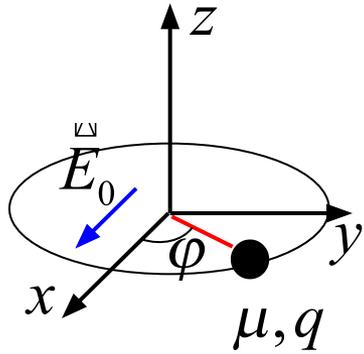


# Теория возмущений. Плоский ротатор (основное состояние)

Уравнение Шрёдингера для заряженного 2D ротатора в однородном электрическом поле



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

Невозмущённый гамильтониан

$$\hat{H}_0 = \frac{\hbar^2 \hat{l}_z^2}{2I}, \quad \hat{H}_0 \psi_m^{(0)}(\varphi) = E_m^{(0)} \psi_m^{(0)}(\varphi)$$

$$E_m^{(0)} = \frac{\hbar^2 m^2}{2I}, \quad I = \mu r^2, \quad \psi_m^{(0)}(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \cdot e^{im\varphi}$$

«Возмущающий» потенциал

$$V(\varphi) = q\varphi_e = -qE_0 r \cos \varphi = -dE_0 \cos \varphi$$

Основное (невырожденное) состояние

Общие соотношения

Уравнение Шрёдингера

$$\left(\hat{H}_0 + V\right)\psi_l = E_l\psi_l$$

«Невозмущённое» уравнение Шрёдингера

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

Решение уравнения Шрёдингера

$$\psi_l = \sum_n c_{nl}\psi_n^{(0)}$$

Получить уравнение на коэффициенты разложения?

1 шаг

$$\sum_n c_{nl} (E_l - E_n^{(0)}) \psi_n^{(0)} = \sum_n c_{nl} V \psi_n^{(0)}$$

2 шаг

$$\int dq (\psi_m^{(0)}(q))^* \dots$$

Уравнение Шрёдингера в представлении с.ф. невозмущённого гамильтониана

$$c_{ml} (E_l - E_m^{(0)}) = \sum_n V_{mn} c_{nl},$$

$$V_{mn} \equiv \langle m | V | n \rangle = \int dq (\psi_m^{(0)}(q))^* V(q) \psi_n^{(0)}(q)$$

«Поправка» к  $l$ -ому уровню (возмущение «мало»)

$$E_l = E_l^{(0)} + E_l^{(1)} + E_l^{(2)} + \dots, \quad c_{ml} = \delta_{ml} + c_{ml}^{(1)} + \dots \quad (c_{ml}^{(0)} = \delta_{ml})$$

Нулевое приближение

$$E_l = E_l^{(0)}, \quad c_{ml} = c_{ml}^{(0)} = \delta_{ml}$$

Первое приближение ( $m=l$ )

$$c_{ll}^{(0)} \left( (E_l^{(0)} + E_l^{(1)}) - E_l^{(0)} \right) = \sum_n V_{ln} c_{nl}^{(0)} = V_{ll}$$

Поправка первого порядка к энергии  $l$ -ого уровня

$$\boxed{E_l^{(1)} = V_{ll}}$$

Основное состояние плоского ротатора

$$E_{l=0}^{(1)} = V_{00} = ?$$

Второе приближение ( $m=l$ )

$$\left(c_{ll}^{(0)} + c_{ll}^{(1)}\right) \left( \left( E_l^{(0)} + E_l^{(1)} + E_l^{(2)} \right) - E_l^{(0)} \right) = \sum_n V_{ln} \left( c_{nl}^{(0)} + c_{nl}^{(1)} \right) = V_{ll} + \sum_{n \neq l} V_{ln} \left( c_{nl}^{(0)} + c_{nl}^{(1)} \right)$$

Или

$$c_{ll}^{(1)} E_l^{(1)} + c_{ll}^{(0)} E_l^{(2)} = \sum_{n \neq l} V_{ln} \left( c_{nl}^{(0)} + c_{nl}^{(1)} \right)$$

Надо знать коэффициенты разложения при несовпадающих индексах?

Уравнение для коэффициентов разложения при несовпадающих индексах

$$c_{ml}^{(1)} \left( E_l^{(0)} - E_m^{(0)} \right) = \sum_n V_{mn} c_{nl}^{(0)} = V_{ml}, \quad m \neq l$$

Или

$$c_{ml}^{(1)} = \frac{V_{ml}}{E_l^{(0)} - E_m^{(0)}}, \quad m \neq l$$

Условие применимости теории возмущений?

Коэффициент при  $m=l$ ?

Условие применимости теории возмущений

$$\left| \frac{V_{ml}}{E_l^{(0)} - E_m^{(0)}} \right| \ll 1$$

В.ф. в первом приближении

$$\psi_l = \left( c_{ll}^{(0)} + c_{ll}^{(1)} \right) \psi_l^{(0)} + \sum_{n \neq l} c_{nl}^{(1)} \psi_n^{(0)}$$

Условие нормировки в первом приближении

$$\int dq (\psi_l(q))^* \psi_l(q) = \int dq \left[ \left( c_{ll}^{(0)} + c_{ll}^{(1)} \right) \psi_l^{(0)} + \sum_{n \neq l} c_{nl}^{(1)} \psi_n^{(0)} \right]^* \left[ \left( c_{ll}^{(0)} + c_{ll}^{(1)} \right) \psi_l^{(0)} + \sum_{n \neq l} c_{nl}^{(1)} \psi_n^{(0)} \right] = 1$$

Условие для искомого коэффициента?

Условие для искомого коэффициента

$$\operatorname{Re} c_{ll}^{(1)} = 0 \quad \Rightarrow \quad c_{ll}^{(0)} + c_{ll}^{(1)} = 1 + i\alpha \approx e^{i\alpha}$$

В.ф. в первом приближении

$$\psi_l \approx e^{i\alpha} \left[ \psi_l^{(0)} + \sum_{n \neq l} c_{nl}^{(1)} \psi_n^{(0)} \right]$$

Выбираем фазовый множитель равным единице, т.е.

$$c_{ll}^{(1)} = 0$$

Уравнение для поправки второго порядка к энергии

$$c_{ll}^{(1)} E_l^{(1)} + c_{ll}^{(0)} E_l^{(2)} = \sum_{n \neq l} V_{ln} (c_{nl}^{(0)} + c_{nl}^{(1)})$$

Или

$$E_l^{(2)} = \sum_{n \neq l} \frac{V_{ln} V_{nl}}{E_l^{(0)} - E_n^{(0)}}$$

Основное состояние плоского ротатора. Поправка второго порядка к энергии

$$E_0^{(2)} = \sum_{n \neq 0} \frac{V_{0n} V_{n0}}{E_0^{(0)} - E_n^{(0)}}$$

$$E_m^{(0)} = \frac{\hbar^2 m^2}{2I}, \quad \psi_m^{(0)}(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \cdot e^{im\varphi}, \quad V(\varphi) = -dE_0 \cos \varphi$$

Вычислить матричные элементы?

$$V_{mn} = \int_0^{2\pi} d\varphi \left( \psi_m^{(0)}(\varphi) \right)^* V(\varphi) \psi_n^{(0)}(\varphi)$$

## Вспомогательные формулы

$$V(\varphi) = -dE_0 \cos \varphi = -\frac{dE_0}{2} (e^{i\varphi} + e^{-i\varphi})$$

$$V_{mn} = -\frac{dE_0}{4\pi} \cdot \int_0^{2\pi} d\varphi e^{-im\varphi} (e^{i\varphi} + e^{-i\varphi}) e^{in\varphi}$$

$$V_{mn} = -\frac{dE_0}{2} \cdot (\delta_{m,n+1} + \delta_{m,n-1})$$

Поправка второго порядка к энергии?

Поправка второго порядка к энергии

$$E_0^{(2)} = \sum_{n \neq l} \frac{V_{0n} V_{n0}}{E_0^{(0)} - E_n^{(0)}} = -\frac{V_{01} V_{10}}{E_1^{(0)}} - \frac{V_{0-1} V_{-10}}{E_{-1}^{(0)}} = -\frac{|V_{10}|^2}{E_1^{(0)}}$$

Или

$$E_0^{(2)} = -\frac{|V_{10}|^2}{E_1^{(0)}} = -\frac{d^2 E_0^2 I}{\hbar^2}$$