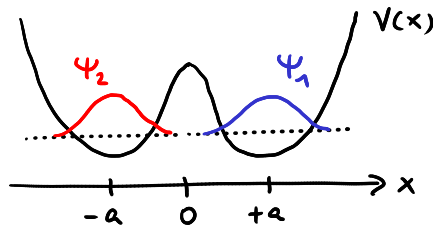
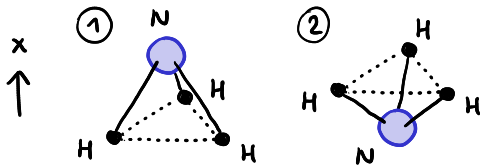


Ilustrace formalismu a postula'tu - NH₃ jako dvojhladinovy' syste'm

• molekula NH₃



modelovy' potencia'l

$$V(x) = \lambda(x^2 - a^2)^2$$

parametry

$$a = 0.038 \text{ nm} \quad V(0) = 0.26 \text{ eV}$$

- sledujeme dusikovy' iont, který se může nacházet ve dvou možných rovnoažných poloha'ch
- pohyb ča'stice s redukovanou hmotností $m = \frac{3m_H m_N}{3m_H + m_N}$ v potencia'ln $V(x)$ ($m \approx 2.5 m_p$)
- malá ale nenulová' pravděpodobnost tunelova'ni' mezi rovnoažnými' polohami: - povede k oscilaci'm
- oscilace dusikove'ho iontu mezi polohami 1 a 2 spadaji' do mikrovlnne' oblasti: $F \approx 24 \text{ GHz}$
a jsou využíva'ny v MASERu - zdroji koherentního mikrovlnne'ho za'ření založeném na stimulované emisi, obdoba pozdějšího LASERu

• aproximativni' popis - NH₃ jako dvoustavovy' kvantověmechanický syste'm

- pro účely teoreticke'ho popisu maseru postačí zachytit přeskakova'ni' mezi polohami 1 a 2
- základni' stav v prave' a leve' potencia'love' jámě poslouží jako ba'ze dvourozměrne'ho Hilbertova prostoru \mathcal{H}

$$\begin{aligned} \text{vlnova' funkce } \Psi_1(x) &\leftrightarrow \text{stav z } \mathcal{H} \quad |1\rangle \\ \Psi_2(x) &\leftrightarrow \quad \quad \quad |2\rangle \end{aligned}$$

ortonormalni' ba'ze - zanedba'me překryv $\langle 1|2\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_1^*(x) \Psi_2(x) dx \approx 0$

normova'ni' $\langle 1|1\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} |\Psi_1(x)|^2 dx = 1$ $\langle 2|2\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} |\Psi_2(x)|^2 dx = 1$

→ obecný stav syste'mu $|\psi\rangle = c_1|1\rangle + c_2|2\rangle$ $|c_1|^2 + |c_2|^2 = 1$

$P(\text{nalezeni' N v jámě 1}) = |\langle 1|\psi\rangle|^2 = |c_1|^2 = P_1$

$P(\text{nalezeni' N v jámě 2}) = |\langle 2|\psi\rangle|^2 = |c_2|^2 = P_2$

• opera'tory

opera'tor polohy - v dvourozměrne'm prostoru matice 2x2

$$X = \begin{pmatrix} \langle 1|\hat{x}|1\rangle & \langle 1|\hat{x}|2\rangle \\ \langle 2|\hat{x}|1\rangle & \langle 2|\hat{x}|2\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a & 0 \\ 0 & -a \end{pmatrix}$$

$$\langle 1|\hat{x}|1\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_1^*(x) x \Psi_1(x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} x |\Psi_1(x)|^2 dx \approx +a$$

$$\langle 1|\hat{x}|2\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_1^*(x) x \Psi_2(x) dx = 0 \quad (\text{x lichá', } \Psi_1 \Psi_2 \text{ sudá'})$$

Hamiltonia'n syste'mu

$$H = \begin{pmatrix} \langle 1|\hat{H}|1\rangle & \langle 1|\hat{H}|2\rangle \\ \langle 2|\hat{H}|1\rangle & \langle 2|\hat{H}|2\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} E_0 & -T \\ -T & E_0 \end{pmatrix}$$

$$\langle 1|\hat{H}|1\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_1^*(x) \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right] \Psi_1(x) dx = E_0 \in \mathbb{R}$$

$$\langle 1|\hat{H}|2\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_1^*(x) \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right] \Psi_2(x) dx = -T \in \mathbb{R}$$

- oba operátory reprezentovány reálnou symetrickou maticí

(obecně hermiteovskému operátoru přísluší hermiteovská matice $H^\dagger = H^{T*} = H$)

- hodnota E_0 je přibližně energie základního stavu v jedné jámě, T je malá tunelovací amplituda

- alternativní zápis operátorů pomocí matic. prvků v Diracově formalismu

$$\hat{X} = a (|1\rangle\langle 1| - |2\rangle\langle 2|)$$

$$\hat{H} = E_0 (|1\rangle\langle 1| + |2\rangle\langle 2|) - T (|1\rangle\langle 2| + |2\rangle\langle 1|)$$

• měření polohy:

vlastní hodnoty $+a, -a$ pravděpodobnosti: $P(+a) = |\langle 1|\psi\rangle|^2 = |c_1|^2$ $P(-a) = |\langle 2|\psi\rangle|^2 = |c_2|^2$

střední hodnota

$$\begin{aligned} \langle \hat{X} \rangle &= \langle \psi | \hat{X} | \psi \rangle = \left(\sum_m c_m^* \langle m | \right) \hat{X} \left(\sum_n c_n | n \rangle \right) = \sum_m \sum_n c_m^* \overbrace{\langle m | \hat{X} | n \rangle}^{X_{mn}} c_n = \bar{c}^{T*} X \bar{c} = \\ &= (c_1^* \ c_2^*) \begin{pmatrix} +a & 0 \\ 0 & -a \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = c_1^* c_1 (+a) + c_2^* c_2 (-a) = |c_1|^2 (+a) + |c_2|^2 (-a) \end{aligned}$$

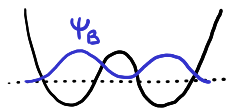
• vlastní stavy \hat{H}

maticová podoba Schrödingerovy rovnice v bázi $|1\rangle, |2\rangle$:

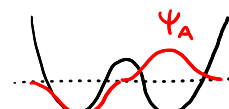
$$\begin{aligned} \hat{H} | \psi \rangle &= E | \psi \rangle & \langle 1 | \hat{H} | (c_1 | 1 \rangle + c_2 | 2 \rangle) &= E \langle 1 | (c_1 | 1 \rangle + c_2 | 2 \rangle) & \overbrace{\begin{pmatrix} E_0 & -T \\ -T & E_0 \end{pmatrix}}^H \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} &= E \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} \\ \uparrow & \quad \uparrow & \langle 2 | \hat{H} | (c_1 | 1 \rangle + c_2 | 2 \rangle) &= E \langle 2 | (c_1 | 1 \rangle + c_2 | 2 \rangle) & & \end{aligned}$$

diagonalizace poskytne vlastní stavy

$$\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$



$$\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$$



$$|B\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|1\rangle + |2\rangle)$$

$$E_B = E_0 - T$$

$$|A\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|1\rangle - |2\rangle)$$

$$E_A = E_0 + T$$

matice přechodu mezi bázi $|1\rangle, |2\rangle$ a $|B\rangle, |A\rangle$

$$| \psi \rangle = c_1 | 1 \rangle + c_2 | 2 \rangle$$

$$c_B = \langle B | \psi \rangle = \langle B | (c_1 | 1 \rangle + c_2 | 2 \rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}} c_1 + \frac{1}{\sqrt{2}} c_2$$

$$| \psi \rangle = c_B | B \rangle + c_A | A \rangle$$

$$c_A = \langle A | \psi \rangle = \langle A | (c_1 | 1 \rangle + c_2 | 2 \rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}} c_1 - \frac{1}{\sqrt{2}} c_2$$

$$\begin{pmatrix} c_B \\ c_A \end{pmatrix} = \underbrace{\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}}_M \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}$$

střední hodnota a převod Hamiltoniánu mezi bázi:

$$\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = M^{-1} \begin{pmatrix} c_B \\ c_A \end{pmatrix} \rightarrow (c_1^* \ c_2^*) = (c_B^* \ c_A^*) (M^{-1})^{T*} = (c_B^* \ c_A^*) M$$

Pozn.: Matice přechodu mezi ortonormalními bázi je unitární, tj. platí $M^{-1} = M^\dagger = M^{T*}$

$$\langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle = (c_1^* \ c_2^*) \begin{pmatrix} E_0 & -T \\ -T & E_0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = (c_B^* \ c_A^*) \underbrace{(M^{-1})^{T*} H M^{-1}}_{H'} \begin{pmatrix} c_B \\ c_A \end{pmatrix}$$

H' = Hamiltonián v bázi vlastních stavů

$$H' = \begin{pmatrix} E_B & 0 \\ 0 & E_A \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \langle B | \hat{H} | B \rangle & \langle B | \hat{H} | A \rangle \\ \langle A | \hat{H} | B \rangle & \langle A | \hat{H} | A \rangle \end{pmatrix} \quad \text{Hamiltonián je v bázi vlastních stavů diagonální}$$

měření energie by poskytlo E_B s $P_B = |\langle B | \psi \rangle|^2 = |c_B|^2$ a E_A s $P_A = |\langle A | \psi \rangle|^2 = |c_A|^2$

střední hodnota energie $\langle \hat{H} \rangle = |c_B|^2 E_B + |c_A|^2 E_A = E_0 - T(c_1^* c_2 + c_1 c_2^*)$

• časový vývoj - využije se maticová podoba nestac. SchR

$i\hbar \frac{d}{dt} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} E_0 & -T \\ -T & E_0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}$ nestac. SchR v bázi: $|1\rangle, |2\rangle$
- soustava svařovaných dif. rovnic

$i\hbar \frac{d}{dt} \begin{pmatrix} c_B \\ c_A \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} E_B & 0 \\ 0 & E_A \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_B \\ c_A \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{pmatrix} c_B \\ c_A \end{pmatrix}_t = \begin{pmatrix} e^{-\frac{i}{\hbar} E_B t} & 0 \\ 0 & e^{-\frac{i}{\hbar} E_A t} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_B \\ c_A \end{pmatrix}_{t=0}$ nestac. SchR v bázi: $|B\rangle, |A\rangle$
- dvě samostatné dif. rovnice s explicitním řešením

časový vývoj stavu v bázi: $|1\rangle, |2\rangle$ - postup: převedeme do $|B\rangle, |A\rangle$, tam je časový vývoj jednoduchý a poté zpět do báze $|1\rangle, |2\rangle$

$$\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}_t = \underbrace{\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}}_{M^{-1}} \begin{pmatrix} e^{-\frac{i}{\hbar} E_B t} & 0 \\ 0 & e^{-\frac{i}{\hbar} E_A t} \end{pmatrix} \underbrace{\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}}_M \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}_{t=0} = U(t) \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}_{t=0}$$

↑ operátor časového vývoje

$$U(t) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{-\frac{i}{\hbar} E_B t} & 0 \\ 0 & e^{-\frac{i}{\hbar} E_A t} \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} = e^{-\frac{i}{\hbar} E_0 t} \begin{pmatrix} \cos \frac{Tt}{\hbar} & i \sin \frac{Tt}{\hbar} \\ i \sin \frac{Tt}{\hbar} & \cos \frac{Tt}{\hbar} \end{pmatrix} = e_0 \begin{pmatrix} c & is \\ is & c \end{pmatrix}$$

pro výchozí $c_1(t=0) = 1, c_2(t=0) = 0$ (částice v pravé jámě) $c_1(t) = e_0 c, c_2(t) = i e_0 s$
pravděpodobnosti: nalezení v pravé/levé jámě oscilují

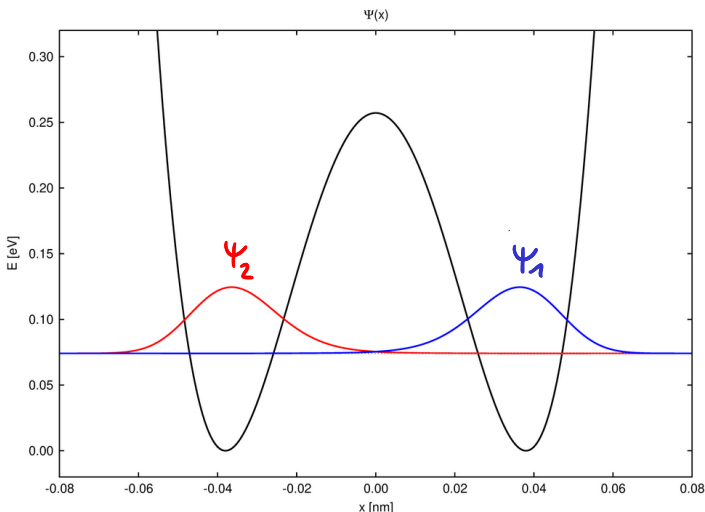
$P_1 = |c_1(t)|^2 = \cos^2 \frac{Tt}{\hbar} \quad P_2 = |c_2(t)|^2 = \sin^2 \frac{Tt}{\hbar}$

střední hodnota x: $\langle \hat{x} \rangle = +a P_1 - a P_2 = a \left(\cos^2 \frac{Tt}{\hbar} - \sin^2 \frac{Tt}{\hbar} \right) = a \cos \frac{2Tt}{\hbar}$

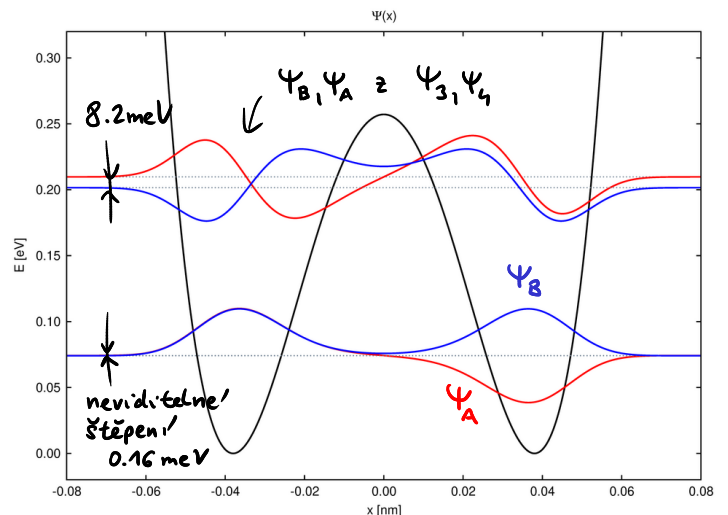
→ přelevání mezi jámami s frekvencí $f = \frac{\omega}{2\pi} = \frac{T}{\pi\hbar}$

• numerické vyčíslení pro modelový potenciál

báze funkce ψ_1, ψ_2



vlnové funkce vlastních stavů



pro Ψ_1, Ψ_2 : $E_0 = 74.139 \text{ meV}$
 $T = 0.079 \text{ meV}$

pro Ψ_3, Ψ_4 : $E_0 = 205.67 \text{ meV}$
 $T = 4.09 \text{ meV}$

štěpení $E_A - E_B = 2T = 0.16 \text{ meV}$

štěpení 8.2 meV

Frekvence $F = \frac{T}{\pi \hbar} = 39 \text{ GHz}$

$F = 2.0 \text{ THz}$

(experiment 24 GHz)

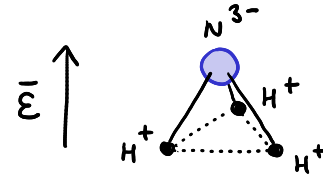
Pozn. Frekvence přelévání je velmi citlivá na šířku a výšku bariéry mezi jámami (analogie tunelového jevu), $F = 24 \text{ GHz}$ by vyšlo pro $V(0) = 0.291 \text{ eV}$

Pozn. Deuterovaný amoniak ND_3 má exp. frekvenci přelévání $F = 1.6 \text{ GHz}$ (důsledek odlišné redukované hmotnosti, potenciál víceméně stejný)

• posuv energií v elektrickém poli (Starkův jev)

vložení do statického elektrického pole s intenzitou \mathcal{E} ve směru pohybu iontu N přinese dodatečný potenciál

$\Delta V(x) = -q\mathcal{E}x$ ← náboj iontu N

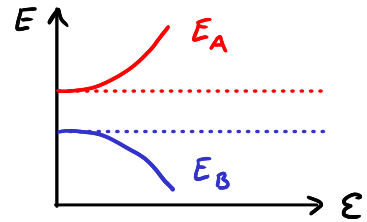


nový Hamiltonián $\hat{H} - q\mathcal{E}\hat{x}$

vlastní hodnoty

$$\begin{pmatrix} E_0 - q\mathcal{E}a & -T \\ -T & E_0 + q\mathcal{E}a \end{pmatrix}$$

$$E_{A/B} = E_0 \pm \sqrt{T^2 + (q\mathcal{E}a)^2}$$



• Rabiho oscilace ve střídavém elektrickém poli: $\mathcal{E} = \mathcal{E}_0 \cos \Omega t$

nestac. Schr

$$i\hbar \frac{d}{dt} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} E_0 - q\mathcal{E}_0 a \cos \Omega t & -T \\ -T & E_0 + q\mathcal{E}_0 a \cos \Omega t \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}$$

→ přelévání mezi P_1 a P_2 s menšími oscilacemi

Rabiho frekvence $\Omega_R = \sqrt{\left(\Omega - \frac{2T}{\hbar}\right)^2 + \left(\frac{q\mathcal{E}_0 a}{\hbar}\right)^2}$

