

УДК 530.145

## О СТАЦИОНАРНОЙ ТЕОРИИ ВОЗМУЩЕНИЙ В СЛУЧАЕ ПОТЕНЦИАЛА-РЯДА

В.Н. Капшай<sup>1</sup>, Л.Д. Корсун<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Гомельский государственный университет им. Ф. Скорины, Гомель

<sup>2</sup>Гомельский государственный технический университет им. П.О. Сухого, Гомель

## THE STATIONARY PERTURBATION THEORY IN CASE OF A POTENTIAL-SERIES

V.N. Kapshai<sup>1</sup>, L.D. Korsun<sup>2</sup>

<sup>1</sup>F. Scorina Gomel State University, Gomel

<sup>2</sup>P. Sukhoi State Technical University, Gomel

Процедура построения стационарной теории возмущений для уравнения Шредингера и вычисления поправок к спектру энергий и соответствующим волновым функциям реализована в случае потенциала, представленного в виде ряда по степеням малого параметра (потенциала-ряда). В качестве физического примера рассмотрено применение полученной схемы для ангармонического осциллятора.

**Ключевые слова:** стационарная теория возмущений, уравнение Шредингера, волновая функция, энергетический спектр, потенциал, поправка, ангармонический осциллятор.

The procedure for constructing of stationary perturbation theory for the Schrodinger equation and corrections to the energy spectrum and corresponding wave functions is implemented in case of the potential, represented in the form of a series in powers of a small parameter (potential-series). The application of the obtained scheme for the anharmonic oscillator is examined as a physical example.

**Keywords:** stationary perturbation theory, Schrödinger equation, wave function, energy spectrum, potential, correction, anharmonic oscillator.

### Введение

Изучение большинства физических систем требует применения приближенных методов, как численных, так и аналитических. Одним из наиболее детально разработанных методов исследования не решаемых точно задач квантовой механики и теории поля является теория возмущений (ТВ) Рэлея – Шредингера [1], [2]. Стандартный случай теории возмущений соответствует слабому внешнему воздействию или слабому взаимодействию между частицами, когда для приближенного вычисления спектров и волновых функций полного гамильтониана используется малость возмущения «первого порядка» в гамильтониане. При этом поправки вычисляются последовательно: точно решается «невозмущенная» задача (нулевой порядок ТВ), затем для вычисления поправки порядка  $n$  необходимо предварительно найти все предыдущие порядки. При этом, если исследуемый эффект возникает именно в высших порядках, то рекуррентная схема становится неудобной, так как с ростом порядка объем вычислений возрастает. Следует ожидать, что особенно громоздкой рекуррентная схема окажется в случае, когда для «возмущения» порядок малости не фиксирован, например, когда потенциал имеет вид ряда по степеням малого параметра. Вместе с тем, именно такой случай

является исключительно важным в тех разделах квантовой теории, в которых сам оператор взаимодействия не является известным «а priori», а строится с помощью той или иной процедуры в виде степенного ряда. Еще одной проблемой стандартной теории возмущений является доказательство сходимости рядов ТВ и проблема сильной связи. Тем более сложной будет эта проблема в случае потенциала-ряда. Все эти соображения приводят к выводу о необходимости построения прозрачной схемы ТВ для возмущения, имеющего вид ряда по степеням малого параметра.

В настоящее время существует много попыток выйти за рамки стандартной ТВ, предложены различные модификации ТВ, как приспособленные для решения конкретных квантовомеханических и теоретико-полевых задач, так и носящие более общий характер. Например, в приложениях ТВ иногда используется вариант рекуррентной схемы, основанной на каноническом преобразовании волновой функции и гамильтониана:  $\psi' = e^{iS}\psi$ ,  $H' = e^{iS}He^{-iS}$ , где оператор  $H'$  представляется в виде ряда [3], [4]. Такое преобразование широко применяется в релятивистской теории и носит название преобразования Фолди-Вутхойзена. В теории молекулярных спектров этот метод (метод контактных

преобразований) широко применяется для исследования колебательно-вращательной модели молекул [5].

Другим примером может служить ТВ, не использующая знание всего спектра невозмущенной задачи и объединяющая ТВ и различные вариационные методы [6], [7]. В литературе эти подходы известны как «логарифмическая теория возмущений» [8], [9], в которой осуществляется переход от одномерного уравнения Шредингера к нелинейному уравнению Риккати и вычисление коэффициентов ряда ТВ сводится к рекуррентным соотношениям, или как «метод нелинеаризации» [7], или как «метод Далгарно-Льюиса» [10]. Все эти методы находят широкое применение, например, в теории рассеяния частиц, и непрерывно развиваются [11].

Также в настоящее время существуют методы, позволяющие выйти за рамки обычной ТВ и исследовать предел сильной связи, например, вариационная теория возмущений (ВТВ) [12]–[14], в которой удается построить новое разложение, позволяющее существенно расширить возможности теории возмущений, например, анализировать предел сильной связи.

Данная работа посвящена построению явной, удобной для последующих применений процедуры вычисления поправок к спектру и волновым функциям, представляемым в виде рядов по малому параметру в случае, когда потенциал-ряд по этому параметру не зависит от полной энергии. Именно в виде степенных рядов получаются операторы взаимодействия в ковариантном одновременном подходе Логунова-Тавхелидзе в квантовой теории поля [15] и в подходе, основанном на шпурионной диаграммной технике Кадышевского [16]. Основной вопрос при этом – каким образом изменяются собственные значения и собственные векторы при изменении оператора, зависящего от некоторого параметра. С целью достижения полной прозрачности схемы построения регулярного метода вычисления поправок к основному вкладу, когда потенциал можно разложить в ряд по степеням малого параметра, в данной работе мы рассматриваем случай, когда основной гамильтониан  $H_0$  имеет только дискретный спектр. Более общий случай гамильтониана  $H_0$ , имеющего как дискретный, так и непрерывный спектр будет также рассмотрен отдельно.

**1 Постановка задачи и первый порядок теории возмущений**

Итак, рассмотрим стационарное уравнение Шредингера  $H|\psi_n\rangle = E_n|\psi_n\rangle$  с гамильтонианом, который можно представить в виде

$$H = H^{(0)} + \lambda V,$$

где  $\lambda$  – безразмерный малый параметр.

Предположим, что оператор  $H^{(0)}$  (невозмущенный гамильтониан) имеет только дискретный спектр и его собственные значения  $E_n^{(0)}$  и собственные функции  $|\psi_n^{(0)}\rangle$  известны:

$$H^{(0)}|\psi_n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)}|\psi_n^{(0)}\rangle. \quad (1.1)$$

Оператор возмущения  $\lambda V$  – небольшая поправка к  $H^{(0)}$ . Мы рассмотрим указанный во введении и представляющий особый интерес случай, когда оператор  $V$  является рядом по степеням малого вещественного параметра  $\lambda$  ( $|\lambda| \ll 1$ ):

$$V = V^{(1)} + \lambda V^{(2)} + \lambda^2 V^{(3)} + \dots, \quad (1.2)$$

так, что оператор полной энергии будет иметь вид

$$H = H^{(0)} + \lambda V^{(1)} + \lambda^2 V^{(2)} + \lambda^3 V^{(3)} + \dots$$

Пусть состояние  $|\psi_a^{(0)}\rangle = |a^{(0)}\rangle$  не вырождено, то есть уравнение

$$H^{(0)}|a^{(0)}\rangle = E_a^{(0)}|a^{(0)}\rangle \quad (1.3)$$

имеет только одно решение. Найдем поправки к волновой функции и энергии при отсутствии вырождения. Решения задачи

$$H|\psi_n\rangle = E_n|\psi_n\rangle \quad (1.4)$$

будем искать как «незначительно» модифицированные решения (1.1). Поскольку  $\lambda$  мало, можно считать, что  $E_a$  мало отличается от  $E_a^{(0)}$ , и возмущенные собственные значения можно искать в виде рядов по степеням малого параметра  $\lambda$ . То же можно сказать и о собственной функции  $|a\rangle \equiv |\psi_a\rangle$ . Тогда для решения задачи (1.4) или для краткости

$$H|a\rangle = E_a|a\rangle, \quad (1.5)$$

можно считать, что

$$E_a = E_a^{(0)} + \lambda \varepsilon_a^{(1)} + \lambda^2 \varepsilon_a^{(2)} + \lambda^3 \varepsilon_a^{(3)} + \dots, \quad (1.6)$$

а также, что

$$|a\rangle = |a^{(0)}\rangle + \lambda |a^{(1)}\rangle + \lambda^2 |a^{(2)}\rangle + \lambda^3 |a^{(3)}\rangle + \dots \quad (1.7)$$

Наша задача состоит в определении коэффициентов разложений (1.6) и (1.7) при условии, что оператор возмущения имеет вид (1.2).

Нормировка состояния  $|a\rangle$  из уравнения (1.5) не определяется. Для дальнейших вычислений удобно зафиксировать нормировку вектора  $|a\rangle$  с помощью условия

$$1 = \langle a^{(0)}|a\rangle = \langle a^{(0)}|a^{(0)}\rangle + \lambda \langle a^{(0)}|a^{(1)}\rangle + \lambda^2 \langle a^{(0)}|a^{(2)}\rangle + \dots$$

Это приводит к условиям ортогональности  $\langle a^{(0)}|a^{(1)}\rangle = 0; \langle a^{(0)}|a^{(2)}\rangle = 0; \dots \langle a^{(0)}|a^{(n)}\rangle = 0; \dots$  (1.8)

Подставим представленные в виде рядов по степеням параметра  $\lambda$  потенциал, энергию и вектор состояния в уравнение Шредингера:

$$\left\{ (H^{(0)} - E_a^{(0)}) + \lambda(V^{(1)} - \varepsilon_a^{(1)}) + \lambda^2(V^{(2)} - \varepsilon_a^{(2)}) + \lambda^3(V^{(3)} - \varepsilon_a^{(3)}) + \dots \right\} \cdot \left[ |a^{(0)}\rangle + \lambda|a^{(1)}\rangle + \lambda^2|a^{(2)}\rangle + \lambda^3|a^{(3)}\rangle + \dots \right] = 0. \quad (1.9)$$

Равенство (1.9) имеет место для любого значения  $\lambda$ , только если равны коэффициенты, стоящие при одинаковых степенях  $\lambda$ . Из этого условия получается цепочка рекуррентных соотношений, позволяющая найти поправку заданного порядка:

$$\lambda^0: (H^{(0)} - E_a^{(0)})|a^{(0)}\rangle = 0; \quad (1.10)$$

$$\lambda^1: (H^{(0)} - E_a^{(0)})|a^{(1)}\rangle + (V^{(1)} - \varepsilon_a^{(1)})|a^{(0)}\rangle = 0; \quad (1.11)$$

$$\lambda^2: (H^{(0)} - E_a^{(0)})|a^{(2)}\rangle + (V^{(1)} - \varepsilon_a^{(1)})|a^{(1)}\rangle + (V^{(2)} - \varepsilon_a^{(2)})|a^{(0)}\rangle = 0; \quad (1.12)$$

$$\dots$$

$$\lambda^n: (H^{(0)} - E_a^{(0)})|a^{(n)}\rangle + (V^{(1)} - \varepsilon_a^{(1)})|a^{(n-1)}\rangle + \dots + (V^{(n)} - \varepsilon_a^{(n)})|a^{(0)}\rangle = 0. \quad (1.13)$$

При этом с самого начала фиксировано невозмущенное состояние, для которого вычисляются поправки, так как первое из этих уравнений совпадает с уравнением (1.3) невозмущенной задачи и его решение известно. Уравнение (1.11) вместе с условиями ортогональности (1.8) позволяет определить поправки первого порядка  $\varepsilon_a^{(1)}$  и  $|a^{(1)}\rangle$  к собственному значению (СЗ) и собственному вектору (СВ) соответственно.

Вначале умножим второе уравнение (1.11) слева на вектор  $\langle a^{(0)}|$  и получим

$$\langle a^{(0)}|(H^{(0)} - E_a^{(0)})|a^{(1)}\rangle + \langle a^{(0)}|(V^{(1)} - \varepsilon_a^{(1)})|a^{(0)}\rangle = 0.$$

Первое слагаемое, очевидно, равно нулю, поскольку  $\langle a^{(0)}|(H^{(0)} - E_a^{(0)}) = 0$ . Учитывая также, что  $\langle a^{(0)}|a^{(0)}\rangle = 1$ , имеем следующее выражение для первой поправки к энергии:

$$\varepsilon_a^{(1)} = \langle a^{(0)}|V^{(1)}|a^{(0)}\rangle. \quad (1.14)$$

Замечательно, что для определения  $\varepsilon_a^{(1)}$  необходимо знать только невозмущенный вектор  $|a^{(0)}\rangle$  и первый порядок гамильтониана взаимодействия. Подчеркнем также, что определенная на самом первом шаге величина  $\varepsilon_a^{(1)}$  будет входить во многие последующие формулы. Вернемся к уравнению (1.11), в котором величина  $\varepsilon_a^{(1)}$  уже известна, и теперь надо определить вектор  $|a^{(1)}\rangle$ . Для этого домножим уравнение (1.11) слева на вектор  $\langle m^{(0)}|$  ( $m \neq a$ ):

$$\langle m^{(0)}|(H^{(0)} - E_a^{(0)})|a^{(1)}\rangle + \langle m^{(0)}|(V^{(1)} - \varepsilon_a^{(1)})|a^{(0)}\rangle = 0.$$

Учитывая, что

$$\langle m^{(0)}|(H^{(0)} - E_a^{(0)}) = \langle m^{(0)}|(E_m^{(0)} - E_a^{(0)}),$$

находим скалярные произведения

$$\langle m^{(0)}|a^{(1)}\rangle = (E_a^{(0)} - E_m^{(0)})^{-1} \langle m^{(0)}|(V^{(1)} - \varepsilon_a^{(1)})|a^{(0)}\rangle = 0; \quad (1.15)$$

$$m \neq a.$$

Все векторы  $|m^{(0)}\rangle$ ,  $m = 1, 2, 3, \dots, a, \dots$  образуют полный базисный набор, а значит

$$|a^{(1)}\rangle = \sum_m |m^{(0)}\rangle \langle m^{(0)}|a^{(1)}\rangle = \sum_{m \neq a} |m^{(0)}\rangle \langle m^{(0)}|a^{(1)}\rangle + |a^{(0)}\rangle \langle a^{(0)}|a^{(1)}\rangle. \quad (1.16)$$

Коэффициенты разложения в (1.16) определены в (1.15), за исключением коэффициента в последнем слагаемом. Вспомним, однако, что последний коэффициент уже был выбран ранее в (1.8) равным нулю. Итак,

$$|a^{(1)}\rangle = \sum_{m \neq a} |m^{(0)}\rangle (E_a^{(0)} - E_m^{(0)})^{-1} \cdot \langle m^{(0)}|(V^{(1)} - \varepsilon_a^{(1)})|a^{(0)}\rangle. \quad (1.17)$$

Этим нахождение величин первого порядка ТВ завершено. Подчеркнем, что для вычисления первой поправки к собственному вектору необходимо знать уже все СВ и СЗ невозмущенной задачи.

## 2 Поправки высших порядков

Для вычисления поправок первого порядка к СЗ и СВ приведенных формул (1.14) и (1.17) вполне достаточно. Однако для целей вычисления следующих порядков удобно представить эти формулы в несколько другом виде. Учтем, что

$$(E_a^{(0)} - E_m^{(0)})^{-1} |m^{(0)}\rangle = (E_a^{(0)} - H^{(0)})^{-1} |m^{(0)}\rangle,$$

$$\langle m^{(0)}|(E_a^{(0)} - E_m^{(0)})^{-1} = \langle m^{(0)}|(E_a^{(0)} - H^{(0)})^{-1},$$

поэтому можно записать

$$\begin{aligned} & \sum_{m \neq a} |m^{(0)}\rangle (E_a^{(0)} - E_m^{(0)})^{-1} \langle m^{(0)}| = \\ & = (E_a^{(0)} - H^{(0)})^{-1} \sum_{m \neq a} |m^{(0)}\rangle \langle m^{(0)}| = \\ & = \sum_{m \neq a} |m^{(0)}\rangle \langle m^{(0)}|(E_a^{(0)} - H^{(0)})^{-1}. \end{aligned}$$

Операторы

$$P_a^{(0)} = |a^{(0)}\rangle \langle a^{(0)}|; \quad Q_a^{(0)} = 1 - |a^{(0)}\rangle \langle a^{(0)}|,$$

являются, соответственно, операторами проектирования на вектор  $|a^{(0)}\rangle$  и на подпространство, ортогональное к  $|a^{(0)}\rangle$ . Они удовлетворяют очевидным соотношениям

$$(P_a^{(0)})^2 = P_a^{(0)}; \quad (Q_a^{(0)})^2 = Q_a^{(0)}; \quad P_a^{(0)}Q_a^{(0)} = 0. \quad (2.1)$$

Кроме того, поскольку система собственных векторов свободного гамильтониана полна, то есть  $\sum_m |m^{(0)}\rangle \langle m^{(0)}| = 1$ , имеем

$$\sum_{m \neq a} |m^{(0)}\rangle \langle m^{(0)}| = Q_a^{(0)}.$$

Итак, фигурирующий в (1.17) оператор есть

$$\begin{aligned} \sum_{m \neq a} |m^{(0)}\rangle (E_a^{(0)} - E_m^{(0)})^{-1} \langle m^{(0)}| &= \\ = (E_a^{(0)} - H^{(0)})^{-1} Q_a^{(0)} &= Q_a^{(0)} (E_a^{(0)} - H^{(0)})^{-1}. \end{aligned}$$

Таким образом, гриновский оператор

$$G^{(0)}(E_a^{(0)}) = (E_a^{(0)} - H^{(0)})^{-1}$$

коммутирует с оператором проектирования  $Q_a^{(0)}$ . Спроектированный на ортогональное к вектору  $|a^{(0)}\rangle$  подпространство гриновский оператор удовлетворяет равенству:

$G^{(0)}(E_a^{(0)})Q_a^{(0)} = Q_a^{(0)}G^{(0)}(E_a^{(0)}) = Q_a^{(0)}G^{(0)}(E_a^{(0)})Q_a^{(0)}$ , которое легко получить, используя (2.1). Таким образом, решение (1.17) уравнения (1.11) можно представить в виде

$$\begin{aligned} |a^{(1)}\rangle &= Q_a^{(0)} G^{(0)}(E_a^{(0)}) (V^{(1)} - \varepsilon_a^{(1)}) |a^{(0)}\rangle = \\ &= G^{(0)}(E_a^{(0)}) Q_a^{(0)} (V^{(1)} - \varepsilon_a^{(1)}) |a^{(0)}\rangle. \end{aligned} \quad (2.2)$$

Получим этот результат другим способом, который будет пригоден и для отыскания следующих порядков. Уравнение (1.11) есть частный случай неоднородного уравнения

$$(E_a^{(0)} - H^{(0)}) |\psi\rangle = |f\rangle, \quad (2.3)$$

в котором вектор  $|f\rangle$  известен, а искомым вектор  $|\psi\rangle$  подчиняется дополнительному условию  $\langle a^{(0)} | \psi \rangle = 0$ . Решением уравнения (2.3) является

$$|\psi\rangle = (E_a^{(0)} - H^{(0)})^{-1} |f\rangle + C |a^{(0)}\rangle,$$

где второе слагаемое, содержащее произвольную константу  $C$ , есть решение однородного уравнения. Эту константу выберем так, чтобы выполнялось условие

$$0 = \langle a^{(0)} | \psi \rangle = \langle a^{(0)} | (E_a^{(0)} - H^{(0)})^{-1} |f\rangle + C,$$

значит

$$C = (-1) \langle a^{(0)} | (E_a^{(0)} - H^{(0)})^{-1} |f\rangle,$$

и, следовательно,

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= (E_a^{(0)} - H^{(0)})^{-1} |f\rangle - |a^{(0)}\rangle \cdot \\ &\cdot \langle a^{(0)} | (E_a^{(0)} - H^{(0)})^{-1} |f\rangle. \end{aligned}$$

Другими словами,

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= Q_a^{(0)} (E_a^{(0)} - H^{(0)})^{-1} |f\rangle = \\ &= Q_a^{(0)} G^{(0)}(E_a^{(0)}) |f\rangle. \end{aligned} \quad (2.4)$$

При учете явного вида  $|f\rangle$  в уравнении (1.11), получаем

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= Q_a^{(0)} (E_a^{(0)} - H^{(0)})^{-1} (V^{(1)} - \varepsilon_a^{(1)}) |a^{(0)}\rangle = \\ &= Q_a^{(0)} G^{(0)}(E_a^{(0)}) (V^{(1)} - \varepsilon_a^{(1)}) |a^{(0)}\rangle, \end{aligned}$$

что совпадает с (2.2).

Дальнейшее решение уравнений цепочки (1.10)–(1.13) осуществляется последовательно. Домножая уравнение (1.12) на вектор  $\langle a^{(0)} |$  слева, получаем

$$\begin{aligned} \langle a^{(0)} | (V^{(1)} - \varepsilon_a^{(1)}) |a^{(1)}\rangle + \\ + \langle a^{(0)} | (V^{(2)} - \varepsilon_a^{(2)}) |a^{(0)}\rangle = 0, \end{aligned}$$

откуда, при учете (1.8), ясно, что вторая поправка к энергии есть

$$\varepsilon_a^{(2)} = \langle a^{(0)} | (V^{(1)}) |a^{(1)}\rangle + \langle a^{(0)} | (V^{(2)}) |a^{(0)}\rangle.$$

Теперь, уже определив  $\varepsilon_a^{(2)}$ , замечаем, что уравнение (1.12) имеет вид (2.3), где искомым вектор  $|\psi\rangle = |a^{(2)}\rangle$  также подчиняется дополнительному условию  $\langle a^{(0)} | \psi \rangle = \langle a^{(0)} | a^{(2)} \rangle = 0$ , а правая часть равна

$$|f^{(2)}\rangle = (V^{(1)} - \varepsilon_a^{(1)}) |a^{(1)}\rangle + (V^{(2)} - \varepsilon_a^{(2)}) |a^{(0)}\rangle.$$

Значит, согласно (2.4), его решение есть

$$\begin{aligned} |a^{(2)}\rangle &= Q_a^{(0)} G^{(0)}(E_a^{(0)}) |f^{(2)}\rangle = \\ &= Q_a^{(0)} G^{(0)}(E_a^{(0)}) [(V^{(1)} - \varepsilon_a^{(1)}) |a^{(1)}\rangle + \\ &+ (V^{(2)} - \varepsilon_a^{(2)}) |a^{(0)}\rangle]. \end{aligned}$$

Учитывая (2.2), мы также можем записать

$$\begin{aligned} |a^{(2)}\rangle &= Q_a^{(0)} G^{(0)}(E_a^{(0)}) (V^{(2)} - \varepsilon_a^{(2)}) |a^{(0)}\rangle + \\ &+ Q_a^{(0)} G^{(0)}(E_a^{(0)}) (V^{(1)} - \varepsilon_a^{(1)}) \cdot \\ &\cdot Q_a^{(0)} G^{(0)}(E_a^{(0)}) (V^{(1)} - \varepsilon_a^{(1)}) |a^{(0)}\rangle. \end{aligned}$$

Продолжая рекуррентные выкладки, т.е. переходя к последующим уравнениям системы (1.10)–(1.13), можно вычислить поправки более высоких порядков. При условии, что уже найдены предыдущие  $(n-1)$  поправок к энергии и волновой функции, для  $n$ -го порядка можем написать

$$\begin{aligned} \varepsilon_a^{(n)} &= \langle a^{(0)} | V^{(n)} |a^{(0)}\rangle + \\ &+ \langle a^{(0)} | V^{(n-1)} |a^{(1)}\rangle + \dots + \langle a^{(0)} | V^{(1)} |a^{(n-1)}\rangle \end{aligned} \quad (2.5)$$

для энергии и затем

$$\begin{aligned} |a^{(n)}\rangle &= Q_a^{(0)} G^{(0)}(E_a^{(0)}) [(V^{(n)} - \varepsilon_a^{(n)}) |a^{(0)}\rangle + \\ &+ (V^{(n-1)} - \varepsilon_a^{(n-1)}) |a^{(1)}\rangle + \dots + (V^{(1)} - \varepsilon_a^{(1)}) |a^{(n-1)}\rangle]. \end{aligned} \quad (2.6)$$

для волновой функции.

Этими формулами нахождение всех порядков теории возмущений, фактически завершено. Посмотрим, однако, более внимательно на полученные поправки к энергии и волновой функции. Для этого выпишем полученные для них ряды, используя формулы (2.5) и (2.6), а также определения (1.6) и (1.7):

$$\begin{aligned} \Delta E_a = E_a - E_a^{(0)} &= \lambda \varepsilon_a^{(1)} + \lambda^2 \varepsilon_a^{(2)} + \lambda^3 \varepsilon_a^{(3)} + \dots = \\ &= \lambda \langle a^{(0)} | V^{(1)} | a^{(0)} \rangle + \\ &+ \lambda^2 \left( \langle a^{(0)} | V^{(2)} | a^{(0)} \rangle + \langle a^{(0)} | V^{(1)} | a^{(1)} \rangle \right) + \\ &+ \lambda^3 \left( \langle a^{(0)} | V^{(3)} | a^{(0)} \rangle + \langle a^{(0)} | V^{(2)} | a^{(1)} \rangle + \right. \quad (2.7) \\ &\quad \left. + \langle a^{(0)} | V^{(1)} | a^{(2)} \rangle \right) + \dots + \\ &+ \lambda^n \left( \langle a^{(0)} | V^{(n)} | a^{(0)} \rangle + \langle a^{(0)} | V^{(n-1)} | a^{(1)} \rangle + \dots \right. \\ &\quad \left. + \langle a^{(0)} | V^{(1)} | a^{(n-1)} \rangle \right) + \dots \end{aligned}$$

Аналогично, для поправки к волновой функции имеем

$$\begin{aligned} |\Delta \psi_a \rangle &= |\psi_a \rangle - |\psi_a^{(0)} \rangle = \\ &= \lambda |a^{(1)} \rangle + \lambda^2 |a^{(2)} \rangle + \lambda^3 |a^{(3)} \rangle + \dots = \\ &= \lambda Q_a^{(0)} G^{(0)}(E_a^{(0)}) \left[ (V^{(1)} - \varepsilon_a^{(1)}) |a^{(0)} \rangle \right] + \quad (2.8) \\ &+ \lambda^2 Q_a^{(0)} G^{(0)}(E_a^{(0)}) \left[ (V^{(1)} - \varepsilon_a^{(1)}) |a^{(1)} \rangle + \right. \\ &\quad \left. + (V^{(2)} - \varepsilon_a^{(2)}) |a^{(0)} \rangle \right] + \\ &+ \lambda^3 Q_a^{(0)} G^{(0)}(E_a^{(0)}) \left[ (V^{(1)} - \varepsilon_a^{(1)}) |a^{(2)} \rangle + \right. \\ &\quad \left. + (V^{(2)} - \varepsilon_a^{(2)}) |a^{(1)} \rangle + (V^{(3)} - \varepsilon_a^{(3)}) |a^{(0)} \rangle \right] + \\ &+ \dots + \lambda^n Q_a^{(0)} G^{(0)}(E_a^{(0)}) \left[ (V^{(1)} - \varepsilon_a^{(1)}) |a^{(n-1)} \rangle + \right. \\ &\quad \left. + (V^{(2)} - \varepsilon_a^{(2)}) |a^{(n-2)} \rangle + \dots + (V^{(n)} - \varepsilon_a^{(n)}) |a^{(0)} \rangle \right] + \dots \end{aligned}$$

Теперь заметим, что ряды для  $\Delta E_a$  и  $|\Delta \psi_a \rangle$  могут быть записаны следующим образом:

$$\begin{aligned} \Delta E_a &= \langle a^{(0)} | (\lambda V^{(1)} + \lambda^2 V^{(2)} + \dots) | a^{(0)} \rangle + \quad (2.9) \\ &+ \langle a^{(0)} | \lambda (\lambda V^{(1)} + \lambda^2 V^{(2)} + \dots) | a^{(1)} \rangle + \\ &+ \langle a^{(0)} | \lambda^2 (\lambda V^{(1)} + \lambda^2 V^{(2)} + \dots) | a^{(2)} \rangle + \dots = \\ &= \langle a^{(0)} | \lambda V (|a^{(0)} \rangle + \lambda |a^{(1)} \rangle + \lambda^2 |a^{(2)} \rangle + \dots) = \\ &= \langle a^{(0)} | \lambda V (|\psi_a^{(0)} \rangle + |\Delta \psi_a \rangle). \end{aligned}$$

и

$$\begin{aligned} |\Delta \psi_a \rangle &= \lambda Q_a^{(0)} G^{(0)}(E_a^{(0)}) (V^{(1)} - \varepsilon_a^{(1)}) \cdot \\ &\quad \cdot (|a^{(0)} \rangle + \lambda |a^{(1)} \rangle + \dots) + \\ &+ \lambda^2 Q_a^{(0)} G^{(0)}(E_a^{(0)}) (V^{(2)} - \varepsilon_a^{(2)}) \cdot \\ &\quad \cdot (|a^{(0)} \rangle + \lambda |a^{(1)} \rangle + \lambda^2 |a^{(2)} \rangle + \dots) + \quad (2.10) \\ &+ \lambda^3 Q_a^{(0)} G^{(0)}(E_a^{(0)}) (V^{(3)} - \varepsilon_a^{(3)}) \cdot \\ &\quad \cdot (|a^{(0)} \rangle + \lambda |a^{(1)} \rangle + \lambda^2 |a^{(2)} \rangle + \dots) + \dots \\ &= Q_a^{(0)} G^{(0)}(E_a^{(0)}) \{ (\lambda V - \Delta E_a) \} (|\psi_a^{(0)} \rangle + |\Delta \psi_a \rangle). \end{aligned}$$

Таким образом, в данной работе представлена процедура вычисления поправок к спектру и волновым функциям в случае, когда потенциал задан в виде ряда по малому параметру и не зависит от полной энергии. Мы уже упоминали во

введении, что именно в виде рядов по степеням малого параметра строятся потенциалы в ковариантных трехмерных подходах в квантовой теории поля. Кроме того, когда даже в квантовой механике рассматривается случай потенциала  $V = V(E; \vec{x}; \dots)$ , зависящего от энергии, мы неизбежно приходим при его исследовании по ТВ к выражениям типа

$$\lambda V(E^{(0)} + \lambda E^{(1)} + \lambda^2 E^{(2)} + \dots; \vec{x}; \dots),$$

которые в духе ТВ следует понимать как разложения, содержащие все натуральные степени  $\lambda$ :

$$\lambda V = \lambda V(E^{(0)}; \vec{x}; \dots) + \lambda^2 E^{(1)} \frac{\partial}{\partial E^{(0)}} V(E^{(0)}; \vec{x}; \dots) + \dots$$

Именно поэтому мы выписали формулы (2.7)–(2.10), определяющие  $\Delta E_a$  и  $|\Delta \psi_a \rangle$  так подробно.

### 3 Примеры

1. Наиболее часто используется вариант ТВ, когда потенциал считается величиной фиксированного (первого) порядка малости [1]. Ответы для этого случая могут быть найдены из (2.7) и (2.8), если положить:

$$\lambda V = \lambda V^{(1)}, \quad V^{(2)} = V^{(3)} = \dots = 0. \quad (3.1)$$

Тогда поправка к энергии имеет вид:

$$\begin{aligned} \Delta E_a &= E_a - E_a^{(0)} = \\ &= \lambda E_a^{(1)} + \lambda^2 E_a^{(2)} + \dots + \lambda^n E_a^{(n)} + \dots, \quad (3.2) \end{aligned}$$

где, учитывая, что  $|\varphi^{(0)} \rangle = |a^{(0)} \rangle = |\psi^{(0)} \rangle$ , получим

$$\begin{aligned} E_a^{(1)} &= \langle \varphi^{(0)} | V | \varphi^{(0)} \rangle; \\ E_a^{(2)} &= \langle \varphi^{(0)} | V | \varphi^{(1)} \rangle; \\ &\dots \\ E_a^{(n)} &= \langle \varphi^{(0)} | V | \varphi^{(n-1)} \rangle. \end{aligned}$$

Поправка к волновой функции:

$$|\Delta \psi_a \rangle = \lambda |\varphi^{(1)} \rangle + \lambda^2 |\varphi^{(2)} \rangle + \dots + \lambda^n |\varphi^{(n)} \rangle + \dots, \quad (3.3)$$

где

$$\begin{aligned} |\varphi^{(1)} \rangle &= Q_a^{(0)} G^{(0)}(E_a^{(0)}) \left[ (V - E_a^{(1)}) | \varphi^{(0)} \rangle \right]; \\ |\varphi^{(2)} \rangle &= Q_a^{(0)} G^{(0)}(E_a^{(0)}) \left[ (V - E_a^{(1)}) | \varphi^{(1)} \rangle + \right. \\ &\quad \left. + (0 - E_a^{(2)}) | \varphi^{(0)} \rangle \right]; \\ &\dots \\ |\varphi^{(n)} \rangle &= Q_a^{(0)} G^{(0)}(E_a^{(0)}) \left[ (V - E_a^{(1)}) | \varphi^{(n-1)} \rangle + \dots \right. \\ &\quad \left. + (0 - E_a^{(n)}) | \varphi^{(0)} \rangle \right]. \end{aligned}$$

При этом все  $E_a^{(n)}$  и  $|\varphi^{(n)} \rangle$  не зависят от  $\lambda$ .

2. Можно построить вариант ТВ, когда потенциал, например, имеет вид:

$$\lambda V = \xi^k W^{(k)}.$$

Тогда в соответствии с формулами (2.7) и (2.8), учитывая что

$$W^{(1)} = W^{(2)} = \dots = W^{(k-1)} = W^{(k+1)} = \dots = 0,$$

$$|v^{(0)}\rangle = |a^{(0)}\rangle = |\psi^{(0)}\rangle,$$

получим поправку к энергии

$$\begin{aligned} \Delta E_a &= \xi^k \varepsilon_a^{(k)} + \xi^{2k} \varepsilon_a^{(2k)} + \\ &+ \xi^{3k} \varepsilon_a^{(3k)} + \dots + \xi^{nk} \varepsilon_a^{(nk)} + \dots = \\ &= \xi^k \langle v^{(0)} | W^{(k)} | v^{(0)} \rangle + \xi^{2k} \langle v^{(0)} | W^{(k)} | v^{(k)} \rangle + \\ &+ \xi^{3k} \langle v^{(0)} | W^{(k)} | v^{(2k)} \rangle + \\ &+ \dots + \xi^{nk} \langle v^{(0)} | W^{(k)} | v^{(n-1)k} \rangle + \dots \end{aligned} \quad (3.4)$$

Поправка к волновой функции будет иметь вид

$$\begin{aligned} |\Delta \psi_a\rangle &= \xi^k |v^{(k)}\rangle + \xi^{2k} |v^{(2k)}\rangle + \\ &+ \xi^{3k} |v^{(3k)}\rangle + \dots + \xi^{nk} |v^{(nk)}\rangle + \dots, \end{aligned} \quad (3.5)$$

где

$$\begin{aligned} |v^{(1)}\rangle &= |v^{(2)}\rangle = \dots = |v^{(k-1)}\rangle = 0; \\ |v^{(k)}\rangle &= Q_a^{(0)} G^{(0)}(E_a^{(0)}) [(W^{(k)} - \varepsilon_a^{(k)}) |v^{(0)}\rangle]; \\ |v^{(k+1)}\rangle &= |v^{(k+2)}\rangle = \dots = |v^{(2k-1)}\rangle = 0; \\ |v^{(2k)}\rangle &= Q_a^{(0)} G^{(0)}(E_a^{(0)}) [(0 - \varepsilon_a^{(2k)}) |v^{(0)}\rangle + \\ &+ (W^{(k)} - \varepsilon_a^{(k)}) |v^{(k)}\rangle]; \\ &\dots \\ |v^{(3k)}\rangle &= Q_a^{(0)} G^{(0)}(E_a^{(0)}) [(0 - \varepsilon_a^{(3k)}) |v^{(0)}\rangle + \\ &+ (0 - \varepsilon_a^{(2k)}) |v^{(k)}\rangle + (W^{(k)} - \varepsilon_a^{(k)}) |v^{(2k)}\rangle]; \\ &\dots \\ |v^{(nk)}\rangle &= Q_a^{(0)} G^{(0)}(E_a^{(0)}) [(0 - \varepsilon_a^{(nk)}) |v^{(0)}\rangle + \\ &+ (0 - \varepsilon_a^{(n-1)k}) |v^{(k)}\rangle + \dots + \\ &+ (W^{(k)} - \varepsilon_a^{(k)}) |v^{(n-1)k}\rangle]; \\ &\dots \end{aligned}$$

С другой стороны, результаты (3.4) и (3.5) можно также получить, если воспользоваться формулами (3.1)–(3.3) и положить в (3.1)

$$\lambda = \xi^k, \quad V^{(1)} = W^{(k)},$$

обозначив поправки к СЗ и СВ следующим образом

$$\begin{aligned} E_a^{(1)} &= \varepsilon_a^k, E_a^{(2)} = \varepsilon_a^{2k}, \dots, E_a^{(n)} = \varepsilon_a^{nk}, \\ |\varphi^{(0)}\rangle &= |v^{(0)}\rangle, |\varphi^{(1)}\rangle = |v^{(k)}\rangle, \dots, |\varphi^{(n)}\rangle = |v^{(nk)}\rangle. \end{aligned}$$

3. Интересно с изложенных позиций рассмотреть случай применения ТВ в отсутствие вырождения к квантовому ангармоническому осциллятору, для которого уравнение Шредингера имеет вид

$$\left( \frac{-\hbar^2}{2m_0} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{m_0 \omega_0'^2 x^2}{2} + W(\lambda, x) \right) |\psi_n\rangle = E |\psi_n\rangle. \quad (3.6)$$

Ограничимся рассмотрением потенциалов вида

$$W(\lambda, x) = x^2 \mathcal{G}(\lambda x), \quad (\mathcal{G}(0) = 0),$$

для которых

$$W(\lambda, x) = x^2 \mathcal{G}(0) + x^2 \left[ \lambda x \mathcal{G}'(0) + \lambda^2 x^2 \frac{\mathcal{G}''(0)}{2!} + \dots \right].$$

Введем замену  $\omega_0'^2 = \omega_0^2 + \frac{2}{m_0} \mathcal{G}(0)$ . Тогда

уравнение (3.6) примет вид

$$\left( \frac{-\hbar^2}{2m_0} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{m_0 \omega_0'^2 x^2}{2} + V(\lambda, x) \right) |\psi_n\rangle = E |\psi_n\rangle.$$

Здесь в качестве оператора возмущения взята ангармоническая поправка к потенциальной энергии в виде

$$V(\lambda, x) = \lambda V = \lambda \mathcal{G}'(0) x^3 + \lambda^2 \frac{\mathcal{G}''(0)}{2!} x^4 + \dots,$$

при этом в соответствии с (1.2):

$$V^{(1)} = \mathcal{G}'(0) x^3, \quad V^{(2)} = \frac{\mathcal{G}''(0)}{2!} x^4, \dots$$

Прежде всего отметим, что точное решение уравнения (3.6), найденное методом теории возмущений, близко к состояниям  $|\psi_n^{(0)}\rangle$  линейного квантового гармонического осциллятора. Найдем поправки к энергетическому спектру в соответствии с формулами (2.5):

$$\Delta E_n = E_n - E_n^{(0)} = \lambda \varepsilon_n^{(1)} + \lambda^2 \varepsilon_n^{(2)} + \dots$$

Для упрощения введем новую переменную

$\zeta = \frac{x}{x_0}$ , где  $x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m_0 \omega_0'}}$  – безразмерная величина.

После подстановки решение соответствующего (3.6) «невозмущенного» уравнения примет вид

$$\psi_n^{(0)}(\zeta) = e^{-\frac{1}{2}\zeta^2} \frac{H_n(\zeta)}{\sqrt{2^n n! x_0 \sqrt{\pi}}}; \quad \langle \psi_n^{(0)} | \psi_m^{(0)} \rangle = \delta_{nm},$$

где  $H_n(\zeta)$  – полиномы Чебышева-Эрмита.

В соответствии с (2.5) поправки для энергии имеют вид

$$\begin{aligned} \varepsilon_n^{(1)} &= \langle \psi_n^{(0)} | V^{(1)} | \psi_n^{(0)} \rangle = 0, \\ \varepsilon_n^{(2)} &= \langle \psi_n^{(0)} | V^{(1)} | \psi_n^{(1)} \rangle + \langle \psi_n^{(0)} | V^{(2)} | \psi_n^{(0)} \rangle, \end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned} \langle \psi_n^{(0)} | V^{(2)} | \psi_n^{(0)} \rangle &= \frac{3}{2} \frac{\mathcal{G}''(0)}{2!} \left( \frac{\hbar}{m_0 \omega_0'} \right)^2 \left( n^2 + n + \frac{1}{2} \right), \\ \langle \psi_n^{(0)} | V^{(1)} | \psi_n^{(1)} \rangle &= -(\mathcal{G}'(0))^2 \left( \frac{\hbar}{m_0 \omega_0'} \right)^2 \cdot \\ &\cdot \left( \frac{15}{4 m_0 \omega_0'^2} \left( n^2 + n + \frac{11}{30} \right) \right). \end{aligned}$$

Приближенное выражение для уровней энергии ангармонического осциллятора будет

$$\begin{aligned} E_n &= \hbar \omega_0' \left( n + \frac{1}{2} \right) - \\ &- \lambda^2 \left( \frac{\hbar}{m_0 \omega_0'} \right)^2 \left( \frac{15 (\mathcal{G}'(0))^2}{4 m_0 \omega_0'^2} \left( n^2 + n + \frac{11}{30} \right) - \right. \end{aligned}$$

$$-\frac{3}{2} \frac{g''(0)}{2!} \left( n^2 + n + \frac{1}{2} \right) + \dots$$

Определение энергетического спектра ангармонического осциллятора другими методами [17] требует проведения более громоздкой процедуры вычислений.

### Заключение

В данной работе представлены результаты вычисления явного вида поправок к спектру энергий и соответствующим волновым функциям в стационарной теории возмущений для уравнения Шредингера в случае потенциала-ряда. Изложенная процедура вычисления поправок позволяет сократить и систематизировать объем вычислений, который обычно возрастает с ростом порядка стандартной теории возмущений. С целью максимального упрощения схемы мы рассмотрели случай только дискретного спектра гамильтониана  $H_0$ , не зависящего от энергии. Более сложные случаи, а именно, когда гамильтониан  $H_0$  имеет как дискретный, так и непрерывный спектр или когда присутствует вырождение, будут рассмотрены отдельно. Также дополнительной сложностью является возможная зависимость всех слагаемых ряда от энергии системы. Учет и этой зависимости мы предполагаем рассмотреть в последующем.

### ЛИТЕРАТУРА

1. Мессиа, А. Квантовая механика, Т. 1. / А. Мессиа. – М. : Наука, 1978.
2. Като, Т. Теория возмущений линейных операторов / Т. Като. – М. : Наука, 1972.
3. Бьеркен, Дж.Д. Релятивистская квантовая теория. Ч. 1. / Дж.Д. Бьеркен, С.Д. Дрелл. – М. : Наука, 1978.
4. Ициксон, К. Квантовая теория поля. Т. 1, 2. / К. Ициксон, Ж.-Б. Зюбер. – М. : Мир, 1984.
5. Тютчев, Вл.Г. Эффективные гамильтонианы // Внутримолекулярные взаимодействия и инфракрасные спектры атмосферных газов. – Томск, 1975. – С. 3–46.

6. Поликанов, В.С. К нерелятивистской теории возмущений для дискретного спектра / В.С. Поликанов // ЖЭТФ. – 1967. – Т. 52. – Вып. 5. – С. 1326.

7. Турбинер, А.В. Задача о спектре в квантовой механике и процедура «нелинеаризации» / А.В. Турбинер // УФН. – 1984. – Т. 144. – Вып. 1. – С. 35.

8. Логарифмическая теория возмущений и ее применение к эффекту итарка в атоме водорода / С.П. Аллилуев [и др.] // ЖЭТФ. – 1982. – Т. 82. – Вып. 1. – С. 77.

9. Mei, W.N. Higher-order corrections to the excited states using the logarithmic perturbation method / W.N. Mei, D.S.Chuu // Phys.Rev. A, 1998. – Vol. 58. – № 1. – P. 713.

10. Aharonov, Y. A New Approach to Perturbation Theory / Y. Aharonov, C.K. Au // Phys. Rev. Lett. – 1979. – Vol. 42. – P. 1582.

11. Yahiaoui, S.-A. The effective potential and resummation procedure to multidimensional complex cubic potentials for weak and strong-coupling / S.-A. Yahiaoui, O. Cherroud, M.Bentaiba // J. Math. Phys. – 2007. – 48. – P. 113503.

12. Solovtsov, I.L. New expansion in QCD / I.L. Solovtsov // Phys. Lett., 1994. – B327. – P. 335.

13. Korsun, L.D. Variational perturbation theory: the  $\varphi^{2k}$ -oscillator / L.D. Korsun, A.N. Sissakian, I.L. Solovtsov // Teor. Mat. Fiz. – 1992. – Vol. 90. – P. 37–54.

14. Korsun, L.D.  $\varphi^{2k}$ -oscillator in the strong coupling limit / L.D. Korsun, A.N. Sissakian, I.L. Solovtsov // Int. J. Mod. Phys. A. – 1993. – Vol. 8. – P. 5129–5140.

15. Logunov, A.A. Quasi-optical approach in quantum field theory / A.A. Logunov, A.N. Tavkhelidze // Nuovo Cimento. – 1963. – Vol. 29. – P. 380–399.

16. Kadyshevsky, V.G. Quasipotential type equation for the relativistic scattering amplitude / V.G. Kadyshevsky // Nucl. Phys. – 1968. – Vol. B6, № 1. – P. 125–148.

17. Соколов, А.А. Квантовая механика / А.А. Соколов, И.М. Тернов, В.Ч. Жуковский. – М. : Наука, 1979.

Поступила в редакцию 14.02.11.