7. Molekuelschwingungen

Wir approximieren das Lennard Jones Potential als harmonischen Oszillator, um die Gleichgewichtslage R_0

$$V(R + R_0) \approx -V_0 + \frac{36V_0}{R_0^2}(R - R_0)^2 + O\left((R - R_0)^3\right)$$

Gehen wir ins Schwerpunktkoordinatensystem und setzen $x = R - R_0$, wird der Hamiltonoperator zu:

$$H = \frac{p^2}{2\mu} + \frac{36V_0}{R_0^2}x^2 - V_0$$

Das kann nun mit $\omega = \sqrt{\frac{72V_0}{\mu R_0^2}}$ als verschobener harmonischer Oszillator interpretiert werden.

$$\left(\frac{p^2}{2\mu} + \frac{\mu\omega^2}{2}x^2\right)\psi(x,t) = (E + V_0)\,\psi(x,t)$$

Damit folgen die gesuchten Energien

$$\begin{aligned} E_0 &= \frac{\hbar\omega}{2} - V_0 \\ E_1 &= \frac{3\hbar\omega}{2} - V_0 \\ E_2 &= \frac{5\hbar\omega}{2} - V_0 \end{aligned}$$

8. Rechnungen mit Erzeugern und Vernichtern

a)

$$\psi(x, t = 0) = \frac{1}{\sqrt{6}}\left(2\psi_0 + i\sqrt{2}\psi_2\right)$$

b)

$$\begin{aligned} \psi(x,t) &= \frac{1}{\sqrt{6}}\left(2\psi_0 e^{-i\omega t/2} + i\sqrt{2}\psi_2 e^{-i5\omega t/2}\right) \\ |\psi(x,t)|^2 &= \frac{1}{6}\left(4|\psi_0|^2 + 2|\psi_2|^2 + 4\sqrt{2}\psi_0\psi_2\sin(2\omega t)\right) \end{aligned}$$

c)

$$x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$$
$$\hat{x} = \frac{x_0}{\sqrt{2}} \left(\hat{a} + \hat{a}^\dagger\right)$$
$$\hat{x}^2 = \frac{x_0^2}{2} \left(2\hat{n} + (\hat{a})^2 + \left(\hat{a}^\dagger\right)^2 + 1\right)$$
$$\hat{p} = \frac{\hbar}{i\sqrt{2}x_0} \left(\hat{a} - \hat{a}^\dagger\right)$$
$$\hat{p}^2 = \frac{\hbar^2}{2x_0^2} \left(2\hat{n} - (\hat{a})^2 - \left(\hat{a}^\dagger\right)^2 + 1\right)$$
$$\langle x(t)\rangle = \langle p(t)\rangle = 0$$
$$\left\langle x(t)^2 \right\rangle = \frac{x_0^2}{12} \left(14 + 4\sin\left(2\omega t\right)\right) = (\Delta x)^2$$
$$\left\langle p(t)^2 \right\rangle = \frac{\hbar^2}{12x_0^2} \left(14 - 4\sin\left(2\omega t\right)\right) = (\Delta p)^2$$
$$\Delta x \Delta p = \frac{\hbar}{6} \sqrt{49 - 4\sin^2\left(2\omega t\right)}$$

Da die Wurzel immer groesser als 3 ist, ist die Heisenbergsche Unschaerferelation erfuellt. Die klassischen Bewegungsgleichungen sind erfuellt.

9. Rattling modes in Clathraten

a)
Ohne elektrisches Feld ist das System ein harmonischer Oszillator

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

Mit elektrischem Feld, wird das Potential zu einem verschobenen harmonischen Oszillator

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 \hat{x}^2 - 3eE\hat{x}$$

b)
Ohne elektrisches Feld ergeben sich die Energieeigenwerte des harmonischen Oszillators

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2}\right)$$

Um die Energieeigenwerte im elektrischen Feld zu bekommen ergaenzen wir auf vollstaendige Quadrate und bekommen wieder einen harmonischen Oszillator.

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 \left(\hat{x} - \frac{3eE}{m\omega^2}\right)^2 - \frac{9e^2E^2}{2m\omega^2}$$

Man sieht, dass das Potential eine Parabel ist, deren Scheitel nicht im Ursprung liegt. Jetzt machen wir eine Variablentransformation $x \to y = x - \alpha$ mit

$\alpha = \frac{3eE}{m\omega^2}$. Dann wieder umschreiben auf Erzeuger $\hat{b}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{\hat{x}-\alpha}{x_0} - x_0\frac{d}{dx}\right)$ und Vernichter $\hat{b} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{\hat{x}-\alpha}{x_0} + x_0\frac{d}{dx}\right)$. Daraus folgen die Energieeigenwerte zu:

$$E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right) - \frac{9e^2E^2}{2m\omega^2}$$

c)

$$\psi_0(x-\alpha) = \frac{1}{\sqrt{\sqrt{\pi}x_0}}e^{-\frac{(x-\alpha)^2}{2x_0}}$$
$$\psi_1(x-\alpha) = \frac{2}{\sqrt{\sqrt{\pi}2x_0}}\frac{(x-\alpha)}{x_0}e^{-\frac{(x-\alpha)^2}{2x_0}}$$

Mit der charakteristischen Laenge $x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$
d)

$$\langle\hat{x}\rangle_0 = (\psi_0, \hat{x}\psi_0) = (\psi_0, (\hat{x}-\alpha)\,\psi_0) + (\psi_0, \alpha\psi_0) = c\left(\psi_0, \left(\hat{b} + \hat{b}^\dagger\right)\psi_0\right) + \alpha = \alpha$$

Wobei c eine Konstante ist.

$$\langle\hat{x}\rangle_1 = (\psi_1, \hat{x}\psi_1) = (\psi_1, (\hat{x}-\alpha)\,\psi_1) + (\psi_1, \alpha\psi_1) = \alpha$$

Um die Erwartungswerte von $\hat{p}$ zu bestimmen geht man gleich vor, allerdings hebt sich der verschobene Ortsanteil durch die Subtraktion von Erzeuger und Vernichter genau auf. Deswegen gilt:

$$\langle\hat{p}\rangle_0 = 0$$
$$\langle\hat{p}\rangle_1 = 0$$