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

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

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

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

[opomba] Da ohranimo vezana stanja v harmonskem potencialu, mora veljati:

$$c > 0, c << \frac{k}{2}x_0^2$$

Kjer je x0 povprečni odmik nezmotenega harmonskega oscilatorja.
Energije *n*-tega lastnega stanja novega Hamiltonijana zapišemo kot neskončno vsoto perturbacijskih popravkov.

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

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

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

$$E_{n1} = \langle n_0 | V' | n_0 \rangle = c\langle n_0 | x^4 | n_0 \rangle = c\langle x^2 n_0 | x^2 n_0 \rangle$$

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:

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

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

Spomnimo se samo še, kaj predstvaljajo x0 in ω:

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

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

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

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

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

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

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

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

S temi pravili lahko izračunamo najprej vrednost izraza:

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

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

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

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

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

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

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

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:

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

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

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

Rešitev prevega dela poznamo že od prej, rešimo še nov, desni del:

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

Zdaj lahko zapišemo produkt, ki vsebuje 6 različnih členov (3x2):

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

Sedaj upoštevamo še ortogonalnost funkcij:

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

in tako dobimo:

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

$$=c\frac{x_0^3}{2\sqrt{2}}\left[\begin{array}{l}\sqrt{(n+3)(n+2)(n+1)}\delta_{m,n+3}+(3n+3)\sqrt{n+1}\delta_{m,n+1}+ \\ +3n\sqrt{n}\delta_{m,n-1}+\sqrt{(n-1)(n-2)n}\delta_{m,n-3}\end{array}\right]$$

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

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

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

Celotna energija je tako:

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