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

$$\hat{H} + \hat{E}_0 + \frac{A}{\hbar^2}\hat{\boldsymbol{s}}_\mu \cdot \hat{\boldsymbol{s}}_e + \frac{D}{\hbar^2}\hat{s}_{\mu 3}\hat{s}_{e3},$$

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

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

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

3 Řešení

Pauliho matice jsou

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

Přímým dosazením do rovnice Hamiltoniánu tedy dostaneme:

$$E_0 = -\frac{\alpha^2 c^2 m_r}{2}\begin{pmatrix} 1 & & & \\ & 1 & & \\ & & 1 & \\ & & & 1 \end{pmatrix} \qquad \boldsymbol{s}_\mu \cdot \boldsymbol{s}_e = \frac{\hbar^2}{4}\begin{pmatrix} 1 & & & \\ & -1 & 2 & \\ & 2 & -1 & \\ & & & 1 \end{pmatrix} \qquad s_{\mu 3}s_{e3} = \frac{\hbar^2}{4}\begin{pmatrix} 1 & & & \\ & -1 & & \\ & & -1 & \\ & & & 1 \end{pmatrix}$$

$$H = \frac{1}{4}\begin{pmatrix} A + D - 2\alpha^2 c^2 m_r & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -A - D - 2\alpha^2 c^2 m_r & 2A & 0 \\ 0 & 2A & -A - D - 2\alpha^2 c^2 m_r & 0 \\ 0 & 0 & 0 & A + D - 2\alpha^2 c^2 m_r \end{pmatrix}$$

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 $\big|\psi_\mu\big\rangle \otimes |\psi_e\rangle$.

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:

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

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

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

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

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

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

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

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

Víme, že pro časový vývoj obecného stavu platí:

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

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

$$\begin{aligned}\big|\psi(t)\big\rangle &= \sum_m \mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_m t/\hbar}\hat{\mathrm{P}}_{E_m}\big|\psi(0)\big\rangle \\ &= b\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_1 t/\hbar}\ |1\rangle \quad - \frac{a}{\sqrt{2}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_2 t/\hbar}\ |2\rangle \quad + \frac{a}{\sqrt{2}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_3 t}\ |3\rangle,\end{aligned}$$

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

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

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

Všimněme si, že první dvě složky obě odpovídají stavu, kdy je spin mionu ve směru $\uparrow$, platí tedy:

$$P(\uparrow_\mu) = P(\uparrow_\mu\uparrow_e) + P(\uparrow_\mu\downarrow_e) = \int_{a,b} |\psi_{\uparrow_\mu\uparrow_e}(t)|^2 + |\psi_{\uparrow_\mu\downarrow_e}(t)|^2\,\mathrm{d}P,$$

kde $\int_{a,b}\,\mathrm{d}P$ je integrál přes všechny možné počáteční hodnoty a, b, $a^2 + b^2 = 1$.

4 Kvadratický Hamiltonián

4.1 Zadání

Pohyb částice je popsán Hamiltoniánem

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

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

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

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

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

Pro náš kvadratický Hamiltonián zjevně platí

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

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 $\left|\psi(t)\right\rangle$ s počáteční podmínkou

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

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

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

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

$$\left|\psi(t)\right\rangle = \sum_m \mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_m t}\hat{\mathrm{P}}_{E_m}\left|\psi(0)\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_n t}\,|n\rangle + \mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_{n+1}t}\,|n+1\rangle\right),$$

$$\left|\psi(t)\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}t\left(n^2+n+\frac{1}{2}\right)}\left(|n\rangle + \mathrm{e}^{-2\mathrm{i}t(n+1)}\,|n+1\rangle\right).$$

Střední hodnota operátoru souřadnice $\hat{x}$ potom bude

$$\begin{aligned}
\big\langle\psi(t)\big|\ \hat{x}\ \big|\psi(t)\big\rangle &= \Big(\langle n| + \mathrm{e}^{2\mathrm{i}t(n+1)}\,\langle n+1|\Big)\ \hat{x}\ \Big(|n\rangle + \mathrm{e}^{-2\mathrm{i}t(n+1)}\,|n+1\rangle\Big) \\
&= \mathrm{e}^{2\mathrm{i}t(n+1)}\langle n+1|\hat{x}\,|n\rangle + \langle n|\hat{x}\,|n\rangle + \langle n+1|\hat{x}\,|n+1\rangle + \mathrm{e}^{-2\mathrm{i}t(n+1)}\langle n|\hat{x}\,|n+1\rangle \\
&= \mathrm{e}^{2\mathrm{i}t(n+1)}\langle n+1|\,\Big(\hat{a}^\dagger + \hat{a}\Big)\,|n\rangle + \langle n|\,\Big(\hat{a}^\dagger + \hat{a}\Big)\,|n\rangle + \langle n+1|\,\Big(\hat{a}^\dagger + \hat{a}\Big)\,|n+1\rangle + \mathrm{e}^{-2\mathrm{i}t(n+1)}\langle n|\,\Big(\hat{a}^\dagger + \hat{a}\Big)\,|n+1\rangle \\
&= \sqrt{n+1}\,\mathrm{e}^{2\mathrm{i}t}\mathrm{e}^{2int} + \sqrt{n+1}\,\mathrm{e}^{-2\mathrm{i}t}\mathrm{e}^{-2int} \\
&= 2\sqrt{n+1}\,\cos\big(2t\,(n+1)\big).
\end{aligned}$$

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

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

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 $M = \frac{1}{2},\ \Omega = 1,\ \hbar = 1$

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