Таким образом, в нулевом приближении по оператору $\hat{C}$ получаем важный результат. Уравнение (57,7) представляет собой уравнение Шредингера. Координаты ядер входят в это уравнение как параметры. Функция $\varphi_m(\boldsymbol{r}_k, \boldsymbol{R}_i)$ описывает движение электронов при неподвижных ядрах. Уравнение (57,8) содержит лишь операторы, действующие на координаты ядер. Оно может рассматриваться как уравнение Шредингера для тяжелой подсистемы — ядер. При этом энергия электронной подсистемы $E_m(\boldsymbol{R}_i)$ играет роль потенциальной энергии ядер.

Полная волновая функция системы в нулевом приближении $\hat{C} = 0$ может быть представлена в виде произведения волновых функций α_m и φ_m, т. е. имеет такой же вид, как если бы обе подсистемы были вполне независимыми:

$$\psi = \alpha_m(\boldsymbol{R}_i)\,\varphi_m(\boldsymbol{r}_k, \boldsymbol{R}_i).$$

В описанном приближении можно говорить, что электронная подсистема адиабатически следует за движением ядер в том смысле, что при изменении положения ядер $\boldsymbol{R}_i$ электронная подсистема остается в том же квантовом состоянии E_m. Однако ее уровень энергии E_m изменяется в соответствии с движением ядер.

В общем виде нельзя сформулировать условие малости оператора $\hat{C}$. В каждой конкретной задаче этот вопрос следует рассматривать отдельно. Примеры такого рассмотрения могут быть найдены в книгах В. Паули и М. Борна и Хуан Кунь [1]).

§ 58. Теория возмущений в интегральной форме

Теория возмущений легко может быть развита в рамках формализма Фейнмана [2]). Для этого удобно основываться на интегральном уравнении (29,5) для функции Грина $K(\boldsymbol{r}_2 t_2;\ \boldsymbol{r}_1 t_1)$, которую будем обозначать как $K(2,1)$

$$K(2,\ 1) = K_0(2,\ 1) - \frac{i}{\hbar}\int\limits_{-\infty}^{\infty} K_0(2, 3)\,\hat{H}'(3)\,K(3,\ 1)\,d^4x_3. \qquad (58,1)$$

Здесь через $K_0(2,1)$ мы обозначили функцию Грина невозмущенной задачи $\hat{H} = \hat{H}_0$, $\hat{H}' = 0$.

Пользуясь малостью возмущения, решаем уравнение (58,1) методом последовательных приближений. В нулевом приближении,

[1]) В. Паули, Общие принципы волновой механики, Гостехиздат, 1947, стр. 141; М. Борн и Хуан Кунь, Динамическая теория кристаллических решеток, ИЛ, 1958, стр. 193.

[2]) Ссылка на стр. 104. См. также С. Швебер, Г. Бете, Ф. Гофман, Мезоны и поля, т. 1, стр. 78, ИЛ, 1957.

т. е. считая $\hat{H}' = 0$, имеем:

$$K(2,1) = K_0(2,1). \tag{58,2}$$

Следующее приближение мы получим, если подставим в интеграл (58,1) функцию Грина $K(3,1)$ в нулевом приближении, т. е.

$$K^{(1)}(2,1) = -\frac{i}{\hbar}\int K_0(2,3)\,\hat{H}'(3)\,K_0(3,1)\,d^4x_3. \tag{58,3}$$

Чтобы получить поправку к функции Грина во втором приближении, мы должны подставить в интеграл (58,1) функцию $K(3,1)$ уже с точностью до членов первого порядка малости:

$$K^{(2)}(2,1) = \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^2\int K_0(2,3)\,\hat{H}'(3)\,K_0(3,4)\,\hat{H}'(4)\,K_0(4,1)\,d^4x_3\,d^4x_4. \tag{58,4}$$

Аналогичным образом можно выписать поправку любого порядка малости. Окончательно имеем:

$$K(2,1) = K_0(2,1) - \frac{i}{\hbar}\int K_0(2,3)\,\hat{H}'(3)\,K_0(3,1)\,d^4x_3 + \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2\int K_0(2,3)\,\hat{H}'(3)\,K_0(3,4)\,\hat{H}'(4)\,K_0(4,1)\,d^4x_3\,d^4x_4 + \ldots \tag{58,5}$$

Формулу (58,5) можно интерпретировать следующим образом: нулевой член описывает распространение невозмущенной частицы из точки 1 в точку 2. Следующий член описывает распространение свободной частицы из точки 1 в точку 3. В точке 3 действует возмущение. Затем частица, опять как свободная, распространяется из точки 3 в точку 2. Интегрирование означает, что мы суммируем вклад всех возможных точек 3. Член второго порядка малости учитывает действие возмущения уже в двух точках 3 и 4 и т. д. Вычислив из уравнения (58,5) функцию Грина K в нужном приближении, мы тем самым знаем и волновую функцию в этом приближении. Удобство интегрального уравнения (58,1) в том и заключается, что оно позволяет чрезвычайно просто получить ряд теории возмущений. Примеры использования интегральной формы теории возмущений мы рассмотрим в гл. XIII.