KVANTNA MEHANIKA naloga:

PRETURBACIJA

Rok Zaplotnik

NALOGA:

Izračunati moram popravke energij lastnih stanj v prvem redu preturbacije za anharmonski oscilator, ki ga v prvem približku zapišemo s potencialom:

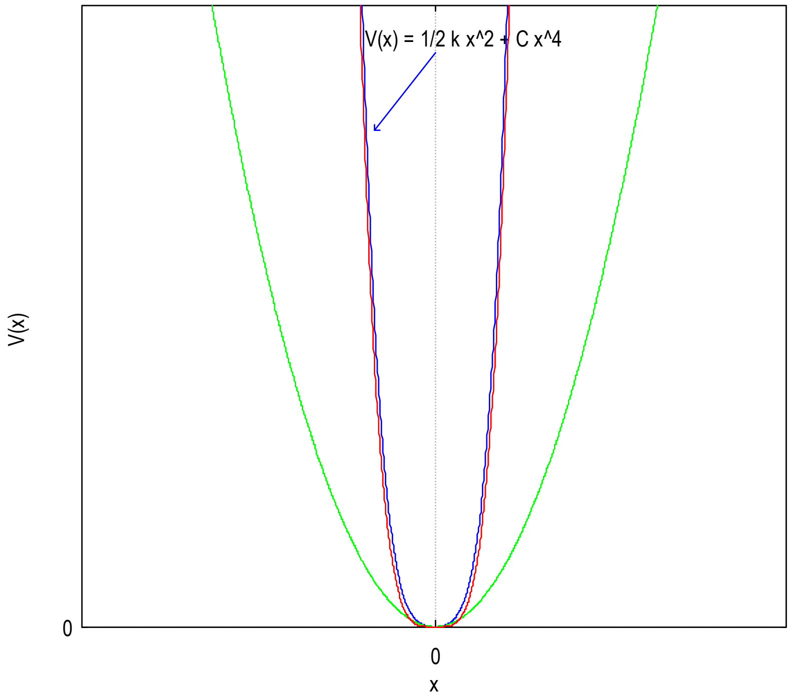
$$V(x) = \frac{1}{2}kx^2 + cx^4$$

Izračunati pa moram tudi popravke energij v drugem redu preturbacije za anharmonski oscilator s potencialom:

$$V(x) = \frac{1}{2}kx^2 + cx^3$$

REŠITEV:

Prvi potencial izgleda takole:



Že iz grafa je razvidno, da bodo energije lastnih stanj višje kot energije harmonskega oscilatorja. Energije lastnih stanj pa lahko zapišemo kot vsoto energij harmonskega oscilatorja in popravka energij prvega reda preturbacije.

$$E_n = E_n^0 + {}_0\langle n|V'|n\rangle_0$$

Izračunati maramo

$$c\,{}_0\langle n|x^4|n\rangle_0$$

x zapišemo s pomočjo kreacijskih in anihilacijskih operatorjev

$$x = \frac{x_0}{\sqrt{2}}(a + a^+)$$

kjer je

$$x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \qquad \omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$$

V naslednjih računih upoštevamo delovanje kreacijskega ter anihilacijskega operatorja na stanje | n >.

$$a^+|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle \qquad a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle$$

$$|(a+a^+)^2 n\rangle_0 = (a^2 + aa^+ + a^+a + a^{+^2})|n\rangle_0 =$$
$$\sqrt{n-1}\sqrt{n}|n-2\rangle + (n+1)|n\rangle + n|n\rangle + \sqrt{n+2}\sqrt{n+1}|n+2\rangle$$

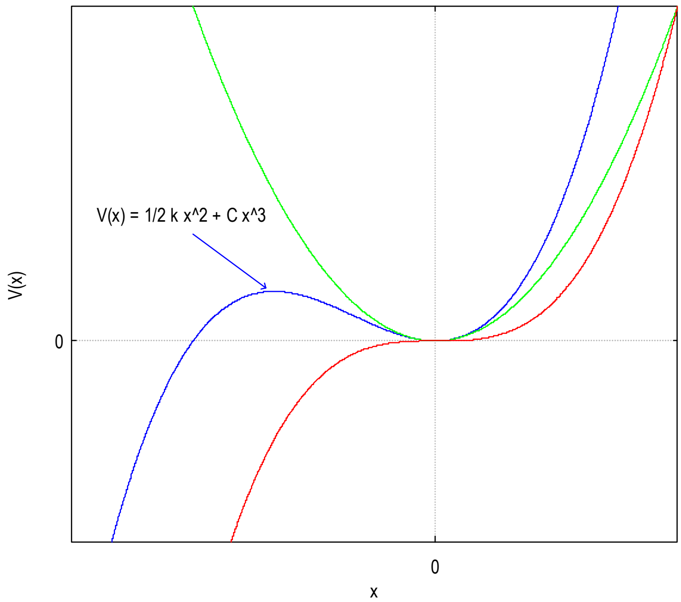
Če namesto x vstavimo kreacijske in anihilacijske operatorje dobimo naslednji izraz.

$$c_0\langle n|\frac{x_0^4}{4}(a+a^+)^4|n\rangle_0 = \frac{cx_0^4}{4}\,{}_0\langle(a+a^+)^2 n|(a+a^+)^2 n\rangle_0 =$$

Sedaj uporabimo prej izračunan rezultat in med seboj zmnožimo le enaka stanja in dobimo končni rezultat, koliko je popravek prvega reda preturbacije.

$$= \frac{cx_0^4}{4}((n-1)n + (2n+1)^2 + (n+2)(n+1)) =$$
$$= \frac{cx_0^4}{4}(n^2 - n + 4n^2 + 4n + 1 + n^2 + n + 2n + 2) =$$
$$= \frac{cx_0^4}{4}(6n^2 + 6n + 3) = \frac{3cx_0^4}{4}(2n^2 + 2n + 1)$$

Drugi potencial pa izgleda takole:



Pri tem potencialu pa ni takoj razvidno ali se bodo energije lastnih stanj zvišale ali znižale, vendar po temeljitem premisleku ugotovimo, da se energije znižajo, kar bomo potrdili tudi z računom.

Za ta potencial pa ni dovolj prvi približek, saj je ta enak nič (integral lihe funkcije od -∞ do + ∞), zato moramo izračunati drugi približek.

$$E_n = E_n^0 + \sum_{m\neq n} \frac{\left| {}_0\langle m|V'|n\rangle_0 \right|^2}{E_n^0 - E_m^0}$$

Izračunati moramo

$$c^2 \sum_{m\neq n} \frac{\left| {}_0\langle m|x^3|n\rangle_0 \right|^2}{E_n^0 - E_m^0}$$

zato bomo uporabili naslednja izraza.

$$|xm\rangle = \frac{x_0}{\sqrt{2}}(a+a^+)|m\rangle = \frac{x_0}{\sqrt{2}}\sqrt{m}|m-1\rangle + \frac{x_0}{\sqrt{2}}\sqrt{m+1}|m+1\rangle$$

$$\frac{x_0^{\;2}}{2}|(a+a^+)^2 n\rangle_0 = \frac{x_0^{\;2}}{2}(a^2 + aa^+ + a^+a + a^{+2})|n\rangle_0 =$$

$$\frac{x_0^{\;2}}{2}\left(\sqrt{n-1}\sqrt{n}|n-2\rangle + (n+1)|n\rangle + n|n\rangle + \sqrt{n+2}\sqrt{n+1}|n+2\rangle\right)$$

Ta dva izraza združimo:

$$
{}_0\langle m|x^3|n\rangle_0 = \left(\frac{x_0}{\sqrt{2}}\right)^3 (\sqrt{m}\sqrt{n-1}\sqrt{n}\langle m-1|n-2\rangle + (2n+1)\sqrt{m}\langle m-1|n\rangle +
$$

$$
+\sqrt{m}\sqrt{n+2}\sqrt{n+1}\langle m-1|n+2\rangle + \sqrt{m+1}\sqrt{n-1}\sqrt{n}\langle m+1|n-2\rangle +
$$

$$
+(2n+1)\sqrt{m+1}\langle m+1|n\rangle + \sqrt{m+1}\sqrt{n+2}\sqrt{n+1}\langle m+1|n+2\rangle)
$$

Sedaj pa moramo izbrati tak m, da bomo množili le enaka stanja.

$$
(n-1)\sqrt{n}\delta_{m,n-1} + (2n+1)\sqrt{n+1}\delta_{m,n+1} + \sqrt{n+1}\sqrt{n+2}\sqrt{n+3}\delta_{m,n+3} +
$$

$$
+\sqrt{n-2}\sqrt{n-1}\sqrt{n}\delta_{m,n-3} + \sqrt{n}(2n+1)\delta_{m,n-1} + (n+2)\sqrt{n+1}\delta_{m,n+1}
$$

To vstavimo v prvotno enačbo.

$$
c^2 \sum_{m\neq n} \frac{\left|{}_0\langle m|x^3|n\rangle_0\right|^2}{E_n^0 - E_m^0} = \frac{c^2 x_0^6}{8}\left[\frac{\left((n-1)\sqrt{n} + (2n+1)\sqrt{n}\right)^2}{E_n - E_{n-1}} + \frac{\left((2n+1)\sqrt{n+1} + (n+2)\sqrt{n+1}\right)^2}{E_n - E_{n+1}} +\right.
$$

$$
\left. + \frac{(n+1)(n+2)(n+3)}{E_n - E_{n+3}} + \frac{n(n-1)(n-2)}{E_n - E_{n-3}}\right]
$$

Sedaj upoštevamo, da je

$$
E_n - E_{n-1} = \hbar\omega
$$

$$
E_n - E_{n+1} = -\hbar\omega
$$

$$
E_n - E_{n-3} = 3\hbar\omega
$$

$$
E_n - E_{n+3} = -3\hbar\omega
$$

in dobimo rezultat.

$$
\frac{c^2 x_0^6}{8\hbar\omega}\left[9n^3 - 9(n+1)^3 - \frac{(n+1)(n+2)(n+3)}{3} + \frac{(n-2)(n-1)n}{3}\right] =
$$

$$
= -\frac{c^2 x_0^6}{8\hbar\omega}\left[30n^2 + 30n + 11\right]
$$

In vidimo, da se res energije znižajo, kot smo na začetku predvidevali.