Kvantummechanika A – gyakorlat

10. gyakorlat

Degenerált időfüggetlen perturbációszámítás és a variációs módszer

1. feladat

1. Vizsgáljuk meg, hogy a kvantummechanikai rotátor esetén milyen degenerációk lépnek fel az energiaszintekben. Az egyszerűség kedvéért tekintsük csak az $l = 0, 1$ eseteket. A Hamilton-operátor

   $$\hat{H}^{(0)} = \frac{\hat{L}^2}{2\Theta} \ .$$

   Tudjuk, hogy az $\hat{L}^2$ operátor hatása az $|l, m\rangle$ sajátállapotára

   $$\hat{L}^2|l, m\rangle = \hbar^2 l(l+1)|l, m\rangle$$

   alakban írható, azaz a rotátor energiaszintjei:

   $$E^{(0)}_{l,m} = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\Theta} \ .$$

   Látható, hogy tulajdonképpen $E^{(0)}_{l,m} \equiv E^{(0)}_{l}$ teljesül, azaz az m mágneses kvantumszámtól nem függ az energia. Tudjuk, hogy $|m| \leq l$, azaz egy adott l-hez tartozó állapot $(2l+1)$-szeresen lesz degenerált, ennélfogva

   - ha $l = 0$: $m = 0$, így nincs degeneráció,
   - míg ha $l = 1$: $m = -1, 0, 1$, azaz 3-szorosan degenerált altérről beszélhetünk.

2. Kapcsoljunk be perturbációként gyenge mágneses teret, és legyen a perturbáló Hamilton-operátor:

   $$\hat{H}' = -\gamma \hat{\mathbf{L}}\mathbf{B} \ ,$$

   ahol γ az ún. giromágneses faktor, és az x-tengellyel legyen párhuzamos a $\mathbf{B}$ homogén mágneses tér, ennélfogva

   $$\hat{\mathbf{L}}\mathbf{B} = \hat{L}_x B = \frac{1}{2}\big(\hat{L}_+ + \hat{L}_-\big)B \ .$$

   Tekintsük külön az $l = 0, 1$ eseteket ismét:

   - ha $l = 0$, akkor nincs energiakorrekció a perturbációszámítás első rendjében, mivel:

     $$E^{(1)}_{00} = \langle 0, 0|\hat{H}|0, 0\rangle = -\frac{\gamma B}{2}\langle 0, 0|\hat{L}_+ + \hat{L}_-|0, 0\rangle = 0$$

     az állapotok ortogonalitása és a léptetőoperátorok hatása miatt;

- ha $l = 1$, akkor a 3-szorosan degenerált altéren a perturbáció mátrixa:

$$\begin{aligned}
W_{mm'} &= \langle 1, m|\hat{H}'|1, m'\rangle = -\frac{\gamma B}{2}\langle 1, m|\hat{L}_+ + \hat{L}_-|1, m'\rangle \\
&= -\frac{\gamma B}{2}\left[\langle 1, m|\hat{L}_+|1, m'\rangle + \langle 1, m|\hat{L}_-|1, m'\rangle\right] \\
&= -\frac{\gamma B\hbar}{2}\left[\sqrt{2 - m'(m'+1)}\delta_{m,m'+1} + \sqrt{2 - m'(m'-1)}\delta_{m,m'-1}\right] ,
\end{aligned}$$

azaz

$$\mathbf{W} = -\frac{\hbar\gamma B}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} .$$

Ekkor $\mathbf{W}$ sajátértékei a

$$-\lambda^3 + 2\lambda = (2 - \lambda^2)\lambda \overset{!}{=} 0$$

egyenletből

$$\begin{aligned}
\lambda_1 &= 0 , \\
\lambda_{2,3} &= \pm\sqrt{2} .
\end{aligned}$$

Ennélfogva az energikorrekciók:

$$\begin{aligned}
E_1^{(1)} &= 0 , \\
E_{2,3}^{(1)} &= \mp\hbar\gamma B .
\end{aligned}$$

Variációs módszer

A variációs módszert különböző kvantummechanikai rendszerek alapállapoti energiájának felülről becslésére használhatjuk. Felírható egy energiafunkcionál mint

$$E[\psi](\alpha) = \frac{\langle\psi(x;\alpha)|\hat{H}|\psi(x;\alpha)\rangle}{\langle\psi(x;\alpha)|\psi(x;\alpha)\rangle} ,$$

ahol $\psi(x;\alpha)$ valamilyen próbafüggvény, és α (egy vagy akár több) paramétert jelöl. A módszer alapján felülről becsülhetjük az E_0 alapállapoti energiát az energiafunkcionál minimalizálásával az α paraméter hangolásán keresztül, azaz $E[\psi](\alpha_0)$ minimális, ha

$$\left.\frac{\mathrm{d}E[\psi](\alpha)}{\mathrm{d}\alpha}\right|_{\alpha_0} = 0 .$$

2. feladat

Tekintsük az anharmonikus oszcillátort az alábbi Hamilton-operátorral:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2 + \lambda\hat{x}^4 ,$$

és legyen a próbafüggvény α optimalizálandó paraméterrel a harmonikus oszcillátor alapállapoti hullámfüggvényével azonos alakú, azaz

$$\psi(x;\alpha) = e^{-\alpha x^2/2} \ .$$

Az energiafunkcionál nevezője:

$$\langle \psi(x;\alpha) | \psi(x;\alpha) \rangle = \int\limits_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x \ e^{-\alpha x^2} = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} \ .$$

A Hamilton-operátorban a kinetikus tag:

$$\frac{\hat{p}^2}{2m}\psi(x;\alpha) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}e^{-\alpha x^2/2} = -\frac{\hbar^2}{2m}e^{-\alpha x^2/2}(\alpha^2 x^2 - \alpha) \ .$$

Ezen felül tudjuk, hogy

$$\int\limits_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x \ x^2 e^{-\alpha x^2} = \frac{\sqrt{\pi}}{2\alpha^{3/2}} \ ,$$

$$\int\limits_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x \ x^4 e^{-\alpha x^2} = \frac{3\sqrt{\pi}}{4\alpha^{5/2}} \ .$$

Az energia így (szorgalmi ellenőrizni!)

$$\begin{aligned} E[\psi](\alpha) &= \sqrt{\frac{\alpha}{\pi}} \int\limits_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x \ e^{-\alpha x^2} \left[\frac{\hbar^2}{2m}\alpha - \frac{\hbar^2}{2m}\alpha^2 x^2 + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 + \lambda x^4 \right] \\ &= \frac{\hbar^2}{4m}\alpha + \frac{m\omega^2}{4\alpha} + \frac{3\lambda}{4\alpha^2} \ . \end{aligned}$$

Az α-szerinti derivált elvégzése, és a kapott kifejezés zérussá tétele után a megoldandó egyenlet az optimális α_0 paraméter meghatározásához:

$$\left. \frac{\mathrm{d}E[\psi](\alpha)}{\mathrm{d}\alpha} \right|_{\alpha_0} = \frac{\hbar^2}{4m} - \frac{m\omega^2}{4\alpha_0^2} - \frac{6\lambda}{4\alpha_0^3} \stackrel{!}{=} 0 \ .$$

Ahhoz, hogy meg tudjuk oldani az egyenletet legyen most $\omega^2 \approx 0$, így

$$\alpha_0 = \left(\frac{6\lambda m}{\hbar^2} \right)^{1/3} ,$$

és ekkor – visszahelyettesítés után – a becslés az alapállapoti energiára:

$$E_0 \leq E[\psi](\alpha_0) = \frac{3}{8}\left(\frac{6\hbar^4\lambda}{m^2} \right)^{1/3} \ .$$

3. feladat

Egy feladat erejéig felejtsük el, hogy mi az egzakt megoldása a kvantummechanikai harmonikus oszcillátornak, és próbáljuk megbecsülni az alapállapoti energiát a

$$\psi(x;\beta) = \frac{\mathcal{N}}{x^2+\beta^2}$$

próbafüggvénnyel.

1. Válasszuk meg úgy a hullámfüggvényt, hogy az energiafunkcionál nevezője 1 legyen (értsd.: normálunk, ahogy szoktunk):

$$\langle\psi(x;\beta)|\psi(x;\beta)\rangle = \int\limits_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\, \frac{|\mathcal{N}|^2}{(x^2+\beta^2)^2} = |\mathcal{N}|^2\frac{\pi}{2\beta^3} \stackrel{!}{=} 1\ ,$$

   így (a szokásos konvencióval) $\mathcal{N} = \sqrt{2\beta^3/\pi}$!

2. A kinetikus tag

$$\left\langle \psi(x\ \beta) \middle| -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} \middle| \psi(x\ \beta) \right\rangle = -\frac{2\beta^3}{\pi}\frac{\hbar^2}{2m}\int\limits_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}x\, \frac{1}{x^2+\beta^2}\frac{2(3x^2-\beta^2)}{(x^2+\beta^2)^3}\frac{\hbar^2}{4m\beta^2}\ .$$

   A potenciális tag:

$$\left\langle \psi(x\ \beta) \middle| \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2 \middle| \psi(x\ \beta) \right\rangle = \frac{2\beta^3}{\pi}\frac{m\omega^2}{2}\int\limits_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}x\, \frac{x^2}{(x^2+\beta^2)^2} = \frac{\beta^2 m\omega^2}{2}\ .$$

   Az energiafunkcionál tehát

$$E[\psi](\beta) = \frac{\hbar^2}{4m\beta^2} + \frac{\beta^2 m\omega^2}{2}\ .$$

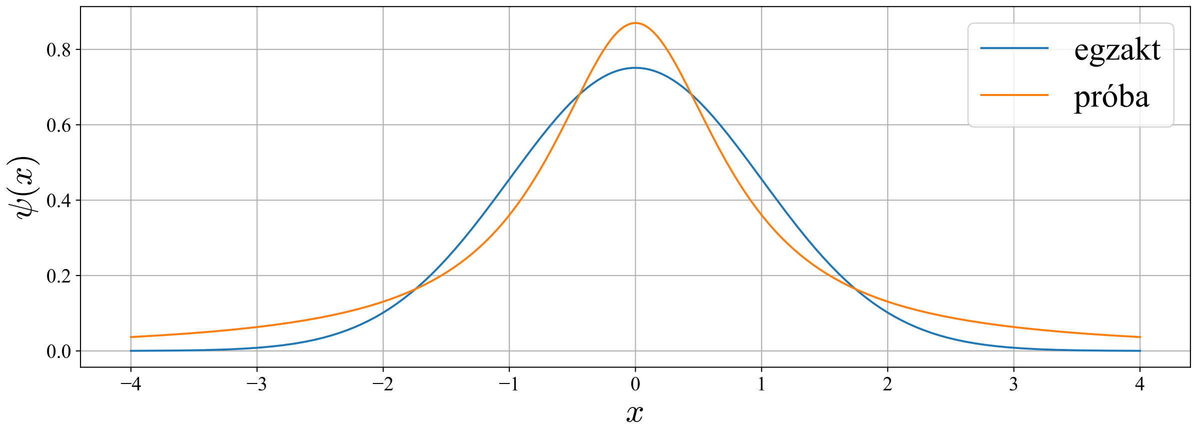
3. Az optimális paraméterre vonatkozó egyenlet deriválás után:

$$\left.\frac{\mathrm{d}E[\psi](\beta)}{\mathrm{d}\beta}\right|_{\beta_0} = -\frac{\hbar^2}{2m\beta_0^2} + \beta_0 m\omega^2 \stackrel{!}{=} 0\ ,$$

   ahonnan (valós β esetén) $\beta_0^2 = \hbar/(m\omega\sqrt{2})$, így

$$E_0 \le E[\psi](\beta_0) = \frac{\hbar\omega}{\sqrt{2}}\ .$$

   Összevetve az tapasztaljuk, hogy nagyságrendileg egyezik az egzakt $\hbar\omega/2$ eredménnyel a becslésünk, de közel sem ideális.



1. ábra. A harmonikus oszcillátor egzakt alapállapoti hullámfüggvénye és a 4. feladatban használt próbafüggvény az otimális β érték mellett ($\hbar = \omega = m = 1$).

4. feladat

A variációs módszer segítségével lehetőségünk van gerjesztett állapotok energiaszintjeire is becslést adni. Ha van valamilyen $\psi(x)$ próbafüggvényünk, ami ortogonális az adott rendszer alapállapoti hullámfüggvényére, akkor belátható, hogy

$$\langle\psi(x)|\hat{H}|\psi(x)\rangle \geq E_1 \ .$$

Bizonyítsuk ezt most be! Tetszőleges állapot kifejthető a Hamilton-operátor $|\phi_i(x)\rangle$ sajátfüggvényeinek bázisán, azaz

$$|\psi(x)\rangle = \sum_i c_i|\phi_i(x)\rangle \ ,$$

illetve tudjuk, hogy $\langle\phi_i(x)|\phi_j(x)\rangle = \delta_{ij}$. Szorozzuk balról $\langle\phi_n(x)|$-nel a kifejtett állapotot:

$$\langle\phi_n(x)|\psi(x)\rangle = \sum_i c_i\langle\phi_n(x)|\phi_i(x)\rangle = \sum_i c_i\delta_{ni} = c_n \ .$$

Tudjuk, hogy ha $|\psi(x)\rangle$ ortogonális $|\phi_0(x)\rangle$ alapállapotra, akkor $\langle\phi_0(x)|\psi(x)\rangle = c_0 = 0$. Ennélfogva (feltéve, hogy $E_0 < E_1 < E_2 \dots$)

$$\langle\psi(x)|\hat{H}|\psi(x)\rangle = \sum_{n=0} E_n|c_n|^2 = \underbrace{E_0|c_0|^2}_{0} + \sum_{n=1} E_n|c_n|^2 \geq E_1\sum_{n=1}|c_n|^2 = E_1 \ .$$

A kérdés ezek után csak az, hogy mi legyen az alapállotra ortogonális próbafüggvényünk. Legegyszerűbben úgy tudunk ortogonális hullámfügvényt gyártani a *páros* alapállapoti hullámfüggvényre, hogy egy megfelelően viselkedő (végtelenben lecsengő, stb.) *páratlan* függvényt választunk. Intuitívan az előző feladat alapján ez lehetne pl.

$$\psi(x;\gamma) = \frac{\mathcal{N}'}{x^2+\gamma^2}x \ ,$$

azonban ez a potenciális $\langle\psi(x;\gamma)|\hat{V}|\psi(x;\gamma)\rangle$ járulék esetén divergens integrálhoz vezet, így valami másra lesz szükségünk. Jó választás lesz a

$$\psi(x;\gamma) = \frac{\mathcal{N}'}{x^4+\gamma^4}x \ .$$

A normáltság megkövetelése után

$$\langle\psi(x;\gamma)|\psi(x;\gamma)\rangle = |\mathcal{N}'|^2 \int\limits_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\, \frac{x^2}{(x^4+\gamma^4)^2} = |\mathcal{N}'|^2 \frac{\pi}{2^{5/2}\gamma^5} \stackrel{!}{=} 1 \,,$$

ahonnan $\mathcal{N}' = \sqrt{2^{5/2}\gamma^5/\pi}$. Az előző feladathoz hasonlóan a kinetikus tag:

$$\left\langle \psi(x;\gamma) \middle| -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} \middle| \psi(x;\gamma) \right\rangle = -\frac{2^{5/2}\gamma^5}{\pi}\frac{\hbar^2}{2m} \int\limits_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\, \frac{x}{x^4+\gamma^4}\frac{4x^3(3x^4-5\gamma^4)}{(x^4+\gamma^4)^3} = \frac{5\hbar^2}{4m\gamma^2} \,.$$

A potenciális tag:

$$\left\langle \psi(x;\gamma) \middle| \frac{m\omega^2\hat{x}^2}{2} \middle| \psi(x;\gamma) \right\rangle = \frac{2^{5/2}\gamma^5}{\pi}\frac{m\omega^2}{2} \int\limits_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\, \frac{x^4}{(x^4+\gamma^4)^2} = \frac{m\omega^2\gamma^2}{2} \,.$$

Az energia tehát

$$E_1[\psi](\gamma) = \frac{5\hbar^2}{4m\gamma^2} + \frac{m\omega^2\gamma^2}{2} \,.$$

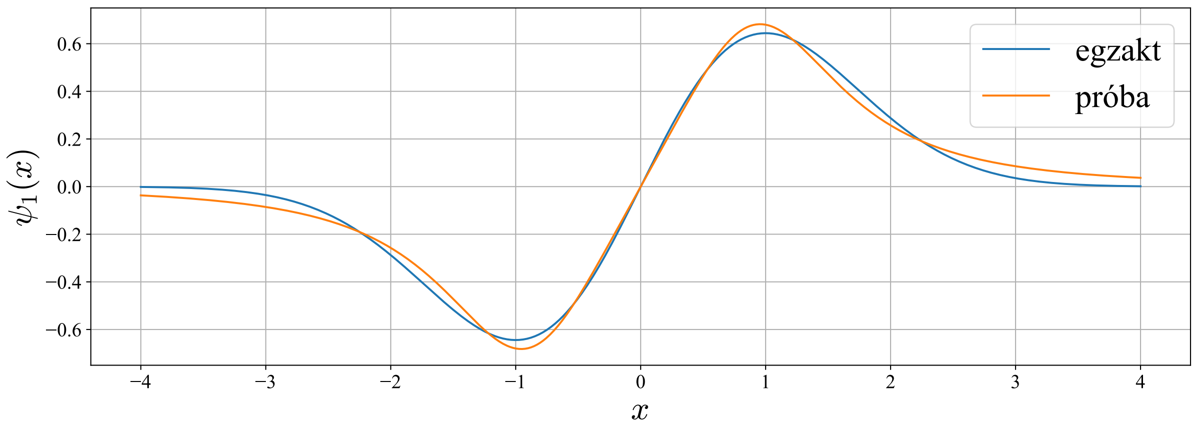
Az optimális paraméterre vonatkozó egyenlet deriválás után:

$$\left.\frac{\mathrm{d}E[\psi](\gamma)}{\mathrm{d}\gamma}\right|_{\gamma_0} = -\frac{5\hbar^2}{2m\gamma_0^3} + m\omega^2\gamma_0 \stackrel{!}{=} 0 \,,$$

ahonnan $\gamma_0^2 = \sqrt{5/2}\hbar/(m\omega)$, így a becslés

$$E_1 \le E[\psi](\gamma_0) = \sqrt{\frac{5}{2}}\hbar\omega \,,$$

ami egész közel van az egzakt $3\hbar\omega/2$ értékhez.



2. ábra. A harmonikus oszcillátor egzakt első gerjesztett állapotához tartozó hullámfüggvény és az 5. feladatban használt próbafüggvény az optimális γ érték mellett ($\hbar = m = \omega = 1$).

5. feladat

A variációs módszer segítségével mutassuk meg, hogy a nem-degenerált és időfüggetlen perturbációszámítás első rendben mindig felülről becsüli az alapállapoti energiát. Ehhez legyen a próbafüggvény a perturbálatlan alapállapoti hullámfüggvény, azaz

$$\psi(x) = \psi_0^{(0)}(x) \ .$$

A variációszámítás szerint

$$\langle \psi_0^{(0)}(x) | \hat{H} | \psi_0^{(0)}(x) \rangle \geq E_0 \ ,$$

ahol azt is tudjuk, hogy $\hat{H} = \hat{H}^{(0)} + \hat{H}'$, így

$$\langle \psi_0^{(0)}(x) | \hat{H} | \psi_0^{(0)}(x) \rangle = \langle \psi_0^{(0)}(x) | \hat{H}^{(0)} | \psi_0^{(0)}(x) \rangle + \langle \psi_0^{(0)} | \hat{H}' | \psi_0^{(0)} \rangle = E_0^{(0)} + E_1^{(0)} \geq E_0 \ .$$

Itt felismertük a az elsőrendű energiakorrekció képletét, és így beláttuk a fenti állítást. Azt is meg tudjuk mutatni, hogy az alapállapoti energia másodrendű korrekciója mindig negatív:

$$E_0^{(2)} = \sum_{m \neq 0} \frac{|\langle \psi_m^{(0)} | \hat{H}' | \psi_0^{(0)} \rangle|^2}{E_0^{(0)} - E_m^{(0)}} \ .$$

A számláló mindig nagyobb, mint 0. Ezen felül tudjuk, hogy $E_0^{(0)} < E_1^{(0)} < E_2^{(0)} < \ldots$, azaz a nevező mindig negatív, ennélfogva a teljes kifejezés is mindig negatív.