Úvod do kvantové mechaniky: Domácí úkoly

Michal Grňo

13. června 2020

1 Úloha č. 2

1.1 Zadání

V roce 2084 měří pozorovatel qubity v bázi

$$|+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\big(|\,0\,\rangle + |\,1\,\rangle\big), \qquad |-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\big(|\,0\,\rangle - |\,1\,\rangle\big)$$

Jaká je pravděpodobnost, že naměří $|+\rangle\,|+\rangle\,|+\rangle$, a jaká je pravděpodobnost že naměří $|-\rangle\,|-\rangle\,|-\rangle$ když měří qubity ve stavu

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}\,|\,1\,\rangle\,|\,0\,\rangle\,|\,1\,\rangle + \frac{2}{\sqrt{3}}\,|\,0\,\rangle\,|\,1\,\rangle\,|\,0\,\rangle$$

1.2 Řešení

Zjevně ani v roce 2084 ještě standardy nevyžadují uvádět normalizované stavy. Škoda, určitě by to zabránilo mnohým překlepům. Každopádně si stav normalizujeme:

$$|\psi\rangle := \frac{1}{\big\||\psi\rangle\big\|}\,|\psi\rangle = \frac{\sqrt{3}}{\sqrt{1+2^2}}\,|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{5}}\,|\,1\,\rangle\,|\,0\,\rangle\,|\,1\,\rangle + \frac{2}{\sqrt{5}}\,|\,0\,\rangle\,|\,1\,\rangle\,|\,0\,\rangle$$

Dále si vyjádříme bázi $|\,0\,\rangle\,, |\,1\,\rangle$ pomocí báze $|+\rangle\,, |-\rangle$.

$$\begin{aligned}
|+\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}\big(|\,0\,\rangle + |\,1\,\rangle\big), & |-\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}\big(|\,0\,\rangle - |\,1\,\rangle\big), \\
|+\rangle + |-\rangle &= \frac{2}{\sqrt{2}}\,|\,0\,\rangle, & |+\rangle - |-\rangle &= \frac{2}{\sqrt{2}}\,|\,1\,\rangle, \\
|\,0\,\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}\big(|+\rangle + |-\rangle\big), & |\,1\,\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}\big(|+\rangle - |-\rangle\big).
\end{aligned}$$

Nyní si vyjádříme stav $|\psi\rangle$ v bázi $|+\rangle\,, |-\rangle$, budou nás ovšem zajímat pouze členy s $|+\rangle\,|+\rangle\,|+\rangle$ a $|-\rangle\,|-\rangle\,|-\rangle$, ostatní schováme za elipsou „$(\ldots)$“.

$$\begin{aligned}
|\psi\rangle &= \frac{1}{\sqrt{5}}\,|\,1\,\rangle\,|\,0\,\rangle\,|\,1\,\rangle \;+\; \frac{2}{\sqrt{5}}\,|\,0\,\rangle\,|\,1\,\rangle\,|\,0\,\rangle \\
&= \frac{1}{\sqrt{5}}\,|\,1\,\rangle\,|\,0\,\rangle\;\frac{1}{\sqrt{2}}\big(|+\rangle - |-\rangle\big) \;+\; \frac{2}{\sqrt{5}}\,|\,0\,\rangle\,|\,1\,\rangle\;\frac{1}{\sqrt{2}}\big(|+\rangle + |-\rangle\big) \\
&= \frac{1}{\sqrt{10}}\bigg(\Big(2\,|\,0\,\rangle\,|\,1\,\rangle + |\,1\,\rangle\,|\,0\,\rangle\Big)\,|+\rangle + \Big(2\,|\,0\,\rangle\,|\,1\,\rangle - |\,1\,\rangle\,|\,0\,\rangle\Big)\,|-\rangle\bigg) \\
&= \frac{1}{\sqrt{10}}\Bigg(\bigg(2\,|\,0\,\rangle\;\frac{1}{\sqrt{2}}\big(|+\rangle - |-\rangle\big) + |\,1\,\rangle\;\frac{1}{\sqrt{2}}\big(|+\rangle + |-\rangle\big)\bigg)\,|+\rangle + \\
&\qquad + \bigg(2\,|\,0\,\rangle\;\frac{1}{\sqrt{2}}\big(|+\rangle - |-\rangle\big) - |\,1\,\rangle\;\frac{1}{\sqrt{2}}\big(|+\rangle + |-\rangle\big)\bigg)\,|-\rangle\Bigg) \\
&= \frac{1}{\sqrt{20}}\Bigg(2\,|\,0\,\rangle\,|+\rangle\,|+\rangle + |\,1\,\rangle\,|+\rangle\,|+\rangle - 2\,|\,0\,\rangle\,|-\rangle\,|-\rangle - |\,1\,\rangle\,|-\rangle\,|-\rangle\Bigg) + (\ldots)
\end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
&= \frac{1}{\sqrt{20}}\Bigg(2\frac{1}{\sqrt{2}}\Big(\left|+\right\rangle + \left|-\right\rangle\Big)\left|+\right\rangle\left|+\right\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}\Big(\left|+\right\rangle - \left|-\right\rangle\Big)\left|+\right\rangle\left|+\right\rangle \\
&\qquad\qquad - 2\frac{1}{\sqrt{2}}\Big(\left|+\right\rangle + \left|-\right\rangle\Big)\left|-\right\rangle\left|-\right\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}\Big(\left|+\right\rangle - \left|-\right\rangle\Big)\left|-\right\rangle\left|-\right\rangle\Bigg) + (\dots) \\
&= \frac{1}{\sqrt{40}}\Bigg(2\left|+\right\rangle\left|+\right\rangle\left|+\right\rangle + \left|+\right\rangle\left|+\right\rangle\left|+\right\rangle - 2\left|-\right\rangle\left|-\right\rangle\left|-\right\rangle + \left|-\right\rangle\left|-\right\rangle\left|-\right\rangle\Bigg) + (\dots) \\
&= \frac{3}{2\sqrt{10}}\left|+\right\rangle\left|+\right\rangle\left|+\right\rangle - \frac{1}{2\sqrt{10}}\left|-\right\rangle\left|-\right\rangle\left|-\right\rangle + (\dots).
\end{aligned}
$$

Nyní velice snadno vypočteme pravděpodobnosti:

$$
P_{+++} = \left|\left\langle+\right|\left\langle+\right|\left\langle+\right| \left|\psi\right\rangle\right|^2 = \left|\frac{3}{2\sqrt{10}}\right|^2 = \frac{9}{40} = 0.225
$$

$$
P_{---} = \left|\left\langle-\right|\left\langle-\right|\left\langle-\right| \left|\psi\right\rangle\right|^2 = \left|\frac{-1}{2\sqrt{10}}\right|^2 = \frac{1}{40} = 0.025
$$

Pozn.: byla-li v zadání chyba a místo faktoru $2/\sqrt{3}$ byl myšlen faktor $\sqrt{2/3}$, zcela obdobným způsobem bychom dostali výsledek:

$$
P_{+++} = \frac{2\sqrt{2}+3}{24} \approx 0.2429
$$

$$
P_{---} = \frac{-2\sqrt{2}+3}{24} \approx 0.0071
$$

2 Úloha č. 3

2.1 Zadání

Je zadán hamiltonián:

$$
\hat{H} = \epsilon_1 \left|1\right\rangle\left\langle 1\right| + \epsilon_2 \left|2\right\rangle\left\langle 2\right| + J\Big(\left|1\right\rangle\left\langle 2\right| + \left|2\right\rangle\left\langle 1\right|\Big), \qquad \epsilon_1 \neq \epsilon_2
$$

Nalezněte jeho vlastní energie a) přesně a b) poruchovou teorií v J do prvního a druhého řádu. Porovnejte poruchové řešení s Taylorovým rozvojem přesného.

2.2 Řešení

Nejprve diagonalizací najdeme přesné vlastní energie hamiltoniánu:

$$
\left\langle m\right|\hat{H}\left|n\right\rangle = H = \begin{pmatrix}\epsilon_1 & J \\ J & \epsilon_2\end{pmatrix},
$$

$$
0 = |H - EI| = \det\begin{pmatrix}\epsilon_1 - E & J \\ J & \epsilon_2 - E\end{pmatrix} = (\epsilon_1 - E)(\epsilon_2 - E) - J^2
$$

$$
E = \frac{1}{2}\left(\epsilon_1 + \epsilon_2 \pm \sqrt{(\epsilon_1 - \epsilon_2)^2 + 4J^2}\right)
$$

Nyní si vyjádříme hamiltonián řečí poruchové teorie druhého řádu:

$$
H = H^\circ + JH' + J^2H''
$$

$$
\begin{pmatrix}\epsilon_1 & J \\ J & \epsilon_2\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}\epsilon_1 & 0 \\ 0 & \epsilon_2\end{pmatrix} + J\begin{pmatrix}0 & 1 \\ 1 & 0\end{pmatrix} + J^2\begin{pmatrix}0 & 0 \\ 0 & 0\end{pmatrix}
$$

Dále by stačilo použít obecný vzorec pro korekce n-tého řádu:

$$
E_k^{(n)} = \left\langle \psi_k^\circ \middle| \sum_{m=0}^{n-1} \hat{H}^{(n-m)} \middle| \psi_k^{(m)} \right\rangle
$$

$$
\left|\psi_k^{(n)}\right\rangle = \sum_{\ell\neq k} \frac{1}{E_\ell^\circ - E_k^\circ} \left|\psi_\ell^\circ\right\rangle\left\langle\psi_\ell^\circ\right| \left(\hat{H}^{(n)}\left|\psi_k^\circ\right\rangle + \sum_{m=1}^{n-1}(\hat{H}^{(n-m)} - E_k^{(n-m)})\left|\psi_k^{(m)}\right\rangle\right)
$$

Osobně ale nerad používám vzorečky „spadlé z nebe“, proto si v tomto úkolu dám na čas a korekce prvního a druhého řádu odvodím. V Schrödingerově rovnici si tedy rozvineme $\hat{H}, E_k, |\psi_k\rangle$ Taylorovou řadou podle J a separujeme členy bez J, s J a s J^2:

$$H\vec{\psi} = E\vec{\psi}$$

$$\left(H^\circ + JH' + J^2H''\right)\left(\vec{\psi}_k^\circ + J\vec{\psi}_k' + J^2\vec{\psi}_k'' + (\dots)\right) = \left(E_k^\circ + JE_k' + J^2E_k'' + (\dots)\right)\left(\vec{\psi}_k^\circ + J\vec{\psi}_k' + J^2\vec{\psi}_k'' + (\dots)\right)$$

$$H^\circ\vec{\psi}_k^\circ + J\left(H'\vec{\psi}_k^\circ + H^\circ\vec{\psi}_k'\right) + J^2\left(H''\vec{\psi}_k^\circ + H'\vec{\psi}_k' + H^\circ\vec{\psi}_k''\right) = E_k^\circ\vec{\psi}_k^\circ + J\left(E_k'\vec{\psi}_k^\circ + E_k^\circ\vec{\psi}_k'\right) + J^2\left(E_k''\vec{\psi}_k^\circ + E_k'\vec{\psi}_k' + E_k^\circ\vec{\psi}_k''\right) + (\dots)$$

To pro aproximaci druhého řádu vede na tři rovnice:

$$H^\circ\vec{\psi}_k^\circ = E_k^\circ\vec{\psi}_k^\circ$$

$$H'\vec{\psi}_k^\circ + H^\circ\vec{\psi}_k' = E_k'\vec{\psi}_k^\circ + E_k^\circ\vec{\psi}_k'$$

$$H''\vec{\psi}_k^\circ + H'\vec{\psi}_k' + H^\circ\vec{\psi}_k'' = E_k''\vec{\psi}_k^\circ + E_k'\vec{\psi}_k' + E_k^\circ\vec{\psi}_k''$$

Vyřešíme vlastní čísla nultého řádu:

$$H^\circ = \begin{pmatrix}\epsilon_1 & 0\\ 0 & \epsilon_2\end{pmatrix} \implies E_1^\circ = \epsilon_1,\ \vec{\psi}_1^\circ = \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix},\quad E_2^\circ = \epsilon_2,\ \vec{\psi}_2^\circ = \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}.$$

Pokračujeme prvním řádem, předpokládáme $\vec{\psi}_k' \perp \vec{\psi}_k^\circ$:

$$H' = \begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix}$$

$$H'\vec{\psi}_1^\circ + H^\circ\vec{\psi}_1' = E_1'\vec{\psi}_1^\circ + E_1^\circ\vec{\psi}_1'$$

$$\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} + \begin{pmatrix}\epsilon_1 & 0\\ 0 & \epsilon_2\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0\\a\end{pmatrix} = E_1'\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} + \epsilon_1\begin{pmatrix}0\\a\end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix} + \begin{pmatrix}0\\ \epsilon_2 a\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}E_1'\\0\end{pmatrix} + \begin{pmatrix}0\\ \epsilon_1 a\end{pmatrix}$$

$$0 = E_1',\qquad 1 = a(\epsilon_1 - \epsilon_2)$$

$$H'\vec{\psi}_2^\circ + H^\circ\vec{\psi}_2' = E_2'\vec{\psi}_2^\circ + E_2^\circ\vec{\psi}_1'$$

$$\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix} + \begin{pmatrix}\epsilon_1 & 0\\ 0 & \epsilon_2\end{pmatrix}\begin{pmatrix}b\\0\end{pmatrix} = E_2'\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix} + \epsilon_2\begin{pmatrix}b\\0\end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} + \begin{pmatrix}\epsilon_1 b\\ 0\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}0\\E_2'\end{pmatrix} + \begin{pmatrix}\epsilon_2 b\\ 0\end{pmatrix}$$

$$0 = E_2',\qquad 1 = b(\epsilon_2 - \epsilon_1)$$

$$E_1' = 0,\quad \vec{\psi}_1' = \begin{pmatrix}0\\ \frac{1}{\epsilon_1-\epsilon_2}\end{pmatrix},\quad E_2' = 0,\quad \vec{\psi}_2' = \begin{pmatrix}\frac{-1}{\epsilon_1-\epsilon_2}\\ 0\end{pmatrix}.$$

A nakonec druhý řád, opět předpokládáme $\vec{\psi}_k'' \perp \vec{\psi}_k^\circ$:

$$H''\vec{\psi}_1^\circ + H'\vec{\psi}_1' + H^\circ\vec{\psi}_1'' = E_1''\vec{\psi}_1^\circ + E_1'\vec{\psi}_1' + E_1^\circ\vec{\psi}_1''$$

$$\begin{pmatrix}0 & 0\\ 0 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} + \begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0\\ \frac{1}{\epsilon_1-\epsilon_2}\end{pmatrix} + \begin{pmatrix}\epsilon_1 & 0\\ 0 & \epsilon_2\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0\\c\end{pmatrix} = E_1''\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} + 0\begin{pmatrix}0\\ \frac{1}{\epsilon_1-\epsilon_2}\end{pmatrix} + \epsilon_1\begin{pmatrix}0\\c\end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix}\frac{1}{\epsilon_1-\epsilon_2}\\ 0\end{pmatrix} + \begin{pmatrix}0\\ \epsilon_2 c\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}E_1''\\0\end{pmatrix} + \begin{pmatrix}0\\ \epsilon_1 c\end{pmatrix}$$

$$\frac{1}{\epsilon_1 - \epsilon_2} = E_1''$$

$$H''\vec{\psi}_2^\circ + H'\vec{\psi}_2' + H^\circ\vec{\psi}_2'' = E_2''\vec{\psi}_2^\circ + E_2'\vec{\psi}_2' + E_2^\circ\vec{\psi}_2''$$

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \frac{-1}{\epsilon_1-\epsilon_2} \\ 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \epsilon_1 & 0 \\ 0 & \epsilon_2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} d \\ 0 \end{pmatrix} = E_2''\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} + 0\begin{pmatrix} \frac{-1}{\epsilon_1-\epsilon_2} \\ 0 \end{pmatrix} + \epsilon_2\begin{pmatrix} d \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} 0 \\ \frac{-1}{\epsilon_1-\epsilon_2} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \epsilon_1 d \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ E_2'' \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \epsilon_2 d \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\frac{-1}{\epsilon_1-\epsilon_2} = E_2''$$

Získali jsme aproximace druhého řádu pro vlastní energie $\hat{H}$:

$$E_1 = \epsilon_1 + \frac{J^2}{\epsilon_1-\epsilon_2}, \qquad E_2 = \epsilon_2 + \frac{J^2}{\epsilon_2-\epsilon_1}$$

Porovnáme je nyní s Taylorovým rozvojem jejich přesných hodnot, *wlog.* předpokládáme $\epsilon_1 > \epsilon_2$:

$$E_1 = \frac{1}{2}\left(\epsilon_1 + \epsilon_2 + \sqrt{(\epsilon_1-\epsilon_2)^2 + 4J^2}\right) = \epsilon_1 + \frac{J^2}{\epsilon_1-\epsilon_2} - \frac{J^4}{(\epsilon_1-\epsilon_2)^3} + 2\frac{J^6}{(\epsilon_1-\epsilon_2)^5} + (\dots)$$
$$E_2 = \frac{1}{2}\left(\epsilon_1 + \epsilon_2 - \sqrt{(\epsilon_1-\epsilon_2)^2 + 4J^2}\right) = \epsilon_2 - \frac{J^2}{\epsilon_1-\epsilon_2} + \frac{J^4}{(\epsilon_1-\epsilon_2)^3} - 2\frac{J^6}{(\epsilon_1-\epsilon_2)^5} + (\dots)$$

Vidíme, že jsme perturbační metodou získali stejný výsledek, jaký by nám dal Taylorův rozvoj přesného výsledku, s tím podstatným rozdílem, že jsme výpočtem přes perturbační metodu strávili výrazně více času. Z toho plyne důležité ponaučení: počítat jednoduché příklady perturbační metodou je blbost.

3 Úloha č. 4

3.1 Zadání

Vypočtěte komutátor $\left[\hat{p}^2, \hat{q}\right]$ a pomocí něj odůvodněte vztah

$$\hat{\dot{q}} = \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\left[\hat{H}, \hat{q}\right].$$

3.2 Řešení

Začneme výpočtem komutátoru, využijeme kanonického vztahu $[\hat{p}, \hat{q}] = -\mathrm{i}\hbar$:

$$\begin{aligned}\left[\hat{p}^2, \hat{q}\right] &= \hat{p}\hat{p}\hat{q} - \hat{q}\hat{p}\hat{p} \\ &= \hat{p}\hat{p}\hat{q} - \hat{p}\hat{q}\hat{p} + \hat{p}\hat{q}\hat{p} - \hat{q}\hat{p}\hat{p} \\ &= \hat{p}\left(\hat{p}\hat{q} - \hat{q}\hat{p}\right) + \left(\hat{p}\hat{q} - \hat{q}\hat{p}\right)\hat{p} \\ &= \hat{p}\left[\hat{p}, \hat{q}\right] + \left[\hat{p}, \hat{q}\right]\hat{p} \\ &= -2\,\mathrm{i}\hbar\,\hat{p}\end{aligned}$$

Uvažujeme-li volnou částici, platí $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m}$, tedy:

$$\left[\hat{H}, \hat{q}\right] = \left[\frac{\hat{p}^2}{2m}, \hat{q}\right] = \frac{1}{2m}\left[\hat{p}^2, \hat{q}\right] = -\frac{1}{2m}2\,\mathrm{i}\hbar\,\hat{p} = \frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\hat{p}}{m} = \frac{\hbar}{\mathrm{i}}\hat{\dot{q}}.$$