# Cvičení 28. 4. 2021

Téma: LHO zase jinak

**Časový vývoj střední hodnoty**

Pro časový vývoj střední hodnoty operátoru $A$ lze odvodit rovnici

$$\frac{\mathrm{d}\langle A\rangle}{\mathrm{d}t} = \frac{i}{\hbar}\langle[H,A]\rangle + \left\langle \frac{\partial A}{\partial t}\right\rangle . \tag{1}$$

Ověříme si jej explicitně pro částici pohybující se v poli LHO, která je ve stavu $|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}(|0\rangle + |1\rangle + |3\rangle)$ a operátor hybnosti $p$.

▷ Vypočtěte komutátor $[H,p]$. (VIII-3)

▷ Pomocí anihilačních a kreačních operátorů vypočtěte levou a pravou stranu rovnice. (VIII-3, VIII-4)

**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 $\omega$. Popis první částice bude popisovat souřadnice $x_1$, popis 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.

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

▷ 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 (jsou to vektory)

$$V = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\left(\frac{1}{|R|} + \frac{1}{|R - r_1 + r_2|} - \frac{1}{|R - r_1|} - \frac{1}{|R + r_2|}\right) .$$

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: $|r_1| \ll |R|$ a $|r_2| \ll |R|$. Jednotlivé členy je pak možné rozvinout, mnoho se poodečítá a zbyde

$$V = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\left(\frac{r_1 \cdot r_2}{|R|^3} - 3\frac{(r_1 \cdot R)(r_2 \cdot R)}{|R|^5}\right) .$$

Pro 1D systém máme $r_1 = x_1$, $r_2 = x_2$ a $|R| = R$ a dostaneme

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

▷ Přepište operátor $V$ pomocí anihilačních a kreačních operátorů.

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

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

▷ Najděte nové energie. (Stavy není třeba hledat.) Jak závisí korekce na vzdálenosti? Jak závisí korekce na frekvenci oscilátoru (je třeba dosadit za $\alpha$)?

(IX-1, IX-2)

**Časový vývoj funkce**

Částice je ve stavu daném vlnovou funkcí

$$\psi = \frac{2}{\sqrt{3\alpha\sqrt{\pi}}}\frac{x^2}{\alpha^2}e^{-\frac{x^2}{2\alpha^2}}$$

a pohybuje se v potenciálu lineárního harmonického oscilátoru $V = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$.

▷ Napište časovou závislost vlnové funkce.

**Vzorečky**

$$\begin{aligned}
a &= \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(x + \frac{i}{m\omega}p\right) = \frac{1}{\sqrt{2}\alpha}(x + \alpha^2\frac{d}{dx}) \\
a|n\rangle &= \sqrt{n}|n-1\rangle \\
a^+ &= \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(x - \frac{i}{m\omega}p\right) = \frac{1}{\sqrt{2}\alpha}(x - \alpha^2\frac{d}{dx}) \\
a^+|n\rangle &= \sqrt{n+1}|n+1\rangle \\
x &= \frac{\alpha}{\sqrt{2}}(a + a^\dagger) \\
p &= \frac{\sqrt{\hbar m\omega}}{i\sqrt{2}}(a - a^\dagger) \\
[x,p] &= i\hbar
\end{aligned}$$