Cvičení ÚDKM 7. 4. 2022 (8. cvičení)

Témata:

- úvod do přibližných metod: poruchová metoda
- použití PM na harmonickém oscilátoru

Úvod do přibližných metod: poruchová metoda

V kvantové mechanice lze vyřešit analyticky jen velmi málo problémů, proto se běžně používají přibližné metody. Jednou z nich je tzv. **poruchová metoda**. Ta předpokládá, že náš problém (popsaný hamiltoniánem $\hat{H}$) se liší od nějakého problému $\hat{H}_0$, který umíme vyřešit přesně (tzv. neporušený problém; např. LHO, potenciálová jáma, atom vodíku), jen velmi málo o $\delta\hat{V}$ (parametr δ je velmi malý), a tedy řešení lze rozepsat jako řadu v nějakém parametru δ:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \delta\hat{V}\,, \tag{1}$$

$$E_n = E_n^{(0)} + \delta E_n^{(1)} + \delta^2 E_n^{(2)} + \cdots\,, \tag{2}$$

$$|\psi_n\rangle \equiv |n\rangle = \left|n^{(0)}\right\rangle + \delta\left|n^{(1)}\right\rangle + \delta^2\left|n^{(2)}\right\rangle + \cdots \tag{3}$$

Naším úkolem je pak počítat jednotlivé členy řad pro energii n-tého stavu E_n a příp. pro odpovídající stav $|\psi_n\rangle$ (horní index značí tzv. řád poruchové metody). Trik je v tom, že i-tou opravu energie (a vlnové funkce) si umíme vyjádřit vždy jen pomocí nižších členů, přičemž nultý (= výchozí) odhad energie $E^{(0)}$ (resp. vln. funkce) umíme získat přesně. Poctivé odvození poruchové metody uvidíte na přednášce (nebo si můžete najít v téměř libovolné knize o kvantové mechanice), zde se spokojíme jen s náznakem a výslednými vztahy. Řešíme, jako obvykle, Schrödingerovu rovnici. Dosadíme za hamiltoninán, energie a vlnovou funkci odpovídající řady uvedené výše. Porovnáním členů pro jednotlivé mocniny našeho poruchového parametru (= řády poruchové metody) pak získáme rovnice pro energii a vlnovou funkci, které vyřešíme.

Poruchová metoda I: pro nedegenerované hladiny

Předpokládejme nejprve, n-tá energetická hladina není degenerovaná, tj. jedné energie odpovídá právě jedna vlnová funkce (případu degenerace se budeme věnovat dále). Porovnáním výrazů pro jednotlivé mocniny získáme pro první opravu energie (tj. členy s δ^1)

$$E_n^{(1)} = \left\langle n^{(0)}\middle|\,\hat{V}\,\middle|n^{(0)}\right\rangle \tag{4}$$

a pro druhou opravu energie (tj. členy s δ^2)

$$E_n^{(2)} = \sum_{k\neq n} \frac{\left\langle n^{(0)}\middle|\,\hat{V}\,\middle|k^{(0)}\right\rangle\left\langle k^{(0)}\middle|\,\hat{V}\,\middle|n^{(0)}\right\rangle}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}\,. \tag{5}$$

Suma probíhá přes všechny vlastní stavy $\left|k^{(0)}\right\rangle$ neporušeného hamiltoniánu $\hat{H}_0$ kromě toho, $\left|n^{(0)}\right\rangle$, ke kterému počítáme opravu.

1D harmonický oscilátor s poruchou

Použití poruchové metody si ukážeme na případě porušeného lineárního harmonického oscilátoru. Uvažujme problém

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2} + \frac{\hat{x}^2}{2} + \delta\hat{x}\,. \tag{6}$$

Naším cílem je spočítat opravu k energii základního stavu v prvním a druhém řádu poruchové metody, tj. najít $E_0^{(1)}$ a $E_0^{(2)}$.

Zjevně v tomto případě vezmeme:

- neporušený problém: lineární harmonický oscilátor

$$\hat{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2} + \frac{\hat{x}^2}{2}\,; \tag{7}$$

energie n-tého stavu $|n\rangle$ ($= \left|\psi_n^{(0)}\right\rangle$) je dána vztahem (viz první úkol)

$$E_n = n + \frac{1}{2}\,. \tag{8}$$

Jelikož nás zajímá oprava k základnímu stavu, máme $n = 0$.

- porucha: člen $\delta\hat{x}$

$$\hat{V} = \hat{x} \tag{9}$$

Nyní dosadíme do výrazů pro $E_0^{(1)}$ a $E_0^{(2)}$. Za $\hat{x}$ dále dosadíme operátory $\hat{a}$, $\hat{a}^\dagger$ (viz první úkol, rovnice (**??**)) a necháme tyto operátory působit na daný stav LHO (rovnice (**??**) a (**??**)). Nakonec využijeme orthonormality vlastních stavů LHO, $\langle n|k\rangle = \delta_{nk}$.

V prvním řádu dostaneme:

$$\begin{aligned}
E_0^{(1)} &= \langle 0|\,\hat{V}\,|0\rangle = \\
&= \langle 0|\,\hat{x}\,|0\rangle = \\
&= \langle 0|\,\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\hat{a} + \hat{a}^\dagger\right)|0\rangle = \\
&= \frac{1}{\sqrt{2}}\,\langle 0|\left(\hat{a}\,|0\rangle + \hat{a}^\dagger\,|0\rangle\right) = \\
&= \frac{1}{\sqrt{2}}\,\langle 0|\left(0 + \sqrt{0+1}\,|1\rangle\right) = \\
&= \frac{1}{\sqrt{2}}\,\langle 0|1\rangle = 0
\end{aligned} \tag{10}$$

Alternativně bychom mohli tento člen spočítat v souřadnicové reprezentaci:

$$E_0^{(1)} = \langle 0|\,\hat{V}\,|0\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_0^*(x)\,x\,\psi_0(x)\mathrm{d}x\,. \tag{11}$$

(I) Ověřte, že dostaneme stejný výsledek.

V druhém řádu dostaneme:

$$\begin{aligned}
E_0^{(2)} &= \sum_{k\neq 0} \frac{\langle 0|\,\hat{V}\,|k\rangle\,\langle k|\,\hat{V}\,|0\rangle}{E_0^{(0)} - E_k^{(0)}} = \\
&= \sum_{k\neq 0} \frac{|\,\langle 0|\,\hat{x}\,|k\rangle\,|^2}{0 + 1/2 - (k + 1/2)} = \\
&= \sum_{k\neq 0} \frac{|\,\langle 0|\,\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\hat{a} + \hat{a}^\dagger\right)|k\rangle\,|^2}{-k} = \\
&= \sum_{k\neq 0} \frac{\frac{1}{2}|\,\langle 0|\left(\sqrt{k}\,|k-1\rangle + \sqrt{k+1}\,|k+1\rangle\right)|^2}{-k} = \\
&= \sum_{k\neq 0} \frac{\frac{1}{2}|\left(\sqrt{k}\,\langle 0|k-1\rangle + \sqrt{k+1}\,\langle 0|k+1\rangle\right)|^2}{-k} = \\
&= \frac{\frac{1}{2}|\sqrt{1}\,\langle 0|1-1\rangle\,|^2}{-1} = \\
&= \frac{\frac{1}{2}}{-1} = \\
&= -\frac{1}{2}
\end{aligned} \tag{12}$$

Ze součtu přes k zůstane jen jeden přispívající člen (ostatní vypadnou kvůli orthogonalitě vlastních stavů LHO). (Výpočet bychom mohli provést také např. v souřadnicové reprezentaci, podobně jako výše.)

Vidíme tedy, že první oprava k energii vymizí a uplatní se až druhý řád poruchové metody. Pro energii základního stavu tedy získáme

$$E_0 \approx E_0^{(0)} + \delta E_0^{(1)} + \delta^2 E_0^{(2)} = \frac{1}{2} + \delta 0 + \delta^2\,\frac{-1}{2} = \frac{1-\delta^2}{2}\,. \tag{13}$$

Pokud tedy např. $\delta = 0,1$, získáme $E_0 \approx 0,495$.

(II) Na vás je nyní podobný výpočet, tj. první a druhá oprava energie základního stavu, provést pro LHO s poruchou (a) $\hat{x}^2$ a (b) $\hat{x}^4$. Hamiltoniány budou mít tvar

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2} + \frac{\hat{x}^2}{2} + \delta\hat{x}^2\,, \qquad \text{resp.} \qquad \hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2} + \frac{\hat{x}^2}{2} + \delta\hat{x}^4\,. \tag{14}$$

Postup bude zcela analogický tomu popsanému výše: zjistíme, jak působí $\hat{x}^2$ (resp. $\hat{x}^4$) na obecný stav LHO $|k\rangle$ (rozepsáním na $\hat{a}$ a $\hat{a}^\dagger$), a následně dosadíme do výrazů pro $E_0^{(1)}$ a $E_0^{(2)}$. Je potřeba ale dát pozor na to, že operátory $\hat{a}$ a $\hat{a}^\dagger$ spolu nekomutují! Tedy např. pro $\hat{x}^2$ získáme

$$\hat{x}^2 = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\hat{a} + \hat{a}^\dagger\right)\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\hat{a} + \hat{a}^\dagger\right) = \frac{1}{2}\left(\hat{a}\hat{a} + \hat{a}^\dagger\hat{a} + \hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger\right)\,. \tag{15}$$

Měli byste získat:

$$\text{(a)} \qquad E_0^{(1)} = \frac{1}{2}\,, \quad E_0^{(2)} = -\frac{1}{4}\,, \tag{16}$$

$$\text{(b)} \qquad E_0^{(1)} = \frac{3}{4}\,, \quad E_0^{(2)} = -\frac{21}{8}\,. \tag{17}$$

Vyčíslete energii porušeného LHO do prvního a druhého řádu poruchové pro hodnotu $\delta = 0.01$ a $\delta = 0.1$. (pro oba případy).

Poruchová metoda pro degenerované hladiny

V tomto druhém příkladu se zaměříme na případy degenerovaných hladin, tj. na případy, kdy několik stavů našeho neporušeného hamiltoniánu má stejnou energii a my hledáme opravy k jednomu z nich. V takových případech musíme postupovat trochu jinak než v případě nedegenerovaných hladin. Tentokrát je vlnová funkce n-té hladiny, $\left|n^{(0)}\right\rangle$, v nultém řádu lineární kombinací všech stavů s touto energií, tj.

$$\left|n^{(0)}\right\rangle \to \sum_i \alpha_i \left|n_i^{(0)}\right\rangle \equiv \sum_i \alpha_i \left|i^{(0)}\right\rangle\,. \tag{18}$$

Pro první řád místo rovnice (4) dostaneme soustavu lineárních rovnic pro první opravu energie $E_n^{(1)}$ a pro příspěvky jednotlivých stavů v nultém řádu, tj. koeficienty α_i. Získáme tedy vlastní problém

$$\begin{pmatrix} W_{11} - E_n^{(1)} & W_{12} & \cdots & W_{1N} \\ W_{21} & W_{22} - E_n^{(1)} & \cdots & W_{2N} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ W_{N1} & W_{N2} & \cdots & W_{NN} - E_n^{(1)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \vdots \\ \alpha_N \end{pmatrix} = 0\,, \tag{19}$$

který řešíme pomocí determinantu. N zde značí počet stavů s energií $E_n^{(0)}$ a pro jednoduchost jsme označili $W_{ij} = \left\langle i^{(0)}\right|\hat{V}\left|j^{(0)}\right\rangle$. (Pozn.: Máme tedy N rovnic a jednu rovnici pro normalizaci $\sum_i |\alpha_i|^2 = 1$ pro celkem $N+1$ neznámých.) V případě, že hladina degenerovaná není, zůstane nám pouze první člen a získáme nám známou rovnici $E_n^{(1)} = \left\langle n^{(0)}\right|\hat{V}\left|n^{(0)}\right\rangle$.

Spřažené harmonické oscilátory

Nejjednodušším příkladem systému s degenerovanými hladinami jsou dva spřažené harmonické oscilátory,

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2} + \frac{\hat{x}^2}{2} + \frac{\hat{p}_y^2}{2} + \frac{\hat{y}^2}{2} + \delta\hat{x}^2\hat{y}^2\,. \tag{20}$$

Neporušeným problémem jsou zjevně lineární harmonické oscilátory popsané hamiltoniány

$$\hat{H}_{0,i} = \frac{\hat{p}_i^2}{2} + \frac{\hat{x}_i^2}{2} \tag{21}$$

a naší poruchou je jejich interakce

$$\hat{V} = \hat{x}^2\hat{y}^2\,. \tag{22}$$

Tedy celkový neporušený hamiltonián $\hat{H}_0$ je

$$\hat{H}_0 = \frac{\hat{p}_x^2}{2} + \frac{\hat{x}^2}{2} + \frac{\hat{p}_y^2}{2} + \frac{\hat{y}^2}{2} \,. \tag{23}$$

Vlastní funkce tohoto celkového hamiltoniánu $\hat{H}_0$ uvažujeme jako součin vlastních funkcí dílčích LHO, tj.

$$|i\, j\rangle = |i\rangle_x \, |j\rangle_y \ , \tag{24}$$

$|i\rangle_x$ značí i-tou hladinu prvního LHO a $|j\rangle_y$ značí j-tou hladinu druhého LHO. Pro působení hamiltoniánu (23) (a později také (22)) platí, že x-ové operátory působí jen na stavy $|i\rangle_x$ a y-ové operátory jen na stavy $|j\rangle_y$ (tj. učeně řečeno, $\hat{H}_{0,x}$ působí v prostoru stavů $|i\rangle_x$ a $\hat{H}_{0,y}$ v prostoru stavů $|j\rangle_y$.)

(I) Jaká je energie systému, neinteragují-li spolu tyto dva LHO? (Tj. zanedbáme člen $\hat{V}$ a řešíme jen neporušený systém.) Mělo by vyjít $E_{ij} = i + j + 1$. Vidíme tedy, že kromě základního stavu (tj. $i = j = 0$) je spektrum degenerované.

Uvažujme první excitovaný stav s energií $E_1 = 2$ a spočítejme první korekci energie. Energetické hladině $E_1 = 2$ odpovídají dva stavy: (a) $i = 1$ a $j = 0$, tj. $|1\,0\rangle$, nebo (b) $i = 0$ a $j = 1$, tj. $|0\,1\rangle$; musíme tedy použít degenerovanou poruchovou metodu. Dosazením do (19) dostaneme:

$$\begin{pmatrix} \frac{3}{4} - E_1^{(1)} & 0 \\ 0 & \frac{3}{4} - E_1^{(1)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \end{pmatrix} = 0 \,. \tag{25}$$

(II) Získejte výše napsanou matici. Nápověda: působení $\hat{x}^2$ a $\hat{y}^2$ vyjádřete pomocí operátorů $\hat{a}$, $\hat{a}^\dagger$ (viz dřívější cvičení).

Vyřešením této soustavy rovnic (pomocí determinantu, který požadujeme roven nule) získáme jeden dvojnásobný kořen

$$E_1^{(1)} = \frac{3}{4} \,. \tag{26}$$

V tomto případě tedy nedojde k rozštěpení hladin (tedy nedojde k sejmutí degenerace), obě hladiny se posunou o stejnou hodnotu. Jejich energie bude

$$E_1 \approx E_1^{(0)} + \delta E_1^{(1)} = 2 + \frac{3}{4}\delta \,. \tag{27}$$

(III) Zopakujte výše popsaný postup pro třetí excitovaný stav, tj. spočtěte $E_3^{(1)}$. Mělo by vám vyjít, že dojde k částečnému sejmutí degenerace. Pro čtvrtý excitovaný stav by pak mělo vyjít úplné sejmutí degenerace. (Stačí řešit jeden z těchto dvou případů.)

Povinné úlohy na příště

1. (1 b.) Určete první a druhou opravu energie pro LHO s poruchou $\hat{x}^2$ (tj. úkol (II))
2. (1 b.) Uvažujme 2D harmonický oscilátor s poruchou $\hat{x}\hat{y}$,

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2} + \frac{\hat{x}^2}{2} + \frac{\hat{p}_y^2}{2} + \frac{\hat{y}^2}{2} + \delta \hat{x}\hat{y} \,. \tag{28}$$

Vyjádřete nejprve obecně energii neporušeného oscilátoru. Poté spočtěte opravu k energii (v prvním řádu poruchové metody) pro první excitovaný stav.

Bonusová úloha

Nastudujte si odvození prvního a druhého řádu poruchové metody, např. z knihy doc. Zamastila (J. Zamastil a J. Benda: Kvantová mechanika a elektrodynamika, Karolinum 2016.) a odvoďte výraz pro třetí řád poruchové metody.

Kontrolní výsledek:

$$E_n^{(3)} = \sum_{k,l\neq n} \frac{\left\langle \psi_n^{(0)} \middle| \hat{V} \middle| \psi_k^{(0)} \right\rangle \left\langle \psi_k^{(0)} \middle| \hat{V} \middle| \psi_l^{(0)} \right\rangle \left\langle \psi_l^{(0)} \middle| \hat{V} \middle| \psi_n^{(0)} \right\rangle}{\left(E_n^{(0)} - E_k^{(0)}\right)\left(E_n^{(0)} - E_l^{(0)}\right)} - \left\langle \psi_n^{(0)} \middle| \hat{V} \middle| \psi_n^{(0)} \right\rangle \sum_{l\neq n} \frac{\left\langle \psi_n^{(0)} \middle| \hat{V} \middle| \psi_l^{(0)} \right\rangle \left\langle \psi_l^{(0)} \middle| \hat{V} \middle| \psi_n^{(0)} \right\rangle}{\left(E_n^{(0)} - E_l^{(0)}\right)^2} \,. \tag{29}$$