Mechanika Kwantowa - kurs duży

zestaw 9

11.5.2021. wtorek - grupa 2
12.5.2021. środa - grupa 1

Suma punktów 20. Oceny[1]:
[0 – 10] - 2, (10 – 12] - 3, (12 – 14] - 3.5, (14 – 16] - 4, (16 – 18] - 4.5, (18– 20] - 5

1. (pkt. 4) Jednowymiarowy oscylator harmoniczny o częstości ω poddany jest zaburzeniu
$$\hat{H} = \varepsilon \left(\frac{x}{l}\right)^4,$$
gdzie $l = \sqrt{\hbar/m\omega}$. Obliczyć poprawkę do energii w pierwszym i drugim rzędzie zaburzeń. (Jeżeli chodzi o pierwszy rząd rachunku zaburzeń, proszę porównać z zadaniem 7 z poprzedniego zestawu).

2. (pkt. 4) Dwuwymiarowy oscylator harmoniczny o częstości ω poddany jest zaburzeniu
$$\hat{H}' = \varepsilon \left(\frac{x}{l}\right)^2 \left(\frac{y}{l}\right)^2,$$
gdzie l jest zdefiniowane w zadaniu 1. Obliczyć w pierwszym rzędzie rachunku zaburzeń poprawki do energii oscylatora niezaburzonego dla stanu podstawowego, pierwszego i drugiego stanu wzbudzonego.

3. (pkt. 2) Wykazać, że jeżeli jako funkcję próbną w zasadzie wariacyjnej wybierzemy funkcję, która jest ortogonalna do funkcji stanu podstawowego, to możemy oszacować energię pierwszego stanu wzbudzonego. Uwaga: nie oznacza to, ze musimy znać funkcję stanu podstawowego, wystarczy na przykład, że jako funkcję próbną dla potencjału symetrycznego weźmiemy funkcję antysymetryczną.

4. (pkt. 5) Dla potencjału $k\,|x|$ oszacować energię stanu podstawowego metodą wariacyjną. Jako funkcję próbną przyjąć:
$$\psi(x) = A\exp(-\lambda x^2).$$
Wynik podać w postaci
$$E_0 \le c_0 \left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m}\right)^{1/3}.$$
Podać wzór analityczny i wartość numeryczną c_0.

[1] $(x$ lub $x)$ oznacza bez x, $[x$ lub $x]$ oznacza łącznie z x.

5. (pkt. 5) Oszacować metodą wariacyjną energię pierwszego stanu wzbudzonego dla potencjału $k\,|x|$. W tym celu posłużyć się funkcją próbną

$$\psi(x) = B\,x\exp(-\lambda x^2).$$

Wynik podać w postaci

$$E_1 \le c_1 \left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m}\right)^{1/3}.$$

Podać wzór analityczny i wartość numeryczną c_1.

6. Zadanie dodatkowe dla chętnych punktowane jako osobny zestaw.

Znaleźć energię stanu podstawowego i pierwszego stanu wzbudzonego dla cząstki o masie m poruszającej się w potencjale

$$V(x) = k\,|x|$$

i porównać otrzymany wynik z wynikami z zadań 4 i 5.

Problem ten można rozwiązać dokładnie (numerycznie). Zanim podejmie się próbę rozwiazania numerycznego, warto zastanowić się nad warunkami zszycia funkcji falowej w obszarze $x > 0$ z funkcją falową w obszarze $x < 0$. Ponieważ funkcja falowa stanu podstawowego nie może mieć zer w skończonym x, więc musi być funkcją symetryczną. To oznacza, że musi mieć ekstremum w $x = 0$. Wystarczy znaleźć zatem rozwiązanie tylko dla dodatnich x i narzucić warunek znikania pochodnej funkcji falowej w $x = 0$ (lub znaleźć numerycznie położenie ekstremum). Z kolei funkcja falowa pierwszego stanu wzbudzonego musi być równa zero w $x = 0$ (bo jest antysymetryczna). Zatem znowu można rozwiązać równanie Schrödingera tylko dla dodatnich x i narzucić warunek znikania rozwiązania w $x = 0$.

W celu otrzymania dokładnego rozwiązania należy skorzystać z własności funkcji Airy'ego (Abramowitz, Stegun, Handbook of Mathematical Functions, także *Mathematica*). Funkcje Airy'ego są rozwiązaniami równania

$$f''(z) - zf(z) = 0.$$

Równanie to ma dwa rozwiązania oznaczane jako $Ai(z)$ oraz $Bi(z)$ [*Mathematica* używa oznaczeń: `AiryAi[x]` oraz `AiryBi[x]`]. Funkcje te dla $z < 0$ oscylują ze zmienną amplitudą, a dla $z > 0$ funkcja $Ai(z)$ dąży do 0, a funkcja $Bi(z)$ dąży do nieskończoności. Aby sprowadzić równanie Schrödingera

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + k\,|x| - E\right)\psi(x) = 0$$

do równania Airy'ego należy najpierw zmienić zmienne

$$x = \left(\frac{\hbar^2}{2mk}\right)^{1/3}\xi,$$

a potem wprowadzić nową zmienną

$$z = \xi - \lambda,\ \lambda = \left(\frac{2m}{\hbar^2 k^2}\right)^{1/3} E.$$