Квантовая теория
Второй поток. Осень 2014
Список задач №8
Тема: Вариационный метод и стационарная теория возмущений.
Прямой вариационный метод.
Теория возмущений: невырожденный случай.
Теория возмущений: вырожденный случай.
Цепочка сильной связи.

1. Прямой вариационный метод

8.1.1 Для гармонического осциллятора оценить энергию основного состояния вариационным методом, используя пробную функцию

$$\theta(x,\alpha)=\begin{cases}1-\alpha x^2, & |x|\le\alpha^{-1/2}\\ 0, & |x|>\alpha^{-1/2}.\end{cases}$$

8.1.2 Используя пробную функцию Ферми

$$\theta(x)=\begin{cases}1-\frac{|x|}{\alpha}, & (|x|\le\alpha)\\ 0, & (|x|>\alpha)\end{cases}$$

(L22, п.2, EX1), найти оценку сверху для энергии основного состояния частицы в дельта-яме $U(x)=-q\delta(x)$.

8.1.3 Доказать, что при использовании любой однопараметрической пробной функции вида $\theta(\alpha x)$ для отыскания энергии основного состояния в однородных степенных потенциалах $U(x)=K|x|^n$ в точке минимума $\bar{E}$ в точности выполняется теорема о вириале

$$2\bar{T}=n\bar{U},$$

хотя сам $\bar{T}$ и $\bar{U}$ определяются вариационным методом приближенно.

8.1.4 Используя вариационный метод, оценить энергию основного состояния системы с гамильтонианом

$$H=\frac{1}{2}\left(p^2+x^4\right).$$

Вид пробной ВФ выбрать самостоятельно и обосновать.
★ Найти численно по возможности точное значение энергии основного состояния E_0.

8.1.5 Какая из следующих трех пробных функций –

$$\theta_1(\alpha x)=\frac{1}{\mathrm{ch}\alpha x},\quad \theta_2(\alpha x)=\frac{1}{\mathrm{ch}^2\alpha x},\quad \theta_3(\alpha x)=\begin{cases}\cos^2\alpha x, & |\alpha x|\le\frac{\pi}{2}\\ 0, & |\alpha x|>\frac{\pi}{2}\end{cases}$$

дает лучшую оценку энергии основного состояния гармонического осциллятора?
а) Для значений параметров, дающих минимум $\bar{E}$, получить оценку E_0 снизу из неравенства $E_0\ge\bar{E}-\sqrt{\overline{E^2}-\overline{E}^2}$.

8.1.6 Доказать, что фиделити $\mathfrak{F}$ пробной функции $\theta(x)$ и точной волновой функцией основного состояния $\varphi_0(x)$ удовлетворяет неравенству

$$\mathfrak{F}\ge1-\frac{\bar{E}-E_0}{E_1-E_0}.$$

8.1.7 Доказать для энергии основного состояния неравенство

$$E_0 \geq \bar{E} - \frac{\overline{E^2} - \bar{E}^2}{E_1 - \bar{E}}.$$

Указание: рассмотреть интеграл

$$K = \int \theta(x)(\hat{H} - E_0)(\hat{H} - E_1)\theta(x)dx.$$

8.1.8 Оценить энергию первого возбужденного состояния гармонического осциллятора, используя пробные функции

$$\text{a)} \quad \theta(x, \alpha) = x(1 + \alpha|x|)\exp(-\alpha|x|); \qquad \text{b)} \quad \theta(x, \alpha) = x\mathrm{ch}^{-1}\alpha x.$$

8.1.9 Оценить энергию основного состояния гармонического осциллятора, используя *двухпараметрическую* пробную функцию

$$\theta(x, \alpha, \beta) = \begin{cases} (1 - \alpha|x|)\cos(\beta x), & |x| \leq \alpha^{-1}, \\ 0, & |x| > \alpha^{-1}. \end{cases}$$

8.1.10 Для гауссовой потенциальной ямы

$$U(x) = -U_0 \exp\left(-\frac{x^2}{2a^2}\right)$$

вычислить (с тремя десятичными знаками) относительные энергии связи $\varepsilon_i = |E_i|/U_0$ основного ($i = 0$) и первого возбужденного ($i = 1$) состояний при значении борновского параметра $B = 3$. Для решения использовать прямой вариационный метод.

2. Теория возмущений: невырожденный случай

8.2.1 Пусть $H = H_0 + \varepsilon V$, где

$$H_0 = \begin{pmatrix} E_1 & 0 \\ 0 & E_2 \end{pmatrix}, \quad V = \begin{pmatrix} A & B \\ B & A \end{pmatrix}.$$

Найти поправки первого и второго порядков к собственным значениям H_0.

8.2.2 Частица находится в одномерной потенциальной яме $U(x) = -U_0\mathrm{ch}^{-2}(x/a)$. Для этой системы:

a) Могут ли быть отличны от нуля поправки **первого** порядка к энергиям основного и первого возбужденного состояний под действием возмущения $V(x) = -Fx$?

b) Могут ли быть отличны от нуля поправки **второго** порядка к энергиям основного и первого возбужденного состояний под действием возмущения $V(x) = -Fx$?

8.2.3 Атом водорода, находящийся в основном состоянии, помещен в постоянные однородные поля:

a) электрическое – с напряженностью $\mathcal{E} = 10^4$ Гс;

b) магнитное – с напряженностью $\mathcal{H} = 10^4$ Гс.

Оценить порядки величин сдвигов энергетического уровня

8.2.4 Вычислить поправки 1-го и 2-го порядков к уровням энергии гармонического осциллятора при наличии возмущения $\varepsilon\hat{V} = \varepsilon x^2$. Оценить радиус сходи-мости ряда теории возмущений.

8.2.5 Пусть

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2} - q\delta(x), \quad \varepsilon\hat{V} = \varepsilon q\delta(x).$$

Доказать, что поправки третьего и более высоких порядков по ε к энергии основного состояния системы $E_0^(0)$ в точности равны нулю.

8.2.6 В модели ангармонического осциллятора с кубической нелинейностью потенциал в осцилляторных единицах имеет вид

$$U(x) = \frac{x^2}{2} + \varepsilon x^3.$$

Оценить значение параметра ε для этой модели в приложении к задаче о колебаниях двухатомной молекулы.

8.2.7 Вычислить поправки второго порядка к уровням энергии гармонического осциллятора $E_n^{(0)}$ под действием возмущения $\hat{V} = \varepsilon x^3$.

a) При каких значениях ε можно использовать для спектра возмущенной системы приближение $E_n \approx E_n^{(0)} + E_n^{(1)} + E_n^{(2)}$? (В этой модели $E_n^{(1)} = 0$).

b) При каких значениях ε можно использовать для волновой функции возмущенной системы приближение $\psi_n \approx \psi_n^{(0)} + \psi_n^{(1)}$?

8.2.8 Доказать, что поправка второго порядка к частоте перехода между соседними уровнями гармонического осциллятора под действием возмущения $\hat{V} = \varepsilon x^3$ при $\varepsilon \ll 1, n \gg 1$ в асимптотически главном порядке не зависит от $\hbar$.

8.2.9 Вычислить поправки первого и второго порядков к уровням энергии гармонического осциллятора $E_n^{(0)}$ под действием возмущения $\hat{V} = \varepsilon x^4$.

a) Вычислить энергию основного состояния возмущенной системы с помощью прямого вариационного метода, используя пробную функцию

$$\theta(x, \alpha) = \exp(-\alpha x^2)$$

с точностью до членов порядка ε^2.

b) Найти спектр возмущенной системы методом ВКБ с точностью до членов порядка ε^2.

c) Сравнить точность значений энергии основного состояния, найденных с помощью теории возмущений, прямого вариационного метода и метода ВКБ.

8.2.10 Для типичной потенциальной ямы

$$U(x) = -U_0 f\left(\frac{x}{a}\right)$$

с малым борновским параметром $B \ll 1$ вычислить энергию основного состояния E_0 с точностью до членов второго порядка по B, используя в качестве нулевого приближения модель δ-ямы.

3. Теория возмущений: вырожденный случай

8.3.1 Пусть $\hat{H} = \hat{H}_0 + \varepsilon\hat{V}$, где

$$H_0 = \begin{pmatrix} E_1 & 0 \\ 0 & E_1 \end{pmatrix}, \quad V = \begin{pmatrix} A & B \\ B & A \end{pmatrix}$$

(собственные состояния $\hat{H}_0$ вырождены по энергии). Найти поправки первого и второго порядков по ε к собственным значениям $\hat{H}_0$.

8.3.2 Пусть $\hat{H} = \hat{H}_0 + \varepsilon\hat{V}$, где $\hat{H}_0$ – гамильтониан двумерного изотропного гармонического осциллятора, а $\varepsilon\hat{V} = \varepsilon\hat{x}\hat{y}$. Найти поправки первого порядка к энергиям $E_n^{(0)}$ основного и первого возбужденного уровней системы $\hat{H}_0$.

8.3.3 Используя теорию возмущений для вырожденного случая, найти дискретный спектр частицы в поле

$$U(x) = -q\delta(x-a) - q\delta(x+a).$$

Ответ сравнить с результатом задачи 4.2.2.

8.3.4 Пусть $\hat{H} = \hat{H}_0 + \varepsilon\hat{V}$, где

$$\hat{H}_0 = \begin{pmatrix} E_1 & 0 & 0 \\ 0 & E_1 & 0 \\ 0 & 0 & E_2 \end{pmatrix}, \quad \varepsilon\hat{V} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \varepsilon V \\ 0 & 0 & \varepsilon V \\ \varepsilon V & \varepsilon V & 0 \end{pmatrix}.$$

Вычислить поправки второго порядка по ε к уровням энергии гамильтониана $\hat{H}_0$ и сравнить результат с точным решением.

8.3.5 Для системы с гамильтонианом нулевого приближения

$$\hat{H}_0 = \frac{1}{2}\left(p_x^2 + p_y^2\right) + \frac{1}{2}\left(1+\alpha\right)x^2 + \frac{1}{2}y^2$$

и возмущением $\beta\hat{V} = \beta xy$ найти спектр трех состояний с наименьшими энергиями при $\alpha \ll \beta \ll 1$ и $\beta \ll \alpha \ll 1$.

8.3.6 Вычислить поляризуемость атома водорода в основном состоянии, используя для вычисления второй поправки к уровням энергии атома в присутствии возмущения $\varepsilon\hat{V} = e\vec{E}\vec{r}$ формулы

$$\hat{H}_0\psi_i^{(1)} = \varepsilon\hat{V}\psi_i^{(0)}, \quad E_i^{(2)} = \left\langle \psi_i^{(1)} \middle| \varepsilon\hat{V} \middle| \psi_i^{(0)} \right\rangle.$$

8.3.7 Оценить поляризуемость атома водорода в основном состоянии, используя для вычисления второй поправки к уровням энергии атома в присутствии возмущения $\varepsilon\hat{V} = e\vec{E}\vec{r}$ формулу

$$E_n^{(2)} = \sum_m \frac{V_{nm}^2}{E_n - E_m}.$$

a) Взять в сумме в правой части одно слагаемое, соответствующее пере-ходу на ближайший к основному уровень (оценка снизу).

b) Оценить сумму в правой части, заменив все разности энергий на минимальное значение $E_2 - E_1$ (оценка сверху). Сравнить с точным решением 8.3.6.

4. Теория возмущений: цепочка сильной связи

8.4.1 Вычислить плотность состояний в одномерной цепочке сильной связи – одномерной системе с постоянными недиагональными матричными элементами

$$H_{n,n+1} = H_{n,n-1} = V,$$

у которой диагональные матричные элементы $H_{nn} = 0$.

8.4.2 Вычислить плотность состояний в *одномерной модели Андерсона* – цепочке сильной связи с постоянными недиагональными матричными элементами

$$H_{n,n+1} = H_{n,n-1} = V,$$

у которой диагональные матричные элементы $H_{nn} = E_n$ случайны, некоррелированы, и распределены равномерно в полосе шириной W:

$$p(E) = \begin{cases} \frac{1}{W}, & |E| \le \frac{W}{2} \\ 0, & |E| > \frac{W}{2}. \end{cases}$$

8.4.3 Для неупорядоченной дираковской гребенки – потенциала

$$U(x) = -\sum_n q_n \delta(x - na),$$

где q_n – случайные (некоррелированные) величины, распределенные по известному закону, при условии $e^{-Q} \ll 1$, где $Q = m\langle q\rangle a\hbar^{-2}$, построить модель цепочки сильной связи и сравнить ее с моделью Андерсона.

8.4.4 Вычислить плотность состояний в одномерной модели с недиагональным беспорядком - цепочке сильной связи с флуктуирующими недиагональными матричными элементами

$$H_{n,n+1} = H_{n+1,n} \equiv V_n = V_0 + \xi_n,$$

где добавки к матричному элементу ξ_n случайны, некоррелированы и распределены равномерно в полосе шириной U:

$$p(\xi) = \begin{cases} \frac{1}{U}, & |\xi| \le \frac{U}{2} \\ 0, & |\xi| > \frac{U}{2}, \end{cases}$$

а диагональные матричные элементы одинаковы, $H_{nn} = 0$.

8.4.5 Найти зависимость от времени амплитуд $a_n(t)$ на узлах цепочки сильной связи

$$\hat{H} = V(\delta_{n,n+1} + \delta_{n+1,n})$$

с начальным условием $a_n(0) = \delta_{n0}$.

8.4.6 Показать, что в цепочке сильной связи в состоянии с плавно меняющимися амплитудами a_n эволюция амплитуд может быть описана уравнением Шредингера для свободной частицы. Найти первую поправку к этому приближению и определить – увеличивается ли при ее учете скорость роста дисперсии координаты или уменьшается?