

Variační metoda

Najděte přibližnou hodnotu energie základního stavu lineárního harmonického oscilátoru pro testovací funkce (N je normovací konstanta)

- $\psi_a = N \frac{1}{x^2+a}$
- $\psi_a = Nx^2 e^{-ax^2}$

LHO s poruchou

Na lineární harmonický oscilátor s frekvencí ω působí porucha $V' = \lambda e^{-\alpha x^2}$. Jaká je korekce k energii základního a prvního excitovaného stavu daná prvním řádem poruchové teorie?

LHO s poruchou x^3

Vibrační stavy molekuly lze přibližně popsat pomocí lineárních harmonických oscilátorů, jednoho pro každou vibraci. Pro jednu vibraci můžeme uvažovat Hamiltonián

$$H_0 = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2,$$

kde m je odpovídající redukovaná hmotnost. Skutečná závislost energie na výchylce x od rovnovážné polohy není kvadratická, lépe ji popisuje Morseho potenciál. Jako první korekci ke kvadratickému potenciálu můžeme uvažovat poruchu

$$V' = \alpha \hbar \omega \left(\frac{2m\omega}{\hbar} \right)^{\frac{3}{2}} x^3.$$

- Vyjádřete poruchu pomocí zvyšovacích a snižovacích operátorů příslušejících H_0 .
- Vypočtěte všechny maticové elementy $\langle m|V'|n\rangle$ poruchy mezi původními neporušenými stavy oscilátoru.
- Jaká je změna energie pro druhý excitovaný stav do druhého řádu poruchové teorie (včetně?)