

Kvantummechanika A – gyakorlat

9. gyakorlat

Időfüggetlen degenerált és nem-degenerált perturbációs számítás

1. feladat

Vegyük a harmonikus oszcillátort, de most a perturbáló Hamilton-operátor legyen

$$\hat{H}' = \alpha(\hat{x}\hat{p} + \hat{p}\hat{x}) .$$

Felhasználva az a^\dagger, a léptetőoperátorokat:

$$\begin{aligned}\hat{x} &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(a + a^\dagger) , \\ \hat{p} &= i\sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}}(a^\dagger - a) .\end{aligned}$$

Először lássuk be, hogy az elsőrendű energiakorrekció zérus:

$$\begin{aligned}E_n^{(1)} &= \alpha \langle n | \hat{x}\hat{p} + \hat{p}\hat{x} | n \rangle \propto \langle n | (a^\dagger + a)(a^\dagger - a) + (a^\dagger - a)(a + a^\dagger) | n \rangle \\ &= \langle n | aa^\dagger - a^\dagger a + a^\dagger a - aa^\dagger | n \rangle = 0 .\end{aligned}$$

Itt kihasználtuk a sajátállapotok ortonormáltságát, hogy ne kelljen kiírni az automatikusan eltűnő tagokat. Nem-nulla energiakorrekcióért tovább kell mennünk a perturbációs számítás rendjében: a másodrendű korrekcióban megjelenő mátrixelem ($m \neq n$):

$$\begin{aligned}\langle m | \hat{H}' | n \rangle &= \alpha \langle m | \hat{x}\hat{p} + \hat{p}\hat{x} | n \rangle = i\alpha\hbar \langle m | a^\dagger a^\dagger - aa | n \rangle \\ &= i\alpha\hbar (\sqrt{n+2}\sqrt{n+1}\delta_{m,n+2} - \sqrt{n-1}\sqrt{n}\delta_{m,n-2}) .\end{aligned}$$

Az energiakorrekció tehát (kihasználva, hogy a Kronecker-delták miatt a vegyes tagok eltűnnek az abszolútérték négyzetben)

$$\begin{aligned}E_n^{(2)} &= \sum_{m \neq n}^{\infty} \frac{|\langle m | \hat{H}' | n \rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} = (\alpha\hbar)^2 \sum_{m \neq n} \frac{(n+2)(n+1)\delta_{m,n+2} - (n-1)n\delta_{m,n-2}}{\hbar\omega(n-m)} \\ &= \frac{\alpha^2\hbar}{\omega} \left[\frac{(n+2)(n+1)}{n - (n+2)} - \frac{(n-1)n}{n - (n-2)} \right] = \frac{\alpha^2\hbar}{2\omega} [(n+2)(n+1) - (n-1)n] \\ &= -\frac{\alpha^2\hbar}{\omega}(2n+1) .\end{aligned}$$

Érdekes módon az alábbiakat írhatjuk fel ekkor (másodrendig):

$$\begin{aligned}E_n &\approx E_n^{(0)} + E_n^{(1)} + E_n^{(2)} = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) + 0 - \frac{\alpha^2\hbar}{\omega}(2n+1) \\ &= \left(\hbar\omega - \frac{\alpha^2\hbar}{\omega} \right) \left(n + \frac{1}{2} \right) = \hbar\omega \left(1 - \frac{\alpha^2}{\omega^2} \right) \left(n + \frac{1}{2} \right) = \hbar\Omega \left(n + \frac{1}{2} \right) ,\end{aligned}$$

azaz olyan energiákat kapunk, ami egy $\Omega = \omega(1 - \alpha^2/\omega^2)$ frekvenciájú harmonikus oszcillátornál tapasztalnánk.

2. feladat

Legyen két megkülönböztethetetlen bozon egy végtelen mély potenciálgödörben, és legyen a két részecske között egy gyenge és pontszerű kölcsönhatás:

$$V(x_1, x_2) = -aV_0\delta(x_1 - x_2) .$$

Először vegyük a $V_0 = 0$ esetet, és keressük meg ekkor a rendszerünk alapállapotának és első gerjesztett állapotának az energiáját és hullámfüggvényét! A Hamilton-operátor (a gödrön belül)

$$\hat{H}^{(0)} = -\frac{\hbar^2}{2m}(\partial_1^2 + \partial_2^2)$$

Tudjuk, hogy egyetlen részecske esetén az energia és a hullámfüggvény egyszerűen

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} n^2 ,$$
$$|\psi_n\rangle = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) .$$

Kérdés, hogy a két bozon közös hullámfüggvénye hogyan fog kinézni. Tudjuk, hogy bozonoknak teljesen szimmetrikus hullámfüggvényük van, azaz a két részecske felcserélésére:

$$\psi(x_1, x_2) = \psi(x_2, x_1) .$$

Azt is tudjuk, hogy a bozonokra nem érvényes a Pauli-féle kizárási elv, így semmi nem akadályozza, hogy a két bozon ugyanabban az állapotban legyen. Ennélfogva az alapállapot hullámfüggvénye egyszerűen a két egyrészecske hullámfüggvény szorzata lesz:

$$\psi_{1,1}^{(0)}(x_1, x_2) = \psi_1(x_1)\psi_1(x_2) = \frac{2}{a} \sin\left(\frac{\pi x_1}{a}\right) \sin\left(\frac{\pi x_2}{a}\right)$$

Az alapállapottól különböző hullámfüggvényeket szimmetrizálnunk kell (kell még egy $1/\sqrt{2}$ -es normálási faktor is), ami az alábbi hullámfüggvényre vezet (vegyük észre, hogy valóban nem változik semmi az $x_1 \leftrightarrow x_2$ cserére):

$$\begin{aligned} \psi_{n_1, n_2}^{(0)}(x_1, x_2) &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\psi_{n_1}(x_1)\psi_{n_2}(x_2) + \psi_{n_1}(x_2)\psi_{n_2}(x_1) \right] \\ &= \frac{\sqrt{2}}{a} \left[\sin\left(\frac{n_1\pi}{a}x_1\right) \sin\left(\frac{n_2\pi}{a}x_2\right) + \sin\left(\frac{n_1\pi}{a}x_2\right) \sin\left(\frac{n_2\pi}{a}x_1\right) \right] \end{aligned}$$

Erre a $\psi_{n_1, n_2}(x_1, x_2)$ hullámfüggvényre hattanva a Hamilton-operátort az energia sajátértékek leolvasás után az alábbiak adódnak:

$$E_{n_1, n_2}^{(0)} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} (n_1^2 + n_2^2) .$$

Az alapállapot energiája (ez éppen kétszerese az egyrészecske energiának)

$$E_{1,1}^{(0)} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{ma^2} .$$

Ezek után, ha újra bekapcsoljuk a kölcsönhatást, és perturbációként tekintünk rá, az alábbi energiakorrekciókat írhatjuk fel az alapállapot és az első gerjesztett állapot esetén:

$$\begin{aligned} E_{1,1}^{(1)} &= \langle \psi_{1,1}^{(0)} | \hat{H}' | \psi_{1,1}^{(0)} \rangle = -aV_0 \int_0^a dx_1 \int_0^a dx_2 \frac{4}{a^2} \sin^2 \left(\frac{\pi x_1}{a} \right) \sin^2 \left(\frac{\pi x_2}{a} \right) \delta(x_1 - x_2) \\ &= -aV_0 \int_0^a dx_1 \frac{4}{a^2} \sin^4 \left(\frac{\pi x_1}{a} \right) = -\frac{3V_0}{2} \end{aligned}$$

és

$$\begin{aligned} E_{1,2}^{(1)} &= \langle \psi_{1,2}^{(0)} | \hat{H}' | \psi_{1,2}^{(0)} \rangle \\ &= -\frac{2V_0}{a} \int_0^a dx_1 \int_0^a dx_2 \left[\sin \left(\frac{\pi}{a} x_1 \right) \sin \left(\frac{2\pi}{a} x_2 \right) + \sin \left(\frac{\pi}{a} x_2 \right) \sin \left(\frac{2\pi}{a} x_1 \right) \right]^2 \\ &\quad \cdot \delta(x_1 - x_2) \\ &= -\frac{4V_0}{a} \int_0^a dx_1 \sin^2 \left(\frac{\pi}{a} x_1 \right) \sin^2 \left(\frac{2\pi}{a} x_1 \right) = -2V_0 . \end{aligned}$$

Degenerált perturbációszámítás

A degenerált perturbációszámítás módszerét abban az esetben használjuk, amikor a lehetséges energiasajátértékek különböző sajátállapotok esetén egyenlőek lehet, azaz $E_n = E_m$, ha $n \neq m$. Ekkor pl. a nem-degenerált esetben látott második energiakorrekció sem vezet értelmes eredményre, hiszen

$$E_n^{(2)} = \sum_{n \neq m} \frac{|\langle \psi_m | \hat{H}' | \psi_n \rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \rightarrow \infty .$$

3. feladat

Tekintsünk egy szabad részecskét, ami egy rögzített L kerületű körpálya mentén mozoghat (ez egy 1D-mozgásnak felel meg periodikus határfeltételek mellett). A részecskére ható perturbáció legyen

$$\hat{H}' = -V_0 e^{-x^2/a^2} ,$$

ahol $x \in [-L/2, L/2]$, illetve legyen $L \gg a$ és V_0 kellően kicsiny, hogy alkalmazható legyen a perturbációszámítás. A perturbálatlan rendszer Hamilton-operátora egyszerűen

$$\hat{H}^{(0)} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2}$$

és a hullámfüggvényre teljesül, hogy $\psi(-L/2) = \psi(L/2)$, azaz az ismertek rendszer hullámfüggvényei és energiasajátértékei (aki nem hiszi, járjon utána):

$$\begin{aligned} \psi_n^{(0)}(x) &= \frac{1}{\sqrt{L}} e^{i2\pi n x/L} , \\ E_n^{(0)} &= \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{2\pi n}{L} \right)^2 . \end{aligned}$$

Vegyük észre, hogy az $E_n^{(0)} \propto n^2$ arányosság következtében degeneráció lép fel a $\pm n$ kvantumátszokhoz tartozó altereken, azaz egy 2D degenerált alteret kapunk minden n -re (értsd. $E_n^{(0)} = E_{-n}^{(0)}$). Degenerált perturbációszámításban a perturbáció mátrixa (ahol $i, j = \pm n$ lehet):

$$W_{ij} = \langle \psi_i^{(0)} | \hat{H}' | \psi_j^{(0)} \rangle \quad \Longrightarrow \quad \mathbf{W} = \begin{pmatrix} W_{++} & W_{+-} \\ W_{-+} & W_{--} \end{pmatrix}.$$

A diagonális mátrixelemek:

$$\begin{aligned} W_{++} = W_{--} &= -V_0 \int_{-L/2}^{L/2} dx \psi_{\pm n}^*(x) e^{-x^2/a^2} \psi_{\pm n}(x) = -\frac{V_0}{L} \int_{-L/2}^{L/2} dx e^{-x^2/a^2} \\ &\approx -\frac{V_0}{L} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-x^2/a^2} = -\frac{V_0}{L} \sqrt{\pi} a, \end{aligned}$$

ahol a közelítéskor kihasználtuk, hogy $L \gg a$. Az offdiagonális mátrixelemek:

$$\begin{aligned} W_{+-} = W_{-+} &= -V_0 \int_{-L/2}^{L/2} dx \psi_{\pm n}^*(x) e^{-x^2/a^2} \psi_{\mp n}(x) \approx -\frac{V_0}{L} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-x^2/a^2} e^{\pm 4\pi i n x / L} \\ &= -\frac{V_0}{L} \sqrt{\pi} a e^{-(2\pi n / L)^2}, \end{aligned}$$

ahol újra kihasználtuk, hogy $L \gg a$, illetve az integrál kiszámításakor teljes négyzetté alakítottunk az exponensben. Az energiakorrekciók kiszámításához diagonalizálnunk kell \mathbf{W} -t, azaz

$$\begin{vmatrix} W_{++} - \lambda & W_{+-} \\ W_{-+} & W_{++} - \lambda \end{vmatrix} = (W_{++} - \lambda)^2 - W_{+-}^2 \stackrel{!}{=} 0.$$

Az egyenlet megoldása

$$\lambda_{\pm} = E_{\pm n}^{(1)} = W_{++} \pm |W_{+-}| = -\frac{V_0}{L} \sqrt{\pi} a (1 \pm e^{-(2\pi n / L)^2}).$$

Látható, hogy a degenerált energiaszintek felhasadnak, így teljesül a régi mondás, azaz „a perturbáció feloldja a degenerációt”.

4. feladat

Ebben a feladatban megpróbáljuk leellenőrizni a perturbációszámítás helyességét a perturbációszámítás adott rendjéig. Tekintsünk egy olyan háromállapotú rendszert, amelyet az alábbi Hamilton-operátor ír le (még kéne egy a mértékegységet rendező konstans, ettől most tekintsünk el):

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} 1 - \epsilon & 0 & 0 \\ 0 & 1 & \epsilon \\ 0 & \epsilon & 2 \end{pmatrix},$$

ahol $\epsilon \ll 1$.

1. Először keressük meg az egzakt sajátenergiákat, majd fejtsük sorba ϵ^2 -rendig:

$$\begin{aligned}\det(\hat{H} - \lambda \hat{1}) &= (1 - \epsilon - \lambda)(1 - \lambda)(2 - \lambda) - \epsilon^2(1 - \epsilon - \lambda) \\ &= (1 - \epsilon - \lambda)[(1 - \lambda)(2 - \lambda) - \epsilon^2] \stackrel{!}{=} 0 .\end{aligned}$$

A megoldások:

$$\begin{aligned}\lambda_1 &= 1 - \epsilon , \\ \lambda_{2,3} &= \frac{3 \mp \sqrt{1 + 4\epsilon^2}}{2} = \frac{3}{2} \mp \frac{1 + 2\epsilon^2}{2} + \mathcal{O}(\epsilon^4) = \begin{cases} 1 - \epsilon^2 + \mathcal{O}(\epsilon^4) \\ 2 + \epsilon^2 + \mathcal{O}(\epsilon^4) \end{cases} .\end{aligned}$$

2. Most vizsgáljuk meg, hogy mire jutunk perturbációs számítással! Válasszuk le a Hamilton-operátor perturbatív, ϵ -nal arányos részét:

$$\hat{H} = \hat{H}^{(0)} + \hat{H}' = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} -\epsilon & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \epsilon \\ 0 & \epsilon & 0 \end{pmatrix} .$$

Látható, hogy degenerációt kapunk az $E_1^{(0)} = E_2^{(0)} = 1$ esetben, míg az $E_3^{(0)} = 2$ nem-degenerált sajátenergia lesz: kezdjünk azzal! Az elsőrendű energiakorrekció a nem-degenerált esetben

$$\begin{aligned}E_3^{(1)} &= \langle \psi_3^{(0)} | \hat{H}' | \psi_3^{(0)} \rangle = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -\epsilon & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \epsilon \\ 0 & \epsilon & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ \epsilon \\ 0 \end{pmatrix} = 0 .\end{aligned}$$

A másodrendű korrekció pedig

$$E_3^{(2)} = \frac{|\langle \psi_1^{(0)} | \hat{H}' | \psi_3^{(0)} \rangle|^2}{E_3^{(0)} - E_1^{(0)}} + \frac{|\langle \psi_2^{(0)} | \hat{H}' | \psi_3^{(0)} \rangle|^2}{E_3^{(0)} - E_2^{(0)}} = \frac{0}{1} + \frac{\epsilon^2}{1} = \epsilon^2 ,$$

azaz

$$E_3 = E_3^{(0)} + E_3^{(1)} + E_3^{(2)} + \mathcal{O}(\epsilon^3) = 2 + \epsilon^2 + \mathcal{O}(\epsilon^3) .$$

Látható, hogy perturbatív eredmény valóban egyezik ϵ^2 -rendig az egzakt eredménnyel, eddig jól működik a módszer. A degenerált esetben a perturbáció mátrixa:

$$\mathbf{W} = \begin{pmatrix} -\epsilon & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} ,$$

azaz a sajátenergiák $E_1^{(1)} = -\epsilon$ és $E_2^{(2)} = 0$, ennél fogva

$$\begin{aligned}E_1 &= E_1^{(0)} + E_1^{(1)} + \mathcal{O}(\epsilon^2) = 1 - \epsilon + \mathcal{O}(\epsilon^2) , \\ E_2 &= E_2^{(0)} + E_2^{(1)} + \mathcal{O}(\epsilon^2) = 1 + 0 + \mathcal{O}(\epsilon^2) .\end{aligned}$$

A perturbációs számításból kapott eredmények most is egyeznek, de csak ϵ -rendig, hiszen csak elsőrendben tanultunk a degenerált perturbációs számítást. Vegyük észre, hogy az E_1 esetén még az egzakt megoldást is visszakaptuk, ha tovább mennénk a perturbációs számítás rendjében, akkor minden magasabb rendű korrekció eltűnne.