Квантова механика упражнения

Андон Рангелов, кабинет В 40, email: rangelov@phys.uni-sofia.bg , интернет страница за задачите от семинарите http://course.quantum-bg.org

1 Стационарна теория на пертурбациите

Нека да разгледаме Хамилтониян от видът $\hat{H} = \hat{H}_0 + \lambda \hat{V}$, където $0 < \lambda < 1$ и нека $\hat{V} \ll \hat{H}_0$. Да предположим, че знаем спектъра (собствените стойности $E_n^{(0)}$ и собствените вектори $\Psi_n^{(0)}$) на $\hat{H}_0$

$$\hat{H}_0 \Psi_n^{(0)} = E_n^{(0)} \Psi_n^{(0)}$$

където $\left(\Psi_n^{(0)}, \Psi_m^{(0)}\right) = \delta_{n,m}$. Търсим спектъра (собствените стойности E_n и собственеите вектори Ψ_n) на $\hat{H}$

$$\hat{H} \Psi_n = E_n \Psi_n$$

$\Rightarrow$

$$\left(\hat{H}_0 + \lambda \hat{V}\right) \Psi_n = E_n \Psi_n$$

Разлагаме Ψ_n по базиса на собствените вектори на $\hat{H}_0 \Rightarrow \Psi_n = \sum_{m=0}^{\infty} C_m(n) \Psi_m^{(0)} \Rightarrow$

$$\left(\hat{H}_0 + \lambda \hat{V}\right) \sum_{m=0}^{\infty} C_m(n) \Psi_m^{(0)} = E_n \sum_{m=0}^{\infty} C_m(n) \Psi_m^{(0)}$$

$\Rightarrow$

$$\sum_{m=0}^{\infty} E_m^{(0)} C_m(n) \Psi_m^{(0)} + \lambda \hat{V} \sum_{m=0}^{\infty} C_m(n) \Psi_m^{(0)} = E_n \sum_{m=0}^{\infty} C_m(n) \Psi_m^{(0)} \qquad |.\Psi_k^{(0)}$$

$\Rightarrow$

$$\lambda \sum_{m=0}^{\infty} C_m(n) \left(\Psi_k^{(0)}, \hat{V} \Psi_m^{(0)}\right) = \sum_{m=0}^{\infty} C_m(n) \left(E_n - E_m^{(0)}\right) \underbrace{\left(\Psi_k^{(0)}, \Psi_m^{(0)}\right)}_{=\delta_{k,m}} = C_k(n) \left(E_n - E_k^{(0)}\right)$$

$\Rightarrow$

$$C_k(n) \left(E_n - E_k^{(0)}\right) = \lambda \sum_{m=0}^{\infty} V_{k,m} C_m(n)$$

където $V_{k,m} = \left(\Psi_k^{(0)}, \hat{V} \Psi_m^{(0)}\right)$. Разлагаме енергията E_n и коефициентите на разложението $C_k(n)$ в ред по степени на $\lambda \Rightarrow$

$$\begin{aligned} E_n &= E_n^{(0)} + E_n^{(1)} \lambda + E_n^{(2)} \lambda^2 + ... \\ C_k(n) &= C_k^{(0)}(n) + C_k^{(1)}(n) \lambda + C_k^{(2)}(n) \lambda^2 + ... \end{aligned}$$

и заместваме в горното равенство $\Rightarrow$

$$\begin{aligned} &\left(C_k^{(0)}(n) + C_k^{(1)}(n) \lambda + C_k^{(2)}(n) \lambda^2 + ...\right) \left(E_n^{(0)} + E_n^{(1)} \lambda + E_n^{(2)} \lambda^2 + ... - E_k^{(0)}\right) \\ = \;& \lambda \sum_{m=0}^{\infty} V_{k,m} \left(C_m^{(0)}(n) + C_m^{(1)}(n) \lambda + C_m^{(2)}(n) \lambda^2 + ...\right) \end{aligned}$$

сравняваме левите и десните страни пред еднаквите степени на λ.

За λ^0 имаме

$$\left(E_n^{(0)} - E_k^{(0)}\right) C_k^{(0)}(n) = 0$$

$\Rightarrow$ за $n \neq k$ имаме $C_k^{(0)}(n) = 0$ а за $n = k$ имаме $C_n^{(0)}(n) = 1$

За λ^1 имаме

$$E_n^{(1)} C_k^{(0)}(n) + \left(E_n^{(0)} - E_k^{(0)}\right) C_k^{(1)}(n) = \sum_{m=0}^{\infty} V_{k,m} C_m^{(0)}(n)$$

$\Rightarrow$ за $n = k$ имаме

$$E_n^{(1)}.1 + \underbrace{\left(E_n^{(0)} - E_n^{(0)}\right)}_{=0} C_n^{(1)}(n) = \sum_{m=0}^{\infty} V_{n,m} C_m^{(0)}(n) = V_{n,n}$$

$\Rightarrow E_n^{(1)} = V_{n,n} = \left(\Psi_n^{(0)}, \hat{V}\Psi_n^{(0)}\right)$

а за $n \neq k$ имаме

$$C_k^{(1)}(n)\left(E_n^{(0)} - E_k^{(0)}\right) = V_{k,n}$$

$\Rightarrow$

$$C_k^{(1)}(n) = \frac{V_{k,n}}{\left(E_n^{(0)} - E_k^{(0)}\right)}$$

за $n = k$ и от нормировката на вълновата функция имаме

$$\begin{aligned}
(\Psi_n, \Psi_n) &= 1 = \left(\Psi_n^{(0)} + \lambda\Psi_n^{(1)} + \lambda^2\Psi_n^{(2)} + ..., \Psi_n^{(0)} + \lambda\Psi_n^{(1)} + \lambda^2\Psi_n^{(2)} + ...\right) = \\
&= \underbrace{\left(\Psi_n^{(0)}, \Psi_n^{(0)}\right)}_{=1} + \lambda\left(\Psi_n^{(1)}, \Psi_n^{(0)}\right) + \lambda\left(\Psi_n^{(0)}, \Psi_n^{(1)}\right) + ...
\end{aligned}$$

$\Rightarrow \lambda\left[\left(\Psi_n^{(0)}, \Psi_n^{(1)}\right) + \left(\Psi_n^{(0)}, \Psi_n^{(1)}\right)^*\right] = 0 \Rightarrow \left(\Psi_n^{(0)}, \Psi_n^{(1)}\right) = 0 \Rightarrow$

$$\left(\Psi_n^{(0)}, \Psi_n^{(1)}\right) = \left(\Psi_n^{(0)}, \sum_{m=0}^{\infty} C_m^{(1)}(n)\Psi_m^{(0)}\right) = \sum_{m=0}^{\infty} C_m^{(1)}(n)\underbrace{\left(\Psi_n^{(0)}, \Psi_m^{(0)}\right)}_{=\delta_{n,m}} = C_n^{(1)}(n) = 0$$

$\Rightarrow C_n^{(1)}(n) = 0$

Аналогично сравнявайки степените пред λ^2 намираме

$$E_n^{(2)} = \sum_{\substack{m=0 \\ n\neq m}}^{\infty} \frac{|V_{n,m}|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}$$

1.1 Използвайки теорията на пертурбациите намерете енергията, с точност до първи порядък, на частица с маса m намираща се в безкрайно дълбока потенциална яма с ширина a ако потенциала в ямата е от видът:

1.1.1

$V(x) = V_0$ за $b < x < a - b$, $V(x) = 0$ за $0 < x < b$ и $a - b < x < a$, $V(x) = \infty$ за $x > a$ и $0 < x$ (приемете, че $b < a$)

1.1.2

$V(x) = V_0(a - |2x - a|)$ за $0 < x < a$ и $V(x) = \infty$ за $x > a$ и $0 < x$

1.2 Използвайки теорията на пертурбациите намерете енергията, с точност до втори порядък, на частица с маса m намираща се в безкрайно дълбока потенциална яма с ширина a ако потенциала в ямата е от видът:

$V(x) = \infty$ за $x > a$ и $0 < x$, и $V(x) = V_0\delta(x - a/2)$ за $0 < x < a$

1.3 Двуатомна молекула, която се върти около ос минаваща през центъра на тежестта на молекулата, има инерчен момент I и електричен диполен момент d. Молекулата е поставена в еднородно електрично поле с големина ε_0 с посока на полето лежаща в плосккостта на въртене на молекулата. Разглеждайки действието на външното електрично поле като пертурбация, намерете енергията на молекулата с точност до втори порядък.