ГЛАВА XVII

ПРИБЛИЖЕННЫЕ РЕШЕНИЯ НЕСТАЦИОНАРНОГО УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА

§ 1. Изменение «представления» и рассмотрение части гамильтониана по теории возмущений

Данная глава содержит два раздела и посвящена методам построения приближенных решений зависящего от времени уравнения Шредингера. По известному динамическому состоянию исследуемой квантовой системы в момент времени t_0 требуется определить динамическое состояние этой системы в момент времени t. Следовательно, задача состоит в построении, по возможности наиболее точном, оператора $U(t, t_0)$, который описывает эволюцию во времени динамических состояний системы в представлении Шредингера.

Напомним вкратце основные свойства оператора $U(t, t_0)$. Если гамильтониан системы $H(t)$ известен, то этот оператор однозначно определен и является решением интегрального уравнения

$$U(t, t_0) = 1 - i\hbar^{-1} \int_{t_0}^{t} H(\tau)\, U(\tau, t_0)\, d\tau \tag{1}$$

или, что эквивалентно, решением уравнения Шредингера

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U(t, t_0) = H(t)\, U(t, t_0) \tag{2}$$

с начальным условием

$$U(t_0, t_0) = 1. \tag{3}$$

Поскольку $H(t)$ — эрмитов оператор, то U — унитарный

$$U(t, t')\, U^{+}(t, t') = U^{+}(t, t')\, U(t, t') = 1. \tag{4}$$

Более того, справедлив закон композиции [1])

$$U(t, t') = U(t, t'')\, U(t'', t'), \tag{5}$$

[1]) Для доказательства этого закона композиции, физический смысл которого очевиден, заметим, что, если V — унитарный оператор, не зависящий от t, то оператор $U(t, t'')V$ является решением уравнения Шредингера (2). Для того чтобы он был равен $U(t, t')$ при всех t, достаточно, чтобы равенство выполнялось при некотором значении t, например, при $t = t''$, это дает $V = U(t'', t')$.

откуда следует

$$U^{\dagger}(t, t') = U(t', t). \tag{6}$$

Эквивалентное определение U можно получить, заменяя уравнение (1) на эрмитово сопряженное. Принимая во внимание (6), получаем

$$U(t, t_0) = 1 - i\hbar^{-1} \int_{t_0}^{t} U(t, \tau) H(\tau) d\tau. \tag{7}$$

Метод, описанный в настоящей главе, состоит в следующем. Предположим, что гамильтониан H представим в виде

$$H(t) \equiv H^{(0)}(t) + V(t), \tag{8}$$

где $H^{(0)}(t)$ — гамильтониан уравнения Шредингера, решения которого известны. Пусть $U^{(0)}(t, t_0)$ — оператор эволюции, отвечающий $H^{(0)}$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U^{(0)}(t, t_0) = H^{(0)}(t) U^{(0)}(t, t_0), \quad U^{(0)}(t_0, t_0) = 1. \tag{9}$$

Поскольку оператор $U^{(0)}(t, t_0)$ известен, то для определения U достаточно найти унитарный оператор

$$U_I(t, t_0) \equiv U^{(0)\dagger}(t, t_0) U(t, t_0). \tag{10}$$

Физическое значение оператора U_I обсуждалось в § VIII. 14. U_I — оператор эволюции состояний в промежуточном «представлении», получающемся из представления Шредингера унитарным преобразованием $U^{(0)\dagger}(t, t_0)$. Простое вычисление, детали которого приведены в § VIII. 14, показывает, что зависимость U_I от времени определяется гамильтонианом

$$V_I(t) \equiv U^{(0)\dagger}(t, t_0) V(t) U^{(0)}(t, t_0). \tag{11}$$

Другими словами, $U_I(t, t_0)$ есть решение уравнения

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U_I(t, t_0) = V_I(t) U_I(t, t_0), \quad U_I(t_0, t_0) = 1 \tag{12}$$

или, что эквивалентно,

$$U_I(t, t_0) = 1 - i\hbar^{-1} \int_{t_0}^{t} V_I(\tau) U_I(\tau, t_0) d\tau. \tag{13}$$

Оператор $U_I(t, t_0)$ обладает всеми свойствами оператора эволюции и, в частности, удовлетворяет уравнениям (1)—(7), в которых $H(t)$ следует заменить на $V_I(t)$.

Интегральные уравнения (1), (7), (13) можно, по крайней мере формально, решить методом итераций. Так, подставляя в правую часть (13) вместо $U_I(\tau, t_0)$ выражение

$$1 - i\hbar^{-1} \int_{t_0}^{\tau} V_I(\tau') U_I(\tau', t_0)\, d\tau',$$

получаем

$$U_I(t, t_0) = 1 - i\hbar^{-1} \int_{t_0}^{t} V_I(\tau)\, d\tau + \\ + (i\hbar)^{-2} \int_{t_0}^{t} d\tau \int_{t_0}^{\tau} d\tau'\, V_I(\tau) V_I(\tau') U(\tau', t_0). \quad (14)$$

Последовательные итерации дают разложение

$$U_I(t, t_0) = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} U_I^{(n)}(t, t_0), \quad (15)$$

где $U_I^{(n)}$ есть интеграл

$$U_I^{(n)} \equiv (i\hbar)^{-n} \int\limits_{t>\tau_n>\tau_{n-1}>\ldots>\tau_1>t_0} d\tau_n\, d\tau_{n-1} \ldots \\ \ldots d\tau_1\, V_I(\tau_n) V_I(\tau_{n-1}) \ldots V_I(\tau_1). \quad (16)$$

Учитывая определения (10) и (11), получаем следующее разложение для U:

$$U(t, t_0) = U^{(0)}(t, t_0) + \sum_{n=1}^{\infty} U^{(n)}(t, t_0), \quad (17)$$

$$U^{(n)}(t, t_0) = (i\hbar)^{-n} \int\limits_{t>\tau_n>\tau_{n-1}>\ldots>\tau_1>t_0} d\tau_n\, d\tau_{n-1} \ldots \\ \ldots d\tau_1 U^{(0)}(t, \tau_n) V(\tau_n) U^{(0)}(\tau_n, \tau_{n-1}) V(\tau_{n-1}) \ldots \\ \ldots U^{(0)}(\tau_2, \tau_1) V(\tau_1) U^{(0)}(\tau_1, t_0). \quad (18)$$

Разложения (15) и (17) представляют собой ряды по степеням V, которые сходятся тем лучше, чем ближе $U^{(0)}(t, t_0)$ к $U(t, t_0)$. Они служат отправной точкой для вычислений этой главы. Оператор $U^{(0)}$ суть приближение нулевого порядка, а $U^{(1)}$, $U^{(2)}$, ..., $U^{(n)}$, ... отвечают поправкам 1-го, 2-го, ..., n-го, ... порядков к этому приближению. Сложность вычисления этих поправок быстро растет с увеличением их порядка и обычно ограничиваются поправками низшего порядка.