Perturbacija 1

Naloga

Anharmonski oscillator v prvem približku opišemo s potencialom

$$V(x) = \frac{1}{2} k x^2 + c x^4 .$$

Izracunaj popravke energij lastnih stanj v prvem redu perturbacije. Izracunaj popravke energij v drugem redu perturbacije za anharmonski oscilator s potencialom

$$V(x) = \frac{1}{2} k x^2 + c x^3 .$$

1. Prvi red za simetricni potencial

$$V(x) = \frac{1}{2} k x^2 + c x^4 .$$

Hamiltonijan za naš problem je enak vsoti navadnega hamiltonijana za harmonski oscilator in dodatnega prispevka H', ki vsebuje popravek potenciala V'.

$$H = H_0 + H' \qquad\qquad V' = c\, x^4$$

Energije n-tega lastnega stanja novega Hamiltonijana zapišemo kot neskoncno vsoto perturbacijskih popravkov.

$$E_n = E_{n0} + E_{n1} + E_{n2} + \ldots = E_{n0} + \langle n_0 | V' | n_0 \rangle + \ldots$$

Nas bo zanimal samo prvi red perturbacije, zato bomo izracunali matricni element V'_{nn}:

$$\langle n_0 | V' | n_0 \rangle = c \langle n_0 | x^4 | n_0 \rangle = c \left\langle x^2 n_0 \,\middle|\, x^2 n_0 \right\rangle$$

Za lažje racunanje operator x^2 zapišemo s pomocjo kreacijskih in anihilacijskih operatorjev:

$$\left.\begin{aligned} a^+ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\frac{x}{x_0} + i \frac{p}{p_0} \right] \\ a &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\frac{x}{x_0} - i \frac{p}{p_0} \right] \end{aligned}\right\} a^+ + a = \frac{2}{\sqrt{2}} \frac{x}{x_0} \qquad x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m w}} \qquad w = \sqrt{\frac{k}{m}}$$

$$x^2 = \frac{x_0^2}{2} \left[a^{+2} + a^2 + a^+ a + a\, a^+ \right]$$

V nadalnjih racunih upoštevamo pravila za delovanje kreacijskega in anihilacijskega operatorja na lastna stanja harmonskega oscilatorja.

$$a^{+}\left|n\right\rangle = \sqrt{n+1}\ \left|n+1\right\rangle$$

$$a\left|n\right\rangle = \sqrt{n}\ \left|n-1\right\rangle$$

$$a^{+^2}\left|n\right\rangle = a^{+}\sqrt{n+1}\ \left|n+1\right\rangle = \sqrt{(n+2)(n+1)}\ \left|n+2\right\rangle$$

$$a^{2}\left|n\right\rangle = a\sqrt{n}\ \left|n-1\right\rangle = \sqrt{n\,(n-1)}\ \left|n-2\right\rangle$$

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

$$a\,a^{+}\left|n\right\rangle = a\sqrt{n+1}\ \left|n+1\right\rangle = (n+1)\ \left|n\right\rangle$$

S temi pravili lahko izracunamo vrednost izraza:

$$x^{2}\left|n_0\right\rangle = \frac{x_0^2}{2}\left[\sqrt{(n+2)(n+1)}\ \left|n+2\right\rangle + \sqrt{n\,(n-1)}\ \left|n-2\right\rangle + (2n+1)\left|n\right\rangle\right]$$

Ko dva taka izraza skalarno množimo, zaradi ortonormiranosti baznih funkcij dobimo le produkte enakih stanj.

$$\left\langle x^2\, n_0 \middle| x^2\, n_0\right\rangle = \frac{x_0^4}{4}\left[(n+2)(n+1) + n\,(n-1) + (2n+1)^2\right] =$$

$$\frac{x_0^4}{4}\left[n^2 + 3n + 2 + n^2 - n + 4n^2 + 4n + 1\right] = \frac{x_0^4}{4}\left[6n^2 + 6n + 3\right]$$

Energija stanja našega anharmonskega oscilatorja je torej v prvem redu perturbacije enaka:

$$E'_n = (n + \frac{1}{2})\hbar w + \frac{x_0^4}{4}(6n^2 + 6n + 3)$$

2. Kubicni potencial

$$V(x) = \frac{1}{2} k\, x^2 + c\, x^3 .$$

Ker je potencial lih in ker vemo, da so kvadrati valovnih funkcij sode funkcije, bo popravek k energiji prvega reda perturbacije enak nic. Izracunajmo torej popravek drugega reda.

Naloge se lotimo podobno kot prej:

$$x = \frac{x_0 \sqrt{2}}{2} \left[a^+ + a \right] \qquad\qquad x|n\rangle = \frac{x_0 \sqrt{2}}{2} \left[\sqrt{n+1}\, |n+1\rangle + \sqrt{n}\, |n-1\rangle \right]$$

Popravek energije v drugem redu perturbacije izracunamo takole:

$$E_{n2} = \sum_m \frac{\left| \langle n_0 | V' | m_0 \rangle \right|^2}{E_{n0} - E_{m0}}$$

Matricni element v števcu vrste spet izracunamo s pomocjo kreacijskega in anihilacijskega operatorja.

$$\langle n | V' | m \rangle = c \langle x^2 n | x m \rangle = c \frac{x_0^3 \sqrt{2}}{4} \Big[\sqrt{(n+2)(n+1)(m+1)} \langle n+2 | m+1 \rangle +$$
$$\sqrt{(n+2)(n+1)m} \langle n+2 | m-1 \rangle + \sqrt{n(n-1)(m+1)} \langle n-2 | m+1 \rangle +$$
$$\sqrt{n(n-1)m} \langle n-2 | m-1 \rangle + (2n+1)\sqrt{m+1} \langle n | m+1 \rangle + (2n+1)\sqrt{m-1} \langle n | m-1 \rangle \Big]$$

Upoštevamo še ortogonalnost baznih funcij

$$\langle m | n \rangle = d_{m,n}$$

in dobimo:

$$\langle n | V' | m \rangle = c \frac{x_0^3 \sqrt{2}}{4} \Big[(n+2)\sqrt{(n+1)}\, d_{m,n+1} + \sqrt{(n+2)(n+1)(n+3)}\, d_{m,n+3} +$$
$$\sqrt{n(n-1)(n-2)}\, d_{m,n-3} + (n-1)\sqrt{n}\, d_{m,n-1} + (2n+1)\sqrt{n}\, d_{m,n-1} + (2n+1)\sqrt{n+1}\, d_{m,n+1} \Big]$$

$$\langle n | V' | m \rangle = c \frac{x_0^3 \sqrt{2}}{4} \Big[(3n+3)\sqrt{(n+1)}\, d_{m,n+1} + 3n\sqrt{n}\, d_{m,n-1} +$$
$$\sqrt{(n+2)(n+1)(n+3)}\, d_{m,n+3} + \sqrt{n(n-1)(n-2)}\, d_{m,n-3} \Big]$$

Za koncni izracun popravka energije potrebujemo še lastne energije nezmotenega harmonskega oscilatorja:

$$E_{n0} = (n + \frac{1}{2})\hbar w$$

Sedaj lahko zapišemo popravek energije anharmonskega oscilatorja v drugem redu perturbacije:

$$\sum_m \frac{\left|\langle n|V'|m\rangle\right|^2}{E_{n0} - E_{m0}} = c^2 \frac{x_0^6}{8}\left[\frac{(n+1)(3n+3)^2}{-\hbar w} + \frac{9n^3}{\hbar w} + \frac{(n+2)(n+1)(n+3)}{-3\hbar w} + \frac{n(n-1)(n-2)}{3\hbar w}\right] =$$
$$\frac{c^2 x_0^6}{24}(-90n^2 - 90n - 33) = -\frac{c^2 x_0^6}{8\hbar w}(30n^2 + 30n + 11)$$