Úvod

V tomto dokumentu naleznete zadání a vzorové řešení zápočtové písemky k přednášce "Kvantová mechanika I" za ZS 2020/21. Úlohy byly voleny tak, že by je měl být schopen bezezbytku 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. Nakonec jsem musel trochu snížit tento limit na 20 bodů, protože nejvyšší zisk v časovém limitu byl 36 bodů.

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 a nejčastější chyby v řešení.

Poznámka: Řešení pro každou úlohu by se mělo vejít na jednu stránku (včetně zadání). Na první stránce je vždy takové vzorové řešení. Další stránka ukazuje další možnosti a souvislosti.

Úloha 1(10 bodů)
Řetízek tří částic se spinem 1/2 je připraven ve stavu $|\psi\rangle = |{+}{-}{+}\rangle - |{-}{+}{-}\rangle$, kde $|s_1 s_2 s_3\rangle$ znamená stav v němž má i-tá částice z-složku spinového momentu hybnosti rovnu $s_i\frac{\hbar}{2}$. Na systému provedeme měření složky spinu s_x první částice a naměříme hodnotu $+\frac{\hbar}{2}$. Potom provedeme měření s_x druhé částice a naměříme opět hodnotu $+\frac{\hbar}{2}$. Při třetím měření budeme měřit s_x třetí částice. Jaké výsledky a s jakou pravděpodobností můžeme nalézt?

Řešení (obecné poznámky):
V úloze se mluví o posloupnosti tří měření. U prvních dvou známe výsledek a můžeme je tedy chápat jako přípravu stavu pro třetí měření. Prvnímu měření bude odpovídat nějaký projekční operátor $\hat{P}_1$ druhému $\hat{P}_2$. Po těchto dvou měřeních přejde částice do stavu $|\psi_2\rangle = \hat{P}_2\hat{P}_1|\psi\rangle$, kterou nesmíme zapomenout normovat. V posledním měření jde o měření spinu 1/2 a můžeme tedy naměřit dvě hodnoty $\pm\hbar/2$, kterým budou odpovídat dva projekční operátory $\hat{P}_+$, $\hat{P}_-$. Výsledné pravděpodobnosti pak jsou

$$p_\pm = \langle\psi_2|\hat{P}_\pm|\psi_2\rangle.$$

Různé varianty řešení se nyní liší způsobem, jak pracovat s výše uvedenými projektory a vlnovými funkcemi. Uvedu několik možností řešení.
Řešení 1 (efektivně využívající vlastnosti direktního součinu):
Nejdříve je třeba si uvědomit jak vypadá operátor $\hat{s}_x = \frac{\hbar}{2}\sigma_x$ pro jednu částici

$$\hat{s}_x = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Tato matice má (jak vidíte cvičeným okem, nebo víte ze cvičení) vlastní čísla $\pm\frac{\hbar}{2}$ a jim odpovídající vlastní vektory

$$|\uparrow\rangle = \tfrac{1}{\sqrt{2}}(|{+}\rangle + |{-}\rangle), \qquad |\downarrow\rangle = \tfrac{1}{\sqrt{2}}(|{+}\rangle - |{-}\rangle).$$

Pomocí těchto vektorů můžeme napsat projekční operátory odpovídající prvním dvěma měřením:

$$\hat{P}_1 = |\uparrow\rangle\langle\uparrow| \otimes \hat{I} \otimes \hat{I}, \qquad \hat{P}_2 = \hat{I} \otimes |\uparrow\rangle\langle\uparrow| \otimes \hat{I}, \text{ tj.} \qquad \hat{P}_2\hat{P}_1 = |\uparrow\rangle\langle\uparrow| \otimes |\uparrow\rangle\langle\uparrow| \otimes \hat{I}.$$

Každý z těchto operátorů působí jen na část vlnové funkce odpovídající jedné částici, takže

$$\begin{aligned}
\hat{P}_2\hat{P}_1|{+}{-}{+}\rangle &= \langle\uparrow|{+}\rangle|\uparrow\rangle \otimes \langle\uparrow|{-}\rangle|\uparrow\rangle \otimes |{+}\rangle = \tfrac{1}{2}|\uparrow\uparrow\rangle \otimes |{+}\rangle, \\
\hat{P}_2\hat{P}_1|{-}{+}{-}\rangle &= \underbrace{\langle\uparrow|{-}\rangle}_{1/\sqrt{2}}|\uparrow\rangle \otimes \underbrace{\langle\uparrow|{+}\rangle}_{1/\sqrt{2}}|\uparrow\rangle \otimes |{-}\rangle = \tfrac{1}{2}|\uparrow\uparrow\rangle \otimes |{-}\rangle,
\end{aligned}$$

takže $|\psi_2\rangle = \hat{P}_2\hat{P}_1|\psi\rangle = \frac{1}{2}|\uparrow\uparrow\rangle \otimes (|{+}\rangle - |{-}\rangle)$. Po normování tedy je $|\psi_2\rangle = |\uparrow\uparrow\downarrow\rangle$. Výsledkem třetího měření tedy je hodnota x-ové složky spinového momentu hybnost $-\hbar/2$ s pravděpodobností 100%.
Poznámky k Vašim řešením:
Při řešení této úlohy jste byli poměrně úspěšní. Úlohu odevzdalo 30 lidí a průměrný zisk byl 6.5 bodu. Nejčastější chybou byla úvaha, že provádíme měření na různých částicích a proto první dvě měření neovlivní třetí měření. To není pravda, protože je systém připravený v entaglovaném stavu a skutečně, pokud bychom rovnou měřili složku jen x spinu třetí částice, dostaneme obě hodnoty $\pm\hbar/2$ se stejnou pravděpodobností (zkuste formálně spočítat).

Několik z Vás úlohu vyřešilo různými variantami postupu výše, což byla patrně nejrychlejší varianta. Další použili v podstatě stejný postup, ale nezavedli si značku pro vektory $|\uparrow\rangle$ a $|\downarrow\rangle$, takže dostali trochu delší výrazy:

$$\hat{P}_1|\psi\rangle = \tfrac{1}{2}\left\{|{+}{-}{+}\rangle + |{-}{-}{+}\rangle - |{+}{+}{-}\rangle - |{-}{+}{-}\rangle\right\}.$$

Dodejme, že tento výraz jsme získali působení projektoru člen po členu, takže

$$\hat{P}_1|s_1s_2s_3\rangle = \langle\uparrow|s_1\rangle|\uparrow\rangle \otimes |s_2s_3\rangle = \tfrac{1}{2}|{+}s_2s_3\rangle + \tfrac{1}{2}|{-}s_2s_3\rangle,$$

což znamená, že každý člen $|\psi\rangle$ se rozdvojí, na dva, přičemž kvantové čísla s_2 a s_3 zůstanou nezměněna a kvantové číslo s_1 s nahradí jednou znaménkem $+$ a podruhé $-$. Podobně bude působit projektor $\hat{P}_2$, s tím, že se nyní rozdvojuje druhé kvantové číslo v každém členu.

$$|\psi_2\rangle = \hat{P}_2\hat{P}_1|\psi\rangle = \tfrac{1}{\sqrt{8}}\left\{|{+}{+}{+}\rangle + |{+}{-}{+}\rangle + |{-}{+}{+}\rangle + |{-}{-}{+}\rangle - |{+}{+}{-}\rangle - |{+}{-}{-}\rangle - |{-}{+}{-}\rangle - |{-}{-}{-}\rangle\right\}.$$

V posledním řádku jsme si navíc všimli, že vlnová funkce nebyla normovaná a tak jsme upravili prefaktor tak, aby už byla. Pravěpodobnosti pak najdeme použitím standardních vzorců, jak je popsáno výše, při čemž musíme zapůsobit projektorem $\hat{P}_+$, který působí stejně jako projektory $\hat{P}_1$ a $\hat{P}_2$, ale na 3. částici, takže $\hat{P}_+|\psi_2\rangle = 0$, neboť každý člen se zdvojí na jeden se znaménkem plus a jeden se znaménkem minus. Alternativně si někteří z vás všimli, že stav $|\psi_2\rangle$ lze faktorizovat

$$|\psi_2\rangle = \tfrac{1}{4}\left\{|{+}{+}\rangle + |{+}{-}\rangle + |{-}{+}\rangle + |{-}{-}\rangle\right\} \otimes \tfrac{1}{\sqrt{2}}\left\{|{+}\rangle - |{-}\rangle\right\}.$$

Ať tak či onak, dospějeme k závěru, že třetí částici naměříme s pravděpodobností 0 ve stavu se složkou s_x rovnou $+\hbar/2$ a s pravděpodobností 1 ve stavu $|\downarrow\rangle$, tj. s s_x rovnou $-\hbar/2$.

Jiná alternativa řešení: je převést počáteční vlnovou funkci z reprezentace s_z do reprezentace s_x. Ze vztahů pro vektory $|\uparrow\rangle$ a $|\downarrow\rangle$ můžeme vyjádřit vlastních stavy s_z pomocí vlastních stavů s_x následovně $|\pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle \pm |\downarrow\rangle)$ takže

$$|\psi\rangle = \tfrac{1}{\sqrt{8}}(|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle) \otimes (|\uparrow\rangle - |\downarrow\rangle) \otimes (|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle) - (|\uparrow\rangle - |\downarrow\rangle) \otimes (|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle) \otimes (|\uparrow\rangle - |\downarrow\rangle)$$

a po roznásobení

$$|\psi\rangle = \tfrac{1}{\sqrt{2}}\left\{|\uparrow\uparrow\downarrow\rangle - |\uparrow\downarrow\uparrow\rangle + |\downarrow\uparrow\uparrow\rangle - |\downarrow\downarrow\downarrow\rangle\right\}.$$

Výhoda tohoto zápisu je, že projektor $\hat{P}_1$ prostě ponechá členy začínájící šipkou nahoru a ostatní vynuluje a poté projektor $\hat{P}_2$ vynuluje člen se šipkou dolu uprostřed, takže zbude $|\psi_2\rangle = |\uparrow\uparrow\downarrow\rangle$ což je separovaný stav v němž je vidět, že 3. částice je ve stavu s projekcí $s_x = -\hbar/2$.

Řešení pomocí maticové reprezentace v bázi: Další možností, kterou se někteří z vás pustili, je řešit problém v maticové reprezentaci v bázi $\{|{+}{+}{+}\rangle, |{+}{+}{-}\rangle, |{+}{-}{+}\rangle, |{+}{-}{-}\rangle, |{-}{+}{+}\rangle, |{-}{+}{-}\rangle, |{-}{-}{+}\rangle, |{-}{-}{-}\rangle\}$. Tento způsob je asi nejpracnější, protože musíme pracovat s maticemi 8x8, nebudu jej proto podrobně rozepisovat, ale alespoň uvedu, že počáteční stav je v této reprezentaci dán vektorem $|\psi\rangle = (0,0,1,0,0,-1,0,0)^T$ a výše zmíněné projektory jsou dány maticemi:

$$\hat{P}_1 = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1&0&0&0&1&0&0&0\\ 0&1&0&0&0&1&0&0\\ 0&0&1&0&0&0&1&0\\ 0&0&0&1&0&0&0&1\\ 1&0&0&0&1&0&0&0\\ 0&1&0&0&0&1&0&0\\ 0&0&1&0&0&0&1&0\\ 0&0&0&1&0&0&0&1 \end{pmatrix} \quad \hat{P}_2 = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1&0&1&0&0&0&0&0\\ 0&1&0&1&0&0&0&0\\ 1&0&1&0&0&0&0&0\\ 0&1&0&1&0&0&0&0\\ 0&0&0&0&1&0&1&0\\ 0&0&0&0&0&1&0&1\\ 0&0&0&0&1&0&1&0\\ 0&0&0&0&0&1&0&1 \end{pmatrix} \quad \hat{P}_\pm = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1&\pm1&0&0&0&0&0&0\\ \pm1&1&0&0&0&0&0&0\\ 0&0&1&\pm1&0&0&0&0\\ 0&0&\pm1&1&0&0&0&0\\ 0&0&0&0&1&\pm1&0&0\\ 0&0&0&0&\pm1&1&0&0\\ 0&0&0&0&0&0&1&\pm1\\ 0&0&0&0&0&0&\pm1&1 \end{pmatrix}$$

Normovaný vektor před třetím měřením pak je $|\psi\rangle = \frac{1}{2\sqrt{2}}(1,-1,1,-1,1,-1,1,-1)^T$.

Úloha 2(10 bodů)
Částice v centrálním Coulombickém poli je připravena v prvním excitovaném stavu ($n = 2$) se z-tovou složkou orbitálního momentu hybnosti rovnou 0. Jaká je dimenzionalita prostoru všech stavů, které vyhovují tomuto popisu? Najděte mezi nimi stav s největší pravděpodobností výskytu v horní polorovině $z > 0$.

Nápověda pro rychlý výpočet integrálů si vzpomeňte na Γ*-funkci:*

$$\frac{1}{a}\int_0^\infty \left(\frac{x}{a}\right)^n e^{-x/a}\mathrm{d}x = \int_0^\infty t^n e^{-t}\mathrm{d}t = n!$$

Řešení:
Na začátku si uvědomíme, které stavy ψ_{nlm} částice v Coulombickém poli odpovídají zadání. V zadání je jasně řečeno, že $n = 2$ a $m = 0$. Z řešení Coulobického problému víme, že $l < n$, takže připadají v úvahu dvě hodnoty $l = 0, 1$. Takže obecná vlnová funkce popsaná v zadání má tvar

$$\psi = A\psi_{200} + B\psi_{210} = A\tfrac{1}{\sqrt{4\pi}}\tfrac{1}{\sqrt{2a^3}}\left(1 - \tfrac{r}{2a}\right)e^{-\frac{r}{2a}} + B\tfrac{1}{\sqrt{4\pi}}\tfrac{\sqrt{3}}{2\sqrt{6a^3}}\tfrac{z}{r}\tfrac{r}{a}e^{-\frac{r}{2a}},$$

kde $z = r\cos\theta$, A a B jsou dvě komplexní konstanty, splňující podmínku $|A|^2 + |B|^2 = 1$, a v taháku jsme našli příslušné radiální vlnové funkce R_{nl} a sférické harmoniky Y_{lm} takže $\psi_{2l0} = Y_{l0}(\theta,\phi)R_{2l}(r)$. Je vidět, že hledané funkce tvoří podprostor dimenze 2.

Pravděpodobnost výskytu částice v horní polorovině spočítáme integrací přes horní polorovinu (sférický úhel θ jen od 0 do $\frac{\pi}{2}$) ve sférických souřadnicích

$$\begin{aligned} p(z>0) &= \int_{z>0} |\psi|^2\mathrm{d}V \equiv \int_0^{2\pi}\int_0^{\frac{\pi}{2}}\int_0^\infty |\psi|^2\,\mathrm{d}\varphi\,\sin\theta\,\mathrm{d}\theta r^2\,\mathrm{d}r = \\ &= |A|^2\int_{z>0}|\psi_{200}|^2\mathrm{d}V + |B|^2\int_{z>0}|\psi_{210}|^2\mathrm{d}V + (AB^* + A^*B)\int_{z>0}\psi_{200}\psi_{210}\mathrm{d}V. \end{aligned}$$

Snadno si rozmyslíte, že první dva integrály jsou rovny 1/2, protože funkce ψ_{200} a $|\psi_{210}|$ jsou normované na 1 přes celý prostor a symetrické vůči rovině xy, takže integrál přes horní polorovinu i dolní polorovinu je stejný. Navíc platí $|A|^2 + |B|^2 = 1$, takže první dva členy se vysčítají na 1/2. Integrál v posledním členu je roven

$$\frac{1}{4\pi}\frac{1}{4a^3}\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\varphi\int_0^{\frac{\pi}{2}}\cos\theta\sin\theta\,\mathrm{d}\theta\int_0^\infty r^2\tfrac{r}{a}\left(1 - \tfrac{1}{2}\tfrac{r}{a}\right)e^{-\frac{r}{a}}\,\mathrm{d}r.$$

Integrál přes φ je roven 2π, integrál přes θ převedeme substitucí $t = \cos\theta$ na $\int_0^1 t\,\mathrm{d}t = \frac{1}{2}$. K integrálu přes r přidáme prefaktor $1/a^3$ a provedeme substituci $t = r/a$ takže dostaneme integrál

$$\int_0^\infty \left(t^3 - \tfrac{1}{2}t^4\right)e^{-t}\,\mathrm{d}t,$$

v němž využijeme nápovědu takže výsledek je $3! - 4!/2 = 6 - 12 = -6$. Po dosazení všech mezivýsledků zpět dostaneme $p(z > 0) = \frac{1}{2} - \frac{3}{8}(AB^* - A^*B)$. Zbývá najít konstanty A, B pro něž je tato pravděpodobnost největší. To bude pro nejmenší možnou hodnotu výrazu $V = AB^* - A^*B$. Libovolné konstanty splňující normovací podmínku $|A|^2 + |B|^2 = 1$ lze napsat jako $A = \cos\alpha e^{ia}$, $B = \sin\alpha e^{ib}$, kde $\alpha \in \langle 0, \frac{\pi}{2}\rangle$ a $a, b \in \langle 0, 2\pi)$, takže $V = \cos\alpha\sin\alpha(e^{i(a-b)} + e^{i(b-a)}) = \sin 2\alpha\cos(a - b)$. Minimum pravděpodobnosti tedy bude $p(z > 0) = 1/2 + 3/8$ pro $a - b = \pi$ a pro $\phi = \pi/4$ a to nastane pro $A = -B = 1/\sqrt{2}$ neboli pro

$$\psi = (\psi_{200} - \psi_{210})/\sqrt{2}$$

což je hledaný stav s nejpravděpodobnějším výskytem (87.5%) v horní polorovnině.

Poznámky k Vašim řešením:
Toto byla k mému překvapení nejméně úspěšná úloha. Bylo odevzdáno 20 řešení a průměrné hodnocení bylo 2.8 bodu. Nikdo nedostal více než 5 bodů. Téměř nikdo si nevšiml, že stav může být lineární kombinací funkcí ψ_{200} a ψ_{210} a pokud ano, ignoroval interferenční člen a myslel si, že když pro oba stavy je pravděpodobnost rovna jedné polovině, bude totéž platit pro jejich lineární kombinaci. Dobře se na úlohu podívejte a vezměte si z ní poučení pro význam interferenčního členu. To je právě jednou z podstatných aspektů kvantového chování.

Alternativní řešení nevidím. Jen integrály z $|\psi_{200}|^2$ a z $|\psi_{210}|^2$ je možno počítat explicitně, i když je výsledek možno určit ze symetrie, jak je ukázáno nahoře. Tento explicitní výpočet probíhá stejně jako pro interferenční člen a nebudu jej zde přímo vypisovat. Výpočet v kartézských souřadnicích by byl nepraktický, ne-li neproveditelný a přechod do jiné reprezentace není vhodný, protože základní otázka úlohy se týká polohy.

Úloha 3(10 bodů)
Orientace dvouatomové molekuly v čase $t = 0$ je popsána vlnovou funkcí $\psi(\vec{n}) \equiv \psi(\theta, \varphi) = x^2 + y^2 = \sin^2\theta$. Časový vývoj je určen operátorem hamiltoniánu $\hat{H} = \hat{L}^2/2I$, kde $\hat{L}^2$ je operátor kvadrátu orbitálního momentu hybnosti a $I > 0$ je konstanta (moment setrvačnosti). V jakém čase t je nejmenší pravděpodobnost nalézt molekulu orientovanou do směru $\vec{n} = \vec{e}_x \equiv (1, 0, 0)$ (neboli $x = 1$, $y = z = 0$), tj. $\theta = \frac{\pi}{2}$, $\phi = 0$.

Řešení:
V úloze je třeba najít časový vývoj vlnové funkce. Hamiltonián je úměrný operátoru kvadrátu orbitálního momentu hybnosti, takže je potřeba rozložit vlnovou funkci do sférických harmonik, které jsou jeho vlastními funkcemi. Jejich časový vývoj je pak daný jen komplexní fází. Pravděpodobnost ve zvoleném směru je pak úměrná kvadrátu vlnové funkce v tom směru. Dodejme, že směrový vektor $\vec{n} = (x, y, z) = (\cos\varphi \sin\theta, \sin\varphi \sin\theta, \cos\theta)$ je jednotkový, takže $x^2 + y^2 + z^2 = 1$.

Začneme tedy rozkladem vlnové funkce do sférických harmonik. Je jasné, že budeme potřebovat harmoniky s $m = 0$ (vlnová funkce nezávisí na φ), maximálně do stupně l (vlnová funkce polynom v x,y,z stupně 2) a jen sudé l (ψ sudá funkce). Z jejich tabulky v taháku vyčteme

$$Y_{00}\sqrt{4\pi} = x^2 + y^2 + z^2 = 1, \qquad Y_{20}\sqrt{4\pi}\tfrac{2}{\sqrt{5}} = 2z^2 - x^2 - y^2,$$

takže

$$\sqrt{4\pi}(2Y_{00} - \tfrac{2}{\sqrt{5}}Y_{20}) = 3(x^2 + y^2) = 3\psi.$$

Stav Y_{00} je vlastní funkcí operátoru $\hat{L}^2$ s vlastní hodnotou 0, takže je stacionárním stavem s nulovou energií a tato vlnová funkce se v čase nemění. Stav Y_{20} je vlastní funkcí operátoru $\hat{L}^2$ s vlastní hodnotou $6\hbar^2$, takže je stacionárním stavem s energií $E = L^2/2I = 3\hbar^2/I$ a jeho časový vývoj je dán fázovým faktorem $\exp(-\frac{iEt}{\hbar})$. Takže časový vývoj vlnové funkce je

$$\psi(t) = \tfrac{\sqrt{4\pi}}{3}\left[2Y_{00} - \tfrac{2}{\sqrt{5}}Y_{20}\exp(-\tfrac{3i\hbar t}{I})\right] = \tfrac{2}{3} - \tfrac{1}{3}(2z^2 - x^2 - y^2)\exp(-\tfrac{3i\hbar t}{I}),$$

nebo pokud chcete to lze upravit s použitím vztahu $x^2 + y^2 = 1 - z^2 = 1 - \cos^2\theta$

$$\psi(t) = \tfrac{2}{3} - \left(z^2 - \tfrac{1}{3}\right)\exp(-\tfrac{3i\hbar t}{I}), = \tfrac{2}{3} - \left(\cos^2\theta - \tfrac{1}{3}\right)\exp(-\tfrac{3i\hbar t}{I}).$$

Pokud hledáme čas t, kdy se minimalizuje pravděpodobnost ve směru $x = 1$, $y = z = 0$, vidíme, že vlnová funkce v tomto směru je úměrná komplexnímu číslu

$$2 + \exp(-\frac{3i\hbar t}{I}).$$

Toto komplexní číslo má nejmenší velikost, když bude fázový faktor roven $-1 = e^{-i\pi}$, tj. pro $t = \pi I/3\hbar$.

Poznámky k Vašim řešením:
Také s touto úlohou jste měli dost problémů. Odevzdali jste 19 řešení s průměrným hodnocením 3 body. Nejlepší řešení jsem hodnotil 8 body. U této úlohy mě to tolik nepřekvapilo. Ačkoli řešení bylo poměrně rychlé a přímočaré (s využitím tabulky sférických harmonik), byla úloha možná konceptuálně obtížnější. S 3D rotorem jste se přímo nesetkali, ale bylo to dotažení myšlenek vyložených na cvičení 5, kde jsme dělali 2D rotor a uvědomění si, že operátor $\hat{L}^2$ dobře znáte z přednášky a ze cvičení 8 a 10. Dále, že tento operátor závisí jen na úhlových proměnných, takže jej lze chápat jako operátor na prostoru $L^2(S_3)$ (prostor kvadraticky integrovatelných funkcí na jednotkové sféře ve 3D).

Alternativní řešení:
Jen tak pro zajímavost jsem se pokusil vymyslet alternativní řešení vycházející z přímého řešení časové Schrödingerovy rovnice pomocí komutačních relací. Ale doporučený postup, který má obecnější použití je ten výše.

Nejdříve si uvědomíme, že funkce $|\phi_0\rangle = \sqrt{4\pi}Y_{00} = 1$ je vlastní funkcí operátoru $\hat{L}^2$ odpovídající vlastní hodnotě 0, protože operátor momentu hybnosti derivuje podle úhlových proměnných, na nichž tato funkce nezávisí, takže $\hat{L}^2|\phi_0\rangle = 0$. Vlnová funkce $|\phi_0\rangle$ tedy nezávisí na čase, protože evoluční operátor $\hat{U}(t) = \exp -i\hat{H}(t/\hbar)$ na ni působí jako násobení $1 = e^0$. Nyní napíšeme vlnovou funkci jako

$$|\psi\rangle = (1 - \hat{z}^2)|\phi_0\rangle = |\phi_0\rangle - |\phi_z\rangle,$$

kde jsme časově závislou část vlnové funkce označili $|\phi_z\rangle \equiv \hat{z}^2|\phi_0\rangle$. Nyní se podíváme co dá časová Schrödingerova rovnice pro tuto funkci

$$i\hbar\partial_t|\psi\rangle = -i\hbar\partial_t|\phi_z\rangle = \underbrace{\hat{H}|\phi_0\rangle}_{0} - \hat{H}|\phi_z\rangle = -\tfrac{1}{2I}\hat{L}^2\hat{z}^2|\phi_0\rangle = -\tfrac{1}{2I}\{\hat{z}^2\underbrace{\hat{L}^2|\phi_0\rangle}_{0} + [\hat{L}^2, \hat{z}^2]|\phi_0\rangle\}.$$

Nyní postupně vyčíslíme potřebný komutátor (pamatujte, že $\hat{L}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2$ a z taháku $[\hat{L}_\alpha, \hat{x}_\beta] = i\hbar\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}\hat{x}_\gamma$)

$$\begin{aligned}
[\hat{L}^2, \hat{z}] &= [\hat{L}_x^2, \hat{z}] + [\hat{L}_y^2, \hat{z}] + \underbrace{[\hat{L}_z^2, \hat{z}]}_{0} = \hat{L}_x\underbrace{[\hat{L}_x, \hat{z}]}_{-i\hbar y} + [\hat{L}_x, \hat{z}]\hat{L}_x + \hat{L}_y\underbrace{[\hat{L}_y, \hat{z}]}_{i\hbar x} + [\hat{L}_y, \hat{z}]\hat{L}_y \\
&= i\hbar\{\hat{x}\hat{L}_y + \underbrace{\hat{L}_y\hat{x}}_{\hat{x}\hat{L}_y + [\hat{L}_y\hat{x}]} - \hat{y}\hat{L}_x - \underbrace{\hat{L}_x\hat{y}}_{\hat{y}\hat{L}_x + [\hat{L}_x\hat{y}]}\} = i\hbar\{2\hat{x}\hat{L}_y - 2\hat{y}\hat{L}_x - 2i\hbar\hat{z}\}
\end{aligned}$$

Podobně s užitím tohoto výsledku dostaneme

$$\begin{aligned}
[\hat{L}^2, \hat{z}^2] &= \hat{z}[\hat{L}^2, \hat{z}] + [\hat{L}^2, \hat{z}]\hat{z} = i\hbar\{2\hat{x}(\hat{z}\hat{L}_y + \hat{L}_y\hat{z}) - 2\hat{y}(\hat{z}\hat{L}_x + \hat{L}_x\hat{z}) - 4i\hbar\hat{z}^2\} \\
&= 4i\hbar(\hat{x}\hat{z}\hat{L}_y - \hat{y}\hat{z}\hat{L}_x) + 4\hbar^2\hat{z}^2 - 2\hbar^2\hat{x}^2 - 2\hbar^2\hat{y}^2 \\
&= 4i\hbar\hat{z}(\hat{x}\hat{L}_y - \hat{y}\hat{L}_x) + 2\hbar^2(3\hat{z}^2 - 1).
\end{aligned}$$

Tento výsledek dosadíme do Schrödingerovy rovnice výše, přičemž si uvědomíme, že pro jakoukoli složku momentu hybnosti platí $\hat{L}_\alpha|\phi_0\rangle = 0$ (proto jsme se snažili ve všech členech prokomutovat operátory $\hat{L}_\alpha$ co nejvíce doprava), takže ve Schrödingerově rovnici zbyde jen

$$-i\hbar\partial_t|\phi_z\rangle = -\tfrac{1}{2I}[\hat{L}^2, \hat{z}^2]|\phi_0\rangle = \tfrac{2\hbar^2}{2I}(1 - 3\hat{z}^2)|\phi_0\rangle = \tfrac{2\hbar^2}{2I}\{|\phi_0\rangle - 3|\phi_z\rangle\}.$$

Toto je z matematického hlediska obyčejná diferenciální rovnice pro funkci $f(t, z) = |\phi_z(t)\rangle$ (dle definice jsme dosadili $|\phi_0\rangle = 1$):

$$\partial_t f(t, z) = \beta i[1 - 3f(t, z)]$$

závisející na parametru z a konstantě $\beta = \frac{\hbar}{I}$ a s počáteční podmínkou $f(t = 0, z) = z^2|\phi_0\rangle = z^2$. Partikulární řešení této nehomogenní rovnice je konstantní funkce $f = 1/3$, obecné řešení pak $f = 1/3 + C\exp(-3i\beta t)$. Konstantu $C = z^2 - \frac{1}{3}$ pak určíme z počáteční podmínky. Takže nakonec dostáváme, že

$$|\psi(t)\rangle = |\phi_0\rangle - |\phi_z(t)\rangle = 1 - f(t, z) = \frac{2}{3} - \left(z^2 - \frac{1}{3}\right)e^{-3i\beta t},$$

což je stejný výsledek jako jsme dostali první metodou.

Úloha 4(10 bodů)
Uvažujme lineární harmonický oscilátor ve 2D s hamiltoniánem $\hat{H} = \frac{1}{2}(-\partial_x^2 - \partial_y^2 + x^2 + y^2)$ a s momentem hybnosti $\hat{L} = \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x$ připravený ve stavu $|\psi\rangle = |20\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}(a_x^\dagger)^2|00\rangle$. Najděte $\langle\hat{L}\rangle$. Jaké hodnoty L je možno naměřit a s jakou pravděpodobností? Jaká je matice (operátor) hustoty po tomto měření, pokud neznáme jeho výsledky?
Poznámka: Úloha je zadána v jednotkách v nichž $m = \omega = \hbar = 1$.

Řešení:
Všechny otázky této úlohy se točí kolem měření veličiny $\hat{L}$ ve stavu $|20\rangle$. Tato veličina je vlastně z-tová složka momentu hybnosti, která komutuje s hamiltoniánem $\hat{H}$. Podle vět o komutujících operátorech tedy můžeme vlastní vektory operátoru $\hat{L}$ hledat ve vlastním podporostoru hamiltoniánu odpovídající stejné energii jako má stav $|20\rangle$. Protože energie harmonického oscilátoru ve stavu $|n_x n_y\rangle$ závisí jen na součtu $N = n_x + n_y$, budou nás zajímat jen stavy s $N = 2$: $|20\rangle$, $|11\rangle$ a $|02\rangle$. Působení operátoru $\hat{L}$ na tyto vektory nejlépe nalezneme, když si vyjádříme $\hat{x}$, $\hat{p}_y$, $\hat{y}$ a $\hat{p}_x$ pomocí $\hat{a}_x$ a $\hat{a}_y$

$$\hat{L} = \frac{(\hat{a}_x + \hat{a}_x^\dagger)}{\sqrt{2}} \frac{(\hat{a}_y - \hat{a}_y^\dagger)}{i\sqrt{2}} - \frac{(\hat{a}_y + \hat{a}_y^\dagger)}{\sqrt{2}} \frac{(\hat{a}_x - \hat{a}_x^\dagger)}{i\sqrt{2}} = i(\hat{a}_y^\dagger \hat{a}_x - \hat{a}_x^\dagger \hat{a}_y).$$

takže

$$\begin{array}{rcl} \hat{L}|20\rangle &=& i\sqrt{2}|11\rangle \\ \hat{L}|11\rangle &=& i\sqrt{2}(|02\rangle - |20\rangle) \\ \hat{L}|02\rangle &=& -i\sqrt{2}|11\rangle \end{array} \qquad \Rightarrow \qquad L_2 = \sqrt{2}\begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix},$$

kde jsme použili známé působení kreačních a anihilačních operátorů na stavy harmonického oscilátoru. Nakonec řádku výše jsme zapsali působení operátoru $\hat{L}$ ve vlastním podprostoru $N = 2$ jako matici L_2. Vlastní čísla této matice najdeme pomocí charakteristického polynomu $\lambda^3 - 4\lambda$, který má kořeny $\lambda = 0, \pm 2$. Příslušné vlastní vektory $|\psi_\lambda\rangle$ pak najdeme standardní metodou $|\psi_0\rangle = (1, 0, 1)^T$, $|\psi_{\pm 2}\rangle = (1, \pm i\sqrt{2}, -1)^T$, neboli po normování

$$|\psi_0\rangle = \tfrac{1}{\sqrt{2}}(|02\rangle + |02\rangle), \qquad |\psi_{\pm 2}\rangle = \tfrac{1}{2}(|02\rangle \pm i\sqrt{2}|11\rangle - |02\rangle).$$

Nyní už můžeme odpovědět na otázky z úlohy. Pro veličinu L můžeme naměřit hodnotu $\lambda = 0$ s pravděpodobností $p_0 = |\langle\psi_0|200\rangle|^2 = 0.5$ a hodnoty $\lambda = \pm 2$ s pravděpodobnostmi $p_{\pm 2} = |\langle\psi_{\pm 2}|200\rangle|^2 = 0.25$. Střední hodnota $\langle L\rangle = \langle 20|\hat{L}|20\rangle$ je rovnou horní levý roh matice L_2, tj. $\langle L\rangle = 0$. Matice hustoty po měření je pak dána vzorečkem z přednášky

$$\hat{\rho} = p_0|\psi_0\rangle\langle\psi_0| + p_{-2}|\psi_{-2}\rangle\langle\psi_{-2}| + p_2|\psi_2\rangle\langle\psi_2|,$$

což mi stačilo, ale po dosazení za p_λ a $|\psi_\lambda\rangle$ lze přepsat do tvaru

$$\hat{\rho} = \tfrac{1}{8}\left[3|20\rangle\langle 20| + 2|11\rangle\langle 11| + 3|02\rangle\langle 02| + |20\rangle\langle 02| + |02\rangle\langle 20|\right].$$

Poznámky k Vašim řešením:
Tato úloha byla velmi blízká tomu co jste dělali v domácí úloze 5, takže patrně i díky tomu byly výsledky lepší než v předchozích dvou úlohách. Sešlo se mi 22 řešení s průměrným hodnocením 5.5 bodu a z toho 6 řešení bylo zcela správně. Většina nesprávných řešení spočívala prostě v tom, že jste úlohu nedořešili, nebo si možná nevěděli rady. V jednom případě si řešitel neuvědomil, že úloha je dvou a ne třídimenzionální.

Alternativní řešení v souřadnicové reprezentaci:
Kolegyně Tynianskaia se pokusila řešit úlohu přímo s souřadnicové reprezentaci. Pro ilustraci ukážu, jak lze tuto metodu správně dotáhnout do konce, abyste viděli jiný postup než ten vycházející z domácí úlohy. Začneme tím, že si zadaný stav napíšeme v souřadnicové reprezentaci s pomocí vlastních funkcí harmonického oscilátoru napsaných v taháku:

$$\psi(x,y) = \langle x|2\rangle\langle y|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{x_0 8\sqrt{\pi}}} H_2(\tfrac{x}{x_0}) e^{-\frac{1}{2}\frac{x^2}{x_0^2}} \frac{1}{\sqrt{x_0\sqrt{\pi}}} e^{-\frac{1}{2}\frac{y^2}{x_0^2}} = \frac{1}{x_0\sqrt{2\pi}}\left[2\frac{x^2}{x_0^2}-1\right] e^{-\frac{1}{2}\frac{x^2+y^2}{x_0^2}}.$$

Dalším krokem je uvědomit si, jak působí operátor $\hat{L}$ v souřadnicové reprezentaci. Při tom přejdeme do polárních souřadnic $(x,y) = (r\cos\varphi, r\sin\varphi)$, takže

$$\frac{\partial}{\partial\varphi} = \frac{\partial x}{\partial\varphi}\frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial y}{\partial\varphi}\frac{\partial}{\partial y} = -y\partial_x + x\partial_y = \hat{L}/(-i\hbar)$$

neboli $\hat{L} = -i\hbar\partial_\varphi$. Vlastní funkce tohoto operátoru jsou $e^{im\varphi}$ pro celočíselné hodnoty m a příslušná vlastní čísla jsou $\hbar m$. Libovolnou vlnovou funkci můžeme pro fixní r rozložit do Fourierovy řady

$$\psi(r,\varphi) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} \phi_m(r) e^{im\varphi}.$$

Projektor $\hat{P}_m$ na vlastní podprostor operátoru $\hat{L}$ příslušející hodnotě $\hbar m$ působí tak, že vynuluje všechny členy této řady, kromě m-tého

$$\hat{P}_m\psi = \phi_m(r)e^{im\varphi} \equiv \psi_m.$$

Z toho už se dá najít odpověď na všechny otázky úlohy, pokud najdeme rozklad zadané vlnové funkce. K tomu nám stačí použít vzorec $x = r\cos\varphi = \frac{r}{2}(e^{i\varphi}+e^{-i\varphi})$ takže

$$\psi = \tfrac{1}{x_0\sqrt{2\pi}}\left[\tfrac{r^2}{2x_0^2}(e^{i\varphi}+e^{-i\varphi})^2 - 1\right] e^{-\frac{r^2}{2x_0^2}} = \tfrac{1}{x_0\sqrt{2\pi}}\left[\tfrac{r^2}{2x_0^2}(e^{2i\varphi}+e^{-2i\varphi}) + \tfrac{r^2}{x_0^2} - 1\right] e^{-\frac{r^2}{2x_0^2}}.$$

Odtud vidíme, že můžeme naměřit $m = 0, \pm 2$ a projekce ψ_m jsou

$$\psi_0 = \hat{P}_0\psi = \tfrac{1}{x_0\sqrt{2\pi}}[q^2-1]e^{-\frac{1}{2}q^2}, \qquad \psi_{\pm 2} = \hat{P}_{\pm 2}\psi = \tfrac{1}{x_0\sqrt{2\pi}}\tfrac{q^2}{2}e^{-\frac{q^2}{2}}e^{\pm 2i\varphi},$$

kde $q = \frac{r}{x_0}$. Pro výpočet pravděpodobnosti $p_m = \|\psi_m\|^2$ potřebujeme normu těchto projekcí, kterou vypočteme v polárních souřadnicích (kdyby měly všechny projekce stejnou závislost na q nemuseli bychom integrovat a stačily by jejich poměry)

$$\begin{aligned}
\|\psi_0\|^2 &= \int\!\!\int |\psi_0|^2 r\mathrm{d}r\mathrm{d}\varphi = \int\!\!\int |q^2-1|^2 e^{-q^2}\frac{r\mathrm{d}r}{x_0^2}\frac{\mathrm{d}\varphi}{2\pi} = \int_0^\infty [q^4-2q^2+1]e^{-q^2}q\mathrm{d}q \\
&= \frac{1}{2}\int_0^\infty [y^2-2y+1]e^{-y}\mathrm{d}y = \frac{1}{2}(2!-2+1) = \frac{1}{2}, \\
\|\psi_{\pm 2}\|^2 &= \int\!\!\int |\psi_{\pm 2}|^2 r\mathrm{d}r\mathrm{d}\varphi = \int\!\!\int \frac{q^4}{4}e^{-q^2}\frac{r\mathrm{d}r}{x_0^2}\frac{\mathrm{d}\varphi}{2\pi} = \frac{1}{4}\int_0^\infty q^4 e^{-q^2}q\mathrm{d}q = \frac{1}{8}\int_0^\infty y^2 e^{-y}\mathrm{d}y = \frac{1}{4}.
\end{aligned}$$

Tedy pravděpodobnosti vyšly stejně jako předchozím postupem. Střední hodnotu z nich můžeme vyjádřit jako

$$\langle\hat{L}\rangle = \hbar\sum_m m p_m = 0.$$

Mimochodem, můžete si rozmyslet, že v souřadnicové reprezentaci vyjde matice hustoty následovně

$$\langle r,\varphi|\hat{\rho}|r',\varphi'\rangle = \rho(r,r',\varphi,\varphi') = \sum_m P_m|\psi\rangle\langle\psi|P_m = \tfrac{1}{2\pi x_0^2}\left\{(q^2-1)(q'^2-1) + \tfrac{1}{2}q^2q'^2\cos 2(\varphi-\varphi')e^{-\frac{1}{2}(q^2+q'^2)}\right\}.$$

Úloha 5(10 bodů)
Na Hilbertově prostoru $\mathcal{H} = \mathbb{C}^2$ popisujícím Q-bit, s bází $\{|0\rangle, |1\rangle\}$ definujeme operátor hodnoty Q-bitu $\hat{n} = |1\rangle\langle 1|$. V systému dvou Q-bitů, se stavovým prostorem $\mathcal{H} = \mathbb{C}^2 \otimes \mathbb{C}^2$ definujeme operátor $\hat{N} = \hat{n} \otimes \hat{I} + \hat{I} \otimes \hat{n}$. Zjistěte, jak tento operátor působí na bázové vektory $|n_1 n_2\rangle$, kde $n_i \in 0, 1$ je hodnota i-tého Q-bitu. Předpokládejme, že Hamiltonián systému dvou Q-bitů je dán vzorcem $\hat{H} = \epsilon\hat{N} - \beta\hat{V}$, kde $\hat{V} = |10\rangle\langle 01| + |01\rangle\langle 10|$ je operátor přeskoku informace mezi Q-bity a ϵ, β jsou reálné konstanty. Dokažte, že $[\hat{H}, \hat{N}] = 0$. Předpokládejte, že v čase $t = 0$ je systém ve stavu $|00\rangle + |10\rangle$. Jaká je pravděpodobnost nalézt v čase $t > 0$ hodnotu druhého Q-bitu $n_2 = 1$?

Řešení:
Nejdříve se podíváme jak působí operátory $\hat{N}$ a $\hat{V}$ na obecný bázový vektor

$$\begin{aligned}
\hat{N}|n_1 n_2\rangle &= (\hat{n} \otimes \hat{I} + \hat{I} \otimes \hat{n})|n_1 n_2\rangle = (n_1 + n_2)|n_1 n_2\rangle, \\
\hat{V}|n_1 n_2\rangle &= \begin{cases} 0 & \text{pro } n_1 = n_2, \\ |n_2 n_1\rangle & \text{pro } n_1 \neq n_2, \end{cases}
\end{aligned}$$

takže $\hat{N}\hat{V}|n_1 n_2\rangle = \hat{V}\hat{N}|n_1 n_2\rangle = 0$ pro $n_1 = n_2$ a $\hat{N}\hat{V}|n_1 n_2\rangle = \hat{V}\hat{N}|n_1 n_2\rangle = (n_1 + n_2)|n_2 n_1\rangle$ pro $n_1 \neq n_2$, neboli $[\hat{V}, \hat{N}] = 0$ a tedy

$$[\hat{H}, \hat{N}] = [\epsilon\hat{N} - \beta\hat{V}, \hat{N}] = \epsilon[\hat{N}, \hat{N}] - \beta[\hat{V}, \hat{N}] = 0,$$

což jsme měli dokázat. Z této komutační relace, vidíme, že vlastní vektory operátoru $\hat{H}$ můžeme hledat ve vlastních podprostorech s konstantním $N = n_1 + n_2$. Pro $N = 0$ a $N = 2$ dostáváme rovnou vlastní vektory $|\psi_0\rangle = |00\rangle$ a $|\psi_2\rangle = |11\rangle$ s vlastní energií $E_0 = \langle 00|\hat{H}|00\rangle = 0$ a $E_2 = \langle 11|\hat{H}|11\rangle = N\epsilon = 2\epsilon$. Ve vlastním podprostoru $N = 1$ jsou dva stavy a působení hamiltoniánu na ně je

$$\begin{aligned}
\hat{H}|10\rangle &= (\epsilon\hat{N} - \beta\hat{V})|10\rangle = \epsilon|10\rangle - \beta|01\rangle \\
\hat{H}|01\rangle &= (\epsilon\hat{N} - \beta\hat{V})|01\rangle = \epsilon|01\rangle - \beta|10\rangle.
\end{aligned}$$

Z toho jsou ihned vidět vlastní hodnoty energie a vlastní vektory hamiltoniánu v tomto podprostoru

$$E = \begin{cases} (\epsilon - \beta) & \ldots & |\psi_+\rangle = \frac{1}{2}(|10\rangle + |10\rangle), \\ (\epsilon + \beta) & \ldots & |\psi_-\rangle = \frac{1}{2}(|10\rangle - |10\rangle), \end{cases}$$

Tyto vektory nejsou normované, ale to nevadí. Důležité je že jejich časový vývoj je $|\psi_a\rangle \exp(-iE_a t/\hbar)$. Rozvedeme do nich stav (přenormovaný), na nějž se ptá poslední otázka

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle + |10\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\psi_0\rangle + |\psi_+\rangle + |\psi_-\rangle).$$

Časový vývoj tohoto stavu je

$$|\psi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\psi_0\rangle + |\psi_+\rangle e^{\frac{-i(\epsilon-\beta)t}{\hbar}} + |\psi_-\rangle e^{\frac{-i(\epsilon+\beta)t}{\hbar}}\right) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|00\rangle + |10\rangle e^{\frac{-i\epsilon t}{\hbar}} \cos\frac{\beta t}{\hbar} + i|01\rangle e^{\frac{-i\epsilon t}{\hbar}} \sin\frac{\beta t}{\hbar}\right).$$

Pravděpodobnost nalezení druhého Q-bitu ve stavu $n_2 = 1$ je kvadrát absolutní hodnoty koeficientu u posledního členu, tj. $p = \frac{1}{2}\sin^2\frac{\beta t}{\hbar}$.

Poznámky k Vašim řešením:
Na tuto úlohu Vás dobře připravil domácí úkol 3, takže patřila k těm úspěšnějším. Celkem ji odevzdalo 27 lidí a průměrné hodnocení bylo více než 8 bodů. Z toho je vidět, že jste moc nechybovali.

Řešení naznačené výše se objevilo v různých variantách. Někteří si všimli, že působení operátoru $\hat{V}$ lze zapsat pomocí Kronekerova symbolu δ

$$\hat{V}|n_1 n_2\rangle = (1 - \delta_{n_1 n_2})|n_2 n_1\rangle = \delta_{n_1 0}\delta_{n_2 1}|10\rangle + \delta_{n_1 1}\delta_{n_2 0}|01\rangle.$$

Při vyjadřování komutátoru jste někteří postřehli, že díky $\hat{N}|01\rangle = |01\rangle$ a $\hat{N}|10\rangle = |10\rangle$ platí $\hat{N}\hat{V} = \hat{V}\hat{N} = \hat{V}$.

Pro vyjádření časového vývoje jste si mnohdy uvědomili, že díky $\hat{H}|00\rangle = 0$ zůstává tento stav konstantní v čase a stačí se zabývat vývojem stavu $|10\rangle$. Přitom $\hat{N}$ je díky dokázané komutační relaci zachovávající se veličinou, takže

$$\hat{U}(t)|10\rangle = b(t)|10\rangle + c(t)|01\rangle.$$

Kolega Paidar toho využil a dosazením tohoto předpokladu do časové Schodingerovy rovnice našel soustavu diferenciálních rovnic pro funkce $b(t)$ a $c(t)$. Poznamenejme, že řešení této soustavy pomocí charakteristického polynomu je samozřejmě ekvivalentní hledání vlastních čísel matice Hamiltoniánu.

Řešení založené na maticové reprezentaci: Mnoho z vás řešilo úlohu v reprezentaci v bázi $\{|00\rangle, |01\rangle, |10\rangle, |11\rangle\}$. Na rozdíl od první úlohy, kde byl stavový prostor osmidimenzionální, je to zde celkem efektivní. Pro operátory $\hat{N}$, $\hat{V}$ a $\hat{H}$ tak dostaneme matice

$$\hat{N} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}, \qquad \hat{V} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \qquad \hat{N} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \epsilon & -\beta & 0 \\ 0 & -\beta & \epsilon & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2\epsilon \end{pmatrix}.$$

Maticová reprezentace operátoru $\hat{N}$ tak v podstatě rovnou odpovídá na první otázku. Komutátor se dá spočíst prostým vynásobením výše uvedených matic $[\hat{H}, \hat{N}] = \hat{H}\hat{N} - \hat{N}\hat{H} = 0$.

Při řešení časového vývoje můžeme postupovat různě. Buď budeme sledovat stejný postup jako výše a najdeme vlastní čísla $0, \epsilon - \beta, \epsilon + \beta, 2\epsilon$ a vlastní vektory $|\psi_0\rangle = (1, 0, 0, 0)^T$, $|\psi_\pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(0, 1, \pm 1, 0)^T$, $|\psi_2\rangle = (0, 0, 0, 0)^T$ hamiltoniánu, do nichž rozložíme počáteční stav, který po normování je $|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(1, 1, 0, 0)^T = \frac{1}{\sqrt{2}}[|\psi_0\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}(|\psi_0\rangle + |\psi_0\rangle)]$, takže dostaneme časový vývoj jako v poslední rovnici na předchozí straně zapsaný pomocí sloupcového vektoru.

Někteří z vás vyjádřili nejprve evoluční operátor

$$\begin{aligned}\hat{U}(t) &= e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} = \sum_n |\psi_n\rangle\langle\psi_n| e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t} = \\ &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} + \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} e^{-\frac{i}{\hbar}(\epsilon-\beta)t} + \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} e^{-\frac{i}{\hbar}(\epsilon+\beta)t} + \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} e^{-\frac{i}{\hbar}2\epsilon t}.\end{aligned}$$

Zajímavý postřeh měli kolegové Starý a Divíšek, kteří si všimli, že díky komutační relaci $[\hat{N}, \hat{V}] = 0$, můžeme psát $e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} = e^{-\frac{i}{\hbar}\epsilon\hat{N}t} e^{\frac{i}{\hbar}\beta\hat{V}t}$. První exponenciálu vyčíslíte snadno, neboť operátor $\hat{N}$ je diagonální a tak dostaneme prostě na diagonále exponenciály příslušných diagonálních prvků. Druhou exponenciálu můžeme vypočíst jako exponenciálu Pauliho matice σ_x, protože $\hat{V}$ je vlastně σ_x obložená nulami. Pro Pauliho matice platí $\sigma_x^n = \sigma_x$ pro n liché a $\sigma_x^n = I$ pro n sudé takže z Taylorova rozvoje dostaneme $\exp \alpha\sigma_x = I\cos\alpha + \sigma_x i \sin\alpha$. Ať už použijete tento postup z Taylorova rozvoje nebo vzorec výše založený na spektrálním rozkladu dostanete evoluční operátor ve tvaru

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t)\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & e^{-\frac{i}{\hbar}\epsilon t}\cos\frac{\beta t}{\hbar} & e^{-\frac{i}{\hbar}\epsilon t} i \sin\frac{\beta t}{\hbar} & 0 \\ 0 & e^{-\frac{i}{\hbar}\epsilon t} i \sin\frac{\beta t}{\hbar} & e^{-\frac{i}{\hbar}\epsilon t}\cos\frac{\beta t}{\hbar} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{-\frac{i}{\hbar}2\epsilon t} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ e^{-\frac{i}{\hbar}\epsilon t}\cos\frac{\beta t}{\hbar} \\ e^{-\frac{i}{\hbar}\epsilon t} i \sin\frac{\beta t}{\hbar} \\ 0 \end{pmatrix}.$$