Úvod

V tomto dokumentu naleznete zadání a vzorové řešení zápočtové písemky z přednášky "Kvantová teorie II" za LS 2022/23. Oproti minulým běhům mojí přednášky "Kvantová mechanika II" se snížila hodinová dotace z 4/2 na 3/1, proto jsme místo pěti úloh řešili jen čtyři. Rovněž jsem poskytl v podstatě neomezený čas (prakticky to skončilo na 140min). Všichni kdo vydrželi do konce písemky (9 studentů) získali alespoň polovinu bodů, čímž si vysloužili odpuštění počítání u zkoušky. Vzorové řešení níže, si doporučuji 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 a nejčastější chyby.

Co se týče úspěšnosti jednotlivých úloh, tak průměrný počet bodů z odevzdaných řešení byl v poměrně úzkém rozsahu 7.25-8.15, přičemž úlohy s vyšším pořadovým číslem na tom byly trochu hůře. V prezenční části mi všech 9 studentů odevzdalo všechny úlohy. V řešeních odevzdaných dotatečně se počet odevzdaných řešení jednotlivých úloh postupně snižoval (18,17,17,11). Celkově hodnotím výsledky pozitivně, zdá se, že se mi podařilo sladit obtížnost úloh s úlohami, s nimiž jste se setkali na cvičení a v domácích úkolech.

Úloha 1(10 bodů)
Částice v kvantové trojtečce má hamiltonián

$$\hat{h} = -\beta\left(|1\rangle\langle 2| + |2\rangle\langle 3| + |3\rangle\langle 1|\right) + \text{h. c.} = -\beta \sum_{m\neq n} |m\rangle\langle n|,$$

kde h. c. znamená hermitovsky sdružený předchozí člen. Uvažujte takovou trojtečku zaplněnou dvěma navzájem neinteragujícími elektrony (tj. nerozlišitelné částice se spinem 1/2). Najděte energie a stupeň degenerace stacionárních stavů. Dále najděte vlnovou funkci stavu s největší energií a z-složkou celkového spinu rovnou $1\hbar$. Jaká je v tomto stavu pravděpodobnost, že některý z elektronů je v tečce $|1\rangle$ a současně ten druhý v tečce $|2\rangle$.

Řešení: Úloha byla v některých bodech podobná domácímu úkolu. Je vhodné nejdříve vyřešit jednoelektronový problém pro uvedený hamiltonián bez spinu. V maticové podobě

$$\hat{h} = -\beta\begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \qquad |\phi_0\rangle = \tfrac{1}{\sqrt{3}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \qquad |\phi_1\rangle = \tfrac{1}{\sqrt{6}}\begin{pmatrix} 2 \\ -1 \\ -1 \end{pmatrix}, \qquad |\phi_2\rangle = \tfrac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix},$$

kde jsme rovnou napsali vlastní vektory. Jejich nalezení zde snad již není třeba opakovat. Dodejme jen, že první $|\phi_0\rangle$ lze uhodnout ze symetrie a vynásobením maticí $\hat{h}$ ověříme, že se jedná o vlastní vektor odpovídající vlastnímu číslu $\epsilon_0 = -2\beta$. U dalších dvou vektorů si vynásobením ověříme, že odpovídají oba vlatnímu číslu $\epsilon_1 = \epsilon_2 = \beta$.

Nyní je potřeba si uvědomit, že pro neinteragující elektrony se energie prostě sčítají a vlnové funkce jsou dány (správně antisymetrizovaným) součinem jednoelektronových řešení. Hamiltonián navíc nezáleží na spinu, spin se jen uplatní pro výpočet počtu stavů s danou energií. Nejdříve si pro pozdější kontrolu rozmysleme dimenzi stavového prostoru. Máme dohromady 3×2 jednoelektronové stavy (tři prostorové krát dvě hodnoty spinové souřadnice). To znamená že pro dvě rozlišitelné částice by bylo k dispozici 6×6 stavů, ale antisymetrizace ponechá jen $6\times 5/2 = \binom{6}{2} = 15$ stavů (6 se změní na 5 protože druhou částici již nesmíme dát do stejného stavu a dvěma dělíme, protože nerozlišíme, zda je částice 1 ve stavu A a částice 2 ve stavu B nebo naopak - antisymetrizační operátor udělá z obou případů stejný stav). Základní dvoučásticový stav s energií $E = -4\beta$ je tedy nedegenerovaný $|\psi\rangle = \left|\boxed{\updownarrow}\boxed{\ }\boxed{\ }\right\rangle$. Grafickým znázorněním vlnové funkce jsme ukázali, že stav $|\phi_0\rangle$ s energií ϵ_0 je obsazen dvěma elektrony s opačným spinem (větší obdélníček) a stavy $|\phi_1\rangle$, $|\phi_2\rangle$ jsou prázdné. Druhý stav stav s energií $E = \epsilon_0 + \epsilon_1 = -\beta$ je 8krát degenerovaný $|\psi\rangle = \left|\boxed{\uparrow}\boxed{\uparrow}\boxed{\ }\right\rangle$, $\left|\boxed{\uparrow}\boxed{\downarrow}\boxed{\ }\right\rangle$, $\left|\boxed{\downarrow}\boxed{\uparrow}\boxed{\ }\right\rangle$, $\left|\boxed{\downarrow}\boxed{\downarrow}\boxed{\ }\right\rangle$, $\left|\boxed{\uparrow}\boxed{\ }\boxed{\uparrow}\right\rangle$, $\left|\boxed{\uparrow}\boxed{\ }\boxed{\downarrow}\right\rangle$, $\left|\boxed{\downarrow}\boxed{\ }\boxed{\uparrow}\right\rangle$, $\left|\boxed{\downarrow}\boxed{\ }\boxed{\downarrow}\right\rangle$. Nejvyšší energie 2β je pak 6krát degenerovaná, konkrétně $|\psi\rangle = \left|\boxed{\ }\boxed{\updownarrow}\boxed{\ }\right\rangle$, $\left|\boxed{\ }\boxed{\ }\boxed{\updownarrow}\right\rangle$, $\left|\boxed{\ }\boxed{\uparrow}\boxed{\uparrow}\right\rangle$, $\left|\boxed{\ }\boxed{\uparrow}\boxed{\downarrow}\right\rangle$, $\left|\boxed{\ }\boxed{\downarrow}\boxed{\uparrow}\right\rangle$, $\left|\boxed{\ }\boxed{\downarrow}\boxed{\downarrow}\right\rangle$. Můžeme si zkontrolovat, že jsme správně počítali: celkem máme 1+8+6=15 stavů, takže jsme vyčerpali celý dvoučásticový prostor. Poslední otázka se týkala stavu s největší energií a se z-složkou spinu $1\hbar$ což je

$$|\psi\rangle = \left|\boxed{\ }\boxed{\uparrow}\boxed{\uparrow}\right\rangle = \sqrt{2}\hat{A}|\phi_1\uparrow\rangle|\phi_2\uparrow\rangle = \tfrac{1}{\sqrt{2}}\Big\{|\phi_1\rangle|\phi_2\rangle - |\phi_2\rangle|\phi_1\rangle\Big\}|\uparrow\rangle|\uparrow\rangle,$$

kde jsme rozepsali antisymetrizaci vlnové funkce explicitně v prvním kvantování. Ještě dosadíme nalezené funkce $|\phi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}}(2|1\rangle - |2\rangle - |3\rangle)$, $|\phi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|2\rangle - |3\rangle)$, takže

$$|\psi\rangle = \tfrac{1}{\sqrt{6}}[|1\rangle|2\rangle - |2\rangle|1\rangle + |2\rangle|3\rangle - |3\rangle|2\rangle + |3\rangle|1\rangle - |1\rangle|3\rangle\rangle]|\uparrow\rangle|\uparrow\rangle,$$

kde první dva členy odpovídají tomu, že jedna částice je v tečce $|1\rangle$ a druhá v tečce $|2\rangle$ a hledaná pravděpodobnost tedy je $p = \frac{1}{6} + \frac{1}{6} = \frac{1}{3}$.

Další poznámky k řešení: V zadání jsem si nevšiml nejednoznačnosti v určení hledaného stavu. Výše uvedený stav má nejvyšší energii, za předpokladu, že $\beta > 0$. Někteří jste na to v řešení upozornili, s tím, že v obráceném případě by stav s nejvyšší energií neměl správný spin. Na druhé straně v několika řešeních jste zapomněli na znaménko a vyšlo vám pořadí stavů stejně obráceně, což vedlo ke zmatkům.

K další chyba, která se některým vloudila spočívala ve výpočtu pravděpodobnosti. Někteří jste použili formálního postupu výpočtu pravděpodobnosti pomocí projektoru $p = \langle\psi|\hat{P}|\psi\rangle$, kde

$$\hat{P} = |1\rangle\langle 1| \otimes |2\rangle\langle 2| + |2\rangle\langle 2| \otimes |1\rangle\langle 1| = |12\rangle\langle 12| + |21\rangle\langle 21|.$$

Chyby, které se objevily spočívali jednak v zapomenutí druhého členu (u nerozlišitelných částic nezbytného) a nebo v chybném přidání faktoru $\frac{1}{2}$ do definice projektoru.

Komentář ke značení: V řešení výše jsem pro názornost značil stavy grafickými symboly, které jsou vlastně názorným zobrazením reprezentace obsazovacích čísel. Pro zajímavost vypisuji některé zmíněné stavy, v této reprezentaci a také v reprezentaci prvního kvantování. Pro obsazovací čísla si zvolíme pořadí $|N_{\phi_0+}N_{\phi_0-}N_{\phi_1+}N_{\phi_1-}N_{\phi_2+}N_{\phi_2-}\rangle$, takže základní stav je

$$\left|\boxed{\updownarrow}\boxed{}\boxed{}\right\rangle = |110000\rangle = \sqrt{2}\hat{A}|\phi_0\uparrow\rangle|\phi_0\downarrow\rangle = \tfrac{1}{\sqrt{2}}|\phi_0\rangle|\phi_0\rangle\left\{|\uparrow\rangle|\downarrow\rangle - |\downarrow\rangle|\uparrow\rangle\right\}.$$

Stavy s energií $E = -\beta$ pak jsou

$$\begin{aligned}
\left|\boxed{\uparrow}\boxed{\uparrow}\boxed{}\right\rangle &= |101000\rangle = \sqrt{2}\hat{A}|\phi_0\uparrow\rangle|\phi_1\uparrow\rangle = \tfrac{1}{\sqrt{2}}\left\{|\phi_0\phi_1\rangle - |\phi_1\phi_0\rangle\right\}|\uparrow\rangle|\uparrow\rangle,\\
\left|\boxed{\downarrow}\boxed{\downarrow}\boxed{}\right\rangle &= |010100\rangle = \sqrt{2}\hat{A}|\phi_0\downarrow\rangle|\phi_1\downarrow\rangle = \tfrac{1}{\sqrt{2}}\left\{|\phi_0\phi_1\rangle - |\phi_1\phi_0\rangle\right\}|\downarrow\rangle|\downarrow\rangle,\\
\left|\boxed{\uparrow}\boxed{\downarrow}\boxed{}\right\rangle &= |100100\rangle = \sqrt{2}\hat{A}|\phi_0\uparrow\rangle|\phi_1\downarrow\rangle = \tfrac{1}{\sqrt{2}}\left\{|\phi_0\phi_1\rangle|\uparrow\rangle|\downarrow\rangle - |\phi_1\phi_0\rangle|\downarrow\rangle|\uparrow\rangle\right\},\\
\left|\boxed{\downarrow}\boxed{\uparrow}\boxed{}\right\rangle &= |011000\rangle = \sqrt{2}\hat{A}|\phi_0\downarrow\rangle|\phi_1\uparrow\rangle = \tfrac{1}{\sqrt{2}}\left\{|\phi_0\phi_1\rangle|\downarrow\rangle|\uparrow\rangle - |\phi_1\phi_0\rangle|\uparrow\rangle|\downarrow\rangle\right\}
\end{aligned}$$

a podobné další čtyři stavy vzniklé záměnou $\phi_1 \to \phi_2$. Všiměte si, že první dva stavy jsou vlastně členy spinového tripletu a mají antisymetrickou prostorovou část. Kde je třetí člen tripletu? Ten dostaneme linární kombinací posledních dvou stavů

$$\tfrac{1}{\sqrt{2}}\left\{|100100\rangle + |011000\rangle\right\} = \tfrac{1}{2}\left\{|\phi_0\phi_1\rangle - |\phi_1\phi_0\rangle\right\}\left\{|\uparrow\rangle|\downarrow\rangle + |\downarrow\rangle|\uparrow\rangle\right\}.$$

Druhá lineární kombinace pak dá singletní stav

$$\tfrac{1}{\sqrt{2}}\left\{|100100\rangle - |011000\rangle\right\} = \tfrac{1}{2}\left\{|\phi_0\phi_1\rangle + |\phi_1\phi_0\rangle\right\}\left\{|\uparrow\rangle|\downarrow\rangle - |\downarrow\rangle|\uparrow\rangle\right\}.$$

Všiměte si, že singletní stav má symetrickou prostorovou a antisymetrickou spinovou část, zatímco všechny členy tripletu mají stejnou antisymetrickou prostorovou část ve shodě s tím, jak jsme řešili podobnou úlohu v prvním kvantování na cvičení. Někteří z vás diskutovali degeneraci stavů právě v této reprezentaci.

To souvisí s posledním způsobem řešení, který se objevil. Přišel mi komplikovanější na provedení, ale dává další nezávislý pohled, tak jej alespoň zmíním. Jde o to, že nemusíme vycházet z jednočásticového řešení, ale můžeme přímo diagonalizovat dvoučásticový hamiltonián v původní bázi. Přitom využijeme nezávislosti hamiltoniánu na spinu, takže stacionární stavy musí být vlastním vektory celkového spinu. To znamená, že tripletní stavy budou (spinově) třikrát degenerované a budou mít antisymetrickou prostorovou část a singletní stavy budou (spinově) nedegenerované a budou mít symetrickou prostorovou část. Antisymetrická prostorová část je třirozměrná a za bázi lze zvolit

$$\tfrac{1}{\sqrt{2}}\left\{|12\rangle - |21\rangle\right\}, \qquad \tfrac{1}{\sqrt{2}}\left\{|23\rangle - |32\rangle\right\}, \qquad \tfrac{1}{\sqrt{2}}\left\{|31\rangle - |13\rangle\right\}$$

a symetrická se šestirozměrná s bází

$$|11\rangle, \qquad |22\rangle, \qquad |33\rangle, \qquad \tfrac{1}{\sqrt{2}}\left\{|12\rangle + |21\rangle\right\}, \qquad \tfrac{1}{\sqrt{2}}\left\{|23\rangle + |32\rangle\right\}, \qquad \tfrac{1}{\sqrt{2}}\left\{|31\rangle + |13\rangle\right\}.$$

V těchto bázích napíšeme hamiltonián jako 3×3 matici pro tripletní stavy (devět stavů, ale po trojici se stejnou energií a jinou projekcí spinu) a matici 6×6 pro singletní stavy. Tu diagonalizovat vyžaduje jistou obratnost nebo použití symetrie, ale to je na jinou přednášku.

Úloha 2(10 bodů)
V systému z úlohy 1 napište hamiltonián $\hat{h}$ (respektive jeho rozšíření jako jednočásticový operátor na Fockův prostor) ve formalismu II. kvantování. Dále napište v tomto formalismu posunovací operátor $\hat{s}_- = \hat{s}_x - i\hat{s}_y$ pro celkový spin. Pomocí těchto výrazů a kanonických komutačních relací ukažte, že tyto operátory komutují.

Řešení: První část úlohy je totožná s částí domácího úkolu 4, takže by měla být snadná. Použijeme známý vztah pro vyjádření jednočásticového operátoru na Fockově prostoru

$$\hat{H} = \sum_{\alpha,\beta} \langle\alpha|\hat{h}|\beta\rangle \hat{a}^\dagger_\alpha \hat{a}_\beta,$$

kde $\hat{a}^\dagger_\alpha$ kreuje stav $|\alpha\rangle = \hat{a}^\dagger_\alpha|0\rangle$ a α je kompletní sada kvantových čísel popisujících jednočásticové stavy (vlastní čísla ÚSKO). V našem případě je $\alpha = n, s$, kde $n = 1, 2, 3$ určuje polohu v jedné z kvantových teček a $s = \pm 1$ určuje projekci spinu $s_z = \pm\hbar$. Pro hamiltonián z úlohy 1 je

$$\langle n, s|\hat{h}|m, s'\rangle = -\beta(1 - \delta_{mn})\delta_{ss'}$$

a tedy

$$\hat{H} = -\beta \sum_s \sum_{m\neq n} \hat{a}^\dagger_{ns}\hat{a}_{ms}.$$

Podobně posunovací operátor $\hat{s}_-$ pro jednu částici se dá vyjádřit jako $\hat{s}_- = \hbar\hat{I}_{dot} \otimes |-\rangle\langle+|$, kde jsme explicitně vyjádřili i fakt, že operátor nepůsobí na prostorové stupně volnosti, takže

$$\langle n, s|\hat{s}_-|m, s'\rangle = \hbar\delta_{mn}\delta_{s-}\delta_{s'+}$$

neboli posunovací operátor pro celkový spin (tj. součet posunovacích operátorů přes všechny částice)

$$\hat{S}_- = \hbar \sum_n \hat{a}^\dagger_{n-}\hat{a}_{n+}.$$

Nyní nám zbývá jen spočíst hledaný komutátor

$$\begin{aligned}
[\hat{H}, \hat{S}_-] &= -\beta\hbar \sum_s \sum_{m\neq n} \sum_k [\hat{a}^\dagger_{ns}\hat{a}_{ms}, \hat{a}^\dagger_{k-}\hat{a}_{k+}] \\
&= -\beta\hbar \sum_s \sum_{m\neq n} \sum_k \left(\hat{a}^\dagger_{ns}[\hat{a}_{ms}, \hat{a}^\dagger_{k-}\hat{a}_{k+}] + [\hat{a}^\dagger_{ns}, \hat{a}^\dagger_{k-}\hat{a}_{k+}]\hat{a}_{ms} \right).
\end{aligned}$$

Nyní nesmíme zapomenout, že zbylé komutátory musíme rozvinout do antikomutátorů, protože pro fermiony jsou kanonické anti-komutační relace $\{\hat{a}_{ms}, \hat{a}^\dagger_{ns'}\} = \delta_{mn}\delta_{ss'}$. K tomu jsme používali na cvičení identitu $[A, BC] = \{A, B\}C - B\{A, C\}$ takže

$$\begin{aligned}
[\hat{H}, \hat{S}_-] &= -\beta\hbar \sum_s \sum_{m\neq n} \sum_k \left(\hat{a}^\dagger_{ns}\{\hat{a}_{ms}, \hat{a}^\dagger_{k-}\}\hat{a}_{k+} - \hat{a}^\dagger_{k-}\{\hat{a}^\dagger_{ns}, \hat{a}_{k+}\}\hat{a}_{ms} \right) \\
&= -\beta\hbar \sum_s \sum_{m\neq n} \sum_k \left(\hat{a}^\dagger_{ns}\delta_{mk}\delta_{s-}\hat{a}_{k+} - \hat{a}^\dagger_{k-}\delta_{nk}\delta_{s+}\hat{a}_{ms} \right) = -\beta\hbar \sum_{m\neq n} \left(\hat{a}^\dagger_{n-}\hat{a}_{m+} - \hat{a}^\dagger_{n-}\hat{a}_{m+} \right) = 0.
\end{aligned}$$

Všiměte si, že v prvním řádku jsme vůbec nepsali členy $\{\hat{a}_{ms}, \hat{a}_{k+}\} = \{\hat{a}^\dagger_{ns}, \hat{a}^\dagger_{k-}\} = 0$. Tím je důkaz zkompletován.

Poznámky: úloha byla poměrně přímočará, většina řešila správně, i když někteří jste rozepisovali explicitně všechny členy místo obecné sumy, takže to bylo poměrně pracné. V několika případech se objevila chyba, že jste místo antikomutačních použili komutační relace. Za to jsem strhával dva body. Takový postup by byl v pořádku pro bosony.

Úloha 3(10 bodů)
Elektron v atomu vodíku je připraven ve stavu s energií odpovídající 2. excitovanému stavu ($n = 3$) a s celkovým (orbitálním + spinovým) momentem hybnosti $J = \frac{3}{2}$ a jeho projekcí $M = \frac{3}{2}$. Zjistěte jaké stavy odpovídají tomuto popisu. Předpokládejte, že všechny jsou stejně pravděpodobné a najděte redukovanou matici hustoty

$$\hat{\rho} = \tfrac{1}{2}[\hat{I} + \vec{p} \cdot \vec{\sigma}]$$

pro samotný spin elektronu v tomto stavu. Jaký je polarizační vektor $\vec{p}$ tohoto stavu. Jedná se o čistý nebo smíšený stav?

Řešení: Je potřeba si vzpomenout, že druhá excitovaná hladina atomu vodíku je 9×2 degenerovaná, kde dvojka je za spin elektronu a prostorová část vlnové funkce je $|3lm\rangle$, kde orbitální moment hybnosti odpovídá $l = 0, 1, 2$. Z pravidel skládání momentu hybnosti víme, že celkového momentu hybnosti $J = \frac{3}{2}$ můžeme dosáhnout skládáním $l = 1$ a $s = \frac{1}{2}$ nebo $l = 2$ a $s = \frac{1}{2}$. První možnosti je jednodušší, protože jde o nejvyšší možnou hodnotu J a hledaný stav $|nlm\rangle|m_s\rangle$ tedy je

$$|\psi_1\rangle = |311\rangle|+\rangle.$$

Druhý stav najdeme skládáním momentů hybnosti $l = 2$ a $s = \frac{1}{2}$. Buď použijete tabulku Clebsch-Gordanových koeficientů, nebo zapůsobíme posunovacím operátorem J_- na stav $|322\rangle|+\rangle$ s kvantovými čísly $J = M = \frac{5}{2}$ což dá $\frac{1}{\sqrt{5}}(2|321\rangle|+\rangle + |322\rangle|-\rangle)$ a ortogonalizací na tento stav pak dostaneme další stav s $J = M = \frac{3}{2}$

$$|\psi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{5}}\left\{2|322\rangle|-\rangle - |321\rangle|+\rangle\right\}.$$

Pokud předpokládáme, že oba stavy jsou stejně pravděpodobné, dostaneme matici hustoty

$$\hat{\rho} = \frac{1}{2}\left\{|\psi_1\rangle\langle\psi_1| + |\psi_2\rangle\langle\psi_2|\right\}.$$

Redukovaná matice hustoty pro spin se pak spočte stopou přes prostorové stupně volnosti

$$\hat{\rho}_S = \sum_{nlm}\langle nlm|\hat{\rho}|nlm\rangle = \frac{1}{2}\left\{|+\rangle\langle+| + \frac{4}{5}|-\rangle\langle-| + \frac{1}{5}|+\rangle\langle+|\right\} = \frac{1}{2}\left\{\hat{I} + \frac{1}{5}|+\rangle\langle+| - \frac{1}{5}|-\rangle\langle-|\right\},$$

takže vědomi si toho, že $\sigma_z = |+\rangle\langle+| - |-\rangle\langle-|$ vidíme, že polarizační vektor je $\vec{p} = (0, 0, \frac{1}{5})$. Z přednášky rovněž víme, že se tedy jedná o smíšený stav, protože $\|\vec{p}\| < 1$.

Poznámka: V této úloze se objevila poměrně častá chyba, že jste si neuvědomili, že stavy $|322\rangle|-\rangle$ a $|321\rangle|+\rangle$ je potřeba kaplovat, takže jste nesprávně napsali matici hustoty jako

$$\hat{\rho} = \frac{1}{3}\left\{|311+\rangle\langle 311+| + |322-\rangle\langle 322-| + |321+\rangle\langle 321+|\right\}.$$

Polarizační vektor pak vyšel $\vec{p} = (0, 0, \frac{1}{3})$. Pokud byla úloha jinak správně strhával jsem za to dva body.

Úloha 4(10 bodů)
V atomu vodíku uvažujte poruchu ve tvaru Hénonova-Heilesova potenciálu

$$V(x,y,z) = \lambda\left(\tfrac{1}{3}y^3 - yx^2\right).$$

Kterou nejnižší hladinu v atomu vodíku ovlivní tato porucha v 1. řádu poruchové teorie? Jak veliká je matice, kterou bychom měli diagonalizovat a kolik maticových elementů je skutečně nenulových a které z nich budete muset opravdu počítat integrací? Nápověda: použijte Gauntovu formuli nebo Wignerovu-Eckartovu větu a případně ještě paritu.

Řešení: Z tabulky sférických harmonik v taháku, vyčteme $r^3 Y_{3\pm3} = \mp\sqrt{\frac{35}{64\pi}}(x \pm iy)^3$ a tedy $V = C(Y_{33} + Y_{3-3})$. Hodnota konstanta C je pro řešení úlohy nepodstatná, důležité je, že daná porucha je součtem sférického komponent tenzoru T^3_3 a T^3_{-3}. Ať už použijeme Gauntovu formuli nebo WE-větu, vidíme, že matice poruchy

$$\langle nlm|V|nl'm'\rangle,$$

kterou musíme diagonalizovat pro korekci hladiny E_n je úměrná Clebsch-Gordanovým koeficientům $\langle 3l'3m'|lm\rangle$ a $\langle 3l'{-3}m'|lm\rangle$. Výběrová pravidla pro skládání momentu hybnosti pak říkají, že tyto maticové elementy mohou být nenulové jen pokud je splněna trojúhelníková nerovnost $|3-l'| \le l \le |3+l'|$. Tu nelze splnit pro obě $l, l' < 2$. a protože v atomu vodíku je $l < n$ budou všechny maticové elementy pro hladiny odpovídající kvantovému číslu $n = 1$ a $n = 2$ nulové. Nejnižší hladina, kterou porucha ovlivní je tudíž $n = 3$. Pro tuto hladinu jsou možné hodnoty $l = 0, 1, 2$ a jim odpovdající $m = -l, ..., l$. Pro započtení poruchy je tedy potřeba diagonalizovat matici 9×9. Přitom trojúhelníková nerovnost nedovolí použití hodnot $l = 0$ a $l' = 0$. Možné jsou jen kombinace $(l, l') = (1, 2)$, $(2, 1)$ a $(2, 2)$. Poslední z možností navíc musíme vyloučit kvůli paritě. Maticový element $\langle 32m|V|32m'\rangle$ totiž obsahuje integrál součinu dvou funkcí $Y_{2m}Y_{2m'}$ s paritou 1 a liché funkce $V(x,y,z)$ s paritou -1 a integrace tedy dá nulu. Pokud tedy ještě aplikujeme výběrové pravidlo $m' \pm 3 = m$ zjistíme nakonec, že nenulové jsou jen 4 maticové elementy

$$\langle 322|V|31\,{-1}\rangle, \qquad \langle 311|V|32\,{-2}\rangle, \qquad \langle 31\,{-1}|V|322\rangle, \qquad \langle 32\,{-2}|V|311\rangle.$$

Ty navíc nejsou nezávislé. Jednak kvůli samosdruženosti operátoru V jsou druhé dva elementy komplexním sdružením prvních dvou a navíc s použitím relace $Y^*_{lm} = (-1)^m Y_{l-m}$ a vyjádření $|nlm\rangle = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta,\phi)$, kde R_{nl} je reálné, dostaneme

$$\langle 322|V|31\,{-1}\rangle = -\langle 311|V|32\,{-2}\rangle.$$

Stačí tedy nakonec spočítat jediný integrál $\langle 322|V|31\,{-1}\rangle = w$. Porucha pak v hladině E_3 vůbec neovlivní stavy $|300\rangle$, $|310\rangle$, $|32\,{-1}\rangle$, $|320\rangle$, $|321\rangle$. Ostatní stavy se smíchají na $|\psi\rangle = a|32\,{-2}\rangle + b|31\,{-1}\rangle + c|311\rangle + d|322\rangle$ přičemž hodnoty korekce energie a koeficienty (a, b, c, d) najdeme jako vlastní čísla a vlastní vektory matice (ale to již zadání nevyžadovalo)

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & -w^* & 0 \\ 0 & 0 & 0 & w^* \\ -w & 0 & 0 & 0 \\ 0 & w & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Poznámka: Odevzdaná řešení byla většinou správná (kromě těch z prezenční písemky, kde byl zjevně problém nedostatek času). Jen jste často zapomněli uvažovat rovněž o paritě, a nevyloučili jste elementy $\langle 32m|V|32m'\rangle$.