Zápočtová písemka - LS 2013.

Posluchači měli k dispozici tahák vzorců (sférické harmoniky, Coulombické funkce, ...)
Na řešení úloh bylo 90minut. Nejlepší výsledek 32 bodů.

Úloha 1: (10b)
Částice o hmotnosti m se nachází v potenciálové jámě $V(x) = \alpha|x|$, kde $\alpha > 0$ je konstanta a x je operátor polohy částice (v jedné dimenzi). Pomocí WKB přiblížení najděte rozdíl energií prvních dvou hladin.

Řešení:
Energie stacionárních stavů ve WKB aproximaci jsou dány kvantovací podmínkou

$$S(E_n) \equiv \oint p(x)\mathrm{d}x = 2\int_{-a}^{a} \sqrt{2m(E - V(x))}\,\mathrm{d}x = 2\pi\hbar(n + \tfrac{1}{2}).$$

Kde $x = \pm a = \pm E/\alpha$ jsou klasické body obratu (určené podmínkou $E = V(x)$) a integrál akce spočteme jako

$$S(E) = 4\sqrt{2m\alpha}\int_{0}^{a} \sqrt{a - x}\,\mathrm{d}x = 4\sqrt{2m\alpha}\tfrac{2}{3}a^{3/2},$$

kde jsme využili toho, že potenciál je sudá funkce (tj. integrál lze počítat jako dvojnásobek integrálu přes poloviční interval) a dále jsme přepsali energii pomocí bodu obratu $E = \alpha a$. Když do výsledku dosadíme zpět $a = E/\alpha$ a použijeme kvantovací podmínku dostaneme implicitní vztah pro energie

$$4\sqrt{2m\alpha}\tfrac{2}{3}(E_n/\alpha)^{3/2} = 2\pi\hbar(n + \tfrac{1}{2})$$

a odtud najdeme hledaný rozdíl energií

$$E_1 - E_0 = \sqrt[3]{\frac{(3\alpha\pi\hbar)^2}{32m}}\left[\left(\frac{3}{2}\right)^{2/3} - \left(\frac{1}{2}\right)^{2/3}\right] = \sqrt[3]{\frac{(3\alpha\pi\hbar)^2}{128m}}\left[\sqrt[3]{9} - 1\right]$$

Úloha 2: (10b)
Systém dvou částic (rozlišitelných) se spinem 1/2 je popsán hamiltoniánem

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

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 $|+-\rangle$, kde první částice je ve stavu se z-tovou složkou momentu hybnosti $+\hbar/2$ a druhá částice $-\hbar/2$. Jaká je pravděpodobnost, že v čase t naměříme u druhé částice z-složku spinu $+\hbar/2$?

Řešení:
Počáteční stav v čase $t=0$ lze napsat jako lineární kombinaci vlastních vektorů $|jm\rangle$ kvadrátu celkového spinu $\vec{S}^{(1)}+\vec{S}^{(2)}$ a jeho z-tové složky pro $m=0$ a $j=0,1$

$$|+-\rangle = \frac{1}{2}(|+-\rangle + |-+\rangle) + \frac{1}{2}(|+-\rangle - |-+\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}}(|10\rangle + |00\rangle).$$

Stavy $|jm\rangle$ jsou vlastními stavy hamiltoniánu (vzpomeňte jak jsme na přednášce vyjadřovali skalární součin dvou vektorů momentu hybnosti) odpovídající energii

$$E_{jm} = B\hbar m + A\hbar\frac{1}{2}\left[j(j+1) - \frac{3}{2}\right],$$

což pro stavy $|00\rangle$ a $|10\rangle$ dá hodnoty $-3A\hbar/4$ a $A\hbar/4$. Časový vývoj zadaného stavu tedy je

$$|\psi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(e^{-iE_{10}t/\hbar}|10\rangle + e^{-iE_{00}t/\hbar}|00\rangle\right) = \frac{1}{2}e^{3iAt/4}\left[(|+-\rangle + |-+\rangle)e^{-iAt} + |+-\rangle - |-+\rangle\right]$$

Pravděpodobnost nalezení druhé částice ve stavu $\hbar/2$ pak dostaneme projekcí na stav $|-+\rangle$

$$p_{-+}(t) = |\langle + - |\psi(t)\rangle|^2 = \left|\frac{1}{2}(e^{-iAt} - 1)\right|^2 = (\sin At/2)^2 = \frac{1}{2}(1 - \cos At)$$

Úloha 3: (20b)
Atom vodíku je vložen do potenciálového pole $V(\vec{r}) = \alpha(x^2 - y^2)$. V prvním řádu poruchové teorie spočtěte, jak se posunou/rozštěpí první dvě hladiny.
Nápověda: Atom vodíku uvažujte jako bezstrukturní částici v Coulombickém poli (žádné korekce jemné struktury atd.). Nejdříve diskutujte pomocí věty Wignera-Eckarta, které maticové elementy potřebné pro výpočet jsou nenulové (10b) a potom je přímo vypočtěte (5b) a najděte požadované korekce energie (5b).

Řešení:
Stacionární stavy atomu vodíku jsou popsány kvantovými čísly n, l, m, přičemž energie závisí jen na n. Oprava energie základního stavu se v prvním řádu poruchové teorie spočte jako

$$\Delta E = \langle 100|\alpha(x^2 - y^2)|100\rangle,$$

kde jsme využili toho, že energie základního stavu pro $n = 1$ je nedegenerovaná a jediný základní stav má kvantová čísla $l = m = 0$. Abychom nyní mohli uplatnit Wignerovu-Eckartovu větu, musíme vyjádřit operátor $x^2 - y^2$ jako lineární kombinaci komponent ireducibilního tenzorového operátoru. Je to polynom druhého řádu v souřadnicích, a musí tedy jít vyjádřit jako funkce sférických harmonik, o nichž víme, že jsou komponentami ireducibilních tenzorových operátorů. Pohledem na tabulku sférických harmonik vidíme, že

$$x^2 - y^2 \sim Y_{22} + Y_{2-2}, \qquad \text{t. j.} \qquad x^2 - y^2 = T^{(2)}_2 + T^{(2)}_{-2}.$$

Maticový element výše je tedy úměrný součtu Clebsch-Gordanových koeficientů

$$\langle 2, 0, 2, 0|0, 0\rangle + \langle 2, 0, \text{-}2{,}0|0, 0\rangle.$$

Oba tyto koeficienty jsou nulové protože nesplňují ani trojúhelníkovou nerovnost, ani zákon zachování z-tové složky momentu hybnosti při skládání momentu hybnosti. Platí tedy $\Delta E_1 = 0$.

Podobně budeme dikutovat rozštěpení první excitované hladiny. V prvním řádu poruchové teorie je toto rozštěpení dáno vlastními čísly matice

$$\Delta E_{lm,l'm} = \langle 2lm|\alpha(x^2 - y^2)|2l'm'\rangle = \langle 2lm|(T^{(2)}_2 + T^{(2)}_{-2})|2l'm'\rangle,$$

kde pro $n = 2$ mohou čísla l a l' nabývat pouze hodnot 0, 1. Opět použijeme Wignerovu-Eckartovu větu, abychom konstatovali, že tyto maticové elementy jsou úměrné součtu koeficientů (ke stejnému závěru dospějete použitím Gauntovy formule)

$$\langle 2, l', 2, m'|l, m\rangle + \langle 2, l', \text{-}2{,}m'|l, m\rangle.$$

Maticový element $\Delta E_{lm,l'm}$ bude nenulový jen pokud je splněna podmínka $2 + m' = m$ nebo $-2 + m' = m$. To je splněno jen pro dva maticové elementy: $\Delta E_{11,1-1} = A$ a $\Delta E_{1-1,11} = A^*$, které jsme označili A a A^*. Rozštěpení prvního excitovaného stavu je tedy dáno diagonalizací matice

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & A \\ 0 & 0 & A^* & 0 \end{pmatrix},$$

jejíž řádky a sloupce jsme uspořádali v pořadí $(l, m) = (0, 0)$, $(1, 0)$, $(1, 1)$, $(1, -1)$. Vlastní čísla této matice zjevně jsou 0, 0, $|A|$, -$|A|$. Energie stavů $|nlm\rangle = |200\rangle$ a $|210\rangle$ zůstanou tedy v prvním řádu poruchové teorie nezměněny. Stavy $|21 \pm 1\rangle$ se mezi sebou budou míchat na symetrickou a antisymetrickou kombinaci $|211\rangle \pm |21\text{-}1\rangle$ a energie se rozštěpí o $\pm|A|$.

Zbývá nalézt konstantu A. Tu najdeme přímou integrací

$$A = \Delta E_{11,1-1} = \langle 211|\alpha(x^2 - y^2)|21\text{-}1\rangle$$

ve sférických souřadnicích, přičemž

$$\begin{aligned}
|211\rangle &= Y_{11}(\theta,\phi)R_{21}(r) = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}}e^{i\phi}\frac{1}{\sqrt{2a^3}}\left(1-\frac{r}{2a}\right)e^{-r/2a}, \\
|21\text{-}1\rangle &= Y_{1-1}(\theta,\phi)R_{21}(r) = \sqrt{\frac{3}{8\pi}}e^{-i\phi}\frac{1}{\sqrt{2a^3}}\left(1-\frac{r}{2a}\right)e^{-r/2a}, \\
\alpha(x^2-y^2) &= \alpha r^2(\cos^2\phi - \sin^2\phi)\sin^2\theta = \alpha r^2\cos 2\phi\sin^2\theta = \frac{\alpha}{2}r^2(e^{2i\phi}+e^{-2i\phi})\sin^2\theta
\end{aligned}$$

a tedy

$$A = -\frac{3}{8\pi}\frac{1}{2a^3}\frac{\alpha}{2}\int_0^{2\pi} e^{-2i\phi}(e^{2i\phi}+e^{-2i\phi})\mathrm{d}\phi \int_0^{\pi}\sin^3\theta\mathrm{d}\theta\int_0^{\infty} r^4\left(1-\frac{r}{2a}\right)^2 e^{-r/a}\mathrm{d}r,$$

přičemž

$$\begin{aligned}
\int_0^{2\pi} e^{-2i\phi}(e^{2i\phi}+e^{-2i\phi})\mathrm{d}\phi &= \int_0^{2\pi}(1+e^{-4i\phi})\mathrm{d}\phi = 2\pi, \\
\int_0^{\pi}\sin^3\theta\mathrm{d}\theta &= 2\int_0^{\pi/2}(1-\cos^2\theta)\sin\theta\mathrm{d}\theta = 2\int_0^1(1-y^2)dy = \frac{4}{3}, \\
\int_0^{\infty} r^4\left(1-\frac{r}{2a}\right)^2 e^{-r/a}\mathrm{d}r &= a^5\int_0^{\infty}\left(y^4 - y^5 + \frac{1}{4}y^6\right)e^{-y}\mathrm{d}y = a^5(4! - 5! + 6!/4) = \frac{7}{2}a^5,
\end{aligned}$$

kde jsme si v druhém integrálu dali pozor, aby substituce byla prostá funkce na integračním intervalu a v posledním řádku jsme využili definice Γ funkce $\int x^n e^{-x} = n!$. Dohromady dostáváme

$$A = -\frac{3}{8\pi}\frac{1}{2a^3}\frac{\alpha}{2}2\pi\frac{4}{3}\frac{7}{2}a^5 = -\frac{7}{8}\alpha a^2.$$

Úloha 4: (10b)
Hamiltonián kvantového matematického kyvadla je

$$H = -\frac{\hbar^2}{2I}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\varphi^2} - A\cos\varphi,$$

kde I, A jsou kladné konstanty a $\varphi \in \langle 0, 2\pi\rangle$ je poloha kyvadla. Pomocí variačního principu najděte energii základního stavu tohoto systému. Hledejte nejlepší odhad řešení na množině funkcí (funkce už je normovaná)

$$\psi_\alpha(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\cos\alpha + \frac{1}{\sqrt{\pi}}\sin\alpha\cos\varphi,$$

kde α je variační parametr. Řešte nejdříve obecně a nakonec vyčíslete energii pro $A = \hbar^2/\sqrt{8}I$.

Řešení:
Jde o přímočarou aplikaci variačního principu na jednoparametrickou množinu funkcí. Protože testovací funkce je normovaná píšeme

$$E[\psi_\alpha] = E(\alpha) = \langle\psi|H|\psi\rangle = t(\alpha) + v(\alpha),$$

kde jsme si energii roztrhli na kinetickou a potenciální, které spočteme zvlášť. Kinetickou energii spočteme nejrychleji takto

$$t(\alpha) = \frac{\hbar^2}{2I}\int_0^{2\pi} |\psi'_\alpha(\phi)|^2 \mathrm{d}\phi = \frac{\hbar^2}{2I\pi}\sin^2\alpha\int_0^{2\pi}\cos^2\phi\,\mathrm{d}\phi = \frac{\hbar^2}{2I}\sin^2\alpha$$

Potenciální energie vypadá na první pohled složitěji

$$v(\alpha) = -\frac{A}{2\pi}\int_0^{2\pi}(\cos\alpha + \sqrt{2}\sin\alpha\cos\phi)^2\cos\phi\,\mathrm{d}\phi,$$

ale když si uvědomíme, že integrály $\int\cos\phi\,\mathrm{d}\phi$ a $\int\cos^3\phi\,\mathrm{d}\phi$ přes periodu jsou nulové (dají se rozdělit na půlku periody kde jsou kladné/záporné a stejně velké) zbude jediný člen

$$v(\alpha) = -\frac{A}{\pi}\sqrt{2}\sin\alpha\cos\alpha\int_0^{2\pi}\cos^2\phi\,\mathrm{d}\phi = -A\sqrt{2}\sin\alpha\cos\alpha.$$

Variační funkcionál můžeme tedy napsat jako

$$E(\alpha) = t(\alpha)+v(\alpha) = \frac{\hbar^2}{2I}(\sin^2\alpha - \sin\alpha\cos\alpha) = \frac{\hbar^2}{4I}(1-\cos 2\alpha - \sin 2\alpha) = \frac{\hbar^2}{4I}[1-\sqrt{2}\sin(2\alpha+\tfrac{\pi}{4})],$$

kde jsme dosadili za $A = \hbar^2/I\sqrt{8}$ podle zadání. Minimum této funkce nastává pro $\alpha_0 = \pi/8$ (ve výrazu výše jsme si trochu vyhráli s goniometrickými funkcemi, ale stejný výsledek dostanete přímočarým hledáním minima derivací funkce $E(\alpha)$) a hodnota minimální energie zjevně je

$$E_0 = \frac{\hbar^2}{4I}(1-\sqrt{2}) = A(\frac{1}{\sqrt{2}} - 1),$$

což je hledaný variační nejlepší horní odhad energie základního stavu.

Úloha 5: (10b)
Dva nerozlišitelné, navzájem neinteragující, nabité bosony se spinem 1 jsou v nekonečně hluboké potenciálové jámě (1D) délky L. Najděte vlnové funkce odpovídající dvěma nejnižším hladinám. V prvním řádu poruchové teorie najděte korekce k těmto energiím po vložení systému do konstantního elektrického pole velikosti E. Potenciál volte nulový uprostřed jámy.

Řešení:
Nejdříve si připomeneme stacionární stavy pro jedinou částici. Souřadnici x si zvolíme tak, že jáma je položena v intervalu $x \in \langle 0, L\rangle$. Vlnová funkce n-tého stacionárního stavu $|\phi_n\rangle$ je stejná jako pro volnou částici, tj. v souřadnicové reprezentaci je

$$\phi_n(x) = \sqrt{2/L}\sin k_n x, \qquad E_n = \frac{(\hbar k_n)^2}{2m} = \frac{(\hbar\pi n)^2}{2mL^2},$$

kde okrajová podmínka $\phi_n(0) = 0$, vybírá jen funkci sinus a podmínka $\phi_n(L) = 0$ vybírá jen vlnová čísla $k_n = \pi n/L$, kde $n = 1, 2, ...$

Vlnové funkce dvou částic jsou dány součinem jednočásticových funkcí, nebo jejich lineárními kombinacemi tak, aby výsledná funkce (včetně spinové části) byla symetrická při záměně obou částic (bosony). Spinovou část vlnové funkce můžeme s výhodou volit jako vlastní stavy kvadrátu celkového spinu a jeho z-tové komponenty $|jm\rangle$. Z teorie skládání momentu hybnosti víme, že kvantové číslo j pro součet dvou spinů 1 může nabývat hodnot $j = 2, 1, 0$, přičemž vlnové funkce pro $j = 2, 0$ jsou symetrické vůči záměně částic a vlnová funkce pro $j = 1$ je antisymetrická. Nejnižší energii dostaneme, pokud budou obě částice v základním jednočásticovém stavu $\phi_1(x)$, tj. základní stav je

$$|\psi_{11}\rangle = \phi_1(x_1)\phi_1(x_2)|jm\rangle, \qquad E_{11} = 2E_1 = \frac{(\hbar\pi)^2}{mL^2}.$$

Prostorová část vlnové funkce je symetrická, takže spinová část musí být také symetrická, tj. $j = 2$ nebo $j = 0$ a základní stav je tedy 5+1=6 krát degenerovaný. V prvním excitovaném stavu je jedna částice v základním jednočásticovém stavu $|\phi_1\rangle$ a druhá částice ve stavu $|\phi_2\rangle$. Vlnová funkce bude tedy daná jejich symetrizovným, nebo antisymetrizovaným součinem

$$\left.\begin{aligned} |\psi_{12}^S\rangle &= \tfrac{1}{\sqrt{2}}[\phi_1(x_1)\phi_2(x_2) + \phi_1(x_1)\phi_2(x_2)]\,|jm\rangle, \\ |\psi_{12}^A\rangle &= \tfrac{1}{\sqrt{2}}[\phi_1(x_1)\phi_2(x_2) - \phi_1(x_1)\phi_2(x_2)]\,|jm\rangle, \end{aligned}\right\} \qquad E_{12} = E_1 + E_2 = \frac{5(\hbar\pi)^2}{2mL^2}.$$

Spinová část musí být volena tak, aby celá vlnová funkce byla symetrická vůči záměně částic. Pro $|\psi_{12}^S\rangle$ je tedy $j = 2$ nebo $j = 0$ a pro $|\psi_{12}^A\rangle$ je $j = 1$. První excitovaný stav je tak 5+1+3=9 krát degenerovaný.

Nyní se podíváme jak se změní stavy systému po vložení do konstantního elektrického pole velikosti E. Příslušný člen hamiltoniánu je

$$H_I = -Eq(x_1 - L/2) - Eq(x_2 - L/2) = h_I(x_1) + h_I(x_2),$$

kde q je náboj částic a libovolná aditivní konstanta je volena tak, aby potenciál byl nulový ve středu jámy (viz zadání). Hamiltonián včetně poruchy je dán součtem hamiltoniánů pro částici 1 a pro částici 2. Započtení poruchy můžeme tedy udělat na jednočásticové úrovni, čímž dostaneme modifikované vlnové funkce $|\widetilde{\phi_n}\rangle$ a energie $\widetilde{E_n}$, ale dvojčásticové stavy se z nich budou skládat podle stejných vzorců (započtení poruchy s plnou vlnovou funkcí dá samozřejmě stejný výsledek - pokud to nevidíte, ověřte přímým výpočtem). Oprava energie v prvním řádu poruchové teorie na jednočásticové úrovni je dána vzorcem

$$\Delta E_n^{(1)} = \langle\phi_n|h_I|\phi_n\rangle = -Eq\int_0^L (x - L/2)|\phi_n(x)|^2 = 0.$$

Poslední uvedený integrál je nula, protože funkce $(x - L/2)$ je lichá podle středu intervalu, zatímco funkce $|\phi_n(x)|^2$ je sudá pro všechna n. Hledaná korekce energie v prvním řádu je tedy nulová pro všechny stavy.