Mechanika Kwantowa R 2016/2017, Seria 6

Zadanie 1 Przyjmujemy, że radialna część funkcji falowej ma postać gaussowską $R(r) = Ae^{-\alpha r^2}$. Warunek normalizacji pozawala nam wyznaczyć stałą A:

$$1 = \int \mathrm{d}r\, r^2 A^2 e^{-2\alpha r^2} = \frac{A^2}{4\sqrt{2}\alpha^{3/2}} \int_0^\infty \sqrt{t} e^{-t} = \frac{A^2\sqrt{\pi}}{8\sqrt{2}\alpha^{3/2}}, \quad A^2 = \frac{8\sqrt{2}\alpha^{3/2}}{\sqrt{\pi}}$$

Część radialna Hamiltonainu (częsc kątową pomijamy, bo nasz stan próbny nie ma zależności od katów) ma postać:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2mr^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{d}{dr}\right) - \frac{ke^2}{r}$$

Liczymy teraz

$$\langle H\rangle = A^2\left[\int \mathrm{d}r\, r^2 \left(e^{-\alpha r^2}(-\frac{\hbar^2}{2mr^2})\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{d}{dr}e^{-\alpha r^2}\right) - e^{-2\alpha r^2}\frac{ke^2}{r}\right)\right] = \frac{3\alpha\hbar^2}{2m} - \frac{2ke^2\sqrt{2\alpha}}{\sqrt{\pi}}$$

Minimalizacja powyższego wyrażenia po α daje

$$\alpha = \frac{8m^2k^2e^4}{9\pi\hbar^4} = \frac{8}{9\pi}\frac{1}{a^2},$$

gdzie $a = \frac{\hbar^2}{kme^2}$, jest promieniem Bohra. Odpowiadająca optymalnej wartości energia wynosi:

$$\langle H\rangle = -\frac{ke^2}{2a}\frac{8}{3\pi} = -0.85 \cdot 13.6\mathrm{eV} = -11.54\mathrm{eV}$$

Zadanie 2 Stany własne niezaburzone mają postać:

$$\psi_{n_x,n_y}(x,y) = \frac{2}{a}\sin\left(\frac{n_x\pi x}{a}\right)\sin\left(\frac{n_y\pi y}{a}\right), \quad n_x, n_y = 1, 2, 3\ldots$$

Odpowiadające im energie $E_{n_x,n_y} = \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}(n_x^2+n_y^2)$. Stan podstawowy $n_x = 1, n_y = 1$ jest niezdegenerowany, energia niezaburzona $E_0^{(0)} = \frac{\hbar^2\pi^2}{ma^2}$. Liczymy poprawkę:

$$E_0^{(1)} = \langle\psi_{0,0}|V'|\psi_{0,0}\rangle = \frac{4V_0}{a^2}\int_0^a \mathrm{d}x\mathrm{d}y\, \sin^2\left(\frac{\pi x}{a}\right)\sin^2\left(\frac{\pi y}{a}\right)\cos\left(\frac{\pi x}{a}\right)\cos\left(\frac{\pi y}{a}\right) = 0$$

Pierwszy poziom wzbudzony o energii $\frac{5\hbar^2\pi^2}{2ma^2}$ jest podwójnie zdegenerowany, $\psi_{2,1}$, $\psi_{1,2}$. Liczymy macierz zaburzenia w tej podprzestrzeni zapisana w bazie $\psi_{2,1}$, $\psi_{1,2}$:

$$\begin{bmatrix} \langle\psi_{2,1}|V'|\psi_{2,1}\rangle & \langle\psi_{2,1}|V'|\psi_{1,2}\rangle \\ \langle\psi_{1,2}|V'|\psi_{2,1}\rangle & \langle\psi_{1,2}|V'|\psi_{1,2}\rangle \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & \frac{V_0}{4} \\ \frac{V_0}{4} & 0 \end{bmatrix}$$

Stany własne powyższej macierzy to $\psi_\pm = (\psi_{2,1} \pm \psi_{1,2})/\sqrt{2}$ a odpowiadające im wartości własne, które są jednocześnie poprawkami do energii w pierwszym rzędzie: $E_{1,\pm}^{(1)} = \pm\frac{V_0}{4}$.

Zadanie 3 Stany niezaburzone oznaczamy $|n_a, n_b, n_c\rangle$ odpowiadające im energie niezaburzone to

$$E^{(0)}_{n_a,n_b,n_c} = \hbar\omega_a(n_a + \tfrac{1}{2}) + \hbar\omega_b(n_a + \tfrac{1}{2}) + \hbar\omega_c(n_a + \tfrac{1}{2}).$$

Poprawka w pierwszym rzędzie:

$$E^{(1)}_{n_a,n_b,n_c} = \langle n_a, n_b, n_c|(ga^\dagger b^\dagger c + g^* abc^\dagger)|n_a, n_b, n_c\rangle = 0.$$

Poprawka w drugim rzędzie:

$$E^{(2)}_{n_a,n_b,n_c} = \sum_{(n'_a,n'_b,n'_c)\neq(n_a,n_b,n_c)} \frac{|\langle n_a, n_b, n_c|(ga^\dagger b^\dagger c + g^* abc^\dagger)|n'_a, n'_b, n'_c\rangle|^2}{\hbar\omega_a(n_a - n'_a) + \hbar\omega_b(n_b - n'_b) + \hbar\omega_c(n_c - n'_c)} =$$

$$\frac{|g|^2}{\hbar}\left(\frac{(n_a+1)(n_b+1)n_c}{\omega_c - \omega_a - \omega_b} + \frac{n_a n_b(n_c+1)}{\omega_a + \omega_b - \omega_c}\right) = \frac{|g|^2[(n_a + n_b + 1)n_c - n_a n_b]}{\hbar(\omega_c - \omega_a - \omega_b)}. \quad (1)$$

Zadanie 4 Oznaczmy stan podstawowy niezaburzonego oscylatora jako $|0\rangle$. Licząc poprawkę korzystamy z $x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(a + a^\dagger)$ i otrzymujemy:

$$E^{(1)}_0 = \alpha\left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^2 \langle 0|(a+a^\dagger)^4|0\rangle = \alpha\left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^2 \langle 0|a^2 a^{\dagger 2} + aa^\dagger aa^\dagger|0\rangle = 3\alpha\left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^2$$

Dla funkcji próbnej wyznaczamy najpierw czynnik normalizacyjny: $\mathcal{N}_\lambda = \left(\frac{2\lambda}{\pi}\right)^{1/4}$. Wartość oczekiwana Hamiltonianu dla próbnej:

$$\langle H\rangle = \mathcal{N}_\lambda^2\left[\int \mathrm{d}x e^{-\lambda x^2}(-\frac{\hbar^2}{2m})\frac{d^2}{dx^2}e^{-\lambda x^2} + \int \mathrm{d}x e^{-2\lambda x^2}\left(\frac{1}{2}m\omega^2 x^2 + \alpha x^4\right)\right] = \frac{\hbar^2}{2m}\lambda + \frac{m\omega^2}{8\lambda} + \frac{3\alpha}{16\lambda^2} \quad (2)$$

Szukamy minimum po λ. Warunek na minimum.

$$\frac{d\langle H\rangle}{\lambda} = \frac{\hbar^2}{2m} - \frac{m\omega^2}{8\lambda^2} - \frac{3\alpha}{8\lambda^3} = 0$$

Wprowadźmy $\lambda' = \lambda\frac{2\hbar}{m\omega}$. Powyższe równanie sprowadza sie wtedy do:

$$\lambda'^3 - \lambda' - \chi = 0, \quad \chi = \frac{6\alpha\hbar}{m^2\omega^3}$$

Widzimy, że dobraliśmy λ' tak by w przypadku braku zaburzenia $\alpha = 0$ mieć rozwiązanie $\lambda' = 1$. Rozwiązując równanie 3-go stopnia otrzymujemy rozwiązanie, które żeby cokolwiek z niego zobaczyć rozwijamy dla małych χ (ponieważ χ jest proporcjonalne do α uzasadniamy to faktem że zaburzenie jest małe):

$$\lambda' = \frac{\sqrt[3]{2}\left(\sqrt{81\chi^2 - 12} + 9\chi\right)^{2/3} + 2\sqrt[3]{3}}{6^{2/3}\sqrt[3]{\sqrt{81\chi^2 - 12} + 9\chi}} \approx 1 + \frac{\chi}{2} + O(\chi^2)$$

Stąd

$$\lambda = \frac{m\omega}{2\hbar}\left(1 + \frac{3\alpha\hbar}{m^2\omega^3}\right)$$

a uzyskana energia:

$$\langle H \rangle = \frac{\hbar\omega}{2} + 3\alpha \left(\frac{\hbar}{2m\omega} \right)^2 - \frac{9\hbar^3\alpha^2\omega}{4(3\hbar\alpha + m^2\omega^3)^2}.$$

Z czego jasno wynika, że uzyskaliśmy lepsze oszacowanie na energie niż wykonując pierwszy rząd rachunku zaburzeń. Widać, też że optymalna funkcja jest zawężona w porównaniu ze stanem podstawowym oscylatora harmonicznego, co intuicyjnie łatwo zrozumieć jako dodatkowe zwężenie związane z obecnością przyciągającego potencjału αx^4.