

Kvantová mechanika I: Zápočtová písemka

Michal Grňo

10. ledna 2020

1 Mionium v křemíku

2 Zadání

Mionium je vázaný stav mionu s elektronem, podobá se např. atomu vodíku, lze ho vytvořit např. bombardováním křemíkového krystalu miony. Interakce spinu mionu se spinem elektronu a interakce mionia v základním stavu s krystalem se dá modelovat Hamiltonián

$$\hat{H} + \hat{E}_0 + \frac{A}{\hbar^2} \hat{\mathbf{s}}_\mu \cdot \hat{\mathbf{s}}_e + \frac{D}{\hbar^2} \hat{s}_{\mu 3} \hat{s}_{e 3},$$

$$\hat{E}_0 = -\frac{1}{2} m_r c^2 \alpha^2 \hat{1},$$

$$\hat{\mathbf{s}}_\mu = \frac{\hbar}{2} \hat{\boldsymbol{\sigma}} \otimes \hat{1}, \quad \hat{\mathbf{s}}_e = \hat{1} \otimes \frac{\hbar}{2} \hat{\boldsymbol{\sigma}},$$

kde $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3)$ jsou Pauliho matice.

3 Řešení

Pauliho matice jsou

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Přímým dosazením do rovnice Hamiltoniánu tedy dostaneme:

$$E_0 = -\frac{\alpha^2 c^2 m_r}{2} \begin{pmatrix} 1 & & & \\ & 1 & & \\ & & 1 & \\ & & & 1 \end{pmatrix} \quad \mathbf{s}_\mu \cdot \mathbf{s}_e = \frac{\hbar^2}{4} \begin{pmatrix} 1 & & & \\ & -1 & 2 & \\ & 2 & -1 & \\ & & & 1 \end{pmatrix} \quad s_{\mu 3} s_{e 3} = \frac{\hbar^2}{4} \begin{pmatrix} 1 & & & \\ & -1 & & \\ & & -1 & \\ & & & 1 \end{pmatrix}$$
$$H = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} A + D - 2\alpha^2 c^2 m_r & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -A - D - 2\alpha^2 c^2 m_r & 2A & 0 \\ 0 & 2A & -A - D - 2\alpha^2 c^2 m_r & 0 \\ 0 & 0 & 0 & A + D - 2\alpha^2 c^2 m_r \end{pmatrix}$$

Diagonalizujeme-li H , získáme

$$H = R^{-1} H_{diag} R$$

$$R = \begin{pmatrix} 0 & -\sqrt{2}/2 & \sqrt{2}/2 & 0 \\ 0 & \sqrt{2}/2 & \sqrt{2}/2 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$H_{diag} = \begin{pmatrix} -\frac{3A}{4} - \frac{D}{4} - \frac{\alpha^2 c^2 m_r}{2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{A}{4} - \frac{D}{4} - \frac{\alpha^2 c^2 m_r}{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{A}{4} + \frac{D}{4} - \frac{\alpha^2 c^2 m_r}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{A}{4} + \frac{D}{4} - \frac{\alpha^2 c^2 m_r}{2} \end{pmatrix}$$

Na diagonále H_{diag} jsou energie vázaných stavů Hamiltoniánu, sloupce R jsou jim odpovídající stavové vektory $|\psi_\mu\rangle \otimes |\psi_e\rangle$.

Jako podúkol máme vyjádřit $|\rightarrow\rangle^{(\mu)}$ v bázi $\{|\uparrow\rangle^{(\mu)}, |\downarrow\rangle^{(\mu)}\}$. Ze cvičení víme, že těmito *kety* se označují vlastní vektory Pauliho matic:

$$|\rightarrow\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad |\uparrow\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |\downarrow\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Vyjádření $|\rightarrow\rangle^{(\mu)}$ v bázi $\{|\uparrow\rangle^{(\mu)}, |\downarrow\rangle^{(\mu)}\}$ je tedy zřejmé:

$$|\rightarrow\rangle^{(\mu)} = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\rangle^{(\mu)} + |\downarrow\rangle^{(\mu)}).$$

Dále předpokládáme, že v čase $t = 0$ je spin elektronu $|\psi\rangle^{(e)} = |\uparrow\rangle^{(e)}$, zatímco spin mionu je v obecném stavu:

$$|\psi(0)\rangle^{(e)} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |\psi(0)\rangle^{(\mu)} = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix},$$

$$|\psi(0)\rangle = |\psi(0)\rangle^{(e)} \otimes |\psi(0)\rangle^{(\mu)} = \begin{pmatrix} a \\ 0 \\ b \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Vyjádříme-li si tento vektor pomocí vlastních stavů Hamiltoniánu $|n\rangle = R_n$, dostaneme:

$$|\psi(0)\rangle = \frac{a}{\sqrt{2}} (-|2\rangle + |3\rangle) + b|1\rangle.$$

Víme, že pro časový vývoj obecného stavu platí:

$$|\psi(t)\rangle = e^{-i\hat{H}t/\hbar} |\psi(0)\rangle.$$

S použitím Sylvestrovy formule pro rozklad operátorové funkce pomocí vlastních stavů dostaneme

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle &= \sum_m e^{-iE_m t/\hbar} \hat{P}_{E_m} |\psi(0)\rangle \\ &= b e^{-iE_1 t/\hbar} |1\rangle - \frac{a}{\sqrt{2}} e^{-iE_2 t/\hbar} |2\rangle + \frac{a}{\sqrt{2}} e^{-iE_3 t/\hbar} |3\rangle, \end{aligned}$$

$$|\psi(t)\rangle = e^{-i(A+D-2\alpha^2 c^2 m_r)t/4\hbar} \left(b e^{i(2A+D)t/2\hbar} |1\rangle + \frac{a}{\sqrt{2}} \left(-e^{iDt/2\hbar} |2\rangle + |3\rangle \right) \right).$$

Nyní dosadíme zpět za vlastní vektory $|n\rangle$ a získáme:

$$|\psi(t)\rangle = \begin{pmatrix} \frac{a \left(e^{\frac{iDt}{2\hbar}} + 1 \right) e^{-\frac{it(A+D-2\alpha^2 c^2 m_r)}{4\hbar}}}{2} \\ \frac{a \left(1 - e^{\frac{iDt}{2\hbar}} \right) e^{-\frac{it(A+D-2\alpha^2 c^2 m_r)}{4\hbar}}}{2} \\ \frac{b e^{\frac{it(3A+D+2\alpha^2 c^2 m_r)}{4\hbar}}}{0} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \psi_{\uparrow\mu\uparrow e}(t) \\ \psi_{\uparrow\mu\downarrow e}(t) \\ \psi_{\downarrow\mu\uparrow e}(t) \\ \psi_{\downarrow\mu\downarrow e}(t) \end{pmatrix}$$

Nás zajímá projekce $\psi(t)$ na $|\rightarrow_\mu\rangle$, projekční matice je:

$$\begin{aligned} P_{\rightarrow\mu} &= |\rightarrow_\mu\rangle \langle\rightarrow_\mu| = |\rightarrow\uparrow\rangle \langle\rightarrow\uparrow| + |\rightarrow\downarrow\rangle \langle\rightarrow\downarrow| \\ &= \left(\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \right) \left(\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \right)^T + \left(\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right) \left(\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right)^T \\ &= \begin{pmatrix} 1/2 & 0 & 1/2 & 0 \\ 0 & 1/2 & 0 & 1/2 \\ 1/2 & 0 & 1/2 & 0 \\ 0 & 1/2 & 0 & 1/2 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Pravděpodobnost, že v čase t naměříme spin mionu orientovaný ve směru „ \rightarrow “ by potom měla být $p_{\rightarrow\mu}(t) = \left\| P_{\rightarrow\mu} |\psi(t)\rangle \right\|^2$. Po dosazení výrazů do SymPy mi vyšel tento výraz:

$$p_{\rightarrow\mu}(t) = e^{\frac{t(-\operatorname{im}(\alpha^2 c^2 m_r) + \operatorname{im}(\bar{\alpha}^2 \bar{c}^2 \bar{m}_r))}{\hbar}} \left| a e^{\frac{iDt}{2\hbar}} \bar{b} + a e^{\frac{iDt}{\hbar}} \bar{b} + 2ae^{\frac{it(A+D)}{\hbar}} \bar{a} + 2be^{\frac{it(A+D)}{\hbar}} \bar{b} + be^{\frac{it(2A+D)}{\hbar}} \bar{a} + be^{\frac{it(2A+\frac{3D}{2})}{\hbar}} \bar{a} \right|^2.$$

Je pravděpodobné, že pravděpodobnost buďto nezávisí na počátečním stavu mionu (a, b) , anebo alespoň mnohem jednodušším způsobem, nepodařilo se mi ale zjednodušit tvar rovnice, a to ani pomocí $a^2 + b^2 = 1$. Z nějakého důvodu program ignoroval i reálnost parametrů α, c, m_r .

4 Kvadratický Hamiltonián

4.1 Zadání

Pohyb částice je popsán Hamiltoniánem

$$\hat{H} = \hat{p}^4 + \hat{p}^2 \hat{x}^2 + \hat{x}^2 \hat{p}^2 + \hat{x}^4, \quad [\hat{x}, \hat{p}] = i.$$

Určete možné energie E_n této částice a jim odpovídající vlastní stavy $|n\rangle$. Vypočítejte střední hodnotu operátoru souřadnice v čase t , pokud je systém na počátku v čase $t = 0$ ve stavu

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|n\rangle + |n+1\rangle).$$

4.2 Řešení

Ze cvičení víme, že Hamiltonián harmonického oscilátoru je pro $M = \frac{1}{2}$, $\Omega = 1$, $\hbar = 1$ ve tvaru

$$\hat{H}_{harm.} = \hat{p}^2 + \hat{x}^2$$

si můžeme vyjádřit jako

$$\begin{aligned} \hat{H}_{harm.} &= \hat{n} + \frac{1}{2}, \\ \hat{n} &= \hat{a}^\dagger \hat{a}, \quad \hat{n} |n\rangle = n |n\rangle \quad \forall n \in \mathbb{N}_0, \\ \hat{x} &= \hat{a}^\dagger + \hat{a}, \quad \hat{p} = i (\hat{a}^\dagger - \hat{a}), \\ \hat{a} |n\rangle &= \sqrt{n} |n-1\rangle, \\ \hat{a}^\dagger |n\rangle &= \sqrt{n+1} |n+1\rangle. \end{aligned}$$

Pro náš kvadratický Hamiltonián zjevně platí

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \hat{p}^4 + \hat{p}^2 \hat{x}^2 + \hat{x}^2 \hat{p}^2 + \hat{x}^4, \\ &= (\hat{p}^2 + \hat{x}^2)^2 \\ &= \left(\hat{n} + \frac{1}{2} \right)^2 \\ &= \hat{n}^2 + \hat{n} + \frac{1}{2}. \end{aligned}$$

Jeho vlastní stavy budou tedy $|n\rangle$, stejné jako vlastní stavy harmonického oscilátoru, a jim příslušící vlastní energie budou

$$E_n |n\rangle = \hat{H} |n\rangle = \left(\hat{n}^2 + \hat{n} + \frac{1}{2} \right) |n\rangle = \left(n^2 + n + \frac{1}{2} \right) |n\rangle.$$

$$E_n = n^2 + n + \frac{1}{2}.$$

Nakonec nás zajímá časový vývoj stavu $|\psi(t)\rangle$ s počáteční podmínkou

$$|\psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|n\rangle + |n+1\rangle).$$

Víme, že pro časový vývoj obecného stavu platí (při $\hbar = 1$)

$$|\psi(t)\rangle = e^{-i\hat{H}t} |\psi(0)\rangle.$$

S použitím Sylvestrovy formule pro rozklad operátorové funkce pomocí vlastních stavů dostaneme

$$|\psi(t)\rangle = \sum_m e^{-iE_m t} \hat{P}_{E_m} |\psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (e^{-iE_n t} |n\rangle + e^{-iE_{n+1} t} |n+1\rangle),$$

$$|\psi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-it(n^2+n+\frac{1}{2})} (|n\rangle + e^{-2it(n+1)} |n+1\rangle).$$

Střední hodnota operátoru souřadnice \hat{x} potom bude

$$\begin{aligned} \langle \psi(t) | \hat{x} | \psi(t) \rangle &= \left(\langle n | + e^{2it(n+1)} \langle n+1 | \right) \hat{x} \left(|n\rangle + e^{-2it(n+1)} |n+1\rangle \right) \\ &= e^{2it(n+1)} \langle n+1 | \hat{x} | n \rangle + \langle n | \hat{x} | n \rangle + \langle n+1 | \hat{x} | n+1 \rangle + e^{-2it(n+1)} \langle n | \hat{x} | n+1 \rangle \\ &= e^{2it(n+1)} \langle n+1 | (\hat{a}^\dagger + \hat{a}) | n \rangle + \langle n | (\hat{a}^\dagger + \hat{a}) | n \rangle + \langle n+1 | (\hat{a}^\dagger + \hat{a}) | n+1 \rangle + e^{-2it(n+1)} \langle n | (\hat{a}^\dagger + \hat{a}) | n+1 \rangle \\ &= \sqrt{n+1} e^{2it} e^{2int} + \sqrt{n+1} e^{-2it} e^{-2int} \\ &= 2\sqrt{n+1} \cos(2t(n+1)). \end{aligned}$$

Použil jsem vyjádření \hat{x} pomocí posunovacích operátorů a následné zjednodušení pomocí knihovny SymPy.

5 Třírozměrná δ jáma

6 Zadání

Částice se pohybuje v třírozměrném přitažlivém potenciálu

$$V(x, y, z) = -a\delta(x) - b\delta(y) - c\delta(z), \quad a, b, c > 0.$$

Nalezněte energie všech vázaných stavů a jim odpovídající normované vlnové funkce. Pro nejnižší vázaný stav ověřte, že splňuje relace neurčitosti.

7 Řešení

Odpovídající Hamiltonián je pro $M = \frac{1}{2}$, $\Omega = 1$, $\hbar = 1$

$$\hat{H} = \hat{p}^2 + \hat{V} = -\Delta - a\delta(x) - b\delta(y) - c\delta(z).$$

Schrödingerova rovnice potom vede na parciální diferenciální rovnici

$$\begin{aligned} E_n \psi &= \hat{H} \psi \\ E_n \psi &= \left(\hat{p}^2 + \hat{V} = -\Delta - a\delta(x) - b\delta(y) - c\delta(z) \right) \psi \\ E_n \psi(x, y, z) + \Delta \psi(x, y, z) &= -a\psi(0, y, z)\delta(x) - b\psi(x, 0, z)\delta(y) - c\psi(x, y, 0)\delta(z) \end{aligned}$$

Tento typ rovnice jsme si bohužel na Matematice pro Fyziky III. nezavedli, proto ho formálně neumím řešit.