

Perturbacija I.

Naloga

Anharmonski oscilator v prvem približku opišemo s potencialom

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

a) Izračunaj popravke energij lastnih stanj v prvem redu perturbacije.

b) Izračunaj popravke energij v drugem redu perturbacije za anharmonski oscilator s potencialom

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

a) Izračun 1. reda perturbacije za simetrični popravek harmonskega potenciala

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

[opomba] Za c morajo veljati naslednje trditve, da je uporaba perturbacijske teorije upravičena:

$$\frac{2c}{k}x^2 \ll 1 \quad c \ll \frac{k}{2}x_0^{-2} \quad c > 0$$

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

$$H = H_0 + H' \quad V' = cx^4$$

Kjer je x_0 tipična dolžinska skala v osnovnem stanju harmonskega oscilatorja. Energije n -tega lastnega stanja novega Hamiltonijana zapišemo kot neskončno vsoto perturbacijskih popravkov.

$$E_n = E_{n_0} + E_{n_1} + \dots = E_{n_0} + \langle n_0 | V' | n_0 \rangle + \dots$$

$$E_{n_0} = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)$$

Nas bo zanimal samo prvi red perturbacije, zato bomo izračunali matrični element V'_{mn} :

$$E_{n_1} = \langle n_0 | V' | n_0 \rangle = c \langle n_0 | x^4 | n_0 \rangle = c \langle x^2 n_0 | x^2 n_0 \rangle$$

Pri tem smo operator x^4 razdelili na dva operatorja x^2 zaradi lažjega računanja. Za lažje računanje operator x^2 zapišemo s pomočjo kreacijskih in anihilacijskih operatorjev:

$$a^+ = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\frac{x}{x_0} + i \frac{p}{p_0} \right]$$

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\frac{x}{x_0} - i \frac{p}{p_0} \right]$$

Če ju seštejemo, dobimo:

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

Ali če izrazimo x:

$$x = \frac{x_0}{\sqrt{2}} [a + a^+]$$

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

Spomnimo se samo še, kaj predstavljajo x_0 in ω :

$$x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \quad \text{in} \quad \omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$$

V nadaljnjih računih upoštevamo pravila za delovanje kreacijskega in anihilacijskega operatorja na lastna stanja harmonskega oscilatorja:

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

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

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

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

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

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

S temi pravili lahko izračunamo najprej vrednost izraza:

$$x^2 |n\rangle_0 = \frac{x_0^2}{2} [a^2 + a^+ a + a a^+ + a^{+2}] |n\rangle_0 = \frac{x_0^2}{2} [\sqrt{n(n-1)} |n-2\rangle + n |n\rangle + (n+1) |n\rangle + \sqrt{(n+2)(n+1)} |n+2\rangle]$$

$$x^2 |n\rangle_0 = \frac{x_0^2}{2} [\sqrt{n(n-1)} |n-2\rangle + (2n+1) |n\rangle + \sqrt{(n+2)(n+1)} |n+2\rangle]$$

Ko ta rezultat množimo s samim seboj, nam zaradi ortonormiranosti baznih funkcij ostanejo le tisti členi, kjer dobimo produkte enakih stanj:

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

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

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

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

b) Izračun 1. in 2. reda perturbacije za kubični popravek harmonskega potenciala

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

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

Popravek energije v drugem redu perturbacije izračunamo takole:

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

Matrične elemente v števcu vsote izračunamo splošno s pomočjo kreacijskega in anihilacijskega operatorja:

$$\langle n | V' | m \rangle = c \langle xn | x^2 m \rangle$$

Rešitev drugega dela ($x^2 m$) poznamo že od prej, rešimo še nov, levi del:

$$|xn\rangle = \frac{x_0}{\sqrt{2}} [\sqrt{n+1}|n+1\rangle + \sqrt{n}|n-1\rangle]$$

Zdaj lahko zapišemo produkt, ki vsebuje 6 različnih členov (3×2):

$$\langle n | V' | m \rangle = c \langle xn | x^2 m \rangle = c \frac{x_0^3}{2\sqrt{2}} \left[\begin{aligned} &\sqrt{m(m-1)(n+1)} \langle n+1 | m-2 \rangle + (2m+1)\sqrt{n+1} \langle n+1 | m \rangle + \\ &+ \sqrt{(m+2)(m+1)(n+1)} \langle n+1 | m+2 \rangle + \sqrt{m(m-1)n} \langle n-1 | m-2 \rangle + \\ &+ (2m+1)\sqrt{n} \langle n-1 | m \rangle + \sqrt{(m+2)(m+1)n} \langle n-1 | m+2 \rangle \end{aligned} \right] =$$

Sedaj upoštevamo še ortogonalnost funkcij:

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

in tako dobimo:

$$\begin{aligned} \langle n | V' | m \rangle &= c \frac{x_0^3}{2\sqrt{2}} \left[\begin{aligned} &\sqrt{(n+3)(n+2)(n+1)} \delta_{m,n+3} + (2n+3)\sqrt{n+1} \delta_{m,n+1} + \\ &+ \sqrt{(n+1)n(n+1)} \delta_{m,n-1} + \sqrt{(n+1)nn} \delta_{m,n+1} + \\ &+ (2n-1)\sqrt{n} \delta_{m,n-1} + \sqrt{(n-1)(n-2)n} \delta_{m,n-3} \end{aligned} \right] = \\ &= c \frac{x_0^3}{2\sqrt{2}} \left[\begin{aligned} &\sqrt{(n+3)(n+2)(n+1)} \delta_{m,n+3} + (3n+3)\sqrt{n+1} \delta_{m,n+1} + \\ &+ 3n\sqrt{n} \delta_{m,n-1} + \sqrt{(n-1)(n-2)n} \delta_{m,n-3} \end{aligned} \right] \end{aligned}$$

Za končni izračun vsote moramo vnesti še lastne energije nezmotenega harmonskega oscilatorja, ter nato zapišemo končni popravek energije v drugem redu perturbacije:

$$E_{n2} = \sum_m \frac{|\langle n_0 | V | m_0 \rangle|^2}{E_{n0} - E_{m0}} = c^2 \frac{x_0^6}{8} \left[\frac{(n+3)(n+2)(n+1)}{\hbar\omega \frac{1}{2} - \hbar\omega(3 + \frac{1}{2})} + \frac{(3n+3)^2(n+1)}{\hbar\omega \frac{1}{2} - \hbar\omega(1 + \frac{1}{2})} + \frac{9n^3}{\hbar\omega \frac{1}{2} - \hbar\omega(-1 + \frac{1}{2})} + \frac{(n-1)(n-2)n}{\hbar\omega \frac{1}{2} - \hbar\omega(-3 + \frac{1}{2})} \right] =$$

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

Celotna energija je tako:

$$E'_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2}) - c^2 \frac{x_0^6}{8\hbar\omega} [30n^2 + 30n + 11]$$