Matematično-fizikalni praktikum 2025/26

3. naloga: Lastne vrednosti in lastni vektorji

Samo Krejan, 28231092

Enodimenzionalni linearni harmonski oscilator (delec mase m s kinetično energijo $T(p) = p^2/2m$ v kvadratičnem potencialu $V(q) = m\omega^2 q^2/2$) opišemo z brezdimenzijsko Hamiltonovo funkcijo

$$H_0 = \frac{1}{2}\left(p^2 + q^2\right) ,$$

tako da energijo merimo v enotah $\hbar\omega$, gibalne količine v enotah $(\hbar m\omega)^{1/2}$ in dolžine v enotah $(\hbar/m\omega)^{1/2}$. Lastna stanja $|n\rangle$ nemotenega Hamiltonovega operatorja H_0 poznamo iz osnovnega tečaja kvantne mehanike [Strnad III]: v koordinatni reprezentaciji so lastne valovne funkcije

$$|n\rangle = (2^n n! \sqrt{\pi})^{-1/2} \mathrm{e}^{-q^2/2}\, \mathcal{H}_n(q) ,$$

kjer so $\mathcal{H}_n$ Hermitovi polinomi. Lastne funkcije zadoščajo stacionarni Schrödingerjevi enačbi

$$H_0|n^0\rangle = E_n^0|n^0\rangle$$

z nedegeneriranimi lastnimi energijami $E_n^0 = n + 1/2$ za $n = 0, 1, 2, \ldots$. Matrika $\langle i|H_0|j\rangle$ z $i, j = 0, 1, 2, \ldots, N-1$ je očitno diagonalna, z vrednostmi $\delta_{ij}(i + 1/2)$ po diagonali. Nemoteni Hamiltonki dodamo anharmonski člen

$$H = H_0 + \lambda q^4 .$$

Kako se zaradi te motnje spremenijo lastne energije? Iščemo torej matrične elemente $\langle i|H|j\rangle$ *motenega* Hamiltonovega operatorja v bazi *nemotenih* valovnih funkcij $|n^0\rangle$, kar vemo iz perturbacijske teorije v najnižjem redu. Pri računu si pomagamo s pričakovano vrednostjo prehodnega matričnega elementa za posplošeno koordinato

$$q_{ij} = \langle i|q|j\rangle = \frac{1}{2}\sqrt{i + j + 1}\ \delta_{|i-j|,1} ,$$

ki, mimogrede, uteleša izbirno pravilo za električni dipolni prehod med nivoji harmonskega oscilatorja. V praktičnem računu moramo seveda matriki q_{ij} in $\langle i|H|j\rangle$ omejiti na neko končno razsežnost N.

1 Naloga

Z diagonalizacijo poišči nekaj najnižjih lastnih vrednosti in lastnih valovnih funkcij za moteno Hamiltonko $H = H_0 + \lambda q^4$ ob vrednostih parametra $0 \le \lambda \le 1$.