NTNU **Institutt for fysikk**

Faglig kontakt under eksamen:
Professor Arne Brataas
Telefon: 73593647

Eksamen i TFY4205 Kvantemekanikk
Mandag 8. august 2005
9:00–13:00

Tillatte hjelpemidler: Alternativ C
Godkjent lommekalkulator.
K. Rottman: *Matematisk formelsamling*
Barnett and Cronin: *Mathematical formulae*

Sensur faller før 22. august 2005.

Dette oppgavesettet er på 9 sider.

Oppgave 1. Harmonisk oscillator
Hamiltonoperatoren $\hat{H}$ for en harmonisk oscillator i én dimensjon er gitt ved:

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 \hat{q}^2 && (1) \\ &= \hbar\omega \left(\hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2} \right) . && (2) \end{aligned}$$

Her er:

$$\begin{aligned} \hat{a} &= \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \hat{q} + i \sqrt{\frac{1}{2m\hbar\omega}} \hat{p} , && (3) \\ \hat{a}^\dagger &= \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \hat{q} - i \sqrt{\frac{1}{2m\hbar\omega}} \hat{p} && (4) \end{aligned}$$

og posisjons-operatoren $\hat{q}$ og impuls-operatoren $\hat{p}$ oppfyller kommutatorrelasjonen:

$$[\hat{p}, \hat{q}] = \frac{\hbar}{i} .$$

Vi kan også uttrykke $\hat{q}$ og $\hat{p}$ ved $\hat{a}$ og $\hat{a}^\dagger$:

$$\hat{q} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \left(\hat{a}^\dagger + \hat{a} \right) , \hat{p} = \sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} \left(\hat{a}^\dagger - \hat{a} \right) . \quad (5)$$

For grunnlag for det følgende oppgis (skal ikke vises)

$$\begin{aligned} \hat{a} |n\rangle &= \sqrt{n} |n-1\rangle , && (6) \\ \hat{a}^\dagger |n\rangle &= \sqrt{n+1} |n+1\rangle , && (7) \end{aligned}$$

der $|n\rangle$ er ortonormale egenvektorer til $\hat{H}$.

a) Vis (på grunnlag av det ovenstående) at:

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1\,.$$

LØSNING

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = \hat{a}\hat{a}^\dagger - \hat{a}^\dagger\hat{a} \tag{8}$$

Vi setter inn og finner

$$\begin{aligned} \hat{a}\hat{a}^\dagger &= \frac{m\omega}{2\hbar}\hat{q}^2 + \frac{1}{2m\hbar\omega}\hat{p}^2 + \frac{i}{2\hbar}\left(\hat{p}\hat{q} - \hat{q}\hat{q}\right)\,, & (9)\\ &= \frac{m\omega}{2\hbar}\hat{q}^2 + \frac{1}{2m\hbar\omega}\hat{p}^2 + \frac{1}{2}\,. & (10) \end{aligned}$$

Tilsvarende får vi

$$\hat{a}^\dagger\hat{a} = \frac{m\omega}{2\hbar}\hat{q}^2 + \frac{1}{2m\hbar\omega}\hat{p}^2 - \frac{1}{2}\,. \tag{11}$$

Dette gir dermed

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = \frac{1}{2} - (-\frac{1}{2}) = 1 \tag{12}$$

q.e.d.

b) Vis at den normerte tilstanden $|\alpha\rangle$ gitt ved

$$|\alpha\rangle = \exp\left(-\frac{1}{2}|\alpha|^2\right)\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}}|n\rangle\,, \tag{13}$$

er egenvektor til annihilasjonsoperatoren $\hat{a}$ med egenverdi α, der α er et vilkårlig kompleks tall.

LØSNING

$$\begin{aligned} \hat{a}|\alpha\rangle &= \hat{a}\exp\left(-\frac{1}{2}|\alpha|^2\right)\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}}|n\rangle\,, & (14)\\ &= \exp\left(-\frac{1}{2}|\alpha|^2\right)\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}}\hat{a}|n\rangle\,, & (15)\\ &= \exp\left(-\frac{1}{2}|\alpha|^2\right)\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}}\sqrt{n}|n-1\rangle\,, & (16)\\ &= \exp\left(-\frac{1}{2}|\alpha|^2\right)\sum_{n=1}^{\infty}\frac{\alpha^n}{\sqrt{(n-1)!}}|n-1\rangle\,, & (17)\\ &= \exp\left(-\frac{1}{2}|\alpha|^2\right)\sum_{m=0}^{\infty}\frac{\alpha^{m+1}}{\sqrt{m!}}|m\rangle\,, & (18)\\ &= \alpha|\alpha\rangle & (19) \end{aligned}$$

q.e.d.

c) Bestem forventningsverdiene for operatoren $\hat{n} = \hat{a}^\dagger \hat{a}$ i tilstandene $|n\rangle$ og $|\alpha\rangle$. Hvorfor kalles $\hat{n}$ antallsoperatoren?

LØSNING

$$\begin{aligned}
\langle n|\hat{n}|n\rangle &= \langle n|\hat{a}^\dagger \hat{a}|n\rangle\,, && (20)\\
&= \langle n-1|\sqrt{n}\cdot\sqrt{n}|n-1\rangle\,, && (21)\\
&= n\,. && (22)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\langle\alpha|\hat{a}^\dagger \hat{a}|\alpha\rangle &= \langle\alpha|\alpha^*\alpha|\alpha\rangle\,, && (23)\\
&= |\alpha|^2\,. && (24)
\end{aligned}$$

$\hat{n}$ kalles antallsoperatoren fordi den gir ut hvor mange kvant som eksisterer i energitilstanden.

d) Vis at vi har følgende forventningsverdier for $\hat{q}$ i tilstandene $|n\rangle$ og $\alpha\rangle$:

$$\begin{aligned}
\langle n|\hat{q}|n\rangle &= 0\,, && (25)\\
\langle\alpha|\hat{q}|\alpha\rangle &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\,(\alpha+\alpha^*)\;. && (26)
\end{aligned}$$

LØSNING

$$\begin{aligned}
\langle n|\hat{q}|n\rangle &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\langle n|\hat{a}^\dagger+\hat{a}|n\rangle\,, && (27)\\
&= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left(\langle n|\hat{a}^\dagger|n\rangle+\langle n|\hat{a}|n\rangle\right)\,, && (28)\\
&= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left(\sqrt{n+1}\langle n|n+1\rangle+\sqrt{n}\langle n|n-1\rangle\right)\,, && (29)\\
&= 0 && (30)
\end{aligned}$$

q.e.d.

$$\begin{aligned}
\langle\alpha|\hat{q}|\alpha\rangle &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\langle\alpha|\hat{a}^\dagger+\hat{a}|\alpha\rangle\,, && (31)\\
&= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left(\langle\alpha|\hat{a}^\dagger|\alpha\rangle+\langle\alpha|\hat{a}|\alpha\rangle\right)\,, && (32)\\
&= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\,(\alpha^*+\alpha) && (33)
\end{aligned}$$

q.e.d.

e) Vis at:

$$\Delta p\cdot\Delta q = \hbar/2 \tag{34}$$

for tilstanden $|\alpha\rangle$. Beregn også $\Delta p\cdot\Delta q$ for tilstanden $|n\rangle$.

LØSNING

Vi betrakter først tilstanden $|\alpha\rangle$:

$$\begin{aligned}
\langle\alpha|\hat{q}^2|\alpha\rangle &= \frac{\hbar}{2m\omega}\langle\alpha|\hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger + \hat{a}\hat{a} + \hat{a}^\dagger\hat{a} + \hat{a}\hat{a}^\dagger|\alpha\rangle\,, && (35)\\
&= \frac{\hbar}{2m\omega}\langle\hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger + \hat{a}\hat{a} + 2\hat{a}^\dagger\hat{a} + 1|\alpha\rangle\,, && (36)\\
&= \frac{\hbar}{2m\omega}\left((\alpha^*)^2 + \alpha^2 + 2\alpha^*\alpha + 1\right)\,, && (37)\\
&= \frac{\hbar}{2m\omega}\left((\alpha^* + \alpha)^2 + 1\right)\,. && (38)
\end{aligned}$$

Uskarpheten i posisjonen blir dermed

$$\begin{aligned}
(\Delta q)^2 &= \langle(\hat{q} - \langle\hat{q}\rangle)^2\rangle\,, && (39)\\
&= \langle\hat{q}^2\rangle - \langle\hat{q}\rangle^2\,, && (40)\\
&= \frac{\hbar}{2m\omega}\left((\alpha^* + \alpha)^2 + 1\right) - \frac{\hbar}{2m\omega}(\alpha^* + \alpha)^2\,, && (41)\\
&= \frac{\hbar}{2m\omega}\,. && (42)
\end{aligned}$$

Tilsvarende får vi for impuls-operatoren

$$\begin{aligned}
\langle\alpha|\hat{p}|\alpha\rangle &= i\sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}}\langle\alpha|\hat{a}^\dagger - \hat{a}|\alpha\rangle\,, && (43)\\
&= i\sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}}\,(\alpha^* - \alpha) && (44)
\end{aligned}$$

og

$$\begin{aligned}
\langle\alpha|\hat{p}^2|\alpha\rangle &= -\frac{2m\omega}{\hbar}\langle\alpha|\hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger + \hat{a}\hat{a} - \hat{a}^\dagger\hat{a} - \hat{a}\hat{a}^\dagger|\alpha\rangle\,, && (45)\\
&= -\frac{m\hbar\omega}{2}\left((\alpha^* - \alpha)^2 - 1\right)\,. && (46)
\end{aligned}$$

Dette gir

$$\begin{aligned}
(\Delta p)^2 &= \langle\hat{p}^2\rangle - \langle\hat{p}\rangle^2\,, && (47)\\
&= -\frac{m\hbar\omega}{2}\left((\alpha^* - \alpha)^2 - 1\right) + \frac{m\hbar\omega}{2}(\alpha^* - \alpha)^2\,, && (48)\\
&= \frac{m\hbar\omega}{2}\,. && (49)
\end{aligned}$$

Dermed blir uskarphetsrelasjonen:

$$\Delta q \cdot \Delta p = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \cdot \sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} = \frac{\hbar}{2} \qquad (50)$$

q.e.d. Vi betrakter så tilstanden $|n\rangle$. For usikkerheten i posisjon har vi

$$\begin{aligned}
\langle n|\hat{q}^2|n\rangle &= \frac{\hbar}{2m\omega}\langle n|\hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger + \hat{a}\hat{a} + \hat{a}^\dagger\hat{a} + \hat{a}\hat{a}^\dagger|n\rangle\,, && (51)\\
&= \frac{\hbar}{2m\omega}\left(\sqrt{n+1}\cdot\sqrt{n+1} + \sqrt{n}\sqrt{n}\right)\,, && (52)\\
&= \frac{\hbar}{2m\omega}(2n+1)\,, && (53)\\
&= (\Delta q)^2\,. && (54)
\end{aligned}$$

Tilsvarende finner vi $\langle n|\hat{p}|n\rangle = 0$ og

$$\begin{aligned}
\langle n|\hat{p}^2|n\rangle &= -\frac{m\hbar\omega}{2}\langle n| - \hat{a}\hat{a}^\dagger - \hat{a}^\dagger\hat{a}|\rangle\,, && (55)\\
&= \frac{m\hbar\omega}{2}(2n+1)\,, && (56)\\
&= (\Delta p)^2\,. && (57)
\end{aligned}$$

Dette gir

$$\begin{aligned}
\Delta p\cdot\Delta q &= \sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}\cdot\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\,, && (58)\\
&= \frac{\hbar}{2}(2n+1)\,. && (59)
\end{aligned}$$

f) Ovenfor har vi betraktet de tidsuavhengige tilstandene $|n\rangle$ og $|\alpha\rangle$. De tilsvarende tidsavhengige tilstandene (som er løsninger av den tidsavhengige Schrödingerligningen) er gitt ved:

$$|n,t\rangle = \exp\left(-i(n+\frac{1}{2})\omega t\right)|n\rangle \qquad (60)$$

og

$$|\alpha,t\rangle = \exp\left(-\frac{1}{2}|\alpha|^2\right)\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}}|n,t\rangle\,. \qquad (61)$$

Det kan vises (skal *ikke* gjøres her) at $\langle\hat{n}\rangle$, Δp og Δq har samme verdier for $|n,t\rangle$ og $|\alpha,t\rangle$ som for henholdsvis $|n\rangle$ og $|\alpha\rangle$. Når $\hat{n}\to\infty$, vil da $|\alpha,t\rangle$ (for α reell) og/eller $|n,t\rangle$ inneholde beskrivelser som på noen vi nærmer seg den klassiske fysikks beskrivelse av en harmonisk oscillator? Begrunn svaret både for $|\alpha,t\rangle$ og $|n,t\rangle$.

Oppgitt:

For α reell gjelder:

$$|\langle q|\alpha,t\rangle|^2 = \sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}}\exp\left(-(x-\sqrt{2}\alpha\cos\omega t)^2\right)\,, \qquad (62)$$

der

$$x = q\sqrt{m\omega}\hbar\,. \qquad (63)$$

LØSNING

Vi betrakter først $|\alpha,t\rangle$:

Vi setter $\beta \equiv \alpha \exp(-i\omega t)$ og får da:

$$\begin{aligned}
|\alpha, t\rangle &= \exp(-\frac{1}{2}|\alpha|^2) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle \exp -(i(n+\frac{1}{2})\omega t)\,, && (64)\\
&= \exp(-\frac{1}{2}|\alpha|^2) \exp(-i\frac{\omega}{2}t) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\alpha \exp(-i\omega t))^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle\,, && (65)\\
&= \exp(-\frac{1}{2}|\beta|^2) \exp(-i\frac{\omega}{2}t) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\beta^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle\,, && (66)\\
&= \exp(-i\frac{\omega}{2}t)|\beta\rangle\,, && (67)
\end{aligned}$$

der $|\beta\rangle$ altså er gitt ved

$$|\beta\rangle = \exp(-\frac{1}{2}|\beta|^2) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\beta^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle\,. \tag{68}$$

Siden $|\beta\rangle$ er normert er altså også $|\alpha, t\rangle$ normert. Vi må også ha:

$$\langle \alpha, t| = \exp(i\frac{\omega}{2}t)\langle \beta|\,. \tag{69}$$

Dermed har vi

$$\begin{aligned}
\langle \alpha, t|\hat{q}|\alpha, t\rangle &= \langle \beta|\hat{q}|\beta\rangle\,, && (70)\\
&= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\beta + \beta^*)\,, && (71)\\
&= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\alpha \exp(-i\omega t) + \alpha^* \exp(i\omega t))\,, && (72)\\
&= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (|\alpha| \exp(-i(\omega t + \phi)) + |\alpha| \exp(i(\omega t + \phi)))\,, && (73)\\
&= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} 2|\alpha| \cos(\omega t + \phi)\,, && (74)\\
& && (75)
\end{aligned}$$

der vi har satt $\alpha \equiv |\alpha| \exp(-i\phi)$. I tilstanden $|\alpha, t\rangle$ svinger altså middelverdien til posisjonen harmonisk. Dersom α er reell er $\phi = 0$.

Dette resultatet kan også sees direkte fra den oppgitte sannsynlighetsfordeling i posisjonsrommet, $|\langle q|\alpha, t\rangle|^2$.

Den relative uskarpheten i posisjonen er gitt ved

$$\frac{\Delta q}{\langle \hat{q}\rangle} = \frac{1}{2|\alpha| \cos(\omega t + \phi)} \tag{76}$$

som går mot 0 (for alle t for $\cos(\omega t + \phi) \neq 0$) når $\langle \hat{n}\rangle = |\alpha|^2$ går mot ∞.

Altså svinger middelposisjonen som $\cos(\omega t + \phi)$, og den relative usikkerheten går mot 0 når $\langle \hat{n}\rangle$ går mot ∞. Det betyr at for $\langle \hat{n}\rangle \to \infty$ har vi en beskrivelse som går mot klassisk fysikks beskrivelse:

$$q = q_0 \cos(\omega t + \phi)\,. \tag{77}$$

(α reell tilsvarer $\phi = 0$.)

Vi merker oss også at $\Delta q \cdot \Delta p = \hbar/2$, dvs. at $\Delta q \cdot \Delta p$ har den minste verdi som er mulig ifølge usikkerhetsrelasjonen.

Vi betrakter så $|n, t\rangle$:

Vi får ved hjelp av oppgave d) og opplysningene i denne oppgaven:

$$\langle n, t|\hat{q}|n, t\rangle = \exp\left(i(n + \frac{1}{2})\omega t\right) \exp\left(-i(n + \frac{1}{2})\omega t\right)\langle n|\hat{q}|n\rangle = 0\,. \tag{78}$$

Middelposisjonen er altså 0, uavhengig av t og $\langle \hat{n}\rangle$, som vi skulle forvente siden $|n, t\rangle$ er en stasjonær tilstand. $|n, t\rangle$ kan altså ikke beskrive noe som svinger med tiden som en klassisk harmonisk oscillator gjør.

Vi merker oss også ved hjelp av resultatene for pkt. e) at både Δq og Δp går mot ∞ når $\langle n\rangle$ går mot ∞. Dette er som vi skulle vente siden $\langle \hat{q}\rangle = 0 = \langle \hat{p}\rangle$ og energien går mot ∞ når $\langle \hat{n}\rangle$ går mot ∞.

Oppgave 2. Tidsuavhengig perturbasjonsteori

Første ordens energikorreksjon er i Rayleigh-Schrödingers perturbasjonsteori gitt ved:

$$\lambda E_n^{(1)} = \langle n|\lambda \hat{V}|n\rangle\,, \tag{79}$$

der $|n\rangle$ er egentilstand til den uperturberte Hamiltonoperatoren $\hat{H}^{(0)}$. $\lambda\hat{V}$ er perturbasjonen og altså lik $\hat{H} - \hat{H}^{(0)}$ der H er den aktuelle Hamiltonoperatoren.
I denne oppgaven kan du også få bruk for følgende:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dq|q\rangle\langle q| = 1\,. \tag{80}$$

$$\langle q_2|F(\hat{p}, \hat{q})|q_1\rangle = F\left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial q_2}\right)\delta(q_2 - q_1)\,. \tag{81}$$

Bølgefunksjonen for éndimensjonal harmonisk oscillator i grunntilstanden:

$$\psi_0(q) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \exp\left(-m\omega q^2/(2\hbar)\right). \tag{82}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx x^{2n} \exp\left(-x^2\right) = \sqrt{\pi}\frac{1 \cdot 3 \cdot 5 \cdots (2n-1)}{2^n}\,, \tag{83}$$

der $n = 1, 2, 3, \ldots$.

a) $\lambda\hat{V}$ er ovenfor uttrykt ved den generelle formalismen. Anta at vi betrakter et éndimensjonalt problem og at $\hat{V}$ bare er avhengig av konstanter og posisjonsoperatoren $\hat{q}$. Omform uttrykket for $\lambda E_n^{(1)}$ til bølgemekanikk-formalismen (i posisjonsrommet) bl.a. ved bruk av fullstendighetsrelasjonen, dvs. vis at:

$$\lambda E_n^{(1)} = \int dq \psi_n^*(q)\lambda V(q)\psi_n(q)\,, \tag{84}$$

der ψ_n er egenfunksjon til $\hat{H}$. Benytt som kjent at $\psi_n(q) = \langle q|n\rangle$.

LØSNING

$$\begin{aligned}
\lambda E_n^{(1)} &= \langle n|\lambda\hat{V}|n\rangle\,, &(85)\\
&= \int dq_1 \int dq_2 \langle n|q_1\rangle\langle q_1|\lambda\hat{V}|q_2\rangle\langle q_2|n\rangle\,, &(86)\\
&= \int dq_1 \int dq_2 \psi_n^*(q_1)\lambda V(q_1)\delta(q_1-q_2)\psi_n(q_2)\,, &(87)\\
&= \int dq_1 \psi_n^*(q_1)\lambda V(q_1)\psi_n(q_1)\,. &(88)
\end{aligned}$$

b) Beregn grunntilstandsenergien $E_0 \approx E_0^{(0)}+\lambda E_1^{(1)} = \frac{1}{2}\hbar\omega+\lambda E_0^{(1)}$ ved Rayleigh-Schrödinger perturbasjonsteori (se pkt. a) for:

$$\hat{H}^{(0)} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{q}^2 \tag{89}$$

og

$$\lambda\hat{V} = \hat{H} - \hat{H}^{(0)} = \lambda\hat{q}^6\,, \tag{90}$$

der λ er en liten reell og positiv konstant.

LØSNING

$$\begin{aligned}
\lambda E_0^{(1)} &= \int dq (\frac{m\omega}{\pi\hbar})^{1/2} \exp(-\frac{m\omega q^2}{\hbar})\lambda q^6\,, &(91)\\
&= \frac{\lambda}{\sqrt{\pi}}(\frac{m\omega}{\hbar})^{1/2}(\frac{\hbar}{m\omega})^{7/2}\int_{-\infty}^{\infty} x^6 \exp(-x^2)\,, &(92)\\
&= \lambda(\frac{\hbar}{m\omega})^3\frac{15}{8}\,. &(93)
\end{aligned}$$

Dermed er

$$E_0 \approx \frac{1}{2}\hbar\omega + \lambda(\frac{\hbar}{m\omega})^3\frac{15}{8}\,. \tag{94}$$

c) Vis at for enhver kvadratisk integrerbar funksjon f gjelder følgende:

$$\frac{\int d\tau f^*\hat{H}f}{\int d\tau f^* f} \geq E_0\,, \tag{95}$$

der E_0 er den laveste egenverdien til Hamiltonoperatoren $\hat{H}$.

Vi tenker oss at vi ville benytte denne ulikheten (dvs. benytte Rayleigh-Ritz varisjonsmetode) til å beregne en øvre skranke $E_{\rm RR}$ for E_0 for Hamiltonoperatoren $\hat{H}$ gitt under pkt. b). Vi tenker oss videre at vi benytter prøvefunksjonen:

$$f = \exp(-aq^2)\,, \tag{96}$$

der a er en varierbar parameter. Hvilket resultat, det for E_0 i pkt. b) eller det vi her ville få for $E_{\rm RR}$, vil ligge nærmest den korrekte grunntilstandsenergien for $\hat{H}$? Begrunn svaret!

(Merk at det ikke er nødvendig med meget regnearbeid for å kunne svare på dette.)

LØSNING

Vi kaller egenfunksjonene til $\hat{H}$ for ψ_n og utvikler f i disse, dvs.

$$f = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \psi_n \,. \tag{97}$$

Egenverdiene til $\hat{H}$ kaller vi E_n. Vi antar at ψ_n er ortonormerte. Vi får da:

$$\begin{aligned}
\int f^* \hat{H} f d\tau &= \int \sum_m c_m^* \psi_m^* \hat{H} \sum_n c_n \psi_n d\tau \,, & (98)\\
&= \sum_n \sum_m c_m^* c_n E_n \int \psi_m^* \psi_n d\tau \,, & (99)\\
&= \sum_n |c_n|^2 E_n \geq E_0 \sum_n |c_n|^2 \,. & (100)
\end{aligned}$$

Tilsvarende fåes:

$$\int f^* f d\tau = \sum_n |c_n|^2 \tag{101}$$

og dermed har vi

$$\frac{\int f^* \hat{H} f d\tau}{\int f^* f d\tau} = \frac{\sum_n |c_n|^2 E_n}{\sum_n |c_n|^2} \geq E_0 \tag{102}$$

q.e.d.

Dersom a velges like $m\omega/2\hbar$ vil $f \propto \psi_0$ og $E_{\rm RR} = E_0$ fra pkt. b). (fordi $\int d\tau \psi_0 \hat{H}^{(0)} \psi_0 = \hbar\omega/2$). Dersom vi varierer a slik at $E_{\rm RR}$ får minimum (som skal gjøres etter Rayleigh-Ritz-metoden) vil vi få $E_{\rm RR}$ mindre enn E_0 fra pkt. b) for $\lambda \neq 0$.