m\sim \sin\left(\frac{\pi b m\sim - \pi b n\sim}{a}\right) - (-1)^{m\sim+n\sim} \sin\left(\frac{\pi b m\sim - \pi b n\sim}{a}\right) V0\, n\sim - (-1)^{m\sim+n\sim} \sin\left(\frac{\pi b m\sim + \pi b n\sim}{a}\right) V0\, n\sim + (-1)^{m\sim+n\sim} V0\, m\sim \sin\left(\frac{\pi b m\sim + \pi b n\sim}{a}\right) - \sin\left(\frac{\pi b m\sim - \pi b n\sim}{a}\right) V0\, m\sim - \sin\left(\frac{\pi b m\sim - \pi b n\sim}{a}\right) V0\, n\sim - \sin\left(\frac{\pi b m\sim + \pi b n\sim}{a}\right) V0\, n\sim + \sin\left(\frac{\pi b m\sim + \pi b n\sim}{a}\right) V0\, m\sim\right) \quad (3)$$

```
> E[1,n]:=combine[trig]((2*V0/a)*int(sin(Pi*n*x/a)^2,x=b..a-b));
```

$$E_{1,n\sim} := \frac{\pi V0\, a\, n\sim - 2\pi V0\, b\, n\sim + \sin\left(\frac{2\pi b n\sim}{a}\right) V0\, a}{\pi n\sim a} \quad (4)$$

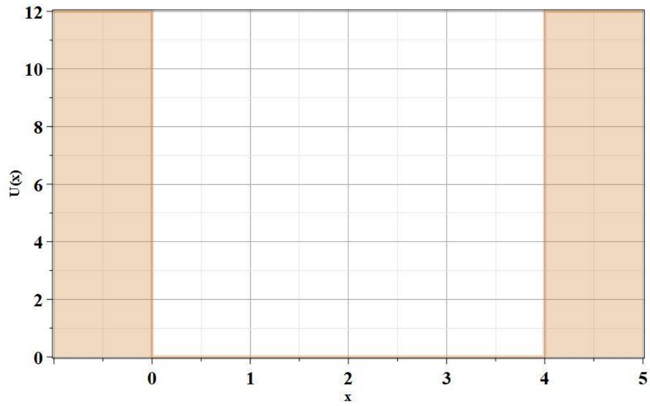
```
> E1:=(n,a,b,V0)->(Pi*V0*a*n-2*Pi*V0*b*n+sin(2*Pi*b*n/a)*V0*a)/(Pi*n*a);
```

$$E1 := (n, a, b, V0) \rightarrow \frac{\pi V0\, a\, n - 2\pi V0\, b\, n + \sin\left(\frac{2\pi b n}{a}\right) V0\, a}{\pi n a} \quad (5)$$

```
>
> U4:=(x,a,b,U0,U1,U2)->piecewise(x<a,U0,a<=x and x<=b, U1,U2);
```

$$U4 := (x, a, b, U0, U1, U2) \rightarrow piecewise(x < a, U0, a \le x \text{ and } x \le b, U1, U2) \quad (6)$$

```
> picU41:=plot(U4(x,0,4,12,0.0,12),x=-1..5,frm,color=gold,filled=true,thickness=5,transparency=0.7,labels=["x",
  "U(x)"]);
```



Строим уровни энергии нескольких первых стационарных состояний с фиксированной энергией.

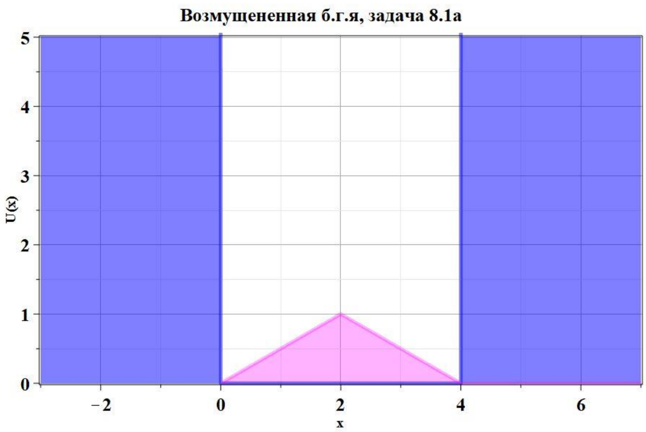
```
> E:=(n,a,q)->q*(Pi*n/a)^2;
```

$$E := (n, a, q) \rightarrow \frac{q \pi^2 n^2}{a^2} \quad (7)$$

```
> q:=1;b:=1;V0:=1;a:=4;
> pE:=plot([E(1,a,q),E(2,a,q),E(3,a,q),E(4,a,q)],x=0..a,color=red,thickness=5):
  txtBGEn:=textplot([[1,10.3,"n=4"],[1,6.1,"n=3"],[1,3.1,"n=2"],[1,1.1,"n=1"]],frm,color=[red,blue,"DarkGreen",
  magenta],legend=["n=1","n=2","n=3","n=4"]):
> pE1:=plot([E(1,a,q)+E1(1,a,b,V0),E(2,a,q)+E1(2,a,b,V0),E(3,a,q)+E1(3,a,b,V0),E(4,a,q)+E1(4,a,b,V0)],x=0..a,
  color=magenta,thickness=4,linestyle=dash,title="Энергетические уровни с поправками к энергии первого
  порядка",legend=["n=1","n=2","n=3","n=4"]):
  txtBGEn:=textplot([[1,10.8,"n=4"],[1,6.5,"n=3"],[1,3.5,"n=2"],[1,1.8,"n=1"]],frm,color=[red,blue,"DarkGreen",
  magenta]):
> display(pE,picU41,txtBGEn,pE1);
```

Решение задачи 8.1а постройте самостоятельно

```
> display(PicU0,PicUW3);
```



Задача 8.4 ГКК

8.4. Представим гамильтониан осциллятора в виде

$$\hat{H}=\frac{\hat{p}^2}{2m}+\frac{kx^2}{2}+\frac{\alpha x^2}{2}.$$

Рассматривая формально слагаемое $\alpha x^2/2$ как возмущение, рассчитать в первых двух порядках теории возмущений сдвиг энергетических уровней осциллятора. Ответ сравнить с точным решением. Каково условие сходимости ряда теории возмущений?

Согласно условию задачи, невозмущенной системой является гармонический осциллятор с частотой $\omega=\sqrt{\frac{k}{m}}$.

Возмущенная часть потенциальной энергии имеет вид :

$$W(x)=\frac{\alpha x^2}{2}$$

Решение этой задачи можно получить без труда, если увидеть, что возмущенная энергия имеет ту же форму, что и потенциальная энергия гармонического осциллятора.

Поэтому возмущение приводит лишь к изменению собственной частоты осциллятора :

$$\Omega=\sqrt{\omega^2+\frac{\alpha}{m}}.$$

Задачей данной работы является проверка того, как работает приближенная теория возмущений в такой ситуации. Результаты, полученные с помощью теории возмущений, можно сравнить с точной теорией.

Согласно теории квантового гармонического осциллятора (**КГО**), волновые функции невозмущенного состояния системы, описываются волновыми функциями :

$$\psi_n^{(0)}(x)=H_n(x)e^{-\frac{x^2}{2x_0^2}},$$

где $H_n(x)$ – полиномы Эрмита. Энергетические уровни невозмущенной задачи :

$$E_n^{(0)}=\hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right),\ n=0,\,1,\,2,...$$

Параметр α – величина первого порядка малости $(\epsilon=\alpha)$.

Тогда матричные элементы возмущения имеют такой вид :

$$V_{mn}=\left(\psi_n^{(0)},V(x)\,\psi_k^{(0)}\right)=\frac{1}{2}\left(\psi_n^{(0)},x^2\,\psi_k^{(0)}\right).$$

Вычисления с таким возмущением аналогичны расчетам дисперсии. Из теории **КГО** имеем :

$$\hat{x}=\hat{z}\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}=\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\sqrt{2}\,\frac{1}{2}(\hat{a}^++\hat{a})$$

Отсюда:

$$V_{nk}=\frac{1}{4}\frac{\hbar}{m\omega}\left(\psi_n^{(0)},(\hat{a}^++\hat{a})^2\,\psi_k^{(0)}\right)=$$

$$=\frac{1}{4}\frac{\hbar}{m\omega}\left(\psi_n^{(0)},\left((\hat{a}^+)^2+\hat{a}^+\hat{a}+\hat{a}\hat{a}^++\hat{a}^2\right)\psi_k^{(0)}\right)=$$

$$=\frac{1}{4}\frac{\hbar}{m\omega}\sqrt{k+1}\sqrt{k+2}\left(\psi_n^{(0)},\psi_{k+2}^{(0)}\right)+\frac{1}{4}\frac{\hbar}{m\omega}k\left(\psi_n^{(0)},\psi_k^{(0)}\right)+$$

$$+\frac{1}{4}\frac{\hbar}{m\omega}(k+1)\left(\psi_n^{(0)},\psi_k^{(0)}\right)+\frac{1}{4}\frac{\hbar}{m\omega}\sqrt{k-1}\sqrt{k}\left(\psi_n^{(0)},\psi_{k-2}^{(0)}\right)=$$

$$=\frac{1}{4}\frac{\hbar}{m\omega}\left(\sqrt{k+1}\sqrt{k+2}\,\delta_{n,k+2}+(2k+1)\psi_k^{(0)}(x)\right)=$$

$$=\frac{1}{4}\frac{\hbar}{m\omega}\left(\sqrt{k+1}\sqrt{k+2}\,\delta_{n,k+2}+(2k+1)\delta_{n,k}+\sqrt{k-1}\sqrt{k}\,\delta_{n,k-2}\right).$$

Первый порядок теории возмущений

Поправка к энергии первого порядка :

$$E_n^{(1)}=V_{nk}=\frac{1}{4}\frac{\hbar}{m\omega}\left(\psi_n^{(0)},\ \left(\hat{a}^{+}+\hat{a}\right)^2\psi_n^{(0)}\right)=\frac{1}{4}\frac{\hbar}{m\omega}(2n+1)$$

Отсюда :

$$E_n\approx E_n^{(0)}+\alpha E_n^{(1)}=\hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)+\alpha\frac{1}{4}\frac{\hbar}{m\omega}(2n+1)=\hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)\left(1+\alpha\frac{1}{2m\omega^2}\right)$$

Точное же значение имеет такой вид :

$$E_n=\hbar\Omega\left(n+\frac{1}{2}\right)=\hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)\sqrt{1+\frac{\alpha}{m\omega^2}}\approx\hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)\left(1+\alpha\frac{1}{2m\omega^2}\right)$$

Поправка к волновой функции первого порядка :

$$\psi_n^{(1)}(x)=\sum_{m=1,\ m\neq n}^{\infty}C_{m(n}^{(1)}\psi_m^{(0)}(x)=$$

$$=\frac{1}{4}\frac{\hbar}{m\omega}\sum_{k=1,\,k\neq n}^{\infty}\frac{1}{\left(E_n^{(0)}-E_k^{(0)}\right)}\left(\sqrt{k+1}\sqrt{k+2}\,\delta_{n,k+2}+(2k+1)\delta_{n,k}+\sqrt{k-1}\sqrt{k}\,\delta_{n,k-2}\right)\psi_k^{(0)}(x)=$$

$$=\frac{1}{4}\frac{\hbar}{m\omega}\left(\frac{1}{\left(E_n^{(0)}-E_{n-2}^{(0)}\right)}\sqrt{n-1}\sqrt{n}\,\psi_{n-2}^{(0)}(x)+\frac{1}{\left(E_n^{(0)}-E_{n-2}^{(0)}\right)}\sqrt{n+1}\sqrt{n+2}\,\psi_{n+2}^{(0)}(x)\right)$$

Здесь использовано свойство символа Кронекера :

$$\delta_{n,k}=\begin{cases}1, & n=k\\ 0, & n\neq k\end{cases}$$

В сумме

$$\sum_{k=1}^{\infty}A_k\delta_{n,k}=A_n$$

остается только одно слагаемое, соответствующее значению $k=n$. В суммах при вычислении $\psi_n^{(1)}(x)$ пропускалось значение $n=k$, но оставались суммы со значениями $n=k-2$ и $n=k+2$.

==

Второй порядок теории возмущений

Для второго порядка имеем (смотрите теорию выше и учебники):

В случае $m=n$:

$$E_n^{(2)}=-\sum_{k=1,\,k\neq n}^{\infty}\frac{V_{nk}V_{kn}}{\left(E_n^{(0)}-E_k^{(0)}\right)}=-\sum_{k=1,\,k\neq n}^{\infty}\frac{\left|V_{nk}\right|^2}{\left(E_n^{(0)}-E_k^{(0)}\right)}$$

В случае $m\neq n$:

$$C_{m(n}^{(2)}=-\sum_{k=1,\,k\neq n}^{\infty}\frac{V_{mk}V_{kn}}{\left(E_n^{(0)}-E_k^{(0)}\right)\left(E_n^{(0)}-E_m^{(0)}\right)}$$

Вычислим поправку к энергии второго порядка:

$$E_n^{(2)}=$$

$$-\frac{1}{16}\left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^2\sum_{k=1,\,k\neq n}^{\infty}\frac{1}{\left(E_n^{(0)}-E_k^{(0)}\right)}\left(\sqrt{k+1}\sqrt{k+2}\,\delta_{n,k+2}+(2k+1)\delta_{n,k}+\sqrt{k-1}\sqrt{k}\,\delta_{n,k-2}\right)\left(\sqrt{n+1}\sqrt{n+2}\,\delta_{kn+2,2}+(2n$$

$$+1)\delta_{kn}+\sqrt{n-1}\sqrt{n}\,\delta_{k,n-2}\right)=$$

$$=-\frac{1}{16}\left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^2\sum_{k=1,\,k\neq n}^{\infty}\frac{\delta_{nk+2}\,\delta_{kn-2}}{\left(E_n^{(0)}-E_k^{(0)}\right)}\sqrt{k+1}\sqrt{k+2}\sqrt{n-1}\sqrt{n}\ --\frac{1}{16}\left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^2\sum_{k=1,\,k\neq n}^{\infty}\frac{\delta_{nk-2}\,\delta_{kn+2-2}}{\left(E_n^{(0)}-E_k^{(0)}\right)}\sqrt{k-1}\sqrt{k}\sqrt{n+1}\sqrt{n+2}.$$

Остальные слагаемые равны нулю по следующим причинам :

1. В сумме пропущено значение $n=k$;
2. Символы Кронекера $\delta_{n,k+2}$ и $\delta_{k,n+2}$ обращаются в 1 при несовпадающих условиях – первое при $n=k+2$, а второе при $n=k-2$. Поэтому соответствующие слагаемые пропадают в сумме.
3. Аналогино пропадают слагаемые с произведением $\delta_{n\,k-2}\delta_{kn-2}$.

Окончательно находим :

$$E_n^{(2)} = -\frac{1}{16}\left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^2 \frac{(n-1)n}{\left(E_n^{(0)} - E_{n-2}^{(0)}\right)} - -\frac{1}{16}\left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^2 \frac{(n+1)(n+2)}{\left(E_n^{(0)} - E_{n+2}^{(0)}\right)} =$$

$$= -\frac{1}{16}\left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^2 \frac{(n-1)n}{\hbar\omega\left(\left(n+\frac{1}{2}\right) - \left(n-2+\frac{1}{2}\right)\right)} - \frac{1}{16}\left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^2 \frac{(n+1)(n+2)}{\hbar\omega\left(\left(n+\frac{1}{2}\right) - \left(n+2+\frac{1}{2}\right)\right)} =$$

$$= \frac{1}{32\,\hbar\omega}\left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^2 ((n+1)(n+2) - (n-1)n) = \frac{1}{16\,\hbar\omega}\left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^2 (2n+1)$$

Поправку к волновой функции второго порядка вычислите самостоятельно !

Задача 8.9 ГКК

8.9. Плоский ротатор с моментом инерции I и электрическим дипольным моментом $\mathbf{d}$ помещен в однородное электрическое поле $\mathcal{E}_0$, лежащее в плоскости вращения. Рассматривая действие поля как возмущение, найти поляризуемость основного состояния ротатора.

Плоский ротатор - это квантовая система, вращающаяся вокруг одной своей оси. Такая система в данной задаче представляет собой невозмущенную систему. Момент инерции этой системы обозначим через J. Ось, вокруг которой происходит вращение, будем считать ось z. Тогда классическая энергия вращения тела вокруг оси z может быть записана в таком виде:

$$E = J\frac{\omega^2}{2}$$

Если ввести величину момента импульса вращения тела: $L_z = J\omega$, то формула для энергии примет такой вид :

$$E = \frac{(L_z)^2}{2J}$$

При переходе к квантовой механике момент импульса частицы заменяется на оператор момента импульса $\hat{L}_z$.

Проекция момента импульса на ось z имеет такой вид :

$$\hat{L}_z = [\vec{x} \times \vec{p}]_z = -i\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right) = (\hat{x}\,\hat{p}_y - \hat{x}\,\hat{p}_x)$$

В полярной системе координат проекция оператора импульса на ось z можно записать так:

$$\hat{L}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi},$$

где φ – азимутальный угол в плоскости вращения ротатора.

Оператор полной энергии вращения (оператор Гамильтона) ротатора имеет такой вид :

$$\hat{H}_0 = \frac{1}{2J}\hat{L}_z^2 = -\frac{\hbar^2}{2J}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}$$

Стационарное уравнение Шредингера для плоского ротатора можно теперь записать так :

$$\hat{H}_0\psi_m^{(0)}(\varphi) = \frac{1}{2J}\hat{L}_z^2\psi_n^{(0)}(\varphi) = -\frac{\hbar^2}{2J}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\psi_n^{(0)}(\varphi) = E\psi_n^{(0)}(\varphi)$$

Это уравнение можно переписать так :

$$-\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\psi_m^{(0)}(\varphi) = m^2\psi_m^{(0)}(\varphi),$$

где m – магнитное квантовое число – целое число нумерующее значения проекции орбитального момента на ось z.

Соответствующие невозмущенные волновые функции и уровни энергии плоского ротатора равны :

$$\psi_m^{(0)}(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im\varphi}, \quad E_m^{(0)} = \frac{\hbar^2}{2J}m^2, \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots$$

Если ротатор заряжен, то в случае наличия электрического поля, лежащего в плоскости вращения, потенциальная энергия взаимодействия ротатора с этим полем имеет такой вид :

$$W(\varphi) = -e(\vec{E}, \vec{r}),$$

где e – электрический заряд ротатора, $\vec{E}$ – напряженность электрического поля, $\vec{r}$ – радиус-вектор в центр заряда из начала координат. Без ограничения общности полагая, что поле направлено вдоль ось x, находим :

$$W(\varphi) = -erE\cos(\varphi).$$

Здесь $d = er$ – дипольный момент ротатора, $E = |\vec{E}|$.

В результате полный оператор энергии будет иметь такой вид :

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + W(\phi)$$

Считая величину $\epsilon = erE$ малой, можем найти поправки к энергии и волновым функциям ротатора в таком поле.

Первый порядок теории возмущений

$$V_{mk}=\left(\psi_m^{(0)},\,V(\varphi)\psi_k^{(0)}\right)=\int_0^{2\pi}\left(\psi_m^{(0)}(\varphi)\right)^{*}V(\varphi)\psi_k^{(0)}(\varphi)\,d\varphi=\frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi}\cos(\varphi)e^{i(k-m)\varphi}d\varphi=$$

$$=\frac{1}{4\pi}\int_0^{2\pi}\left(e^{i\varphi}+e^{-i\varphi}\right)e^{i(k-m)\varphi}d\varphi=\frac{1}{4\pi}\int_0^{2\pi}\left(e^{i(k-m+1)\varphi}+e^{i(k-m-1)\varphi}\right)d\varphi=\frac{1}{2}\left(\delta_{k,m-1}+\delta_{k,m+1}\right).$$

При вычислении последних интегралов использовалось свойство равенства нулю интегралов от косинусов и синусов по периоду. Эти интегралы не равны нулю только в случае, если показатель экспоненты равен нулю. Поэтому первый интеграл равен нулю, если $k-m+1=0$, а второй - если $k-m-1=0$.
В этих случаях интеграл равен 2π.

Волновые функции первого порядка будут иметь такой вид :

$$\psi_m^{(1)}(\varphi)=\sum_{k=1,\,m\neq k}^{\infty}C_{k(m}^{(1)}\,\psi_k^{(0)}(x)=\frac{1}{2}\sum_{k=1,\,m\neq k}^{\infty}\frac{\delta_{k,m-1}+\delta_{k,m+1}}{E_m^{(0)}-E_k^{(0)}}\,\psi_k^{(0)}(\varphi)=$$

$$=\frac{1}{2\left(E_m^{(0)}-E_{m-1}^{(0)}\right)}\psi_{m-1}^{(0)}(\varphi)+\frac{1}{2\left(E_m^{(0)}-E_{m+1}^{(0)}\right)}\psi_{m+1}^{(0)}(\varphi)=$$

$$=\frac{J}{\hbar^2\sqrt{2\pi}}\left(\frac{e^{i\varphi}}{m^2-(m-1)^2}+\frac{e^{-i\varphi}}{m^2-(m+1)^2}\right)e^{im\varphi}=\frac{J}{\hbar^2\sqrt{2\pi}}\,\frac{(2m+1)e^{i\varphi}-(2m-1)e^{-i\varphi}}{4m^2-1}e^{im\varphi}.$$

$=$

Поправка к энергии в первом порядке равна :

$$E_m^{(1)}=V_{mm}=\int_0^{2\pi}\left(\psi_m^{(0)}(\varphi)\right)^{*}V(\varphi)\psi_m^{(0)}(\varphi)\,d\varphi=\frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi}\cos(\varphi)\,d\varphi=0$$

Второй порядок теории возмущений

$$E_m^{(2)}=-\sum_{k=1,\,k\neq m}^{\infty}\frac{V_{mk}V_{km}}{\left(E_m^{(0)}-E_k^{(0)}\right)}=-\frac{1}{4}\sum_{k=1,\,k\neq m}^{\infty}\frac{\left(\delta_{k,m-1}+\delta_{k,m+1}\right)\left(\delta_{m,k-1-1}+\delta_{m,k+1+1}\right)}{\left(E_m^{(0)}-E_k^{(0)}\right)}=$$

$$=-\frac{1}{4}\sum_{k=1,\,k\neq m}^{\infty}\frac{\left(\delta_{k,m-1}+\delta_{k,m+1}\right)}{\left(E_m^{(0)}-E_k^{(0)}\right)}=-\frac{J}{4\hbar^2}\left(\frac{1}{\left(E_m^{(0)}-E_{m-1}^{(0)}\right)}+\frac{1}{\left(E_m^{(0)}-E_{m+1}^{(0)}\right)}\right)=$$

$$=-\frac{J}{2\hbar^2}\,\frac{1}{4m^2-1}$$

Задача 8.3 ГКК (самостоятельно)

8.3. На заряженный линейный осциллятор наложено однородное электрическое поле $\mathcal{E}$, направленное вдоль оси колебаний. Рассматривая действие электрического поля как возмущение, рассчитать в первых двух порядках теории возмущений сдвиг энергетических уровней осциллятора. Полученный результат сравнить с точным решением (см. 2.6).

Потенциальная энергия для однородного внешнего поля E имеет вид: W(x)=-q*E*x.
Необходимо вычислить поправки в первом порядке и во втором.

===

Задача 8.5 ГКК

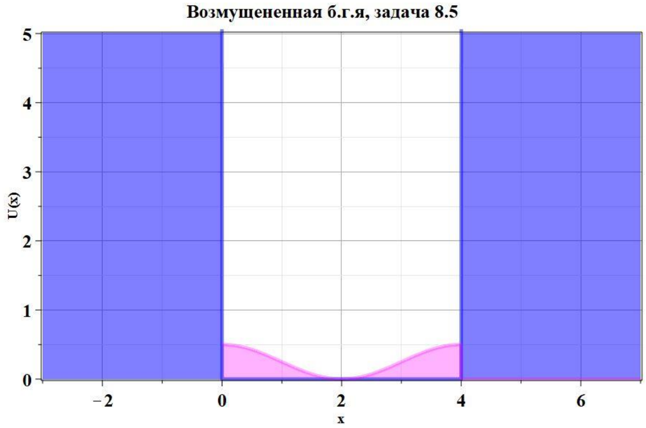
8.5. На частицу в бесконечно глубокой потенциальной яме ширины a $(0 < x \le a)$ наложено возмущение вида

$$V(x)=V_0\cos^2\frac{\pi x}{a}.$$

Рассчитать изменение энергетических уровней частицы в первых двух порядках теории возмущений.

Постановка задачи

```
> display(PicU0,PicUW4);
```



Данные нулевого порядка те же, что и в задаче 8.1.

$$\psi_n^{(0)}(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \cdot \sin\left(\frac{\pi n}{a} x\right)$$

$$E_n^{(0)} = \frac{\hbar^2}{2\,m}\left(\frac{\pi n}{a}\right)^2$$

Потенциальная энергия возмущения :

Потенциальная энергия возмущения :

$$V(x) = V0\left(\cos\left(\frac{\pi x}{a}\right)\right)^2$$

Величину V0 полагаем первого порядка малости.

Проведите расчеты с помощью *Maple* и прямыми расчетами аналитически.

\>

Задача 8.6 ГКК

8.7. Найти в первых двух порядках теории возмущений сдвиг энергетических уровней частицы в условиях задачи 8.1 под действием возмущения $V(x) = \alpha\delta(x - a/2)$. Указать условия применимости полученного результата.

Дополнительная задача

Решить задачу 8.1 с потенциалом возмущения :

$$W(x) = V0\sin\left(\frac{\pi x}{a}\right)$$

```
> display(PicU0,PicUW2);
```