

1 Kvartický oscilátor

1. V jednorozměrném harmonickém oscilátoru popsaném Hamiltoniánem

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

vyjádřete maticové elementy

$$\begin{aligned} \langle m|\hat{x}^2|n\rangle, \\ \langle m|\hat{x}^4|n\rangle, \end{aligned}$$

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

2. Uvažujte Hamiltonián

$$\hat{H} = \frac{1}{2M}\hat{p}^2 + \frac{1}{2}M\Omega^2\hat{x}^2 + \frac{1}{8}b\hat{x}^4 = \hat{H}_0 + \frac{1}{8}b\hat{x}^4,$$

kde b je reálný kladný parametr.

- Napočítejte maticové elementy $H_{mn} = \langle m|\hat{H}|n\rangle$ pro $M = \Omega = \hbar = 1$, $b = 10$ a numerickou diagonalizací matice $H = (H_{mn})$ (například pomocí programů Mathematica, Maple, Matlab, GNU Octave, Python, Julia, knihoven LAPACK, atd.) učete energie základního stavu E_0 a prvních tří vzbuzených stavů $E_{1,2,3}$ Hamiltoniánu $\hat{H}$. Uvažujte pouze konečný počet N elementů báze, tj. $m, n = 0, 1, \dots, N-1$.
- Zakreslete graf závislosti $E_j(N)$, $j = 0, 1, 2, 3$ pro $N \leq 50$.
- Na základě výsledků z předchozího bodu odhadněte, jaká musí být nejmenší velikost matice N , aby čtyři nejnižší energie byly určeny s přesností na pět platných cifer.

3. Uvažujte nyní Hamiltonián

$$\hat{H}' = \frac{1}{2M}\hat{p}^2 - \frac{1}{2}a\hat{x}^2 + \frac{1}{8}b\hat{x}^4,$$

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

- Načtněte klasický potenciál

$$V(x) = -\frac{1}{2}ax^2 + \frac{1}{8}bx^4$$

pro $a = b = 1$ a nalezněte jeho stacionární body.

- Vypočítejte numericky první čtyři energetické hladiny pro $\hbar = 0.2$, $M = a = b = 1$. Velikost matice ať je taková, aby tyto hladiny byly určeny s přesností alespoň na pět platných cifer.
- Vysvětlete, proč jsou dvojice hladin (E_0, E_1) a (E_2, E_3) v téměř degenerovaných dubletech?
- Opakujte výpočet pro jiné hodnoty $\hbar$, například $\hbar = 0.1$ a $\hbar = 0.5$, a diskutujte, jaký vliv má volba $\hbar$ na výsledné spektrum. Nezapomeňte pokaždé zkontrolovat konvergenci energetických hladin (obecně pro menší hodnoty $\hbar$ je potřeba více bazových stavů).

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