תרגול מספר 8

תורת ההפרעות

תוכן עניינים

1 חזרה ונוסחאות 1
2 אוסצילטור אנהרמוני 1
3 קופסא מעוגלת 2
4 אוסצילטור מוזז 4

1 חזרה ונוסחאות

הרעיון הכללי בתורת ההפרעות הוא שאנחנו יכולים להשתמש בבעיה שאנחנו יודעים לפתור (המילטוניאן $\hat{H}_0$ שאנו יודעים לפתור עבורו את משוואות שרדינגר: $\hat{H}_0\psi_n^{(0)} = E_n^{(0)}\psi_n^{(0)}$) כדי למצוא קירוב לפיתרון של בעיה דומה שאנחנו לא יודעים לפתור (בהנחה שההמילטוניאן שלה ניתן לכתיבה כ־$\hat{H} = \hat{H}_0 + \lambda\hat{V}$). הפיתוח, שנעשה בשיעור, פשוט למדי: כותבים את פונקציות הגל והאנרגיות כטורים ב־λ ומחלצים גורמים משותפים. התוצאות עבור האנרגיות בשני הסדרים הנמוכים ביותר ועבור פונקציות הגל בסדר הראשון הן

$$\begin{aligned}
E_n^{(1)} &= \left\langle \psi_n^{(0)} \right| \hat{V} \left| \psi_n^{(0)} \right\rangle, \\
\psi_n^{(1)} &= \sum_{m\neq n} \frac{\left\langle \psi_m^{(0)} \right| \hat{V} \left| \psi_n^{(0)} \right\rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \psi_m^{(0)}, \\
E_n^{(2)} &= \sum_{m\neq n} \frac{\left| \left\langle \psi_m^{(0)} \right| \hat{V} \left| \psi_n^{(0)} \right\rangle \right|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}.
\end{aligned}$$

נוכל להתחיל מכל אחת מהבעיות שאנו כבר מכירים ויש להן פיתרון מדוייק, ולהשתמש בהן כדי לפתור יחסית בקלות בעיות קשות יותר (בלתי־פתירות אנליטית) אך דומות להן באופן חלקי. השיטה עובדת טוב יותר כאשר ההפרעה "קטנה", אך לא נגדיר באופן מדוייק מתי זה נכון. בדרך כלל, נהיה מעוניינים אך ורק בתיקון מהסדר הראשון שאינו מתאפס.

2 אוסצילטור אנהרמוני

נתחיל מאוסצילטור הרמוני רגיל כסדר אפס, ונפתור בעיה מסובכת יותר.

תרגיל: עבור אוסצילטור אנהרמוני חד־מימדי $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2}m\omega^2x^2 + cx^3 + dx^4$, השתמשו בתורת ההפרעות כדי למצוא את האנרגיה של המצב המעורר הראשון לאחר התיקון הראשון.

פיתרון: לפני שנוכל להתחיל כל בעיה בתורת ההפרעות, עלינו להגדיר את פוטנציאל ההפרעה על ידי כתיבת ההמילטוניאן באופן

$$\begin{aligned}
\hat{H} &= \hat{H}_0 + \hat{V}, \\
\hat{H}_0 &= -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2}m\omega^2x^2, \\
\hat{V} &= cx^3 + dx^4.
\end{aligned}$$

בחירה זו קובעת לנו את הפונקציות $\psi_n^{(0)}$ ואת האנרגיות $E_n^{(0)}$, המתאימות להמילטוניאן $\hat{H}_0$ ולסדר אפס של הפיתרון. במקרה זה, כיוון שבחרנו כ־$\hat{H}_0$ המילטוניאן של אוסצילטור הרמוני,

$$\psi_n^{(0)} = \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} H_n\left(\sqrt{\alpha}x\right) e^{-\frac{\alpha x^2}{2}},$$
$$E_n^{(0)} = \hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right).$$

כאן, כמו בתרגול 5, $\alpha = \frac{m\omega}{\hbar}$ וה־$H_n\left(\xi\right)$ הם פולינומי הרמיט. כדי לחשב את התיקון הראשון לאנרגיה נותר לנו רק להשתמש בנוסחא:

$$\begin{aligned}
E_1^{(1)} &= \left\langle \psi_1^{(0)} \right| \hat{V} \left| \psi_1^{(0)} \right\rangle \\
&= \left\langle \left(\frac{4\alpha^3}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} x e^{-\frac{\alpha x^2}{2}} \right| cx^3 + dx^4 \left| \left(\frac{4\alpha^3}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} x e^{-\frac{\alpha x^2}{2}} \right\rangle \\
&= \sqrt{\frac{4\alpha^3}{\pi}} \left[\overbrace{\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\, x^2 e^{-\alpha x^2} cx^3}^{=0} + \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\, x^2 e^{-\alpha x^2} dx^4 \right] \\
&= d\sqrt{\frac{4\alpha^3}{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\, x^6 e^{-\alpha x^2} = d\sqrt{\frac{4\alpha^3}{\pi}} \left(-\frac{\partial}{\partial\alpha}\right)^3 \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} = d2\alpha^{\frac{3}{2}} \frac{1}{2} \left(-\frac{\partial}{\partial\alpha}\right)^2 \alpha^{-3/2} \\
&= d\alpha^{\frac{3}{2}} \frac{3}{2} \left(-\frac{\partial}{\partial\alpha}\right) \alpha^{-5/2} = d\alpha^{\frac{3}{2}} \frac{3}{2}\frac{5}{2} \alpha^{-7/2} = \frac{15}{4}\frac{d}{\alpha^2} = \frac{15}{4}\frac{\hbar^2 d}{m^2\omega^2}.
\end{aligned}$$

האנרגיה המתוקנת תהיה

$$E_1 \simeq E_1^{(0)} + E_1^{(1)} = \boxed{\frac{3}{2}\hbar\omega + \frac{15}{4}\frac{\hbar^2 d}{m^2\omega^2}}.$$

3 קופסא מעוגלת

כעת, נביט על ווריאציה של חלקיק בקופסא.

תרגיל: עבור קופסא באורך L עם תחתית מעוגלת כלפי מטה, $\hat{H} = \hat{H}_0 - \varepsilon \sin\frac{\pi x}{L}$ כאשר $\hat{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}$ הוא המילטוניאן של קופסא רגילה. מצאו את התיקון הראשון לאנרגיה של כל המצבים ולפונקציית הגל של מצב היסוד.

פיתרון: פונקציות הגל והאנרגיות של $\hat{H}_0$ הן

$$\psi_n^{(0)} = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right),\ E_n^{(0)} = \frac{\hbar^2\pi^2 n^2}{2mL^2}.$$

נחשב את התיקון לאנרגיה כתוצאה מההפרעה $\hat{V} = -\varepsilon \sin\frac{\pi x}{L}$:

$$\begin{aligned}
E_n^{(1)} &= \left\langle \psi_n^{(0)} \right| \hat{V} \left| \psi_n^{(0)} \right\rangle = \int_0^L \mathrm{d}x \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \left[-\varepsilon \sin\frac{\pi x}{L}\right] \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \\
&= -\frac{2\varepsilon}{L} \int_0^L \mathrm{d}x \sin^2\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \sin\frac{\pi x}{L} = -\frac{2\varepsilon}{L} \int_0^L \mathrm{d}x \frac{1}{2} \left[1 - \cos\left(\frac{2n\pi x}{L}\right)\right] \sin\frac{\pi x}{L}
\end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
&= -\frac{\varepsilon}{L}\int_0^L \mathrm{d}x\,\sin\frac{\pi x}{L}+\frac{\varepsilon}{L}\int_0^L \mathrm{d}x\,\cos\left(\frac{2n\pi x}{L}\right)\sin\frac{\pi x}{L}\\
&= \frac{\varepsilon}{L}\left[\frac{L}{\pi}\cos\frac{\pi x}{L}\right]\bigg|_0^L+\frac{\varepsilon}{L}\int_0^L \mathrm{d}x\,\frac{1}{2}\left[\sin\left(\frac{2n\pi x}{L}+\frac{\pi x}{L}\right)-\sin\left(\frac{2n\pi x}{L}-\frac{\pi x}{L}\right)\right]\\
&= -2\frac{\varepsilon}{\pi}+\frac{\varepsilon}{2L}\int_0^L \mathrm{d}x\,\left[\sin\left(\frac{(2n+1)\pi x}{L}\right)-\sin\left(\frac{(2n-1)\pi x}{L}\right)\right]\\
&= -2\frac{\varepsilon}{\pi}+\frac{\varepsilon}{2L}\left\{\left[-\frac{L}{(2n+1)\pi}\cos\left(\frac{(2n+1)\pi x}{L}\right)\right]\bigg|_0^L-\left[-\frac{L}{(2n-1)\pi}\cos\left(\frac{(2n-1)\pi x}{L}\right)\right]\bigg|_0^L\right\}\\
&= -\frac{\varepsilon}{\pi}\left\{2+\frac{1}{2}\left[\frac{1}{(2n+1)}\cos\left(\frac{(2n+1)\pi x}{L}\right)\right]\bigg|_0^L-\frac{1}{2}\left[\frac{1}{(2n-1)}\cos\left(\frac{(2n-1)\pi x}{L}\right)\right]\bigg|_0^L\right\}\\
&= -\frac{\varepsilon}{\pi}\left\{2-\frac{1}{2}\frac{2}{(2n+1)}+\frac{1}{2}\frac{2}{(2n-1)}\right\}=-\frac{\varepsilon}{\pi}\left\{2-\frac{1}{(2n+1)}+\frac{1}{(2n-1)}\right\}.
\end{aligned}
$$

השתמשנו בזהויות הטריגונומטריות $\sin^2(x)=\frac{1}{2}[1-\cos(2x)]$ ו־$\cos(x)\sin(y)=\frac{1}{2}[\sin(x+y)-\sin(x-y)]$. אפשר לפשט את הביטוי מעט יותר על ידי הוצאת מכנה משותף ולקבל:

$$
\boxed{E_n^{(1)}=-\frac{\varepsilon}{\pi}\frac{8n^2}{4n^2-1}}.
$$

נעבור לתיקון לפונקציית הגל של מצב היסוד:

$$
\psi_1^{(1)}=\sum_{k\neq 1}\frac{\left\langle\psi_k^{(0)}\middle|\hat{V}\middle|\psi_1^{(0)}\right\rangle}{E_1^{(0)}-E_k^{(0)}}\psi_k^{(0)}.
$$

עלינו לחשב את האינטגרל:

$$
\begin{aligned}
\left\langle\psi_k^{(0)}\middle|\hat{V}\middle|\psi_1^{(0)}\right\rangle &= -\varepsilon\frac{2}{L}\int_0^L \mathrm{d}x\,\sin\left(\frac{k\pi x}{L}\right)\sin\left(\frac{\pi x}{L}\right)\sin\left(\frac{1\pi x}{L}\right)\\
&= -\varepsilon\frac{2}{L}\int_0^L \mathrm{d}x\,\sin\left(\frac{k\pi x}{L}\right)\sin^2\left(\frac{\pi x}{L}\right)
\end{aligned}
$$

שוב עלינו לעבוד עם זהויות טריגונומטריות כדי לפתור את האינטגרל.

$$
\begin{aligned}
&= -\varepsilon\frac{2}{L}\int_0^L \mathrm{d}x\,\sin\left(\frac{k\pi x}{L}\right)\frac{1}{2}\left[1-\cos\left(\frac{2\pi x}{L}\right)\right]\\
&= -\varepsilon\frac{1}{L}\int_0^L \mathrm{d}x\,\sin\left(\frac{k\pi x}{L}\right)+\varepsilon\frac{1}{L}\int_0^L \mathrm{d}x\,\sin\left(\frac{k\pi x}{L}\right)\cos\left(\frac{2\pi x}{L}\right)\\
&= -\varepsilon\frac{1}{L}\left[-\frac{L}{k\pi}\cos\left(\frac{k\pi x}{L}\right)\right]\bigg|_0^L+\varepsilon\frac{1}{L}\int_0^L \mathrm{d}x\,\frac{1}{2}\left[\sin\frac{(k+2)\pi x}{L}+\sin\frac{(k-2)\pi x}{L}\right]\\
&= \frac{\varepsilon}{\pi k}\left[(-1)^k-1\right]-\varepsilon\frac{1}{2L}\int_0^L \mathrm{d}x\,\left[\frac{L}{(k+2)\pi}\cos\frac{(k+2)\pi x}{L}+\frac{L}{(k-2)\pi}\cos\frac{(k-2)\pi x}{L}\right]\bigg|_0^L
\end{aligned}
$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{\varepsilon}{\pi k}\left[(-1)^k-1\right]-\frac{\varepsilon}{2\pi}\left[\frac{\overbrace{(-1)^{k+2}}^{=(-1)^k}-1}{k+2}+\frac{\overbrace{(-1)^{k-2}}^{=(-1)^k}-1}{k-2}\right]\\
&= \frac{\varepsilon}{\pi}\left[(-1)^k-1\right]\left[\frac{1}{k}-\frac{1}{2\,(k+2)}-\frac{1}{2\,(k-2)}\right].
\end{aligned}$$

גם הפעם ניתן לפשט את הביטוי בעזרת מכנה משותף, ולקבל:

$$\left\langle \psi_k^{(0)}\middle|\hat{V}\middle|\psi_1^{(0)}\right\rangle=\frac{\varepsilon}{\pi}\frac{4\left[(-1)^k-1\right]}{k\left(4-k^2\right)}.$$

אם נציב זאת בנוסחא, התוצאה הסופית תהיה:

$$\begin{aligned}
\psi_1^{(1)} &= \frac{4\varepsilon}{\pi}\sum_{k\neq1}\frac{\left[(-1)^k-1\right]}{k\left(4-k^2\right)\left(E_1^{(0)}-E_k^{(0)}\right)}\psi_k^{(0)}\\
&= \frac{4\varepsilon}{\pi}\sum_{k\neq1}\frac{\left[(-1)^k-1\right]}{k\left(4-k^2\right)\left(\frac{\hbar^2\pi^2 1^2}{2mL^2}-\frac{\hbar^2\pi^2k^2}{2mL^2}\right)}\psi_k^{(0)}\\
&= \frac{4\varepsilon}{\pi}\frac{2mL^2}{\hbar^2\pi^2}\sum_{k\neq1}\frac{\left[(-1)^k-1\right]}{k\left(4-k^2\right)\left(1-k^2\right)}\psi_k^{(0)}\\
&= \boxed{\sum_{\substack{k\neq1,\\ k\in\mathrm{Odds}}}\frac{16\frac{\varepsilon mL^2}{\hbar^2\pi^3}}{k\left(4-k^2\right)\left(1-k^2\right)}\psi_k^{(0)}}.
\end{aligned}$$

4 אוסצילטור מוזז

לפעמים אנו מחליפים פוטנציאל שאנו יודעים לפתור עבורו את בעיית שרדינגר במדוייק בפוטנציאל דומה. במקרה זה, ניתן להשתמש בהפרש בין הפוטנציאלים בתור ההפרעה.

דוגמא: האוסצילטור המוזז

$$\hat{H}=\frac{\hat{p}^2}{2m}+\frac{1}{2}m\omega^2\left(\hat{x}-x_0\right)^2$$

ניתן לפיתרון מדוייק, ואנו יודעים כי לא אמור להיות שינוי באנרגיות שלו בהשוואה לאוסצילטור הרגיל עבורו $x_0=0$. מה קורה כאשר מחפשים תיקון ראשון בתורת ההפרעות למצב היסוד?

פיתרון: נכתוב

$$\begin{aligned}
\hat{H}_0 &= \frac{\hat{p}^2}{2m}+\frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2\\
&\Downarrow\\
\hat{V} &= \hat{H}-\hat{H}_0=\frac{1}{2}m\omega^2\left(\hat{x}-x_0\right)^2-\frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2=\frac{1}{2}m\omega^2x_0^2+m\omega^2x_0\hat{x}.
\end{aligned}$$

שוב, נשתמש בעובדה כי פונקציית הגל של מצב היסוד היא

$$\psi_0^{(0)}(x)=\left(\frac{\alpha^3}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}}xe^{-\frac{\alpha x^2}{2}}.$$

התיקון הראשון לאנרגיה יהיה

$$\begin{aligned} E_0^{(1)} &= \left\langle \psi_0^{(0)} \right| \hat{V} \left| \psi_0^{(0)} \right\rangle = \left\langle \psi_0^{(0)} \right| \frac{1}{2} m\omega^2 x_0^2 \left| \psi_0^{(0)} \right\rangle + \left\langle \psi_0^{(0)} \right| m\omega^2 x_0 \hat{x} \left| \psi_0^{(0)} \right\rangle \\ &= \frac{1}{2} m\omega^2 x_0^2 \overbrace{\left\langle \psi_0^{(0)} \middle| \psi_0^{(0)} \right\rangle}^{=1} + m\omega^2 x_0 \overbrace{\left\langle \psi_0^{(0)} \right| \hat{x} \left| \psi_0^{(0)} \right\rangle}^{=\langle \hat{x} \rangle = 0} \\ &= \boxed{\frac{1}{2} m\omega^2 x_0^2}. \end{aligned}$$

כלומר, קיבלנו תיקון ראשון סופי לאנרגיה למרות שאנו יודעים שלמעשה סכום כל התיקונים חייב להתאפס. בעיות כאלו הן מגבלה של תורת ההפרעות.