ний нулевого приближения определяется из уравнения:

$$H_0\psi_m^{(0)} = \mathcal{E}_m^{(0)}\psi_m^{(0)}. \quad (9)$$

Предположим, что в нулевом приближении система находится в состоянии n (т. е. $\mathcal{E}_n \longrightarrow \mathcal{E}_n^{(0)}$ и $\psi_n \longrightarrow \psi_n^{(0)}$ при $\varepsilon \longrightarrow 0$). Тогда решение ур-ния (8) удобно искать в виде:

$$\psi_n = \sum_m C_{mn}\psi_m^{(0)},$$

$$\mathcal{E}_n = \mathcal{E}_n^{(0)} + \varepsilon\mathcal{E}_n^{(1)} + \varepsilon^2\mathcal{E}_n^{(2)} + \ldots, \quad (10)$$

$$C_{mn} = \delta_{mn} + \varepsilon C_{mn}^{(1)} + \varepsilon^2 C_{mn}^{(2)} + \ldots$$

(δ_{mn} — символ Кронекера). Подставляя ф-лы (10) в (8) и приравнивая коэффициенты при одинаковых степенях ε, получим:

$$\mathcal{E}_n^{(1)} = V_{nn}, \quad \mathcal{E}_n^{(2)} = \sum_{m\neq n}\frac{|V_{mn}|^2}{\mathcal{E}_n^{(0)} - \mathcal{E}_m^{(0)}};$$

$$C_{nn}^{(1)} = 0; \quad C_{mn}^{(1)} = \frac{V_{mn}}{\mathcal{E}_n^{(0)} - \mathcal{E}_m^{(0)}}, \quad m \neq n,$$

$$C_{nn}^{(2)} = -\frac{1}{2}\sum_{m\neq n}\frac{|V_{mn}|^2}{(\mathcal{E}_n^{(0)} - \mathcal{E}_m^{(0)})^2},$$

$$C_{mn}^{(2)} = \sum_{k\neq n}\frac{V_{mk}V_{kn}}{(\mathcal{E}_n^{(0)} - \mathcal{E}_k^{(0)})(\mathcal{E}_n^{(0)} - \mathcal{E}_m^{(0)})} - \quad (11)$$

$$-\frac{V_{nn}V_{mn}}{(\mathcal{E}_n^{(0)} - \mathcal{E}_m^{(0)})^2}, \quad m \neq n \text{ и т. д.}$$

Здесь $V_{kn} = \int \psi_k^{(0)*} V \psi_n^{(0)} dq$ —

матричный элемент оператора возмущения (dq — элемент объёма); волновые ф-ции $\psi_k^{(0)}$ считаются нормированными на единицу. Заметим, что поправка второго приближения к энергии осн. состояния всегда отрицательна.

Из ф-л (11) следует, что в тех случаях, когда имеется вырождение, т. е. система в низшем приближении имеет близкие уровни, $|\mathcal{E}_n^{(0)} - \mathcal{E}_m^{(0)}| < |\varepsilon V_{nm}|$, В. т. в описанном виде перестаёт быть применимой. В этой весьма распространённой ситуации приходится точно решать задачу о расщеплении близких уровней. Она сводится к решению т. н. секулярного ур-ния (от англ. secular — вековой; аналогичные ур-ния возникают в теории вековых возмущений в небесной механике):

$$\det|V_{nn'} - \delta_{nn'}\mathcal{E}_n^{(1)}| = 0, \quad (12)$$

где n, n' нумеруют все состояния, имеющие энергию, совпадающую в нулевом приближении с $\mathcal{E}_n^{(0)}$. Решение ур-ния (12) даёт, вообще говоря, разл. $\mathcal{E}_{n'}^{(1)}$ для разных n'. Происходит полное или частичное снятие вырождения (в зависимости от характера нарушения симметрии невозмущённой системы возмущающим потенциалом). Подставляя поочерёдно корни $\mathcal{E}_{n'}^{(1)}$ в ур-ние

$$\sum_{n'}(V_{nn'} - \mathcal{E}_{n'}^{(1)}\delta_{nn'})C_{n'n}^{(0)} = 0 \quad (13)$$

для нахождения коэффициентов разложения волновой ф-ции ψ_n по вырожденной системе состояний $\psi_{n'}^{(0)}$, можно установить вид волновой ф-ции низшего приближения.

Описанная процедура находит применение в очень широком круге физ. задач. Напр., гамильтониан H_0 может соответствовать задаче о движении электрона в кулоновском поле ядра. При этом возмущение U может описывать взаимодействие с медленно меняющимся во времени электрич. или магн. полем (возникающее при этом расщепление уровней наз. соответственно *Штарка эффектом* или *Зеемана эффектом*); в качестве U могут фигурировать спин-орбитальное или спин-спиновое взаимодействие и т. д.

Нестационарная В. т. Рассмотрим теперь важный случай, когда возмущения зависят от времени. Осн. задачей здесь является вычисление вероятностей квантовых переходов между состояниями невозмущённой системы, происходящих под влиянием возмущения. В. т. в этом случае основывается на методе вариации постоянных, так же как и в классич. механике. Задача состоит в решении ур-ния Шрёдингера

$$i\hbar\frac{\partial\psi(t)}{\partial t} = (H_0 + U(t))\psi(t) \quad (14)$$

при условии, что в нач. момент система находилась в одном из стационарных состояний $\psi_n^{(0)}\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\mathcal{E}_n^{(0)}t\right)$ невозмущённого гамильтониана H_0. Рассмотрим достаточно общую ситуацию, когда возмущение быстро убывает при $t \longrightarrow \pm\infty$, и в качестве начального момента времени выберем точку $t = -\infty$.

Решение ур-ния (14) удобно искать в виде ряда:

$$\psi(t) = \sum_m C_{mn}(t)\psi_m^{(0)}\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\mathcal{E}_m^{(0)}t\right), \quad (15)$$

в к-ром зависимость коэффициентов разложения от времени возникает только благодаря возмущению:

$$i\hbar\dot{C}_{mn}(t) = \sum_k U_{mk}(t)C_{kn}(t). \quad (16)$$

Здесь

$$C_{mn}(-\infty) = \delta_{mn},$$

$$U_{mk}(t) = \int \psi_m^{(0)*}U(t)\psi_k^{(0)}\exp\left(-\frac{i}{\hbar}t(\mathcal{E}_k^{(0)} - \mathcal{E}_m^{(0)})\right)dq.$$

Решение ур-ний (16), так же как и в предыдущих примерах, легко найти в виде ряда по малому параметру ε, к-рый в качестве множителя может быть выделен в возмущении.

Для простоты рассмотрим случай, когда возмущение содержит только одну гармонику с частотой ω, т. е. $U(t) = V\exp(-i\omega t)$. Ф-ции $|C_{mn}(t)|^2$ характеризуют вероятность перехода под влиянием возмущения к моменту времени t из нач. состояния n в другое собств. состояние m невозмущённого гамильтониана. Представляет спец. интерес отнесённая к единице времени вероятность перехода из состояния n при $t \longrightarrow -\infty$ в состояние m при $t \longrightarrow +\infty$. Эта величина в первом приближении В. т. определяется выражением:

$$\lim_{t\to+\infty}\frac{d}{dt}|C_{mn}(t)|^2 = \frac{2\pi}{\hbar}|V_{mn}|^2\delta(\mathcal{E}_m^{(0)} - \mathcal{E}_n^{(0)}), \quad (17)$$

где δ — дельта-функция Дирака. Т. о., за бесконечно большой отрезок времени переход осуществляется с сохранением энергии. Интегрируя (17) по малому энергетич. интервалу $\Delta\mathcal{E}$ в окрестности $\mathcal{E}_n^{(0)}$ и считая, что число квантовомеханич. состояний в этом интервале равно $\rho(\mathcal{E}_n^{(0)})\Delta\mathcal{E}$, где ρ — плотность уровней энергии, получим выражение для вероятности перехода в единицу времени в виде:

$$w_{mn} = \frac{2\pi}{\hbar}|V_{mn}|^2\rho(\mathcal{E}_n^{(0)}). \quad (18)$$

Если нач. состояние n характеризуется импульсом $\boldsymbol{p}$ и нормировано на единичную плотность потока, а конечное состояние характеризуется импульсом $\boldsymbol{p}'$ и нормировано на единицу (точнее, на δ-функцию от $\boldsymbol{p}/2\pi\hbar$), то выражение (18) имеет размерность площади и представляет собой дифференц. сечение рассеяния. Ф-ла (18) при этом соответствует т. н. *борновскому приближению* теории рассеяния.

Описанная методика с нек-рыми модификациями охватывает широкий круг задач, относящихся к переходам между уровнями энергии в атомах и атомных ядрах, к распадам нестационарных состояний, к описанию рассеяния и т. д. Она непосредственно обобщается на случай квантовой теории поля (КТП).