Odzivna funkcija harmonskega oscilatorja
Višja statistična fizika

Simon Čopar

5. januar 2010

Frekvenčna odzivna funkcija (posplošena susceptibilnost)

Iz časovne odzivne funkcije (Greenove funkcije) preidemo na frekvenčno odzivno funkcijo s prehodom na harmonski nastavek za silo. Zaradi linearnosti lahko vsak vhodni signal sestavimo iz tovrstnih prispevkov.

$$\Delta B = F_0 e^{-\mathrm{i}\omega t} \chi_{BA}(\omega)$$

Pri tem je

$$\chi_{BA}(\omega) = \frac{\mathrm{i}}{\hbar} \int_0^\infty e^{\mathrm{i}\omega\tau} \langle [B(\tau), A] \rangle \, \mathrm{d}\tau$$

Operatorja A in B sta operator interakcije in operator opazovanega odziva. $B(\tau)$ je operator B, zarotiran v času z neperturbiranim Hamiltonijanom (Heisenbergova slika).

$$B(\tau) = e^{\mathrm{i}H_0\tau/\hbar} B e^{-\mathrm{i}H_0\tau/\hbar}$$

Kanonično povprečje pomeni

$$\langle [B(\tau), A] \rangle = \mathrm{Tr}\, \rho\, [B(\tau), A]$$

Prestavimo se v lastno bazo H_0: $1 = \sum_n |n\rangle\langle n|$, v kateri je kanonični nastavek za ρ diagonalen: $\rho = \frac{e^{-\beta H_0}}{Z}$.

$$\chi_{BA}(\omega) = \frac{\mathrm{i}}{\hbar} \frac{1}{Z} \sum_{n,l} \langle n|e^{-\beta H_0}|n\rangle \int_0^\infty \left(e^{\mathrm{i}(\omega+(\omega_n-\omega_l))t} \langle n|B|l\rangle \langle l|A|n\rangle - e^{\mathrm{i}(\omega-(\omega_n-\omega_l))t} \langle n|A|l\rangle \langle l|B|n\rangle \right) \mathrm{d}t$$

$$\chi_{BA}(\omega) = \frac{\mathrm{i}}{\hbar} \frac{1}{Z} \sum_{n,l} \langle n|e^{-\beta H_0}|n\rangle \begin{pmatrix} \langle n|B|l\rangle \langle l|A|n\rangle \int_{-\infty}^\infty \Theta(t) e^{\mathrm{i}(\omega+(\omega_n-\omega_l))t} \, \mathrm{d}t \\ - \langle n|A|l\rangle \langle l|B|n\rangle \int_{-\infty}^\infty \Theta(t) e^{\mathrm{i}(\omega-(\omega_n-\omega_l))t} \, \mathrm{d}t \end{pmatrix}$$

Fourierovo transformacijo Heavisidove funkcije poznamo:

$$\int_{-\infty}^\infty \Theta(t) e^{-\mathrm{i}\omega t} \, \mathrm{d}t = \pi\delta(\omega) + \frac{1}{\mathrm{i}\omega}$$

S tem smo dosegli isto kot z uporabo Plemljeve formule. Preostane:

$$\chi_{BA}(\omega) = \frac{1}{\hbar} \frac{1}{Z} \sum_{n,l} \langle n|e^{-\beta H_0}|n\rangle \begin{pmatrix} \langle n|B|l\rangle \langle l|A|n\rangle \left(\mathrm{i}\pi\delta(-\omega-(\omega_n-\omega_l)) - \frac{1}{\omega+(\omega_n-\omega_l)} \right) \\ - \langle n|A|l\rangle \langle l|B|n\rangle \left(\mathrm{i}\pi\delta(-\omega+(\omega_n-\omega_l)) - \frac{1}{\omega-(\omega_n-\omega_l)} \right) \end{pmatrix}$$

Kvantni harmonski oscilator

Vzemimo Hamiltonijan v obliki

$$H_0 = \hbar\omega'(a^\dagger a + \tfrac{1}{2})$$

Uporabili smo kreacijski in anihilacijski operator. Operator odmika se v teh enotah zapiše kot

$$x = \frac{x_0}{\sqrt{2}}(a^\dagger + a); \quad x_0^2 = \frac{\hbar}{m\omega'}$$

Perturbiran Hamiltonijan v primeru zunanjega električnega polja je

$$H = H_0 - e_0 E x$$

Gledamo odziv odmika na zunanje polje. Amplituda sile je $F = e_0 E$, oba relavantna operatorja pa sta sedaj:

$$A = B = x$$

Računamo matrične elemente tega operatorja, kar zlahka opravimo s kreacijskimi in anihilacijskimi operatorji:

$$\langle n|x|l\rangle = \frac{x_0}{\sqrt{2}}\langle n|a^\dagger + a|l\rangle = \frac{x_0}{\sqrt{2}}\left(\sqrt{l+1}\,\langle n|l+1\rangle + \sqrt{l}\,\langle n|l-1\rangle\right) = \frac{x_0}{\sqrt{2}}(\sqrt{n}\delta_{n,l+1} + \sqrt{n+1}\delta_{n,l-1})$$

Lastne frekvence so seveda

$$\omega_n = \omega'(n + \tfrac{1}{2})$$
$$\omega_n - \omega_l = \omega'(n - l)$$

$$\chi_{xx}(\omega) = \frac{1}{\hbar}\frac{1}{Z}\sum_n e^{-\beta\hbar\omega_n}\sum_l \langle n|x|l\rangle^2 \begin{pmatrix} \mathrm{i}\pi\left(\delta(\omega + (\omega_n - \omega_l)) - \delta(\omega - (\omega_n - \omega_l))\right) \\ -\left(\frac{1}{\omega + (\omega_n - \omega_l)} - \frac{1}{\omega - (\omega_n - \omega_l)}\right) \end{pmatrix}$$

Vsota po n, l razpade na dve vsoti po n - ena za poddiagonalo, ena za naddiagonalo operatorja x.

$$\chi_{xx}(\omega) = \frac{x_0^2}{2\hbar}\frac{1}{Z}\sum_n e^{-\beta\hbar\omega_n}\left(\begin{array}{r} n\begin{pmatrix} \mathrm{i}\pi\left(\delta(\omega + (\omega_n - \omega_{n-1})) - \delta(\omega - (\omega_n - \omega_{n-1}))\right) \\ -\left(\frac{1}{\omega + (\omega_n - \omega_{n-1})} - \frac{1}{\omega - (\omega_n - \omega_{n-1})}\right) \end{pmatrix} \\ +(n+1)\begin{pmatrix} \mathrm{i}\pi\left(\delta(\omega + (\omega_n - \omega_{n+1})) - \delta(\omega - (\omega_n - \omega_{n+1}))\right) \\ -\left(\frac{1}{\omega + (\omega_n - \omega_{n+1})} - \frac{1}{\omega - (\omega_n - \omega_{n+1})}\right) \end{pmatrix} \end{array}\right)$$

Uporabimo izraze za razliko lastnih frekvenc in vsi členi razen kanoničnih uteži izgubijo odvisnost od n.

$$\chi_{xx}(\omega) = \frac{x_0^2}{2\hbar}\frac{1}{Z}\sum_n e^{-\beta\hbar\omega_n}\left(\mathrm{i}\pi\left(\delta(\omega - \omega') - \delta(\omega + \omega')\right) - \left(\frac{1}{\omega - \omega'} - \frac{1}{\omega + \omega'}\right)\right)$$

$$\chi_{xx}(\omega) = \frac{1}{m}\left(\frac{1}{\omega'^2 - \omega^2} + \frac{\mathrm{i}\pi}{2\omega'}\left(\delta(\omega - \omega') - \delta(\omega + \omega')\right)\right)$$

Za enosmerno silo $F = e_0 E$ pravilno dobimo $x = \frac{F}{m\omega'^2}$, kjer je novi minimum potenciala. Izraz je neodvisen od temperature in je enak klasičnemu, saj v izrazu ne nastopata β in $\hbar$.

Impulzni odziv

Odziv na delta funkcijo

$$\phi_{BA} = \frac{\mathrm{i}}{\hbar} \langle [B(t), A] \rangle$$

za harmonski oscilator postane

$$\phi_{xx} = \frac{\mathrm{i}}{\hbar} \left\langle \left[e^{\mathrm{i}H_0 t} x e^{-\mathrm{i}H_0 t}, x \right] \right\rangle$$

a in $a^\dagger$ se transformirata z nezmotenim harmonskim hamiltonijanom v $a \to a e^{-\mathrm{i}\omega' t}$ in $a^\dagger \to a^\dagger e^{\mathrm{i}\omega' t}$. Komutator:

$$\left[e^{\mathrm{i}H_0 t} x e^{-\mathrm{i}H_0 t}, x \right] = \frac{x_0^2}{2} \left[a e^{-\mathrm{i}\omega' t} + a^\dagger e^{\mathrm{i}\omega' t}, a + a^\dagger \right] = -x_0^2 \mathrm{i} \sin \omega' t$$

To ni odvisno od n, zato povprečenje po termičnih stanjih ne spremeni ničesar.

$$\phi_{xx} = \frac{1}{m\omega'} \sin \omega' t$$

Kubova formula za kanonični ansambel

V klasični limiti Kubova formula da izraz

$$\chi_{BA}(\omega) = \beta \int_0^\infty \left\langle \dot{A}(0) B(t) \right\rangle e^{\mathrm{i}\omega t} \, \mathrm{d}t$$

Za klasični harmonski oscilator z znanimi začetnimi pogoji x', v' poznamo rešitev

$$x = x' \cos \omega' t + \frac{v'}{\omega'} \sin \omega' t$$

Kanonično povprečje izvedemo po faznem prostoru $\mathrm{d}x' \, \mathrm{d}v'$, kjer je pa integral po x' trivialen in ostane

$$\langle \dot{x}(0) x(t) \rangle = \frac{\int e^{-\beta \frac{mv'^2}{2}} \frac{v'^2}{\omega'} \sin \omega' t \, \mathrm{d}v'}{\int e^{-\beta \frac{mv'^2}{2}} \, \mathrm{d}v'}$$

$$\langle \dot{x}(0) x(t) \rangle = \frac{\sin \omega' t}{m\beta\omega'} \frac{\int e^{-\frac{1}{2}t^2} t^2 \, \mathrm{d}t}{\int e^{-\frac{1}{2}t^2} \, \mathrm{d}t} = \frac{1}{m\beta\omega'} \sin \omega' t$$

$$\phi_{xx}(t) = \frac{1}{m\omega'} \sin \omega' t$$

Ta rezultat je enak kot smo ga dobili v prejšnjem poglavju. Frekvenčno odvisno susceptibilnost potem lahko preverimo z zvezo $\chi_{xx}(\omega) = \int_0^\infty \phi_{xx}(t) e^{\mathrm{i}\omega t} \, \mathrm{d}t$.