Cvičení 18. 4. 2023

Téma: Oscilátor

Kvantový oscilátor je systém s Hamiltoniánem

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2 \,.$$

∞ Gausovky

Řešení harmonického oscilátoru obsahují gausovské funkce, e^{-Ax^2}. Funkce jsou tyto:

$$\begin{aligned} f_0(x) &= \frac{1}{\sqrt{\alpha\sqrt{\pi}}}e^{-\frac{x^2}{2\alpha^2}} \\ f_1(x) &= \sqrt{\frac{2}{\alpha\sqrt{\pi}}}\frac{x}{\alpha}e^{-\frac{x^2}{2\alpha^2}} \\ f_2(x) &= \frac{1}{\sqrt{2\alpha\sqrt{\pi}}}\left(2\frac{x^2}{\alpha^2} - 1\right)e^{-\frac{x^2}{2\alpha^2}} \end{aligned}$$

Pro některé z dalších výpočtů je vhodné využít následujících vzorečků:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-Bx^2}dx &= \sqrt{\tfrac{\pi}{B}} & \qquad \int_{-\infty}^{\infty} x^2e^{-Bx^2}dx &= \frac{1}{2B}\sqrt{\frac{\pi}{B}} \\ \int_{-\infty}^{\infty} x^4e^{-Bx^2}dx &= \tfrac{3}{4B^2}\sqrt{\tfrac{\pi}{B}} & \qquad \int_{-\infty}^{\infty} x^6e^{-Bx^2}dx &= \frac{15}{8B^3}\sqrt{\frac{\pi}{B}} \end{aligned}$$

$$a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle \quad a^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle \,.$$

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}}\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\left(x + \frac{i}{m\omega}p\right) \qquad a^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\left(x - \frac{i}{m\omega}p\right) \qquad [a, a^\dagger] = 1 \,.$$

$$x = \frac{\alpha}{\sqrt{2}}(a + a^\dagger) \qquad p = \frac{i\hbar}{\alpha\sqrt{2}}(a^\dagger - a)$$

Příklad 1 Oscilátor v elektrickém poli

Uvažujme, že částice pohybující se v poli kvantového oscilátoru nese náboj a na oscilátor působí elektrické pole o konstantní intenzitě E. Výsledkem je dodatečný potenciál $-|e|\hat{x}E$.

1.1 Vypočtěte změnu energetických hladin po přidání potenciálu pomocí převedení potenciálu v Hamiltoniánu na úplný čtverec. Diskutujte roli různých parametrů ve výsledku.

1.2 Vypočtěte změnu energie základního stavu pomocí maticové reprezentace diagonalizací části nového Hamiltoniánu.

1.3 Vypočtěte změnu energie základního stavu pomocí optimalizace parametru x_0 vlnové funkce

$$f_0(x, x_0) = \frac{1}{\sqrt{\alpha\sqrt{\pi}}}e^{-\frac{(x-x_0)^2}{2\alpha^2}} \,.$$

R1.4 Vypočtěte změnu energie základního stavu pomocí optimalizace (reálného) parametru C vlnové funkce

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{1+C^2}} \frac{1}{\sqrt{\alpha\sqrt{\pi}}} \left(1 + \sqrt{2}C\frac{x}{\alpha}\right) e^{-\frac{x^2}{2\alpha^2}} .$$

Příklad 2 Van der Waalsovy interakce

Na delší vzdálenosti mezi neutrálními atomy působí přitažlivé síly, jejichž nejvyšší řád klesá s šestou mocninou vzdálenosti. Jedná se o tzv. van der Waalsovy interakce, které potkáváme v teorii plynů. Nicméně tyto vazby jsou důležité vpodstatě ve všech materiálech. Jsou způsbené elektronovými korelacemi, tedy tím, že elektrony se navzájem odpuzují a "reagují na pohyb ostatních" elektronů. Vzhledem k tomu, že elektronů je v atomech a molekulách hodně a každý interaguje s každým, a navíc jejich celková vlnová funkce musí být antisymetrická vůči záměně, je nesmírně obtížné popsat přesně elektronové korelace a vypočítat energie takových systémů velmi přesně. Nicméně přibližný výpočet van der Waalsovy interakce je možné provést pomocí systému dvou oscilátorů, modelujících dva atomy. Je to tzv. Drudeho model: záporně nabitá částice pohybující se v potenciálu jádra se stejným, ale kladným nábojem.

Uvažujme dva harmonické oscilátory ve vzdálenosti R podél osy x, částice budeme považovat za rozlišitelné. Potenciál obou oscilátorů je stejný s úhlovou frekvencí ω. Polohu první částice bude popisovat souřadnice x_1, polohu druhé souřadnice x_2. Celková vlnová funkce je tedy funkce dvou souřadnic, pro popis stavů a aplikaci operátorů musíme pracovat s direktním součinem těchto dvou prostorů. Stav celkového systému je potom dán $|\Psi\rangle = |\psi\rangle_1 \otimes |\psi\rangle_2$. Pro jednoduchost budeme používat značení $|n_1 n_2\rangle = |n_1\rangle|n_2\rangle$, tedy $|00\rangle$ označuje stav, kdy oba oscilátory jsou v základním stavu, ve stavu $|10\rangle$ je první v excitovaném stavu atp.

2.1 Jaká je energie stavu $|n_1 n_2\rangle$? Jaké jsou energie stavů $|00\rangle$, $|10\rangle$, $|01\rangle$ a $|11\rangle$?

2.2 Napište operátor energie celkového systému a ověřte předchozí bod. Operátory působící jen na první stav píšeme $O \otimes 1$, jen na druhý $1 \otimes O$. Snižovací a zvyšovací operátory prvního oscilátoru budeme značit a, $a^\dagger$, pro druhého použijeme b, $b^\dagger$.

Nyní přejdeme k modelu Drudeho atomů. Dostaneme tak kladné náboje v bodech 0 a R a záporně nabité částice oscilátoru. V případě 3D oscilátorů je interakce dána

$$V = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\left(\frac{1}{|\vec{R}|} + \frac{1}{|\vec{R} - \vec{r}_1 + \vec{r}_2|} - \frac{1}{|\vec{R} - \vec{r}_1|} - \frac{1}{|\vec{R} + \vec{r}_2|}\right) .$$

Členy postupně vyjadřují interakci mezi centry, částicemi, interakci první částice s druhým centrem a interakci prvního centra s druhou částicí. Budeme uvažovat, že vzdálenost mezi centry je mnohem větší než rozměry oscilátorů: $|\vec{r}_1| \ll |\vec{R}|$ a $|\vec{r}_2| \ll |\vec{R}|$. Jednotlivé členy je pak možné rozvinout, mnoho se poodečítá a zbyde

$$V = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\left(\frac{\vec{r}_1 \cdot \vec{r}_2}{|\vec{R}|^3} - 3\frac{(\vec{r}_1 \cdot \vec{R})(\vec{r}_2 \cdot \vec{R})}{|\vec{R}|^5}\right) .$$

Pro 1D systém máme $\vec{r}_1 = x_1$, $\vec{r}_2 = x_2$ a $|R| = R$ a dostaneme

$$V = -2\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\frac{x_1 x_2}{R^3}$$

2.3 Přepište operátor V pomocí anihilačních a kreačních operátorů.

2.4 Jaké stavy budou mít nenulové maticové elementy operátoru V se základním stavem $|00\rangle$? Řešte inverzně: Zapůsobte operátorem V na základní stav.

2.5 Napište částečnou matici Hamiltoniánu v bázi základního stavu a stavu/ů dávajících nenulové maticové elementy. Pro zjednodušení označme $K = \frac{e^2\alpha^2}{4\pi\epsilon_0 R^3}$

2.6 Najděte nové energie. (Stavy není třeba hledat.) Jak závisí korekce na vzdálenosti? Jak závisí korekce na frekvenci oscilátoru (je třeba dosadit za α)?