Cvičení ÚDKM - řešení

Témata:

- poruchová metoda pro nedegenerované hladiny

Poruchová metoda (pro nedegenerované hladiny)

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), jen velmi málo o $\delta\hat{V}$ (parametr δ je velmi malý), a tedy řešení lze rozepsat jako řadu v nějakém parametru δ:

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

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

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

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). Odvození poruchové metody uvidíte na přednášce (nebo si můžete najít v téměř libovolné knize o kvantové mechanice), zde se spokojíme jen s výslednými vztahy.

$\hat{H}$, $\hat{H}_0$ a $\hat{V}$ jsou zadané a $E_n^{(0)}$ a $\left|\psi_n^{(0)}\right\rangle$ známe nebo je snadno spočítáme. Pro první opravu energie platí

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

a pro druhou opravu

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

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

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:

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

(VII) Ověřte, že dostaneme stejný výsledek.

(VII) Integrand je součin sudé, liché a sudé funkce, čili funkce lichá. Integrál z liché funkce přes symetrický interval dává nulu.

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 $E_0 \approx 0,495$.

(VIII) 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).

(VIII)

(a) Anharmonický oscilátor $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2} + \frac{\hat{x}^2}{2} + \delta\hat{x}^2$*:*
Pro poruchový člen máme

$$\hat{x}^2 = \frac{1}{2}\left(\hat{a}\hat{a}+\hat{a}^\dagger\hat{a}+\hat{a}\hat{a}^\dagger+\hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger\right)$$

Pro působení na funkci $|k\rangle$ *spočteme*

$$\begin{aligned}\hat{x}^2|k\rangle &= \frac{1}{2}\left(\hat{a}\hat{a}+\hat{a}^\dagger\hat{a}+\hat{a}\hat{a}^\dagger+\hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger\right)|k\rangle \\ &= \frac{1}{2}\left(\sqrt{k(k-1)}\,|k-2\rangle + k\,|k\rangle + (k+1)\,|k\rangle + \sqrt{(k+1)(k+2)}\,|k+2\rangle\right) \\ &= \frac{1}{2}\left(\sqrt{k(k-1)}\,|k-2\rangle + (2k+1)\,|k\rangle + \sqrt{(k+1)(k+2)}\,|k+2\rangle\right) .\end{aligned}$$

Pro první řád poruchové metody získáme

$$E_0^{(1)} = \langle 0|\,\hat{x}^2\,|0\rangle = \frac{1}{2}\langle 0|0\rangle = \frac{1}{2}\,;$$

přispívá pouze stav $k = 0$*, tj. jen prostřední člen ve výše odvozeném vztahu.*
Pro druhý řád sčítáme přes všechna kladná k *různá od základního stavu (tj. mimo* $k = 0$*). Přispívá tedy jen stav s* $k = 2$ *(první člen výše):*

$$\begin{aligned}E_0^{(2)} &= \sum_{k\neq 0}\frac{\langle 0|\,\hat{x}^2\,|k\rangle\,\langle k|\,\hat{x}^2\,|0\rangle}{-k} = \\ &= \sum_{k\neq 0}\frac{\frac{1}{4}\sqrt{k(k-1)}\langle 0|\,k-2\rangle\sqrt{k(k-1)}\langle k-2|\,0\rangle}{-k} = \\ &= \frac{\frac{1}{4}|\sqrt{2}\langle 0|0\rangle|^2}{-2} = \\ &= \frac{\frac{1}{2}}{-2} = \\ &= -\frac{1}{4}\,.\end{aligned}$$

(b) Anharmonický oscilátor $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2} + \frac{\hat{x}^2}{2} + \delta\hat{x}^4$*:*
Postupujeme zcela analogicky jako v (a). Nejprve spočteme působení operátoru $\hat{x}^4$ *na funkci* $|k\rangle$*:*

$$\begin{aligned}\hat{x}^4 = \frac{1}{4}\big(&\hat{a}\hat{a}\hat{a}\hat{a} + \hat{a}^\dagger\hat{a}\hat{a}\hat{a} + \hat{a}\hat{a}^\dagger\hat{a}\hat{a} + \hat{a}\hat{a}\hat{a}^\dagger\hat{a} + \hat{a}\hat{a}\hat{a}\hat{a}^\dagger + \\ &+ \hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger\hat{a}\hat{a} + \hat{a}^\dagger\hat{a}\hat{a}^\dagger\hat{a} + \hat{a}^\dagger\hat{a}\hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}\hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger\hat{a} + \hat{a}\hat{a}^\dagger\hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}\hat{a}\hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger + \\ &+ \hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger\hat{a} + \hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger\hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a}\hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger + \hat{a}\hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger\big)\end{aligned}$$

čili

$$\begin{aligned}\hat{x}^4|k\rangle = \frac{1}{4}\Big(&\sqrt{k(k-1)(k-2)(k-3)}\,|k-4\rangle + \\ &+ (4k-2)\,\sqrt{k(k-1)}\,|k-2\rangle + \\ &+ \left(6k^2+6k+3\right)|k\rangle + \\ &+ (4k+6)\,\sqrt{(k+1)(k+2)}\,|k+2\rangle + \\ &+ \sqrt{(k+1)(k+2)(k+3)(k+4)}\,|k+4\rangle\Big)\end{aligned}$$

V prvním řádu se podílí opět jen prostřední člen s $k = 0$

$$E_0^{(1)} = \langle 0|\, \hat{x}^4 \,|0\rangle = \frac{3}{4}\langle 0|\, 0\rangle = \frac{3}{4}\,.$$

V druhém řádu máme jen dva nenulové příspěvky: $k = 4$ (první člen) a $k = 2$ (druhý člen)

$$\begin{aligned}
E_0^{(2)} &= \sum_{k\neq 0} \frac{\langle 0|\, \hat{x}^4 \,|k\rangle \,\langle k|\, \hat{x}^4 \,|0\rangle}{-k} = \\
&= \frac{\frac{1}{16}\sqrt{k(k-1)(k-2)(k-3)}\langle 0|\, k-4\rangle \sqrt{k(k-1)(k-2)(k-3)}\langle k-4|\, 0\rangle}{-k} + \\
&\quad + \frac{\frac{1}{16}\,(4k-2)\,\sqrt{k(k-1)}\langle 0|\, k-2\rangle\,(4k-2)\,\sqrt{k(k-1)}\langle k-2|\, 0\rangle}{-k} = \\
&= \frac{1}{16}\left(\frac{|\sqrt{24}\langle 0|\, 0\rangle|^2}{-4} + \frac{|6\sqrt{2}\langle 0|\, 0\rangle|^2}{-2}\right) = \\
&= -\frac{21}{8}\,.
\end{aligned}$$

Zde pozor, máme součet druhých mocnin, nikoliv druhou mocninu součtu.