Úvod

V tomto dokumentu naleznete zadání a vzorové řešení zápočtové písemky z přednášky "Kvantová mechanika II" za LS 2016/17. Úlohy byly zamýšleny 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, k vykompenzování 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 z maxima 50 bodů, což (spolu s domácími úlohami) stačí na odpuštění řešení dalších úloh při zkoušce. V tomto semestru jsem asi trochu podcenil obtížnost úloh, takže nadpoloviční počet bodů získalo pouze pět řešitelů z dvaceti a nejlepší bodové ohodnocení bylo 42 bodů. Proto jsem získané body přeškáloval faktorem 5/4, takže přes 25 bodů získalo nakonec deset z dvaceti řešitelů.

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

Úloha 1(10 bodů)
Mějme dvourozměrný kvantový lineární harmonický oscilátor s hamiltoniánem

$$\hat{H} = \tfrac{1}{2}\hbar\omega(\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{x}^2 + \hat{y}^2).$$

V prvním řádu poruchové teorie spočtěte jak se poruchou λxy rozštěpí druhá hladina.

Řešení:
Nejdříve musíme najít energie a vlnové funkce neporušeného hamiltoniánu. Uvědomíme si, že hamiltonián je součtem hamiltoniánu pro jednorozměrný lineární harmonický oscilátor v proměnné x a druhý indentický oscilátor ve směru y

$$\hat{H} = \hat{H}_x + \hat{H}_y = \hbar\omega[\hat{a}_x^\dagger \hat{a}_x + \tfrac{1}{2}] + \hbar\omega[\hat{a}_y^\dagger \hat{a}_y + \tfrac{1}{2}],$$

kde jsme zavedli kreační operátory $\hat{a}_x^\dagger$ a $\hat{a}_y^\dagger$ pro oba harmonické oscilátory. Spektrum tohoto hamiltoniánu potom je

$$E_{n_x,n_y} = \hbar\omega(n_x + n_y + 1)$$

a příslušné stacionární stavy označíme $|n_x n_y\rangle$. Nejnižší hladina je $E_{00} = \hbar\omega$. Druhá hladina $E = 2\hbar\omega$ je dvakrát degenerovaná s odpovídajícími stavy $|10\rangle$ a $|01\rangle$. Korekce energie v prvním řádu poruchové teorie dostaneme diagonalizací matice

$$\lambda \begin{pmatrix} \langle 10|xy|10\rangle & \langle 10|xy|01\rangle \\ \langle 01|xy|10\rangle & \langle 01|xy|01\rangle \end{pmatrix}.$$

Z minulého semestru známe vyjádření operátoru souřadnice $\hat{x} = \frac{x_0}{\sqrt{2}}(\hat{a}_x^\dagger + \hat{a}_x)$, kde $x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$. Podobné vyjádření můžeme napsat pro operátor $\hat{y} = \frac{x_0}{\sqrt{2}}(\hat{a}_y^\dagger + \hat{a}_y)$. Maticové elementy poruchy pak spočteme ze známého působení kreačních/anihilačních operátorů na vektory oscilátorové báze

$$\begin{aligned}
(\hat{a}_x^\dagger + \hat{a}_x)(\hat{a}_y^\dagger + \hat{a}_y)|01\rangle &= (\hat{a}_x^\dagger + \hat{a}_x)[\sqrt{2}|02\rangle + |00\rangle] = \sqrt{2}|12\rangle + |10\rangle, \\
(\hat{a}_x^\dagger + \hat{a}_x)(\hat{a}_y^\dagger + \hat{a}_y)|10\rangle &= (\hat{a}_x^\dagger + \hat{a}_x)|11\rangle = \sqrt{2}|21\rangle + |01\rangle,
\end{aligned}$$

Odtud již vidíme, že matice poruchy má tvar

$$\frac{\hbar\lambda}{2m\omega}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Její vlastní čísla $\pm\frac{\hbar\lambda}{2m\omega}$ pak udávají velikost rozštěpení druhé hladiny, které tudíž je $\frac{\hbar\lambda}{m\omega}$.

Další variantou řešení je provést výpočet v souřadnicové reprezentaci. Opět si uvědomíme, že problém se separuje v souřadnicích x a y. Vlnové funkce pro jednorozměrný oscilátor si najdeme v taháku, takže stavy pro dvakrát degenerovanou druhou hladinu mají vlnové funkce

$$\begin{aligned}
\psi_{10}(x,y) &= \phi_1(x)\phi_0(y) = \frac{2x}{x_0^2\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{x^2+y^2}{2x_0^2}}, \\
\psi_{01}(x,y) &= \phi_0(x)\phi_1(y) = \frac{2y}{x_0^2\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{x^2+y^2}{2x_0^2}}.
\end{aligned}$$

Maticové elementy se nyní vypočtou integrací. Ukažme si to napříkladě maticového elementu

$$\langle 10|xy|01\rangle = \frac{4}{2\pi x_0^4}\int \mathrm{d}x \int \mathrm{d}y\; x e^{-\frac{x^2+y^2}{2x_0^2}} (\lambda xy) y e^{-\frac{x^2+y^2}{2x_0^2}} = \frac{2\lambda x_0^2}{\pi}\int \frac{\mathrm{d}x}{x_0}\frac{x^2}{x_0^2} e^{-\frac{x^2}{x_0^2}} \int \frac{\mathrm{d}y}{x_0}\frac{y^2}{x_0^2} e^{-\frac{y^2}{x_0^2}} = \frac{2\lambda}{\pi}(x_0 I)^2,$$

kde integrál $I = \int q^2 e^{-q^2}\mathrm{d}q = \frac{\sqrt{\pi}}{2}$ vypočteme substitucí $z = q^2$ pomocí gama funkce, nebo elementárněji z Gaussova integrálu derivací podle parametru. Podobně vyjádříme maticové elementy $\langle 10|xy|10\rangle$ a $\langle 01|xy|01\rangle$, kde ovšem integrace dá na první pohled 0, protože integrujeme lichou funkci, přes celou reálnou osu. Výpočet dokončíme diagonalizací matice poruchy stejně jako v předchozím případě.

V někteří jste počítali první hladinu jako nultou a proto jste řešili rozštěpení až třetí hladiny. To jsem rovněž uznával, ale dotyční měli více počítání neboť hladina je třikrát degenerovaná.

Úloha 2(10 bodů)
Molekula s kvadrupólovým momentem v nehomogenním elektrickém poli je popsána jako 3D rotor s hamiltoniánem

$$\hat{H} = \tfrac{1}{2I}\hat{L}^2 + \gamma\cos^2\theta$$

na prostoru kvadraticky integrovatelných funkcí na jednotkové sféře. $\hat{L}^2$ je operátor kvadrátu orbitálního momentu hybnosti a θ a ϕ jsou sférické souřadnice. Najděte základní stav tohoto systému pomocí variačního principu. Předpokládejte, že vlnová funkce je lineární kombinací sférických harmonik $Y_{00}(\theta,\phi)$, $Y_{10}(\theta,\phi)$ a $Y_{20}(\theta,\phi)$.

K úloze jsem navíc dodal tabulku Clebsch-Gordanových koeficietů:

$\langle lm\|j_1m_1j_2m_2\rangle$	$l=0$	$l=1$	$l=2$	$l=3$
$\langle l0\|2010\rangle$	0	$-\sqrt{2/5}$	0	$\sqrt{3/5}$
$\langle l0\|2020\rangle$	$\sqrt{1/5}$	0	$-\sqrt{2/7}$	0

Řešení:
Hledáme koeficienty a, b, c tak, aby vlnová funkce $\psi(\theta,\phi) = aY_{00} + bY_{10} + cY_{20}$ minimalizovala funkcionál energie. šlo by hledat minimu přímo, ale jednodušší bude vzpomenout si, že podle Hyleraasova-Undheimova teorému je minimum funkcionálu na lineárním podprostoru dáno nejmenším vlastním číslem matice $H_{ll'} \equiv \int Y_{l0}^*\hat{H}Y_{l'0}\mathrm{d}\Omega$. Příspěvek od kinetické energie je diagonální $\hat{L}^2Y_{l0} = \hbar^2 l(l+1)Y_{l0}$. K nalezení matice kinetické energie nejdříve rozepíšeme $\cos^2\theta$ s použitím tabulky sférických harmonik v taháku

$$\cos^2\theta \equiv \frac{z^2}{r^2} = \frac{\sqrt{4\pi}}{3}\left(Y_{00} + \tfrac{2}{\sqrt{5}}Y_{20}\right).$$

První člen přispěje opět jen jako diagonální příspěvek $\sqrt{4\pi}Y_{00} = 1$ (ke všem diagonálním členům přidáme $\gamma/3$) a druhý spočítáme s využitím Gauntovy formule v taháku

$$\int Y_{l0}^*Y_{20}Y_{l'0}\mathrm{d}\Omega = \sqrt{\frac{5(2l'+1)}{4\pi(2l+1)}}\langle l0|20l'0\rangle^2 = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}\begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & \frac{2\sqrt{5}}{5} & 0 \\ 1 & 0 & \frac{2\sqrt{5}}{7} \end{pmatrix}$$

Za Clebsch-Gordanův koeficient dosadíme z tabulky. Dostaneme tedy matici hamiltoniánu:

$$\frac{\hbar^2}{2I}\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 6 \end{pmatrix} + \frac{\gamma}{3}\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + \frac{2\gamma}{3}\begin{pmatrix} 0 & 0 & \frac{1}{\sqrt{5}} \\ 0 & \frac{2}{5} & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{5}} & 0 & \frac{2}{7} \end{pmatrix}$$

To že jsme dosadili správně si můžeme ověřit také tím, že matice by měla být symetrická. Energie základního stavu bude podle Hyleraasovy-Undheimovy věty nejmeší vlastní číslo této matice. Všimneme si, že matice se rozpadá na dva bloky. Liché a sudé prvky nejsou navzájem svázány. Pro lichou paritu $l = 1$ je variačním odhadem prostě prvek uprostřed matice $E_1 = \frac{\hbar^2}{I} + \frac{\gamma}{3} + \frac{4\gamma}{15} = \frac{\hbar^2}{I} + \frac{3\gamma}{5}$ (a příslušný odhad vlastní funkce je prostě Y_{10}). Pro nalezení základního stavu musíme diagonalizovat zbytek matice

$$\begin{pmatrix} \frac{\gamma}{3} & \frac{2\gamma}{3\sqrt{5}} \\ \frac{2\gamma}{3\sqrt{5}} & \frac{3\hbar^2}{I} + \frac{11\gamma}{21} \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} A & C \\ C & B \end{pmatrix}.$$

Vlastní čísla matice 2×2 snadno najdeme řešením kvadratického charakteristického polynomu:

$$E_{0/2} = \tfrac{1}{2}\left(A + B \pm \sqrt{(A-B)^2 + 4C^2}\right) = \tfrac{1}{2}\left(3\frac{\hbar^2}{I} + \gamma\frac{6}{7} \pm \sqrt{\left(3\frac{\hbar^2}{I} - \gamma\frac{4}{21}\right)^2 + 4\gamma^2\frac{4}{45}}\right),$$

Kde energie základního stavu je dána znaménkem $-$.

Alternativní řešení: Někteří z vás (nejdále to dotáhl kolega Lukeš) si uvědomili, že nepotřebují Gauntovu větu, protože všechny potřebné integrály se snadno spočtou jako integrály z polynomů funkce $\cos\theta$. Také nikdo z Vás nepoužil Hyleraasovy-Undheimovy věty, takže jste nakonec museli minimalizovat funkci tří proměnných, což nikdo nestihl. Nebudu podrobně rozpracovávat tuto alternativu, ale vypíšu jen rovnice pro klíčové body:

$$\begin{aligned}\psi &= AY_{00} + BY_{10} + CY_{20} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}A + \sqrt{\frac{3}{4\pi}}B\cos\theta + \sqrt{\frac{5}{16\pi}}C(3\cos^2\theta - 1) = \\ &= \frac{1}{\sqrt{4\pi}}\left[\underbrace{(A - \tfrac{1}{2}\sqrt{5}C)}_{a} + \underbrace{\sqrt{3}B)}_{b}\cos\theta + \underbrace{\tfrac{3}{2}\sqrt{5}C}_{c}\cos^2\theta\right] = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}(a + b\cos\theta + c\cos^2\theta).\end{aligned}$$

Normování

$$\|\psi\|^2 = A^2 + B^2 + C^2 = \left(a + \frac{c}{3}\right)^2 + \frac{b^2}{3} + \frac{c^2}{5}\frac{4}{9} = a^2 + \frac{1}{3}b^2 + \frac{1}{5}c^2 + \frac{2}{3}ac.$$

Kinetická energie

$$\langle\hat{T}\rangle = A^2 \cdot 0 + B^2 \cdot \frac{\hbar^2}{2I} \cdot 1 \cdot 2 + C^2 \cdot \frac{\hbar^2}{2I} \cdot 2 \cdot 3 = \frac{\hbar^2}{2I}\left(b^2 + \tfrac{4}{5}c^2\right).$$

Potenciální energie

$$\begin{aligned}\langle\hat{V}\rangle &= \langle\psi|\gamma\cos^2\theta|\psi\rangle \\ &= \frac{1}{4\pi}\gamma\int_0^{2\pi} \mathrm{d}\varphi \int_0^{pi} \sin\theta \mathrm{d}\theta (a + b\cos\theta + c\cos^2\theta)\cos^2\theta(a + b\cos\theta + c\cos^2\theta) \\ &= \frac{\gamma}{2}\int_{-1}^{1} \mathrm{d}z(a + bz + cz^2)z^2(a + bz + cz^2) \qquad \text{(jen sudé mocniny přežijí)} \\ &= \gamma\int_0^1 \mathrm{d}z(a^2z^2 + b^2z^4 + c^2z^6 + 2acz^4) = \gamma\left[\frac{a^2}{3} + \frac{b^2}{5} + \frac{c^2}{7} + \frac{2}{5}ac\right].\end{aligned}$$

Nyní je potřeba minimalizovat výraz $\langle\hat{T}\rangle + \langle\hat{V}\rangle$, za podmínky $\|\psi\|^2 = 1$. To se dá udělat metodou Lagrangeových multiplikátorů, ale myslím, že rychlejší je dosadit zpět za a, b, c vyjádření pomocí A, B, C, protože pak má norma vlnové funkce jednodušší vyjádření $A^2 + B^2 + C^2$. Minimalizace příslušné kvadratické formy

$$\langle\hat{T}\rangle + \langle\hat{V}\rangle = \frac{\hbar^2}{I}(B^2 + 3C^2) + \gamma\left[\frac{1}{3}A^2 + \frac{3}{5}B^2 + \frac{11}{21}C^2 + \frac{4}{3\sqrt{5}}AC\right]$$

je opět hledáním nejmenšího vlastního čísla matice této kvadratické formy—dostaneme stejnou matici jako při předcházejícím postupu.

Úloha 3(10 bodů)
Uvažujme Hilbertův prostor lineárního harmonického oscilátoru se standardně definovanými posunovacími operátory $\hat{a}$ a $\hat{a}^\dagger$. Najděte operátor

$$\hat{A} = e^{\alpha(\hat{a}-\hat{a}^\dagger)}\hat{a}e^{\alpha(\hat{a}^\dagger-\hat{a})},$$

kde α je reálná konstanta a zdůvodněte výsledek pomocí operace traslace na hilbertově prostoru.

Řešení:
Jak si někteří povšimli, úloha není příliš jednoznačně zadána. Výzvou "*najděte operátor*" máme na mysli požadavek na zjednodušení výrazu na pravé straně. Nápovědou je otázka na konci. Pokud si vzpomenete na přednášku ihned si uvědomíte, že operátor na pravé straně má tvar transformace operátoru do nového souřadného systému. Navíc je v otázce zmíněna translace a skutečně argument exponenciály se dá pomocí definice $\hat{a}$ přepsat pomocí operátoru hybnosti

$$\hat{a} - \hat{a}^\dagger = i\sqrt{2}\frac{x_0}{\hbar}\hat{p}.$$

Operátor translace o vzdálenost Δx v Hilbertově prostoru má tvar $\hat{T}_{\Delta x} = e^{-\frac{i}{\hbar}\Delta x\,\hat{p}}$. Srovnáním s argumenty exponenciál v operátoru $\hat{A}$ zjistíme, že exponenciály představují traslaci o $\Delta x = \alpha x_0\sqrt{2}$. Posunutí nemění hybnosti $\hat{T}_{\Delta x}\,\hat{p}\,\hat{T}^\dagger_{\Delta x} = \hat{p}$ a posouvá souřadnice $\hat{T}_{\Delta x}\,\hat{x}\,\hat{T}^\dagger_{\Delta x} = \hat{x} + \Delta x$ a tedy

$$\hat{A} = \hat{T}_{\Delta x}\hat{a}\hat{T}^\dagger_{\Delta x} = \hat{T}_{\Delta x}\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{\hat{x}}{x_0} + i\frac{\hat{p}}{p_0}\right)\hat{T}^\dagger_{\Delta x} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{\hat{x}}{x_0} + \frac{\Delta x}{x_0}\hat{I} + i\frac{\hat{p}}{p_0}\right) = \hat{a} + \alpha$$

Další variantou řešení je si všimnout, že první exponenciála je inverzí druhé. Když se nám ji tedy podaří prohodit s operátorem $\hat{a}$ exponenciály se navzájem vyruší. K tomu spočteme nejdříve komutátor

$$[\hat{a} - \hat{a}^\dagger, \hat{a}] = -[\hat{a}^\dagger, \hat{a}] = [\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = \hat{I}.$$

Operátory $\hat{X} = \hat{a} - \hat{a}^\dagger$ a $\hat{Y} = \hat{a}$ tedy splňují podmínky (komutují se svým komutátorem) věty, kterou známe z minulého semestru a podle níž je

$$[f(\hat{X}), \hat{Y}] = f'(\hat{X})[\hat{X}, \hat{Y}],$$

neboli

$$[e^{\alpha(\hat{a}-\hat{a}^\dagger)}, \hat{a}] = \alpha e^{\alpha(\hat{a}-\hat{a}^\dagger)}.$$

S použitím tohoto komutátoru již máme

$$\begin{aligned}\hat{A} &= \{e^{\alpha(\hat{a}-\hat{a}^\dagger)}\hat{a}\}e^{\alpha(\hat{a}^\dagger-\hat{a})} = \{\hat{a}e^{\alpha(\hat{a}-\hat{a}^\dagger)} + [e^{\alpha(\hat{a}-\hat{a}^\dagger)}, \hat{a}]\}e^{\alpha(\hat{a}^\dagger-\hat{a})}\\ &= \hat{a} + \alpha e^{\alpha(\hat{a}-\hat{a}^\dagger)}e^{\alpha(\hat{a}^\dagger-\hat{a})} = \hat{a} + \alpha.\end{aligned}$$

Čímž jsme nalezli požadovaný trasformovaný tvar operátoru $\hat{A}$.

Další alternativní postup vychází z Bakerova-Campbellova-Hausdorffova (BCH) vzorce

$$e^{\alpha\hat{X}}\hat{Y}e^{-\alpha\hat{X}} = \exp\{\alpha[\hat{X}, \cdot\,]\}\hat{Y} \equiv \hat{Y} + \alpha[\hat{X}, \hat{Y}] + \frac{1}{2!}(\alpha)^2[\hat{X}, [\hat{X}, \hat{Y}]] + \ldots$$

pro $\hat{X} = \hat{a} - \hat{a}^\dagger$ a $\hat{Y} = \hat{a}$. Potřebný komutátor jsme spočetli výše $[\hat{a} - \hat{a}^\dagger, \hat{a}] = \hat{I}$ a ostatní komutátory jsou tedy rovny 0, takže rovnou vidíme, $\hat{A} = \hat{Y} + \alpha[\hat{X}, \hat{Y}] = \hat{a} + \alpha\hat{I}$.

Úloha 4(10 bodů)
Systém dvou (rozlišitelných) částic se spinem 1 je popsán hamiltoniánem

$$\hat{H} = B(S_z^{(1)} + S_z^{(2)}) + \frac{A}{\hbar}\vec{S}^{(1)} \cdot \vec{S}^{(2)},$$

kde $\vec{S}^{(i)}$ a $S_z^{(i)}$ je operátor spinového momentu hybnosti částice i a jeho z-tová složka. Systém připravíme v čase $t = 0$ ve stavu $|00\rangle$, kde obě částice mají nulovou z-složku spinu. Jaká je pravděpodobnost, že v čáse $t > 0$ nalezneme u první částice projekci spinu $S_z^{(1)} = \hbar$?

Řešení:
Klíčovým bodem řešení je uvědomit si, že hamiltonián se diagonalizuje v bázi $\underline{|SM\rangle}$ vlastních funkcí celkového spinového momentu hybnosti, nebo přesněji v bázi společných vlastních funkcí kvadrátu a z-tové složky celkového spinu (kaplovaná báze) $\vec{S} = \vec{S}^{(1)} + \vec{S}^{(2)}$. Všiměte si, že bázový vektor $\underline{|SM\rangle}$ jsme podtrhli, abychom jej odlišili od stavů zapsaných v separované bázi $|m_1 m_2\rangle$ vlastních stavů $\hat{S}_z^{(1)}$ a $\hat{S}_z^{(2)}$. Pro výpočet časové závislosti stavového vektoru budeme potřebovat vlastní hodnoty hamiltoniánu

$$E_{SM} \equiv \langle SM|\hat{H}|SM\rangle = B\hbar M + A\hbar\tfrac{1}{2}[S(S+1) - 4],$$

kde jsme využili vzorce pro skalární součin dvou vektorů $2\,\vec{S}^{(1)} \cdot \vec{S}^{(2)} = \vec{S}^{\,2} - \vec{S}^{(1)^2} - \vec{S}^{(2)^2}$ (cosinové věty). Vektory kaplované báze nalezneme snadno pomocí posunovácích operátorů, nebo tabulky Clebsch-Gordanových koeficientů, jak jsme se učili na přednášce (ukazujeme jen část báze, která nám stačí pro řešení úlohy):

$$\begin{array}{lll}
\underline{|22\rangle} = |11\rangle, & & \\
\underline{|21\rangle} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|10\rangle + |01\rangle), & \underline{|11\rangle} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|10\rangle - |01\rangle), & \\
\underline{|20\rangle} = \frac{1}{\sqrt{6}}(|1\,\text{-}1\rangle + 2|00\rangle + |\text{-}11\rangle), & \underline{|10\rangle} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1\,\text{-}1\rangle - |\text{-}11\rangle), & \underline{|00\rangle} = \frac{1}{\sqrt{3}}(|1\,\text{-}1\rangle - |00\rangle + |\text{-}11\rangle).
\end{array}$$

Ihned vídíme, že lineární kombinací vektoru $\underline{|20\rangle}$ a $\underline{|00\rangle}$ s vhodnými koeficienty můžeme vyjádřit počáteční stav $|00\rangle$, neboli po podrobnější úvaze

$$|00\rangle = \sqrt{\tfrac{2}{3}}\,\underline{|20\rangle} - \sqrt{\tfrac{1}{3}}\,\underline{|00\rangle}.$$

Časový vývoj stacionárních stavů $\underline{|SM\rangle}$ je dán prostě fázovým faktorem $\exp(-\frac{i}{\hbar}E_{SM}t)$, přičemž $E_{00} = -2A\hbar$ a $E_{20} = A\hbar$ (viz vzorec výše) neboli amplituda pravděpodobnosti pro měření, na které se ptá úloha je

$$\langle 1\,\text{-}1|\psi(t)\rangle \equiv \langle 1\,\text{-}1|e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}|00\rangle = \sqrt{\tfrac{2}{3}}\,\langle 1\,\text{-}1\underline{|20\rangle}e^{-iAt} - \sqrt{\tfrac{1}{3}}\,\langle 1\,\text{-}1\underline{|00\rangle}e^{2iAt}.$$

Všiměte si, že projekce na vektory $\langle m_1 m_2| = \langle 10|$ a $\langle 11|$, které by rovněž přispívali k amplitudě měření $S_z^{(1)} = \hbar$, jsou nulové (platí $M = m_1 + m_2$). Z rozpisu kaplované báze výše vyčteme $\langle 1\,\text{-}1\underline{|20\rangle} = \frac{1}{\sqrt{6}}$ a $\langle 1\,\text{-}1\underline{|00\rangle} = \frac{1}{\sqrt{3}}$. Výslednou pravděpodobnost pak najdeme jako kvadrát absolutní hodnoty amplitudy, neboli

$$p = \left|\tfrac{1}{3}e^{-iAt} - \tfrac{1}{3}e^{2iAt}\right|^2 = \frac{2}{9}(1 - \cos 3At) = \frac{4}{9}\left(\sin\tfrac{3}{2}At\right)^2$$

(uvádím dva ekvivalentní tvary výsledku, které se objevovaly ve vašich řešeních).

Úloha 5(10 bodů)
Uvažujte kvantovou trojtečku. Hilbertův prostor stavů pro jednu částici v trojtečce tedy obsahuje tři vektory $|0\rangle$, $|1\rangle$, $|2\rangle$ a jejich lineární kombinace. Nechť hamiltonián částice v trojtečce je

$$\hat{h}_0 = -t \sum_n \left(|n\rangle\langle n{+}1| + |n{+}1\rangle\langle n| \right),$$

kde suma probíhá přes všechny stavy v trojtečce a ztotožňujeme $|3\rangle \equiv |0\rangle$. Nyní budeme do tečky přidávat další částice, bosony, nerozlišitelné od první částice. Hamiltonián bude dán prostou sumou $\hat{H}_0 = \sum_i \hat{h}_0^{(i)}$, kde $\hat{h}_0^{(i)}$ je kopie $\hat{h}_0$ působící na i-tou částici. Dále předpokládejme, že první dvě částice interagují prostřednictvím interakčního členu v hamiltoniánu (energie vzroste o U pokud se obě částice nacházejí ve stejné tečce)

$$\hat{V}^{(12)} = U \sum_n |nn\rangle\langle nn|,$$

kde $|mn\rangle$ je stav s první částicí v tečce m a druhou částicí v tečce n a U je konstanta. V případě více částic bude interakce $\hat{V}$ standardně dána stejným členem vysčítaným přes všechny dvojice částic.

- Najděte výraz pro $\hat{H}_0 + \hat{V}$ ve formalizmu 2. kvantování.
- Najděte stacionární stavy a příslušné energie v případě, že trojtečka obsahuje jedinou částici.
- Najděte stacionární stavy a příslušné energie v případě, že trojtečka obsahuje dvě částice.

Řešení:
Odpověď na **první část** najdeme přípočarou aplikací teorie z přednášky. Operátor $\hat{H}_0$ je jednočásticový operátor a jeho zápis ve druhém kvantování najdeme ze znalosti maticových elementů $\langle m|\hat{h}_0|n\rangle = -t(\delta_{m,n+1} + \delta_{m,n-1})$ čili

$$\hat{H}_0 = \sum_{m,n} \langle m|\hat{h}_0|n\rangle \hat{a}_m^\dagger \hat{a}_n = -t \sum_n (\hat{a}_{n+1}^\dagger + \hat{a}_{n-1}^\dagger)\hat{a}_n.$$

Podobně pro dvojčásticový operátor $\langle mn|\hat{V}^{(12)}|m'n'\rangle = U\delta_{m,n}\delta_{m',m}\delta_{n',n}$ dostaneme

$$\hat{V} = \tfrac{1}{2} \sum_{mn,m'n'} \langle mn|\hat{V}^{(12)}|m'n'\rangle\, \hat{a}_m^\dagger \hat{a}_n^\dagger \hat{a}_{n'} \hat{a}_{m'} = \tfrac{1}{2} U \sum_n \hat{a}_n^\dagger \hat{a}_n^\dagger \hat{a}_n \hat{a}_n = \tfrac{1}{2} U \sum_n \hat{N}_n(\hat{N}_n - 1).$$

Poslední úpravu jsme provedli s použitím komutační relace $[\hat{a}_n, \hat{a}_n^\dagger] = 1$, pomocí níž se dají prohodit vnitřní dva operátory $\hat{a}_n^\dagger, \hat{a}_n = \hat{a}_n, \hat{a}_n^\dagger - 1$ a výsledný tvar obsahující operátor $\hat{N}_n$ počtu částic ve stavu $|n\rangle$ se nám bude hodit v poslední části úlohy.

Řešení **druhé otázky** kopíruje domácí úkol číslo 5. Jde sice o bosony, ale na jednočásticové stavy to nemá vliv. Současně si uvědomíme, že nemusíme uvažovat interakci V, která je nulová na jednočásticovém prostoru (při působení na jednočásticové stavy dosazujeme za $N_n = 0$ nebo $N_n = 1$ ve výrazu pro $\hat{V}$). Jednočásticové stacionární stavy uvažujeme ve tvaru

$$|\psi_k\rangle = \sum_n e^{ikn} \hat{a}_n^\dagger |0\rangle,$$

a energii najdeme přímo působením hamiltoniánu

$$\begin{aligned}
\hat{H}|\psi_k\rangle &= -t \sum_{m,n} (\hat{a}_{n+1}^\dagger + \hat{a}_{n-1}^\dagger) \underbrace{\hat{a}_n \hat{a}_m^\dagger}_{\hat{a}_m^\dagger \hat{a}_n + \delta_{m,n}} e^{ikm}|0\rangle = -t \sum_n (\hat{a}_{n+1}^\dagger + \hat{a}_{n-1}^\dagger) e^{ikn}|0\rangle \\
&= -t(e^{ik} + e^{-ik}) \sum_l \hat{a}_l^\dagger e^{ikl}|0\rangle = \epsilon_k |\psi_k\rangle.
\end{aligned}$$

Při úpravě jsme opět použili kanonické komutační relace pro bosonové operátory, dále toho že $\hat{a}_n|0\rangle = 0$ a nakonec jsme v sumě přeznačili sumační index a to v prvním členu na $n + 1 = l$ a v druhém členu

$n-1=l$. Poslední zmíněná úprava využívá cyklické okrajové podmínky $\exp(3ik)=1$ a tato podmínka je kvanovací podmínkou pro energie

$$\epsilon_k = -t(e^{ik}+e^{-ik}) = -2t\cos k, \qquad \text{kde } k=0 \text{ nebo } \pm\tfrac{2\pi}{3}.$$

Máme tedy jen dvě jednočásticové hladiny $\epsilon_0=-2t$ a $\epsilon_\pm = t$ (protože $\cos 2\pi/3 = -1/2$). Příslušné stacionární stavy jsou

$$|\psi_k\rangle \equiv \hat{b}_k^\dagger|0\rangle = \tfrac{1}{\sqrt{3}}\sum_n e^{ikn}\hat{a}_n^\dagger|0\rangle = \tfrac{1}{\sqrt{3}}\sum_n e^{ikn}|n\rangle.$$

Pro **řešení poslední části** je potřeba si vzpomenout (z domácí úlohy č. 5), že část $\hat{H}_0$ má za vlastní stavy funkce $|k_1k_2\rangle \equiv \hat{b}_{k_1}^\dagger\hat{b}_{k_2}^\dagger|0\rangle$ a příslušné vlastní energie jsou $\epsilon_{k_1}+\epsilon_{k_2}$. To je důsledkem toho, že $\hat{H}_0$ je součtem operátorů pro jednotlivé částice a vlnová funkce se tedy separuje (v domácí úloze jsme se to navíc naučili formulovat jako komutační relaci $[\hat{H}_0,\hat{b}_k^\dagger]=\epsilon_k\hat{b}_k^\dagger$). Celkově dvoučásticová část Fockova prostoru pro bosony v trojtečce sestává z šesti stavů

$$\tfrac{1}{\sqrt{2}}\hat{b}_0^\dagger\hat{b}_0^\dagger|0\rangle, \qquad \hat{b}_+^\dagger\hat{b}_-^\dagger|0\rangle, \qquad \tfrac{1}{\sqrt{2}}\hat{b}_+^\dagger\hat{b}_+^\dagger|0\rangle, \qquad \hat{b}_0^\dagger\hat{b}_-^\dagger|0\rangle, \qquad \tfrac{1}{\sqrt{2}}\hat{b}_-^\dagger\hat{b}_-^\dagger|0\rangle, \qquad \hat{b}_0^\dagger\hat{b}_+^\dagger|0\rangle,$$

kde jsme navíc přidali správnou normalizační konstantu, kterou známe z formalizmu 2. kvantování. Jak už jsme psali matice $\hat{H}_0$ v této bázi je diagonální. Zbývá spočíst maticové vyjádření operátoru $\hat{V}$

$$\langle k_1k_2|\hat{V}|k_1',k_2'\rangle = \tfrac{1}{2}U\sum_m \tfrac{1}{3}\sum_{n_1,n_2}\tfrac{1}{3}\sum_{n_1',n_2'}\langle 0|\hat{a}_{n_1}\hat{a}_{n_2}\hat{N}_m(\hat{N}_m-1)\hat{a}_{n_1'}^\dagger\hat{a}_{n_2'}^\dagger|0\rangle e^{i(k_1'n_1'+k_2'n_2'-k_1n_1-k_2n_2)}.$$

Nyní si uvědomíme, že operátor $\hat{N}_m(\hat{N}_m-1)$ působí doprava nenulově jen pokud je stav $|m\rangle$ dvakrát obsazený, tj. $m=n_1'=n_2'$ a podobně nenulové působení vlevo dostaneme jen pro $m=n_1=n_2$. V pětinásobné sumě tedy přežijí jen totálně diagonální členy

$$\langle k_1k_2|\hat{V}|k_1',k_2'\rangle = \tfrac{1}{18}U\sum_m\langle 0|\hat{a}_m\hat{a}_m\hat{N}_m(\hat{N}_m-1)\hat{a}_m^\dagger\hat{a}_m^\dagger|0\rangle e^{im(k_1'+k_2'-k_1-k_2)}.$$

V posledním výrazu můžeme operátor $\hat{N}_m(\hat{N}_m-1)$ nahradit jeho vlastní hodnotou 2 a zbylý maticový element vypočteme ihned $\langle 0|\hat{a}_m^2\hat{a}_m^{\dagger 2}|0\rangle = 2$. Nakonec tedy dostáváme

$$\langle k_1k_2|\hat{V}|k_1',k_2'\rangle = \tfrac{1}{18}U\sum_m 4e^{im(k_1'+k_2'-k_1-k_2)} = \tfrac{2}{3}U\delta_{k_1'+k_2',k_1+k_2},$$

kde jsme využili toho, že suma exponenciál je nenulová jen pokud vyjde její argument nulový, a v tom případě dá faktor 3 (kronekerovo delta ve výsledku je důsledkem symetrie systému - jakási analogie zákona zachování hybnosti pro náš případ). Součet k v kronekerově delta navíc musíme interpretovat jako rovnost modulo 2π. V bázi vypsané výše má tedy hamiltonián $\hat{H}_0+\hat{V}$ vyjádření (chybějící prvky jsou 0)

$$\begin{pmatrix}
-4t+\frac{1}{3}U & \frac{\sqrt{2}}{3}U & & & & \\
\frac{\sqrt{2}}{3}U & 2t+\frac{2}{3}U & & & & \\
& & 2t+\frac{1}{3}U & \frac{\sqrt{2}}{3}U & & \\
& & \frac{\sqrt{2}}{3}U & -t+\frac{2}{3}U & & \\
& & & & 2t+\frac{1}{3}U & \frac{\sqrt{2}}{3}U \\
& & & & \frac{\sqrt{2}}{3}U & -t+\frac{2}{3}U
\end{pmatrix}$$

a příslušné energie jsou vlastní čísla této matice (stačí diagonalizovat bloky 2×2 podle vzorce, který jsme napsali v řešení úlohy 2)

$$\begin{aligned}
E &= \frac{1}{2}\left[-2t+U\pm\sqrt{\left(6t+\frac{1}{3}U\right)^2+\frac{8}{9}U^2}\right], \\
&= \frac{1}{2}\left[t+U\pm\sqrt{\left(3t-\frac{1}{3}U\right)^2+\frac{8}{9}U^2}\right], \qquad 2\times \text{ degenerované.}
\end{aligned}$$