

Cvičení 3

Posunovací operátory, harmonický oscilátor

Domácí úkol – Kvartický oscilátor (*termín odevzdání: 1.11.2017*)

1. V jednorozměrném harmonickém oscilátoru popsaném Hamiltoniánem

$$\hat{H}_0 = \frac{1}{2M}\hat{p}^2 + \frac{1}{2}M\Omega^2\hat{x}^2 \quad (1)$$

spočítejte maticové elementy

$$\langle m|\hat{x}^2|n\rangle, \quad (2)$$

$$\langle m|\hat{x}^4|n\rangle, \quad (3)$$

kde $|m\rangle$ a $|n\rangle$ jsou dva libovolné vlastní vektory Hamiltoniánu \hat{H}_0 .

2. Uvažujte Hamiltonián

$$\hat{H} = \frac{1}{2M}\hat{p}^2 + \frac{1}{2}M\Omega^2\hat{x}^2 + \frac{1}{2}b\hat{x}^4 = \hat{H}_0 + \frac{1}{2}b\hat{x}^4, \quad (4)$$

kde b je reálný kladný parametr.

- Napočítejte maticové elementy $\mathcal{H}_{mn} = \langle m|\hat{H}|n\rangle$ pro $M = \Omega = \hbar = b = 1$.
- Určete numericky diagonalizací matice \mathcal{H} (pomocí programů Mathematica, Maple, Matlab, GNU Octave, Python, knihoven LAPACK, atd.) základní stav E_0 a první tři vzbuzené hladiny $E_{1,2,3}$ Hamiltoniánu \hat{H} . Uvažujte pouze konečný počet elementů báze, tj. $m, n = 0, 1, \dots, N$.
- Zakreslete závislost $E_j(N)$, $j = 0, 1, 2, 3$ pro $N < 30$.
- Odhadněte, zda stačí velikost matice $N = 30$, pokud hledáme tyto čtyři nejnižší energie s přesností na pět platných cifer.

3. Uvažujte Hamiltonián

$$\hat{H}' = \frac{1}{2M}\hat{p}^2 - \frac{1}{2}a\hat{x}^2 + \frac{1}{2}b\hat{x}^4, \quad (5)$$

kde $a > 0$, $b > 0$.

- Zakreslete klasický potenciál.
- Vypočítejte numericky první čtyři energetické hladiny pro $\hbar = 0.03$, $M = a = b = 1$. Volte matice rozměru alespoň $N = 30$.
- Zamyslete se a diskutujte, jaký vliv má volba \hbar na výsledné spektrum.
- Proč jsou hladiny (E_0, E_1) a (E_2, E_3) v téměř degenerovaných dubletech?

Poznámka: Dvoujámový systém popsaný Hamiltoniánem \hat{H}' se požívá například k modelování amoniakového maseru, k modelování systémů ochlazených iontů používaných v teorii kvantové informace, při studiu kvantových fázových přechodů nebo v kvantové chemii.