Úvod

V tomto dokumentu naleznete zadání a vzorové řešení zápočtové písemky z přednášky "Kvantová mechanika I" za ZS 2018/19. Úlohy byly voleny tak, že by je měl být schopen beze zbytku vyřešit každý, kdo absolvoval přednášku a cvičení pokud by měl dost času, ale k vyřešení úloh v časovém limitu (90min) je potřeba ještě trochu tvůrčí invence a porozumění různým souvislostem v látce přednášky.

Na získání zápočtu by vám mělo stačit získat pár bodů, ke kompenzaci případných bodových ztrát z domácích úloh. Snažil jsem se úlohy volit tak, aby každý kdo se věnoval hlouběji přípravě a spočítal si předem pár úloh, byl v časovém limitu schopen získat alespoň polovinu bodů, což (spolu s domácími úlohami) stačí na odpuštění řešení dalších úloh při zkoušce.

V následujícím textu naleznete vzorové řešení. Doporučuji si je pečlivě přečíst pro přípravu ke zkoušce. Snažil jsem ukázat, nebo alespoň naznačit vždy několik postupů vedoucích k řešení a rovněž poukázat na různé souvislosti.

Poznámka: Řešení pro každou úlohu by se mělo vejít na jednu stránku (včetně zadání). To že jsou řešení delší je dáno diskusí různých metod, které lze použít.

Úloha 1(10 bodů)
Uvažujme bezstrukturní částici v jedné dimenzi s operátorem polohy $\hat{x}$ a operátorem hybnosti $\hat{p}$, které splňují kanonickou komutační relaci $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$. Pro dané reálné číslo a definujeme operátor traslace $\hat{T}_a = \exp(-ia\hat{p}/\hbar)$. Najděte komutátor $[\hat{x}, \hat{T}_a]$. Předpokládejte, že $|x\rangle$ je vlastní vektor operátoru $\hat{x}$ odpovídající vlastní hodnotě x. Ukažte, že $\hat{T}_a|x\rangle$ je rovněž vlastním vektorem operátoru $\hat{x}$ a zjistěte jakému vlastnímu číslu odpovídá. Je $\hat{T}_a$ normálním operátorem? Jaké je jeho spektrum?

Řešení (1. způsob):
Nejjednodušší je vzpomenout si na vzoreček, který platí pro libovolnou funkci $f(p)$ a který jsme odvodili na cvičení 6

$$[\hat{x}, f(\hat{p})] = f'(\hat{p})[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar f'(\hat{p}).$$

Po dosazení $f(p) = \exp(-iap/\hbar)$ dostaneme ihned (s užitím $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$)

$$[\hat{x}, \hat{T}_a] = -\frac{i}{\hbar} a e^{-\frac{i}{\hbar} a\hat{p}} [\hat{x}, \hat{p}] = a e^{-\frac{i}{\hbar} a\hat{p}} = a\hat{T}_a.$$

Další část je důkaz toho, že $|\psi\rangle = \hat{T}_a|x\rangle$ je vlastním vektorem operátoru $\hat{x}$. Zde použijeme právě odvozenou komutační relaci v postupu, který jste si měli osvojit v DU3:

$$\hat{x}|\psi\rangle = \hat{x}\hat{T}_a|x\rangle = (\hat{T}_a\hat{x} + [\hat{x}\hat{T}_a])|x\rangle = \hat{T}_a\hat{x}|x\rangle + a\hat{T}_a|x\rangle = (x + a)\hat{T}_a|x\rangle = (x + a)|\psi\rangle,$$

tj. vektor $|\psi\rangle$ je vlastním vektorem operátoru $\hat{x}$ odpovídající vlastnímu číslu $(x + a)$.

Pro další část je třeba si vzpomenout na definiční vztah normálního operátoru $[\hat{T}_a, \hat{T}_a^\dagger] = 0$. Operátor sdružený k $\hat{T}_a$ je $\hat{T}_a^\dagger = \exp(ia\hat{p}/\hbar)$ a protože jsou oba tyto operátory funkcí operátoru $\hat{p}$ musí spolu komutovat, tj. operátor $\hat{T}_a$ je skutečně normálním operátorem.

Spektrum operátoru najdeme, když si opět uvědomíme, že $\hat{T}_a$ je funkcí operátoru $\hat{p}$ jehož spektrum známe a je to prostě množina všech reálných čísel $p \in \mathbb{R}$. Vlastní čísla operátoru $\hat{T}_a$ jsou pak rovna $\exp(-iap/\hbar)$, kam můžeme dosadit libovolné reálné číslo p. Spektrem operátoru $\hat{T}_a$ je tedy jednotková kružnice $\sigma_T = \{z \in \mathbb{C}, |z| = 1\}$ v komplexní rovině.

Jiné řešení:
Někteří z Vás si nepamatovali vzoreček pro komutátor funkce operátoru $\hat{p}$ a tak jej v rámci řešení úlohy sami odvodili, přičemž použili vyjádření exponenciály jako Taylorovy řady a komutátor spočetli člen po členu. To je správně, ale časově dosti náročné. Vyjdeme z definice exponenciály Taylorovou řadou

$$[\hat{x}, \hat{T}_a] = \left[\hat{x}, \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{-ia}{\hbar}\hat{p}\right)^n\right] = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{-ia}{\hbar}\right)^n [\hat{x}, \hat{p}^n]$$

potom si všimneme, že

$$\begin{aligned} [\hat{x}, \hat{p}] &= i\hbar, \\ [\hat{x}, \hat{p}^2] &= \hat{p}[\hat{x}, \hat{p}] + [\hat{x}, \hat{p}]\hat{p} = i\hbar 2\hat{p}, \\ [\hat{x}, \hat{p}^3] &= \hat{p}[\hat{x}, \hat{p}^2] + [\hat{x}, \hat{p}]\hat{p}^2 = i\hbar 3\hat{p}^2 \end{aligned}$$

z čehož se dá usoudit (případně dokázat matematickou indukcí), že $[\hat{x}, \hat{p}^n] = i\hbar n\hat{p}^{n-1}$. Takže

$$[\hat{x}, \hat{T}_a] = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{-ia}{\hbar}\right)^n i\hbar n\hat{p}^{n-1} = a\sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{(n-1)!} \left(\frac{-ia}{\hbar}\right)^{n-1} \hat{p}^{n-1} = a e^{-\frac{i}{\hbar} a\hat{p}} = a\hat{T}_a.$$

Tento postup je však zbytečně zdlouhavý. Lepší nápad byl řešit celý problém v hybnostní reprezentaci a zapůsobit komutátorem na vlnovou funkci $\psi(p)$. Uvědomíme si, že operátor hybnosti je prostě násobení nezávisle proměnnou a podobně operátor $\hat{T}_a$ bude jen násobení exponenciálou, která operátor definuje. Operátor polohy pak v hybnostní reprezentaci je $\hat{x} = i\hbar \mathrm{d}/\mathrm{d}p$. Dostáváme tedy

$$\begin{aligned}
[\hat{x}, \hat{T}_a]\psi(p) &= i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}p}e^{-\frac{i}{\hbar}a\hat{p}}\psi(p) - e^{-\frac{i}{\hbar}a\hat{p}}i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}p}\psi(p) \\
&= i\hbar\left(-\frac{i}{\hbar}a\right)e^{-\frac{i}{\hbar}a\hat{p}}\psi(p) + i\hbar e^{-\frac{i}{\hbar}a\hat{p}}\psi'(p) - e^{-\frac{i}{\hbar}a\hat{p}}i\hbar\psi'(p) \\
&= ae^{-\frac{i}{\hbar}a\hat{p}}\psi(p) = \hat{T}_a\psi(p)
\end{aligned}$$

V hybnostní reprezentaci lze vyřešit také druhou část úlohy. Uvědomíme si, jak vypadá vlnová funkce vlasního vektoru operátoru $\hat{x}$ v hybnostní reprezentaci

$$\psi_x(p) = \langle p|x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{-\frac{i}{\hbar}px}.$$

Působením operátoru $\hat{T}_a$ na tuto funkci pak dostaneme

$$\hat{T}_a\psi_x(p) = e^{-\frac{i}{\hbar}ap}\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{-\frac{i}{\hbar}px} = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{-\frac{i}{\hbar}p(x+a)} = \psi_{x+a}(p).$$

Vidíme tedy, že $\hat{T}_a|x\rangle$ je opět vlastním stavem operátoru $\hat{x}$, ale odpovídající posunuté vlastní hodnotě $(x + a)$.

Úloha 2(10 bodů)
Harmonický oscilátor s hmotností m a vlastní úhlovou frekvencí ω je připraven v čase $t = 0$ ve stavu popsaném vlnovou funkcí $\psi(x) = (x_0 + \sqrt{2}x)\exp\{-\frac{1}{2}(\frac{x}{x_0})^2\}$, kde jako obvykle $x_0 = \sqrt{\hbar/m\omega}$. V čase $t > 0$ vypneme potenciálové pole, takže systém se dále vyvíjí jako volná částice s hmotností m. Jaká je pravděpodobnost, že částice poletí doprava (tj. ve směru $p > 0$)?

Řešení:
Úlohu můžeme rozdělit na dvě části. V první části je potřeba určit časový vývoj vlnové funkce z počátečního stavu do času t a v druhé části najít hledanou pravděpodobnost, kterou lze formulovat jako kvantové měření hybnosti.

Časový vývoj nejsnáze najdeme, tak že vlnovou funkci $\psi(x)$ napíšeme jako lineární kombinaci stacionárních stavů jejichž vlnové funkce si najdeme v taháku:

$$\phi_0(x) = \langle x|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{x_0\sqrt{\pi}}}e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{x}{x_0}\right)^2} \qquad \phi_1(x) = \langle x|1\rangle = \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{x_0\sqrt{\pi}}}\left(\frac{x}{x_0}\right)e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{x}{x_0}\right)^2}$$

z čehož je ihned vidět, že v x-reprezentaci je

$$\psi(x) = x_0\sqrt{x_0\sqrt{\pi}}[\phi_0(x) + \phi_1(x)],$$

neboli v backetové notaci (po normování, které nemusíme hledat explicitně integrací, protože stavy ϕ_0 a ϕ_1 jsou již normované a navzájem ortogonální) $|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle)$. Časový vývoj tohoto stavu najdeme tak, že každý ze stacionárních stavů $|n\rangle$ vynásobíme fázovým faktorem $\exp(-iE_nt/\hbar)$, kde energie stacionárních stavů harmonického oscilátoru jsou $E_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})$ a tedy

$$|\psi(t)\rangle = \tfrac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + e^{-i\omega t}|1\rangle)e^{-\frac{i}{2}\omega t}.$$

Hledanou pravděpodobnost najdeme použitím formalismu kvantové mechaniky pro měření spojité veličiny reprezentované operátorem $\hat{p}$. Pravděpodobnost, že částice poletí v kladném směru je reprezentována projekčním operátorem $\hat{P}_+ = \int_0^\infty |p\rangle\langle p|\mathrm{d}p$ obloženým právě získanou vlnovou funkcí

$$\wp(p > 0) = \langle\psi(t)|\hat{P}_+|\psi(t)\rangle = \frac{1}{2}\int_0^\infty \left[|\phi_0(p)|^2 + |\phi_1(p)|^2 + \phi_0^*(p)\phi_1(p)e^{-i\omega t} + \phi_1^*(p)\phi_0(p)e^{i\omega t}\right]\mathrm{d}p,$$

kde jsme identifikovali $p-$reprezentaci stacionárních stavů harmonického oscilátoru $\phi_n(p) \equiv \langle p|n\rangle$. Vyjádření těchto funkcí je rovněž uvedeno v taháku, takže je jen potřeba spočíst integrály 4 členů ve vzorečku výše, ale zjistíme, že je potřeba vlastně spočíst jen jeden z nich. První dva musí být rovny 1/2 neboť kvadráty všech vlnových funkcí $|\phi_n(p)|^2$ jsou sudé funkce a uvedený integrál je proto polovinou normalizace

$$\int_{-\infty}^\infty |\phi_0(p)|^2\mathrm{d}p = \tfrac{1}{2}\int_0^\infty |\phi_0(p)|^2\mathrm{d}p = \tfrac{1}{2}.$$

Další dva příspěvky jsou navzájem komplexně stdružené a stačí tudíž spočíst jen jeden z nich

$$A = e^{-i\omega t}\int_0^\infty \phi_0^*(p)\phi_1(p)\mathrm{d}p = e^{-i\omega t}\frac{-i\sqrt{2}}{\sqrt{\pi}}\int_0^\infty\left(\frac{p}{p_0}\right)e^{-\left(\frac{p}{p_0}\right)^2}\mathrm{d}\left(\frac{p}{p_0}\right) = \frac{-i}{\sqrt{2\pi}}e^{-i\omega t},$$

kde poslední integrál byl uveden v nápovědě a dále jsme využili taháku k vyjádření funkcí

$$\phi_0(p) = \langle p|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{p_0\sqrt{\pi}}}e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{p}{p_0}\right)^2} \qquad \phi_1(p) = \langle p|1\rangle = \frac{-i\sqrt{2}}{\sqrt{p_0\sqrt{\pi}}}\left(\frac{p}{p_0}\right)e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{p}{p_0}\right)^2}.$$

Hledaná pravděpodobnost tedy je

$$\wp(p > 0) = \frac{1}{2}[1 + A + A^*] = \frac{1}{2} - \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\sin\omega t.$$

Úloha 3(10 bodů)
Částice se spinem 1/2 a hmotností m je zachycena v potenciálové pasti, která je dobře aproximována harmonickým oscilátorem s periodou T a to ve stavu $|\psi\rangle = |0\rangle|+\rangle + |1\rangle|-\rangle$, kde báze $|n\rangle|s_z\rangle$ popisuje prostorové a spinové stupně volnosti (společný stav hamiltoniánu harmonického oscilátoru a operátoru z-tové složky spinu) ve standardní fázové konvenci. V tomto stavu provedeme měření x-ové složky spinového momentu hybnosti a naměříme její největší hodnotu. Jaká je bezprostředně po provedení tohoto měření hustota pravděpodobnosti nalézt částici v daném místě x?

Řešení:
Úloha se opět skládá ze dvou částí. V první půjde o to určit vlnovou funkci po měření spinu a v druhé části musíme z této vlnové funkce spočíst hledanou hustotu pravděpodobnosti. Navíc se musíme vypořádat s tím, že pracujeme na direktním součinu Hilbertových prostorů pro dva stupně volnosti.

Měření x-ové složky spinového momentu hybnosti vedlo na nalezení největší možné hodnoty, tj. $s_x = \hbar/2$. Ze cvičení 2, víme, že příslušný vlastní stav ve spinovém prostoru je $|x\!:\!+\rangle = (|+\rangle + |-\rangle)/\sqrt{2}$. Pokud byste si to náhodou nepamatovali, můžete tento stav nalézt jako vlastní vektor Pauliho matice σ_x z taháku odpovídající největšímu vlastnímu číslu. V celém Hilbertově prostoru tomuto měření odpovídá projektor

$$\hat{P}_{S_x+} = \hat{I} \otimes |x\!:\!+\rangle\langle x\!:\!+| = \tfrac{1}{2}(|0\rangle\langle 0| + |1\rangle\langle 1|) \otimes (|+\rangle + |-\rangle)(\langle +| + \langle -|).$$

Působením tohoto projektoru na stavový vektor dostaneme vlnovou funkci po měření

$$|\widetilde{\psi}\rangle = \hat{P}_{S_x+}|\psi\rangle = \tfrac{1}{2}|0\rangle \otimes (|+\rangle + |-\rangle) + \tfrac{1}{2}|1\rangle \otimes (|+\rangle + |-\rangle) = \tfrac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle) \otimes \tfrac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle + |-\rangle),$$

která je rovnou správně normovaná (všiměte si, že původní vlnová funkce normovaná nebyla a to, že teď vyšla normovaná je náhoda).

Druhým úkolem je najít hustotu pravděpodobnosti pro nalezení částice v místě x. Tomuto měření odpovídá projektor $\hat{P}_x = |x\rangle\langle x| \otimes \hat{I}$ takže hledaná hustota pravděpodobnosti je

$$\rho(x) = \langle\tilde{\psi}|\hat{P}_x|\tilde{\psi}\rangle = \tfrac{1}{2}(\langle 0|x\rangle + \langle 1|x\rangle)(\langle x|0\rangle + \langle x|1\rangle).$$

V tomto výrazu opět identifikujeme vlnové funkce stacionárních stavů harmonického oscilátoru z taháku

$$\phi_0(x) = \langle x|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{x_0\sqrt{\pi}}} e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{x}{x_0}\right)^2} \qquad \phi_1(x) = \langle x|1\rangle = \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{x_0\sqrt{\pi}}}\left(\frac{x}{x_0}\right) e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{x}{x_0}\right)^2}$$

takže

$$\rho(x) = \tfrac{1}{2}|\phi_0(x) + \phi_1(x)|^2 = \tfrac{1}{2}\tfrac{1}{x_0\sqrt{\pi}} e^{-q^2}(1 + 2\sqrt{2}q + 2q^2),$$

kde $q = x/x_0$.
Poznámky: Rozmyslete si důkladně, že rozumíte jednotlivým krokům v odvození výše, které vyžadují práci se stavovým prostorem ve tvaru direktního součinu dvou prostorů.

Druhý krok stanovení hustoty pravděpodobnosti výskytu částice v místě x, někteří z Vás odbyli konstatováním, že systém po prvním měření je ve faktorizovaném stavu a tudíž lze při měření polohy ignorovat spin a spočíst jej prostě jako kvadrát vlnové funkce $\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\phi_0(x) + \phi_1(x)]$. To je správná úvaha a hodnotil jsem ji plným počtem bodů, ale rozmyslete si, že rozumíte plnému postupu výše, které tuto argumentaci ospravedlňuje!

Úloha 4(10 bodů)
Bezstrukturní částice s hmotností m je zachycena v potenciálu aproximovaném nekonečně hlubokou jámou ($V(x) = \infty$ pro $|x| > a$) s plochým dnem ($V(x) = 0$ pro $|x| < a$), kde $2a$ je šířka jámy. Částici připravíme v čase $t = 0$ ve stavu, který je lineární kombinací základního a prvního excitovaného stavu s největší možnou střední hodnotou operátoru polohy $\hat{x}$. Jaká je střední hodnota tohoto operátoru v pozdějším čase $t > 0$.

Řešení:
Nejdříve je potřeba najít dva nejnižší stavy $\phi_0(x)$ a $\phi_1(x)$ v potenciálové jámě. To jsme trochu rozebrali na cvičení a také jsem dal na web vzorové řešení, takže jen rychle připomenu. Vlnové funkce $\phi(x)$ splňují na intervalu $x \in \langle -a, a\rangle$ Schrodingerovu rovnici pro volnou částici

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\phi''(x) = E\phi(x), \qquad \text{tedy} \qquad \phi''(x) + k^2\phi(x) = 0, \qquad \text{kde} \qquad E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}.$$

Nekonečnost potenciálu se projeví okrajovou podmínkou $\phi(a) = \phi(-a) = 0$, která vede na podmínku pro možné hodnoty k a tedy možné hodnoty energií. Potenciál je navíc symetrický podle počátku $x = 0$ a proto musí být základním stavem sudá funkce a prvním excitovaným stavem funkce lichá. Funkce splňující všechny tyto podmínky s nejnižší energií jsou

$$\begin{aligned} \phi_0(x) &= \tfrac{1}{\sqrt{a}}\cos k_0 x \quad \text{pro} \quad E_0 = \tfrac{\hbar^2 k^2}{2m}, \\ \phi_1(x) &= \tfrac{1}{\sqrt{a}}\sin 2k_0 x \quad \text{pro} \quad E_1 = \tfrac{4\hbar^2 k^2}{2m} = 3E_0, \end{aligned}$$

kde $k_0 = \frac{\pi}{2a}$ je nejmenší hodnota splňující okrajovou podmínku $\cos ka = 0$. V zadání se mluví o tom, že částice je na počátku připravena ve stavu $\psi(x) = \alpha\phi_0(x) + \beta\phi_1(x)$ s největší střední hodnotou x. Spočítáme tedy tuto střední hodnotu a najdeme α, β, které ji maximalizují.

$$\langle x\rangle = \int_{-a}^{a} x|\psi(x)|^2 \mathrm{d}x = |\alpha|^2\int_{-a}^{a} x|\phi_0|^2\mathrm{d}x + |\beta|^2\int_{-a}^{a} x|\phi_1|^2\mathrm{d}x + (\alpha^*\beta + \alpha\beta^*)\int_{-a}^{a} x\phi_0\phi_1\mathrm{d}x.$$

První dva integrály jsou zjevně nulové, protože integrand je lichá funkce, kterou integrujeme přes symetrickou oblast. Poslední integrál spočteme s využitím integrálu v nápovědě

$$\int_{-a}^{a} x\phi_0\phi_1\,\mathrm{d}x = \frac{1}{ak_0^2}\int_{-a}^{a} k_0x\,\cos k_0x\,\sin 2k_0x\,k_0\mathrm{d}x = \frac{4a}{\pi^2}\int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} q\,\cos q\,\sin 2q\,\mathrm{d}q = \frac{4a}{\pi^2}\frac{8}{9},$$

kde jsme provedli substituci $q = k_0 x$. Hledaná střední hodnota tedy je

$$\langle x\rangle = (\alpha^*\beta + \alpha\beta^*)\frac{a}{\pi^2}\frac{32}{9}.$$

Aby byla vlnová funkce normovaná, musí navíc být $\alpha^2 + \beta^2 = 1$. S touto podmínou nabývá střední hodnota maximální hodnoty pro $\alpha = \beta = 1/\sqrt{2}$ (podrobnosti viz podobný příklad ze cvičení 7, nebo vzorové řešení úlohy 2 ze zápočtové písemky z roku 2012).

Posledním úkolem je najít jak tato střední hodnota závisí na čase. Protože je vlnová funkce daná jako lineární kombinace stacionárních stavů ϕ_n jejichž časová závislost je dána jen fázovým faktorem $\exp(-iE_nt/\hbar) = \exp(-i\omega_n t)$ stačí v už nalezeném výrazu nahradit

$$\alpha \to \alpha e^{-i\omega_0 t} = \tfrac{1}{\sqrt{2}}e^{-i\omega_0 t} \qquad \text{a} \qquad \beta \to \beta e^{-i\omega_1 t} = \tfrac{1}{\sqrt{2}}e^{-i\omega_1 t}$$

a tedy

$$\langle x(t)\rangle = \frac{1}{2}(e^{i\omega t} + e^{-i\omega t})\frac{a}{\pi^2}\frac{32}{9} = \frac{a}{\pi^2}\frac{32}{9}\cos\omega t, \qquad \text{kde} \qquad \omega = (E_1 - E_0)/\hbar = 3E_0/\hbar = \frac{3\hbar}{2m}\left(\frac{\pi}{2a}\right)^2.$$

Úloha 5(10 bodů)
Uvažujte kvantovou trojtečku ve stavu popsaném kanonickou maticí hustoty $\hat{\rho} = \frac{1}{z}\exp(-\beta\hat{H})$, kde $\hat{H} = -\alpha(|1\rangle\langle 2| + |2\rangle\langle 3| + |2\rangle\langle 1| + |3\rangle\langle 2|)$ dále $\alpha, \beta = 1/kT$ jsou nezáporné konstanty a číslo z je dáno normalizační podmínkou $\mathrm{Tr}\hat{\rho} = 1$. Vyjádřete $\hat{\rho}$ jako matici v bázi $\{|1\rangle, |2\rangle, |3\rangle\}$. Jak vypadá tato matice v limitě nulové teploty $\beta \to \infty$? Jde v této limitě o čistý či smíšený stav? Najděte pravděpodobnost s jakou systém připravený ve stavu popsaném maticí hustoty $\hat{\rho}$ (pro obecné β) můžeme systém najít ve stavu $|n\rangle$ pro dané $n = 1, 2$ nebo 3.

Řešení I:
Nejdříve je potřeba spočíst exponenciálu zadané matice. Přímočaré je použít k tomu spektrální rozklad hamiltoniánu. Vlastní vektory a vlastní čísla najdete standardní procedurou (mimochodem matice je shodná s maticí z domácí úlohy 1) přičemž vyjde

$$E_0 = 0, \quad |\psi_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}, \qquad E_\pm = \mp\sqrt{2}\alpha, \quad |\psi_\pm\rangle = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 \\ \pm\sqrt{2} \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Příslušné projektory na vlastní podprostory jsou

$$\hat{P}_0 = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \qquad \hat{P}_+ = \frac{1}{4}\begin{pmatrix} 1 & \sqrt{2} & 1 \\ \sqrt{2} & 2 & \sqrt{2} \\ 1 & \sqrt{2} & 1 \end{pmatrix}, \qquad \hat{P}_- = \frac{1}{4}\begin{pmatrix} 1 & -\sqrt{2} & 1 \\ -\sqrt{2} & 2 & -\sqrt{2} \\ 1 & -\sqrt{2} & 1 \end{pmatrix}.$$

Můžete si ověřit, že tyto projektory představují rozklad jedničky $\hat{I} = \sum_i \hat{P}_i$ a spektrální rozklad Hamiltoniánu $\hat{H} = \sum_i E_i\hat{P}_i$ a mají jednotkovou stopu (důsledek normalizace stacionárních stavů). Hledaná exponenciála je

$$e^{-\beta\hat{H}} = \hat{P}_0 + e^{\alpha\beta\sqrt{2}}\hat{P}_+ + e^{-\alpha\beta\sqrt{2}}\hat{P}_-$$

a její stopa je

$$z = \mathrm{Tr}e^{-\beta\hat{H}} = \mathrm{Tr}\hat{P}_0 + e^{\alpha\beta\sqrt{2}}\mathrm{Tr}\hat{P}_+ + e^{-\alpha\beta\sqrt{2}}\mathrm{Tr}\hat{P}_- = 1 + e^{\alpha\beta\sqrt{2}} + e^{-\alpha\beta\sqrt{2}} = 1 + t + t^{-1},$$

kde jsme zavedli zkratku $t = \exp(\alpha\beta\sqrt{2})$. Tyto výsledky lze shrnout v maticové podobě jako

$$\rho = \frac{1}{z}e^{-\beta\hat{H}} = \begin{pmatrix} A & D & B \\ D & C & D \\ B & D & A \end{pmatrix},$$

kde

$$A = \frac{1}{4}\frac{t^2+2t+1}{t^2+t+1}, \quad C = \frac{1}{2}\frac{t^2+1}{t^2+t+1}, \quad B = \frac{1}{4}\frac{t^2-2t+1}{t^2+t+1}, \quad D = \frac{\sqrt{2}}{4}\frac{t^2-1}{t^2+t+1}.$$

V limitě $\beta \to \infty$ je $t \to \infty$ a tedy $A \to \frac{1}{4}$, $C \to \frac{1}{2}$, $B \to \frac{1}{4}$ a $D \to \frac{\sqrt{2}}{4}$, tj. $\rho \to \hat{P}_+$ což je projektor na základní stav s energií $E = -\alpha\sqrt{2}$, tj. jedná se o čistý stav (jak si můžete ověřit z podmínky $\mathrm{Tr}\rho^2 = 1$) neboť je to projektor na jediný vektor $|\psi_+\rangle$.

Poslední otázka byla jaká je pravděpodobnost nalézt částici v tečce číslo n pokud je připravena ve stavu popsaném maticí ρ. Podle formalismu kvantové teorie to spočteme z výrazu

$$p_n = \mathrm{Tr}\rho|n\rangle\langle n| = \langle n|\rho|n\rangle,$$

neboli

$$p_1 = p_3 = A = \frac{1}{4}\frac{t^2+2t+1}{t^2+t+1} = \frac{2+\cosh\alpha\beta\sqrt{2}}{2+4\cosh\alpha\beta\sqrt{2}}, \qquad p_2 = C = \frac{1}{2}\frac{t^2+1}{t^2+t+1}. = \frac{\cosh\alpha\beta\sqrt{2}}{1+2\cosh\alpha\beta\sqrt{2}}.$$

Řešení II: (v energetické reprezentaci) Matice hustoty $\hat{\rho}$ má obzvláště jednoduchý tvar reprezentaci vlastních stavů hamiltoniánu $\hat{H}|\psi_k\rangle = E_k|\psi_k\rangle$, protože

$$e^{-\beta\hat{H}}|\psi_k\rangle = e^{-\beta E_k}|\psi_k\rangle$$

neboli

$$e^{-\beta\hat{H}} = e^{-\beta\hat{H}}\hat{I} = e^{-\beta\hat{H}}\sum_k |\psi_k\rangle\langle\psi_k| = \sum_k e^{-\beta E_k}|\psi_k\rangle\langle\psi_k|.$$

Stopu této matice je výhodné opět spočíst v bázi $|\psi_k\rangle$

$$z = \operatorname{Tr} e^{-\beta\hat{H}} = \sum_k \langle\psi_k|e^{-\beta\hat{H}}|\psi_k\rangle = \sum_k e^{-\beta E_k} = 1 + t + t^{-1},$$

kde jsme využili známých vlastních hodnot hamiltoniánu $E_0 = 0$, $E_\pm = \mp\sqrt{2}\alpha$ a opět zavedli zkratku $t = \exp(-\beta E_+) = \exp(\alpha\beta\sqrt{2})$. Hledanou matici hustoty $\hat{\rho}$ můžeme tedy psát jako

$$\hat{\rho} = \frac{1}{1+t+t^{-1}}\left[|\psi_0\rangle\langle\psi_0| + t|\psi_+\rangle\langle\psi_+| + t^{-1}|\psi_-\rangle\langle\psi_-|\right].$$

Také snadno nahlédneme, že v limitě $\beta \to \infty$, tj. $t^{-1} \to 0$ a $t \to \infty$ a tedy

$$\frac{1}{1+t+t^{-1}} \to 0, \qquad \frac{t}{1+t+t^{-1}} \to 1, \qquad \frac{t^{-1}}{1+t+t^{-1}} \to 0,$$

a tedy $\hat{\rho} \to |\psi_+\rangle\langle\psi_+|$ což je evidentně čistý stav. Obtížnější je v této reprezentaci spočíst hledané pravděpodobnosti. Můžeme to zapsat například takto

$$p_n = \operatorname{Tr}\hat{\rho}|n\rangle\langle n| = \sum_k \langle\psi_k|\hat{\rho}|n\rangle\langle n|\psi_k\rangle = [|\langle n|\psi_0\rangle|^2 + t|\langle n|\psi_+\rangle|^2 + t^{-1}|\langle n|\psi_0\rangle|^2]/z$$

a po dosazení explicitního vyjádření vlastních vektorů hamiltoniánu dostaneme stejný výsledek jako v prvním řešení.