

Zadatak 1.

Napišite hamiltonijan nabijenog harmoničkog oscilatora pod djelovanjem homogenog električnog polja E u smjeru titranja. Kakav je njegov energetski spektar te kolika je polarizabilnost oscilatora?

Rješenje:

Potencijalna energija nabijene čestice u homogenom električnom polju je $-qEx$, gdje je q naboј čestice, a x njezin položaj. Toj potencijalnoj energiji moramo pribrojiti elastičnu potencijalnu energiju. Tako dobivamo

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

Jednostavnim algebarskim postupkom ovaj hamiltonijan možemo predočiti u obliku

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\left(x - \frac{qE}{m\omega^2}\right)^2 - \frac{q^2E^2}{2m\omega^2}$$

Vidimo da je položaj čestice pomaknut za određen iznos, neovisan i o položaju i o zaletu. Dakle, hamiltonijan se nije bitno promijenio jer se takvim pomakom ne mijenja komutacijsko pravilo između zaleta i položaja.

Zaključak:

Energetski spektar biti će pomaknut za određen iznos u odnosu na spektar energija oscilatora kada nema električnog polja:

$$E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right) - \frac{q^2E^2}{2m\omega^2}, \quad n=0,1,2,\dots$$

Polarizabilnost je omjer srednje vrijednosti dipolnog momenta i električnog polja. Dipolni moment je umnožak naboja i položaja x . Dakle, dipolni moment je

$$d = qx = q \left(x - \frac{qE}{m\omega^2} \right) + \frac{q^2 E}{m\omega^2}$$

Mi znamo da je srednja vrijednost prvog člana (član za zagradom) u ovom izrazu jednaka 0. **Kako to znamo?**

To znači da je polarizabilnost

$$\alpha = \frac{\langle d \rangle}{E} = \frac{q^2}{m\omega^2}$$

Zadatak 2.

Čestica se giba u polju potencijalne energije

$$V(x) = V_0 \left(\frac{a}{x^6} - \frac{b}{x^{12}} \right)$$

Prepostavljajući da je energija čestice blizu najnižoj vrijednosti, izračunajte njezin energetski spektar.

KVANTNA KEMIJA 4. vježbe