Zápočtová písemka z kvantové mechaniky II

čas na řešení: 90min

Úloha 1(10 bodů)
Dva spiny 1 a 1/2 spolu interagují prostřednictvím hamiltoniánu

$$\hat{H} = -\frac{\alpha}{\hbar^2}\vec{s}^{(1)} \cdot \vec{s}^{(2)},$$

kde $\alpha > 0$ je konstanta. Popište základní stav tohoto systému pomocí matice hustoty. Předpokládejte, že všechny stavy s nejnižší energií jsou zastoupeny se stejnou pravděpodobností. Ve stavu daném touto maticí hustoty spočtěte pravděpodobnost naměření nulové projekce spinu první částice na osu z.

Řešení:
Pro nalezení energie si stačí uvědomit vztah pro skalární součin vektorových operátorů

$$\vec{s}^{(1)} \cdot \vec{s}^{(2)} = \tfrac{1}{2}(\hat{S}^2 - \vec{s}^{(1)2} - \vec{s}^{(2)2}).$$

Hamiltonián je tedy diagonální v bázi $|sm\rangle$ charakterizované celkovým spinem s a jeho z-tovou složkou m

$$H|sm\rangle = -\frac{\alpha}{2}[s(s+1) - 2 - \tfrac{3}{4}]|sm\rangle \equiv E_s|sm\rangle.$$

Pravidla pro skládání momentu hybnosti dají celkový spin $s = \frac{1}{2}$ a $\frac{3}{2}$, přičemž základnímu stavu $E_s = -\alpha/2$ odpovídá hodnota $s = \frac{3}{2}$. Této hodnotě přisluší 4 stavy charakterizované různými $m = \pm\frac{1}{2}, \pm\frac{3}{2}$. Hledaná matice hustoty potom je

$$\hat{\rho} = \tfrac{1}{4}\sum_m |\tfrac{3}{2}m\rangle\langle\tfrac{3}{2}m|,$$

kde jsme použili předpokladu, že všechny 4 stavy nalezneme se stejnou pravděpodobností $\frac{1}{4}$. Pravděpodobnost naměření hodnoty $s_z^{(1)} = 0$ je dána vzorcem

$$p = \mathrm{Tr}[\hat{\rho}\hat{P}] = \tfrac{1}{4}\sum_m \left\{\langle 0\uparrow|\tfrac{3}{2}m\rangle\langle\tfrac{3}{2}m|0\uparrow\rangle + \langle 0\downarrow|\tfrac{3}{2}m\rangle\langle\tfrac{3}{2}m|0\downarrow\rangle\right\},$$

kde jsme použili vyjádření projektoru $\hat{P} = |0\uparrow\rangle\langle 0\uparrow| + |0\downarrow\rangle\langle 0\downarrow|$ charakterizujícího měření v separované bázi $|m_1 m_2\rangle$ odpovídající vlastním číslům $s_z^{(1)}$, $s_z^{(2)}$. Použitím Clebsch-Gordanových koeficientů, nebo přímou konstrukcí stavů $|sm\rangle$ dostaneme

$$\begin{aligned}
|\tfrac{3}{2}\tfrac{3}{2}\rangle &= |1\uparrow\rangle, \\
|\tfrac{3}{2}\tfrac{1}{2}\rangle &= \left(\sqrt{2}|0\uparrow\rangle + |1\downarrow\rangle\right)/\sqrt{3}, \\
|\tfrac{3}{2}-\tfrac{1}{2}\rangle &= \left(\sqrt{2}|0\downarrow\rangle + |-1\uparrow\rangle\right)/\sqrt{3}, \\
|\tfrac{3}{2}-\tfrac{3}{2}\rangle &= |-1\downarrow\rangle,
\end{aligned}$$

což dá pravděpodobnost $p = \frac{1}{3}$.

Úloha 2(10 bodů)
Vibrační stavy molekuly budeme modelovat jako částici v jednorozměrné potentiálové jámě. Pomocí WKB aproximace odhadněte kolik vibračních stavů má molekula popsaná Morseho potenciálem

$$V(x) = D\left(e^{-2\alpha x} - 2e^{-\alpha x}\right),$$

kde D, α jsou kladné konstanty a m je hmotnost částice.

Řešení: Vázané stavy se ve WKB aproximaci spočtou z podmínky

$$\Phi(E) \equiv \int_a^b \sqrt{2m(E - V(x))}\mathrm{d}x = \hbar\pi(n + \tfrac{1}{2}),$$

kde $a < b$ jsou dva body obratu dané podmínkou $V(a) = V(b) = E$. Číslo $n = 0, 1, 2, ..., n_{\mathrm{MAX}}$ určuje pořadové číslo vázaného stavu. Přitom $\Phi(E)$ je rostoucí funkce energie a energie vázaných stavů musí být záporná. Počet stavů je tedy $N = n_{\mathrm{MAX}} + 1$, kde n_{MAX} je největší přirozené číslo vyhovující nerovnosti

$$\Phi(E = 0) \equiv \int_a^\infty \sqrt{-2mV(x)}\mathrm{d}x > \hbar\pi(n_{\mathrm{MAX}} + \tfrac{1}{2}),$$

neboli (symbol $\lfloor . \rfloor$ znamená funkci "floor", neboli ořezání desetinné části čísla)

$$N = \left\lfloor \frac{\Phi(0)}{\hbar\pi} + \frac{1}{2} \right\rfloor.$$

Zbývá vypočíst $\Phi(0)$. Vnější bod obratu pro nulovou energii je $b = \infty$ a vnitřní bod obratu a nalezneme z podmínky

$$0 = V(a) = De^{-\alpha x}(e^{-\alpha x} - 2),$$

neboli $e^{-\alpha x} = 2$. Nyní přímočarou integrací dostáváme

$$\Phi(0) = \sqrt{2mD} \int_a^\infty \sqrt{2e^{-\alpha x} - e^{-2\alpha x}}\,\mathrm{d}x = \sqrt{2mD} \int_a^\infty \sqrt{2 - e^{-\alpha x}}\, e^{-\alpha x/2}\,\mathrm{d}x.$$

Poslední uvedený integrál spočteme substitucí $u = e^{-\alpha x/2}$

$$\int_a^\infty \sqrt{2 - e^{-\alpha x}}\, e^{-\alpha x/2}\,\mathrm{d}x = \frac{2}{\alpha} \int_0^{\sqrt{2}} \sqrt{2 - u^2}\, du = \frac{\pi}{\alpha},$$

kde poslední integrál jsme napsali bez počítání, protože jsme v něm poznali plochu čtvrtkružnice. Dosazením dostáváme hledaný odhad počtu vázaných stavů

$$N = \left\lfloor \frac{\sqrt{2mD}}{\hbar\alpha} + \frac{1}{2} \right\rfloor.$$

Poznámka: Nakreslete si funkci $V(x)$ a body obratu a, b pro různé $E < 0$ a $E \to 0$!

Úloha 3(10 bodů)
Interakce dvou částic se spinem 1/2 je popsána hamiltoniánem $\hat{H}_0 = -\epsilon\,\vec{\sigma}^{(1)} \cdot \vec{\sigma}^{(2)}$, kde $\epsilon > 0$ je konstanta a $\vec{\sigma}^{(i)}$ je vektor Pauliho matic působící na spinové stupně volnosti $i-$té částice. V prvním řádu poruchové teorie spočtěte, jak se rozštěpí energetické hladiny tohoto systému po přiblížení třetí částice, která způsobí poruchu hamiltoniánu

$$\hat{V} = -t\left(\sigma_x^{(1)}\sigma_x^{(3)} + \sigma_x^{(2)}\sigma_x^{(3)}\right),$$

kde $0 < t \ll \epsilon$. Odhadněte jak výsledek ovlivní vyšší řády.

Řešení: Hamiltonián $\hat{H}_0$ závisí jen na stavu prvních dvou částic a diagonalizují jej stavy součtového spinu $\vec{S} = \frac{\hbar}{2}(\vec{\sigma}^{(1)} + \vec{\sigma}^{(2)})$ částic 1 a 2. Tyto stavy označme $|SM\rangle$, kde S je jako obvykle kvantové číslo charakterizující kvadrát celkového spinu a M je trochu netradičně vlastní číslo pro celkovou $x-$ovou složku. Pro energie potom platí (viz řešení úlohy 1)

$$\hat{H}_0|SM\rangle = -\epsilon\tfrac{4}{\hbar^2}\vec{s}^{(1)} \cdot \vec{s}^{(2)}|SM\rangle = -\epsilon\tfrac{4}{\hbar^2}\tfrac{1}{2}\hbar^2[S(S+1) - \tfrac{3}{4} - \tfrac{3}{4}]|SM\rangle.$$

Výsledné energie v nultém řádu jsou $E_S = 3\epsilon$ pro singlet $S = 0$ a $E_S = -\epsilon$ pro triplet $S = 1$. Korekce prvního řádu dostaneme diagonalizací matice poruchy ve vlastních podprostorech v nichž máme báze tvořené dvěma stavy

$$|SM\rangle \otimes |\sigma_3\rangle; \qquad S = 0, \quad M = 0, \quad \sigma_3 = \pm\tfrac{1}{2} \ \text{ pro } \ E_0$$

a šesti stavy

$$|SM\rangle \otimes |\sigma_3\rangle; \qquad S = 1, \quad M = 0, \pm 1, \quad \sigma_3 = \pm\tfrac{1}{2} \ \text{ pro } \ E_1.$$

Snadno zjistíme, že tyto stavy rovnou diagonalizují poruchu neboť

$$\hat{V} = -t\left(\sigma_x^{(1)} + \sigma_x^{(2)}\right)\sigma_x^{(3)} = -\frac{4t}{\hbar^2}S_x s_x^{(3)},$$

což se při působení na výše zmíněné vektory dá nahradit součinem $-4tM\sigma_3$ (faktor 4 pochází od toho že operátor spinu je úměrný půlce Pauliho matice).
Závěr:

1. Hladina $E_0 = 3\epsilon$ není poruchou ovlivněna vůbec neboť $M = 0$.
2. Hladina $E_1 = -\epsilon$ se rozštěpí na tři: $-\epsilon$, $-\epsilon + 2t$ a $-\epsilon - 2t$, každá z nichž je dvakrát degenerovaná.
3. Z řešení je vidět, že nalezené vektory jsou přesnými stacionárními stavy bez ohledu na velikost poruchy. Vyšší řády poruchové teorie jsou tedy nulové.

Úloha 4(10 bodů)

Dva nerozlišitelné bosony s hmotností m a spinem 0 jsou v nekonečně hluboké potenciálové jámě délky L (tj. $V(x_i) = 0$ pro $x_i \in \langle 0, L\rangle$ a $V = \infty$ pro ostatní x_i=souřadnice částice $i = 1, 2$) a interagují spolu prostřednictvím kontaktní interakce $V(x_1, x_2) = -\lambda\delta(x_1 - x_2)$, kde $\lambda = 2\pi^2\hbar^2/(mL)$[1]. Pomocí variačního principu najděte odhad energie základního stavu. Testovací vlnovou funkci volte ve tvaru $\psi(x_1, x_2) = \phi(x_1)\phi(x_2)$, kde

$$\phi(x) = \sqrt{\frac{2}{L}}\left[\alpha \sin\frac{\pi x}{L} + \beta \sin\frac{2\pi x}{L}\right]$$

α, β jsou variační parametry (funkce bude normovaná pro $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$[2]). Napište zda je možné tento výsledek nějak použít i pro případ dvou nerozlišitelných fermionů se spinem 1/2.

Řešení: Nejdříve je dobré si uvědomit, že $\phi(x) = \alpha\phi_1(x)+\beta\phi_2(x)$, kde $\int|\phi_1(x)|^2dx = \int|\phi_2|^2dx = 1$ a $\int\phi_1(x)\phi_2(x)dx = 0$. Nyní spočteme střední hodnotu kinetické energie v testovacím stavu ψ

$$\begin{aligned}\langle\psi|\hat{K}|\psi\rangle &= -\frac{\hbar^2}{2m}\int_0^L \mathrm{d}x_1\int_0^L \mathrm{d}x_2\phi(x_1)^*\phi(x_2)^*\left[\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x_1^2}+\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x_2^2}\right]\phi(x_1)\phi(x_2)\\ &= -\frac{\hbar^2}{2m}\left\{\int\phi(x_1)^*\phi''(x_1)\mathrm{d}x_1\int|\phi(x_2)|^2\mathrm{d}x_2+\int|\phi(x_1)|^2\mathrm{d}x_1\int\phi(x_2)^*\phi''(x_2)\mathrm{d}x_2\right\}\\ &= -\frac{\hbar^2}{2m}2\int\phi(x)^*\phi''(x)\mathrm{d}x \quad = \quad \frac{1}{m}\left(\frac{\hbar\pi}{L}\right)^2\left\{|\alpha|^2+4|\beta|^2\right\}.\end{aligned}$$

Poslední uvedenou úpravu jsme udělali možná trochu rychle, ale uvědomte si, že jde prostě o vážený průměr kinetické energie pro dva její jednočásticové vlastní stavy ϕ_1 a ϕ_2.

Střední hodnota potenciální energie je

$$\begin{aligned}\langle\psi|\hat{V}|\psi\rangle &= -\lambda\int_0^L \mathrm{d}x_1\int_0^L \mathrm{d}x_2|\phi(x_1)|^2|\phi(x_2)|^2\delta(x_1-x_2) = -\lambda\int_0^L|\phi(x)|^4\mathrm{d}x\\ &= -\lambda\int_0^L\left\{|\alpha|^4\phi_1^4+4|\alpha|^3|\beta|\underline{\phi_1^3\phi_2}+6|\alpha|^2|\beta|^2\phi_1^2\phi_2^2+4|\alpha||\beta|^3\underline{\phi_1\phi_2^3}+|\beta|^4\phi_2^4\right\}\mathrm{d}x,\end{aligned}$$

kde jsme použili binomický rozvoj. Podtržené členy představují součin funkce, která je symetrická podle středu intervalu $\langle 0, L\rangle$ s funkcí antisymetrickou a jejich integrací dostaneme nulu. V ostatních členech provedeme substituci $y = \pi x/L$ a dosadíme funkce $\phi_1(x)$ a $\phi_2(x)$ (hodnoty integrálů byly v nápovědě)

$$\begin{aligned}\langle\psi|\hat{V}|\psi\rangle &= -\frac{4\lambda}{\pi L}\int_0^\pi\left\{|\alpha|^4\sin^4 y+6|\alpha|^2|\beta|^2\sin^2 y\sin^2 2y+|\beta|^4\sin^4 2y\right\}\mathrm{d}y,\\ &= -\frac{\lambda}{2L}\left\{3|\alpha|^4+3|\beta|^4+12|\alpha|^2|\beta|^2\right\}.\end{aligned}$$

Dosazením výrazu ze zadání pro λ a $|\alpha|^2 = 1 - |\beta|^2$ upravíme minimalizovanou funkci do tvaru

$$E[\psi] = \langle\hat{K}\rangle + \langle\hat{V}\rangle = \frac{1}{m}\left(\frac{\hbar\pi}{L}\right)^2\{6|\beta|^4 - 3|\beta|^2 - 2\}.$$

Tato funkce nabývá minima $E = -11\hbar^2\pi^2/(4mL^2)$ pro $|\beta|^2 = 1/4$.

Pokud bychom se bavili o fermionech se spinem 1/2 je tento výsledek platný pro singletní spinový stav, který je antisymetrický, takže prostorová funkce bude také symetrická vůči výměně částic, jako ve výpočtu výše. V tripletním stavu bude prostorová část vlnové funkce antisymetrická, takže $\psi(x, x) = 0$ a porucha se vůbec neuplatní. Energie nejnižšího tripletního stavu bude stejná jako pro neinteragující částice, tj. $E = \hbar^2\pi^2/(mL^2)$.

---

[1] V tomto výrazu byla v původním zadání chyba. Kdo se dostal az k dosazování této hodnoty dostal proto dva body navíc.

[2] Zásadně nedělejte poznámky pod čarou v matematických výrazech, vypadá to jako mocnina.

Úloha 5(10 bodů)
V Hubbardově modelu, je možné definovat kvadrát celkového spinu pomocí operátoru

$$\hat{S}^2 = \hbar^2 \sum_m \sum_n \hat{c}^\dagger_{m+} \hat{c}^\dagger_{n-} \hat{c}_{n+} \hat{c}_{m-} + \frac{\hbar^2}{2} \hat{N} + \frac{\hbar^2}{4} (\hat{N}_+ - \hat{N}_-)^2,$$

kde $\hat{c}^\dagger_{n\sigma}$ kreuje elektron se spinem σ do místa n, $\hat{N}_\sigma = \sum_n \hat{c}^\dagger_{n\sigma} \hat{c}_{n\sigma}$ je operátor počtu elektronů se spinem σ a $\hat{N} = \hat{N}_+ + \hat{N}_-$. Ukažte, že vektor

$$|\psi_0\rangle = (\hat{c}^\dagger_{1+} \hat{c}^\dagger_{2-} + \hat{c}^\dagger_{1-} \hat{c}^\dagger_{2+}) |0\rangle$$

je vlastním vektorem tohoto operátoru a najděte hodnotu celkového spinu s.

Řešení: Při řešení budeme používat kanonické komutační relace pro fermionové operátory

$$\{\hat{c}^\dagger_a, \hat{c}^\dagger_b\} = \{\hat{c}_a, \hat{c}_b\} = 0 \qquad \{\hat{c}_a, \hat{c}^\dagger_b\} = \delta_{ab},$$

které znamenají, že libovolné operátory s vyjjímkou $\hat{c}_a$, $\hat{c}^\dagger_a$ můžeme prohazovat, ale musíme změnit znaménko. Výpočet $\hat{S}^2 |\psi_0\rangle$ je poměrně jednoduchý, když si uvědomíme, že anihilační operátory v prvním členu musí korespondovat s kreačními operátory ve vlnové funkci. V opačném případě můžeme anihilační operátory prokomutovat až k vektoru vakua, s nímž dají nulu. Z prvního členu s dvojitou sumou tedy zbude jen

$$\begin{aligned} & \left(\hat{c}^\dagger_{2+} \hat{c}^\dagger_{1-} \hat{c}_{1+} \underline{\hat{c}_{2-} \hat{c}^\dagger_{1+}} \hat{c}^\dagger_{2-} + \hat{c}^\dagger_{1+} \hat{c}^\dagger_{2-} \underbrace{\hat{c}_{2+} \hat{c}_{1-} \hat{c}^\dagger_{1-}} \hat{c}^\dagger_{2+} \right) |0\rangle \\ = \quad & \left(-\hat{c}^\dagger_{2+} \hat{c}^\dagger_{1-} \boxed{\hat{c}_{1+} \hat{c}^\dagger_{1+}} \boxed{\hat{c}_{2-} \hat{c}^\dagger_{2-}} + \hat{c}^\dagger_{1+} \hat{c}^\dagger_{2-} \boxed{\hat{c}_{1-} \hat{c}^\dagger_{1-}} \boxed{\hat{c}_{2+} \hat{c}^\dagger_{2+}} \right) |0\rangle \end{aligned}$$

kde jsme s použitím antikomutačních relací prohodili podtržené operátory a v části výrazu podtrhnutém svorkou jsme prohodili první z operátorů na konec svorky. Ve vzniklém výrazu identifikujeme vždy dvojici operátorů (rámečky)

$$\boxed{\hat{c}_a \hat{c}^\dagger_a} = 1 - \hat{c}^\dagger_a \hat{c}_a = 1 - \hat{N}_a \to 1.$$

Tento operátor vždy působí na vakuum a můžeme jej tedy nahradit jedničkou. Dospějeme tedy k výrazu

$$\left\{ -\hat{c}^\dagger_{2+} \hat{c}^\dagger_{1-} + \hat{c}^\dagger_{1+} \hat{c}^\dagger_{2-} \right\} |0\rangle = |\psi_0\rangle,$$

přičemž jsme opět použili antikomutační relace $\{\hat{c}^\dagger_{2+}, \hat{c}^\dagger_{1-}\} = 0$ k prohození operátorů.

Ve zbylé části výrazu $\hat{S}^2 |\psi_0\rangle$ stačí prostě nahradit $\hat{N} = 2$ neboť operátor působí na stav se dvěma elektrony a podobně $\hat{N}_+ = \hat{N}_- = 1$. Celkově jsme dospěli k rovnosti

$$\hat{S}^2 |\psi_0\rangle = 2\hbar^2 |\psi_0\rangle,$$

což odpovídá vlastnímu číslu $\hbar^2 s(s+1)$ pro celkový spin $s = 1$.

Námět na rozmyšlení: Uměli byste odvodit zadaný tvar operátoru $\hat{S}^2$ v druhém kvantování?