ΑΣΚΗΣΗ 4

Γενική Θεωρία

Εστω η εξίσωση του Schroedinger

$$\mathrm{H}\Psi = E\Psi \ . \tag{1.1}$$

Υποθέτουμε ότι η (άγνωστη) κυματοσυνάρτηση Ψ μπορεί να γραφεί σαν ανάπτυγμα σε μιά ορθοκανονική βάση συναρτήσεων

$$\Psi = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \Psi_n \ . \tag{1.2}$$

Αντικαθιστώντας στην (1.1) έχουμε

$$\sum_{n=0}^{\infty} c_n \mathrm{H}\Psi_n = E\sum_{n=0}^{\infty} c_n \Psi_n \ . \tag{1.3}$$

Πολλαπλασιάζω απο αριστερά με Ψ_m και ολοκληρώνω οπότε έχουμε

$$\sum_{n=0}^{\infty} c_n \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_m \mathrm{H}\Psi_n \, dx = E\sum_{n=0}^{\infty} c_n \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_m \Psi_n dx = E\sum_{n=0}^{\infty} c_n \delta_{mn} = Ec_m \ . \tag{1.4}$$

Ονομάζω

$$\mathrm{H}_{mn} = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_m \mathrm{H}\Psi_n \, dx$$

οπότε το πρόβλημα ανάγεται στην λύση του γενικά απειροδιάστατου προβλήματος ιδιοτιμών

$$\sum_{n=0}^{\infty} \mathrm{H}_{mn} c_n = Ec_m . \tag{1.5}$$

Στην πράξη βέβαια το σύστημα (1.5) μπορεί να λυθεί μόνο για πεπερασμένης διάστασης πίνακα H_{mn} πράγμα το οποίο σημαίνει ότι η σειρά (1.2) θα πρέπει να περικοπεί σε κάποια τιμή του $n = n_{\max}$. Ετσι, η κυματοσυνάρτηση Ψ μπορεί να υπολογιστεί μόνο κατά προσέγγιση, η ακρίβεια της οποίας θα εξαρτάται από την σωστή επιλογή της ορθοκανονικής βάσης Ψ_n. Η σωστή επιλογή πάλι εξαρτάται από την Φυσική του προβλήματος. Μιά καλή επιλογή ορθοκανονικής βάσης θα έχει σαν αποτέλεσμα την ταχεία σύγκλιση της σειράς (1.2) δεδομένου ότι τότε τα μέτρα των συντελεστών c_n θα τείνουν πολύ γρήγορα στο μηδέν όσο αυξάνεται η τιμή του n. Στήν περίπτωση κατά την οποία η Χαμιλτονιανή μπορεί να γραφεί σαν άθροισμα δύο όρων

$$\mathrm{H} = \mathrm{H}^0 + \mathrm{H}^1$$

όπου γνωρίζουμε την λύση του προβλήματος H^0 π.χ.

$$\mathrm{H}^0 \Phi_n = \mathrm{E}_n \Phi_n$$

μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε σαν ορθοκανονική βάση τις συναρτήσεις Φ_n. Στην περίπτωση αυτή ο τύπος (1.5) απλοποιείται στον

$$\sum_{n=0}^{\infty} \mathrm{H}^1_{mn} c_n = \left(E - E_m\right) c_m \ . \tag{1.6}$$

Σημειώνεται ότι η μέθοδος αυτή δεν έχει σχέση με την θεωρία διαταραχών.

Θα εφαρμόσουμε τα παραπάνω στον ίδιο αναρμονικό ταλαντωτή των ασκήσεων 2 και 3.

Ο Αρμονικός Ταλαντωτής

Η εξίσωση του Schroedinger είναι

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2 u(x)}{dx^2} + \frac{1}{2}\kappa x^2 u(x) = Eu(x)$$

όπου $u(x)$ οι κυματοσυναρτήσεις του αρμονικού ταλαντωτή και E οι ιδιοτιμές της ενέργειας. Για να λύσει κανείς την παραπάνω εξίσωση χρησιμοποιεί αδιάστατες μεταβλητές

$\alpha^4 = \frac{m\kappa}{\hbar^2}$, $\xi = \alpha x$, $\lambda = \frac{2E}{\hbar}\left(\frac{m}{\kappa}\right)^{1/2} = \frac{2E}{\hbar\omega}$, οπότε η Δ.Ε. γράφεται

$$\frac{d^2u}{d\xi^2} - \xi^2 u = -\lambda u \ , \ \lambda > 0.$$

Η παραπάνω Δ.Ε. είναι του τύπου Hermite. Οι λύσεις που έχουν φυσική σημασία (δέσμιες καταστάσεις) μηδενίζονται για $\xi \to \pm\infty$ και είναι

$$u_n(\xi) = N_n H_n(\xi)\exp(-\frac{1}{2}\xi^2) \ , \ \lambda = 2n+1, n = 0,1,2\ldots$$

όπου $H_n(\xi)$ είναι τα πολυώνυμα Hermite και $N_n = \left(\frac{1}{\sqrt{\pi}2^n n!}\right)^{1/2}$ παράγων νορμαλισμού.

Ο Αναρμονικός ταλαντωτής

Στην περίπτωση αυτή η εξίσωση του Schroedinger είναι

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2u(x)}{dx^2} + \frac{1}{2}\kappa x^2 u(x) + \frac{1}{4}\mu x^4 u(x) = Eu(x) \cdot$$

Εδώ διακρίνουμε τις περιπτώσεις $\kappa > 0$ η και $\kappa < 0$. Χρησιμοποιούμε όπως και πρίν τις αδιάστατες μεταβλητές

$$\alpha^4 = \frac{m|\kappa|}{\hbar^2} \ , \ \xi = \alpha x \ , \ \lambda = \frac{2E}{\hbar}\left(\frac{m}{|\kappa|}\right)^{1/2} = \frac{2E}{\hbar\omega} \ , \ \rho = \frac{1}{2}\frac{\mu}{|\kappa|\alpha^2}$$

και η εξίσωση γίνεται

$$\frac{d^2u}{d\xi^2} - \left(\pm\xi^2 + \rho\xi^4\right)u = -\lambda u \ , \ \lambda > 0.$$

Ασκηση: Χρησιμοποιώντας την θεωρία που αναπτύχθηκε παραπάνω και θέτοντας $\rho = 0.1$ υπολογίστε τις τρείς πρώτες ενεργειακές στάθμες και τις αντίστοιχες κυματοσυναρτήσεις του αναρμονικού ταλαντωτή για $\kappa > 0$ και $\kappa < 0$ αντίστοιχα. Σαν ορθοκανονική βάση θα χρησιμοποιήσετε τις ιδιοσυναρτήσεις του αρμονικού ταλαντωτή

$$u_n(\xi) = N_n H_n(\xi)\exp(-\frac{1}{2}\xi^2)$$

καθώς και τους τύπους (1.2) και (1.6). Ο πίνακας

$$\mathrm{H}^1_{mn} = \rho\int_{-\infty}^{\infty} \xi^4 u_m(\xi)u_n(\xi)d\xi$$

μπορεί να βρεθεί και αναλυτικά χρησιμοποιώντας ταυτότητες των πολυωνύμων Hermite αλλά δεν χρειάζεται, χρησιμοποιείστε το **Nintegrate**. Τέλος, εκτιμείστε ποιά απο τις τρείς μεθόδους που αναπτύξαμε στις ασκήσεις 2,3,4 είναι κατά την γνώμη σας η καλύτερη.