Príklady na domácu úlohu z kvantovej teórie 2

Sada č.1

riešenia, prosím, odovzdajte do začiatku prednášky 05.03.2024

Prosím, nezľaknite sa dlhého zadania, sú v ňom dlhé poznámky.

1. *poruchová teória pre nedegenerované spektrum*
Uvažujme dve rôzne trojhladinové sústavy s (nedegenerovanými) hladinami
(i) $-60,\ 0\ \text{a}\ 54\,,$
(ii) $-6,\ 0\ \text{a}\ 5\,.$
V každej z týchto sústav osobitne bol zapnutý dodatočný vonkajší potenciál, ktorý možno v oboch prípadoch vyjadriť v energetickej reprezentácii rovnakou dodatočnou maticou $H' = \begin{pmatrix} 10 & 16 & 0 \\ 16 & -5 & \sqrt{6} \\ 0 & \sqrt{6} & -4 \end{pmatrix}$. Uvedené údaje sú v nejakých jednotkách energie, napr. eV. Jednotky nie sú podstatné, takže ich budeme vynechávať.
Poznamenajme, že pre každú z dvoch sústav sme tu zaviedli jej príslušnú energetickú reprezentáciu. Elementy H'_{ij} sú výsledkami počítania integrálov $H'_{ij} = \int \varphi_i^*(x)\, \hat{H}'(x)\, \varphi_j(x)\, dx$, kde $\varphi_i(x)$ je vlnová funkcia stacionárneho stavu sústavy s energiou ε_i. Stacionárne stavy a aj dodatočný potenciál $\hat{H}'(x)$ (ktorý nešpecifikujeme ako funkciu "x") sú rozdielne v jednej a druhej sústave. Ak potom vyjde rovnaká matica H', považujme to za dielo náhody v tomto cvičnom príklade. K riešeniu úlohy si prípadne pripomeňte, ako vyzerajú stacionárne stavy v energetickej reprezentácii.

(a) Poruchová teória bude konvergovať (aj to nie super excelentne) iba v jednom prípade. Bez počítania rozhodnite, v ktorom z týchto dvoch prípadov možno s úspechom použiť poruchovú teóriu.

(b) Vypočítajte energetické hladiny do druhého rádu poruchovej teórie tej sústavy, o ktorej ste vyššie tvrdili, že poruchová teória bude pre ňu použiteľná. Okomentujte konvergenciu prvých členov poruchového radu a *odhadnite*, akej veľkosti je chyba, ktorej sa dopustíme, ak rad usekneme v 2. ráde. **[2 body]**

2. *poruchová teória pre nedegenerované spektrum*
Tento príklad priamo nadväzuje na predchádzajúci príklad. Je dobré si vždy

vyskúšať, koľko by asi vyšli energetické hladiny kompletnej sústavy, teda aj s dodatočným potenciálom, ak by sme sa ich rozhodli počítať priamo, bez použitia rozvoja do poruchového radu. Nemusí sa to vždy podariť, alebo náš odhad môže byť príliš hala-bala, ale skúsiť to treba. V tomto príklade je možné vypočítať všetky tri hladiny sústavy aj úplne presne.

Pre porovnanie s Vašimi výsledkami poruchovej teórie v riešení príkladu **1.** vypočítajte teraz hladiny presnou diagonalizáciou. **Okomentujte zhodu** medzi presným a poruchovým výsledkom pre E_1, E_2, E_3 a či chyba odhadnutá pred výpočtom súhlasí s realitou.

Môžte použiť aj softvérový balík, ktorý urobí diagonalizáciu za Vás na overenie Vami odvodeného výsledku. Urobte však aj vlastný výpočet: je tu príležitosť zopakovať si, ako sa diagonalizujú matice. **[2 body]**

3. *poruchová teória pre nedegenerované spektrum*
Aj tento príklad nadväzuje na príklad **1.**

(a) Ako ilustračný cvičný príklad uvažujte teraz tú sústavu, pre ktorú tvrdíte, že poruchovú teóriu nemožno spoľahlivo použiť. Dosadením do odvodených vzťahov pre $E_n^{(1)}$ a $E_n^{(2)}$ predveďte výpočet *základnej* hladiny do druhého rádu poruchovej teórie. Čo možno povedať o konvergencii poruchových príspevkov?

(b) Vypočítajte hodnotu energie základného stavu s presnosťou na celé čísla a porovnajte s výsledkami poruchovej teórie do druhého rádu z časti *(a)*.

[2 body]

4. *poruchová teória pre nedegenerované spektrum: nabitý JHO*
Uvažujme nabitý JHO s nábojom Q vo vonkajšom homogénnom elektrickom poli $\vec{E}_{ext}(x)$. Predpokladajúc, že pole je dostatočne slabé, aby fungovala poruchová teória, vypočítajte korekcie do druhého rádu poruchovej teórie k hladine $\varepsilon_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})$ po zapnutí poľa.
Príklad sme riešili v závere prednášky 23.2.2024. **[2 body]**

5. Zbierka, kap.6, príklad A3: *nabitý JHO*
(a) Nabitý JHO z predchádzajúceho príkladu vieme riešiť aj úplne presne doplnením polynómu v potenciáli $V(x)$ na úplný štvorec. Aké presné hladiny E_n vychádzajú?

(b) Toto je dôležité: prosím, spomeňte si, ako sme na prednáške hovorili, že príspevok poruchovej teórie N-tého rádu je vždy úmerný N-tej mocnine potenciálu. Na základe tejto skutočnosti vysvetlite, prečo nám v druhom ráde poruchovej teórie vychádza presný výsledok.

(c) Analogicky uvažujme systém s malou poruchou $V'(x) = \xi f(x)$, kde $0 < \xi \ll 1$ je bezrozmerný malý parameter *(predstavte si napr. $\xi = \alpha = 1/137$)* a $f(x)$ je nejaká slušná spojitá funkcia idúca do nuly pre $x \to \pm\infty$. Bez poruchy sú hladiny ε_n. Nemusí ísť o JHO, nie je tu dôležité, aká sústava to je. Nech po zapnutí poruchy možno presne vypočítať, že $E_n = \varepsilon_n(1 + a\xi^2 + b\xi^4 + c\xi^5)$, kde a, b, c sú reálne čísla rádovo rovné 1. Čo možno predpovedať o výsledkoch poruchovej metódy? V ktorom ráde poruchového rozvoja budú výsledky nenulové? Možno získať z konečného počtu členov poruchového rozvoja presný výsledok? V ktorom ráde poruchového rozvoja sa nám to podarí? *Samozrejme, ak by sme naozaj poznali presný výsledok, tak by sme sa už netrápili s odvodzovaním poruchového výsledku, takže otázka je len o porozumení poruchovej teórii.* **[2 body]**

6. *druhý rád poruchovej teórie pre energiu základného stavu*
(a) Napíšte všeobecný vzťah pre korekciu druhého rádu poruchovej teórie k energii základného stavu kvantového systému. Čo možno povedať o znamienku tejto korekcie?

(b) V poslednom príklade úvodného cvičenia nám/Vám vyšlo, že pre atóm vodíka vo vonkajšom homogénnom elektrickom poli je v prvom ráde poruchovej teórie korekcia k základnej hladine rovná nule: $E_1^{(1)} = 0$. *Ak ste tento výsledok nestihli vypočítať na cviku, vypočítajte ho teraz. Zadania príkladov z cvika sú už na stránke kurzu.*
Na základe časti *(a)* bez počítania vysvetlite, ktorým smerom sa po zapnutí elektrického poľa posunie základná hladina. Ustáli sa na hodnote väčšej alebo menšej ako $-13.6\,\mathrm{eV}$? **[2 body]**

7. *bonus príklad: Starkov jav v 2.ráde poruch.teórie pre E zákl.stavu atómu H*
Poznámka 1: Posunutie hladín, ktoré nastane po vložení atómu do vonkajšieho homogénneho elektrického poľa, sa nazýva z historických dôvodov Starkov jav. "Kvadratický" Starkov jav je posunutie v druhom ráde poruchovej teórie. "Lineárny" Starkov jav by bol o posunutí hladín v prvom ráde poruchovej teórie. Tento príklad je o kvadratickom Starkovom jave pre elektrón v

atóme vodíka v základnom stave.

Poznámka 2: Toto je nie ľahký príklad napriek tomu, že je ***z veľkej časti vyriešený v Zelenej učebnici na str.382, resp. v elektronickej verzii na str.261.*** *Postup, ktorým sa dosiahne odpoveď, je založený na použití triku, ktorý vo zvyšku kurzu nebude mať iné ďalšie použitie. Príklad je preto pre ozajstných nadšencov. Trik, ktorým sa nájde riešenie, je však pekný, a určite nezaškodí sa s ním oboznámiť. Vo svojom riešení by ste mali uviesť všetky kroky výpočtu a presvedčiť , že mu rozumiete. Nestačí iba opísať kľúčové časti z učebnice.*

Uvažujme atóm vodíka v základnom stave vo vonkajšom homogénnom elektrickom poli. Už vieme, že do prvého rádu sa základná hladina neposunie. Vypočítajte predpoveď, ako sa posunie táto hladina v druhom ráde poruchovej teórie. **[2 body]**