

Задачи к семинару «Теория возмущений»

Задачи (100 баллов)

Задача 1. Поляризуемость частицы на кольце (15 баллов)

Частица с массой M и зарядом e движется на кольце радиуса R . К системе прикладывается слабое электрическое поле $\mathcal{E}$ параллельно плоскости кольца. Определите поляризуемости $\alpha_n = -\partial^2 E_n / \partial \mathcal{E}^2$ всех уровней энергии.

Проведите вычисления, используя два различных базиса:

1. Базис состояний с фиксированным угловым моментом m («волны де-Бройля»)
2. Базис из вещественных волновых функций.

Задача 2. Двуслойный графен (15 баллов)

В силу решёточной структуры графена, волновая функция электронов представляет собой двухкомпонентный псевдоспинор $\psi(x) = (\psi_A(x) \ \psi_B(x))^T$, где различные компоненты отвечают различным подрешёткам. Возбуждения вблизи так называемой K -долины зоны Бриллюэна описываются эффективным гамильтонианом размера 2×2 , который записывается следующим образом:

$$\hat{H} = v_F \hat{\sigma} \cdot \hat{p} = v_F (\hat{\sigma}_x \hat{p}_x + \hat{\sigma}_y \hat{p}_y) = v_F \begin{pmatrix} 0 & \hat{p}_x - i\hat{p}_y \\ \hat{p}_x + i\hat{p}_y & 0 \end{pmatrix} \quad (1)$$

Для двуслойного графена, соответственно, волновая функция уже образует четырёхкомпонентный спинор

$$\psi(x) = \begin{pmatrix} \psi_A^{(1)}(x) & \psi_B^{(1)}(x) & \psi_A^{(2)}(x) & \psi_B^{(2)}(x) \end{pmatrix}^T \quad (2)$$

Если бы между не было никакого взаимодействия, то гамильтониан системы имеет просто блочно-диагональный вид $\hat{H} = v_F \begin{pmatrix} \hat{\sigma} \cdot \hat{p} & 0 \\ 0 & \hat{\sigma} \cdot \hat{p} \end{pmatrix}$; однако, если два листа графена положить друг на друга определённым образом, то возникает возможность туннелирования электронов между слоями. Гамильтониан такой системы имеет вид:

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} 0 & v_F(\hat{p}_x - i\hat{p}_y) & 0 & 0 \\ v_F(\hat{p}_x + i\hat{p}_y) & 0 & \Delta & 0 \\ 0 & \Delta & 0 & v_F(\hat{p}_x - i\hat{p}_y) \\ 0 & 0 & v_F(\hat{p}_x + i\hat{p}_y) & 0 \end{pmatrix} \quad (3)$$

При нулевом импульсе p , матрица имеет двукратно вырожденное собственное число 0 и однократно вырожденные числа $\pm\Delta$. Если мы исследуем свойства возбуждений при маленькой энергии $|E| \ll \Delta$ и, соответственно, малом импульсе $p \ll \frac{\Delta}{v_F}$, то высокоэнергетические состояния $\pm\Delta$ несут незначительный вклад. Используя теорию возмущений, выведите эффективный гамильтониан, описывающий низкоэнергетические возбуждения, и определите спектр соответствующих двух зон.

Задача 3. Поляризуемость атома водорода (25 баллов)

Атом водорода находится в основном состоянии, описываемом волновой функцией $\psi_{100}(r) = e^{-r/a} / \sqrt{\pi a^3}$, где $a = \hbar^2 / me^2$ — Боровский радиус. Он помещается в постоянное электрическое поле, описываемое гамильтонианом $\hat{V} = -e\mathcal{E}\hat{z}$; требуется определить сдвиг уровня энергии и поляризуемость основного состояния.

Для расчёта сдвига энергии во втором порядке теории возмущений, вообще говоря, необходимо вычислять все матричные элементы $\langle 1, 0, 0 | \hat{z} | n, l, m \rangle$, а кроме них — ещё и матричные элементы $\langle 1, 0, 0 | \hat{z} | k, l, m \rangle$ (k определяет энергию $\frac{\hbar^2 k^2}{2m} = E$) для состояний непрерывного спектра а затем вычислять соответствующую сумму и интеграл. Это — сложная задача; но, к счастью, тут можно поступить иначе. Для этого первую поправку по теории возмущений к волновой функции предлагается найти *точно*, а не искать её в виде разложения.

1. Напишите *точное* уравнение для поправки первого порядка $\psi^{(1)}(\mathbf{r})$ по теории возмущений. Покажите, что в нём можно разделить переменные, сделав анзац $\psi^{(1)}(r, \theta) = f(r)e^{-r/a} \cos \theta$; напишите уравнение на функцию $f(r)$. *Hint*: обезразмерьте это уравнение!

2. Покажите, что это уравнение имеет простое полиномиальное решение $f(r) = A + Br + Cr^2$; найдите A, B, C .

3. Найдя волновую функцию, вычислите поправку $E_{100}^{(2)}$ и поляризуемость α .

Замечание: альтернативный способ решения задачи об атоме водорода в постоянном электрическом поле — это использование параболических координат. Эти координаты замечательны в частности тем, что в них разделяются переменные и в электрическом поле; а кроме этого, лишь небольшое количество матричных элементов оператора $\hat{z}$ отлично от нуля. Именно благодаря этому обстоятельству поправка первого порядка и имеет такой простой вид.

Задача 4. Суперсимметричная квантовая механика (45 баллов)

Рассмотрите для простоты квантовый гармонический осциллятор для частицы массы $m = 1$ с частотой $\omega = 1$, гамильтониан которого имеет вид $\hat{H} = \frac{1}{2}(\hat{p}^2 + \hat{x}^2 - 1)$, так что основное состояние имеет нулевую энергию $E_0 = 0$. Помимо этого, осциллятор содержит ангармонизм *очень* специального вида $V(x) = gx(1 - x^2) + \frac{1}{2}g^2x^4$; безразмерный параметр $g \ll 1$. Требуется исследовать сдвиг энергии основного состояния с точки зрения теории возмущений.

1. **(10 баллов)** Найдите поправку $O(g^2)$ к энергии основного состояния осциллятора.
2. **(10 баллов)** Полученный ответ должен вас натолкнуть на мысль, что нужно считать старшие порядки ТВ (если нет, то перепроверьте). Удобнее всего это делать в координатном базисе, выписывая явно дифференциальные уравнения на поправки к волновым функциям. Выпишите такое уравнение на поправки $O(g)$ и $O(g^2)$, и решите их явно.
3. **(20 баллов)** Прodelайте это в *произвольном* порядке теории возмущений, выпишите явно поправку произвольного порядка к волновой функции $\psi_0^{(n)}(x)$ и $E_0^{(n)}$. Просуммируйте весь ряд теории возмущений, и убедитесь, что вы, в действительности, нашли *точное решение* соответствующего уравнения Шрёдингера. Расстройтесь, потому что это решение никак не позволяет ответить на вопрос, каков же в действительности сдвиг энергии основного состояния δE_0 .
4. **(5 баллов)** Очевидно, что поправка к энергии основного состояния всё-таки имеется — но она *непертурбативна*, для неё невозможно построить асимптотический ряд по степеням малого параметра g . Не смотря на это, теорией возмущений всё-таки можно пользоваться для приближения основного состояния, просто использовать для этого *полный ряд* теории возмущений незаконно. Используя критерии применимости теории возмущений, определите максимальный порядок n^* , до которого результату ещё можно верить.

Указание: хотя возмущение и содержит линейный член по x , с точки зрения вычислений оказывается удобно не сдвигать центр осциллятора.