Kvantová mechanika I: Domácí úkoly

Michal Grňo

3. ledna 2020

1 Cvičení 9. 10.

1.1 Zadání

Jsou dány operátory $\hat{A}$ a $\hat{B}$,

$$\left[\hat{A}, \hat{B}\right] \neq 0,$$

$$\left[\hat{A}, \left[\hat{A}, \hat{B}\right]\right] = \left[\hat{B}, \left[\hat{A}, \hat{B}\right]\right] = 0.$$

Nalezněte, čemu se rovná operátor $\hat{C}$, pro který platí

$$\mathrm{e}^{\hat{A}}\,\mathrm{e}^{\hat{B}} = \mathrm{e}^{\hat{A}+\hat{B}}\,\mathrm{e}^{\hat{C}} = \mathrm{e}^{\hat{C}}\,\mathrm{e}^{\hat{A}+\hat{B}} = \mathrm{e}^{\hat{A}+\hat{B}+\hat{C}}.$$

1.2 Řešení

Na cvičení jsme se přesvědčili, že užitečným nástrojem při odvozování vztahů pro operátorovu exponenciolu je výraz $\mathrm{e}^{\xi\hat{A}}$ a jeho derivace podle ξ. Tohoto triku využijeme i nyní – nalezneme $\hat{X}(\xi)$ takové, aby platilo:

$$\mathrm{e}^{\hat{X}(\xi)} = \mathrm{e}^{\xi\hat{A}}\,\mathrm{e}^{\xi\hat{B}}.$$

Derivací vztahu získáme:

$$\frac{\partial}{\partial\xi}\,\mathrm{e}^{\hat{X}(\xi)} = \frac{\partial}{\partial\xi}\,\mathrm{e}^{\xi\hat{A}}\,\mathrm{e}^{\xi\hat{B}}$$

$$\hat{X}'(\xi)\,\mathrm{e}^{\hat{X}(\xi)} = \hat{A}\,\mathrm{e}^{\xi\hat{A}}\,\mathrm{e}^{\xi\hat{B}} + \mathrm{e}^{\xi\hat{A}}\,\hat{B}\,\mathrm{e}^{\xi\hat{B}}$$

$$\hat{X}'(\xi)\,\mathrm{e}^{\hat{X}(\xi)} = \left(\hat{A} + \mathrm{e}^{\xi\hat{A}}\,\hat{B}\,\mathrm{e}^{\xi\hat{B}}\,\mathrm{e}^{-\xi\hat{B}}\,\mathrm{e}^{-\xi\hat{A}}\right)\mathrm{e}^{\xi\hat{A}}\mathrm{e}^{\xi\hat{B}}$$

$$\hat{X}'(\xi)\,\mathrm{e}^{\hat{X}(\xi)} = \left(\hat{A} + \mathrm{e}^{\xi\hat{A}}\,\hat{B}\,\mathrm{e}^{-\xi\hat{A}}\right)\mathrm{e}^{\hat{X}(\xi)}$$

$$\hat{X}'(\xi) = \hat{A} + \mathrm{e}^{\xi\hat{A}}\,\hat{B}\,\mathrm{e}^{-\xi\hat{A}}$$

Využili jsme vlastnosti, že operátor $\mathrm{e}^{\hat{A}}$ je vždy regulární a jeho inverze je $\mathrm{e}^{-\hat{A}}$. Připomeneme si Glauberův vzorec:

$$\mathrm{e}^{\hat{M}}\,\hat{N}\mathrm{e}^{-\hat{M}} = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\,\hat{K}_n(\hat{M},\hat{N})$$

$$\hat{K}_0(\hat{M},\hat{N}) = \hat{N}$$

$$\hat{K}_{n+1}(\hat{M},\hat{N}) = \left[\hat{M},\hat{K}_n\right]$$

Dosazením do naší rovnice získáme:

$$\hat{X}'(\xi) = \hat{A} + \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!}\ \hat{K}_n(\xi\hat{A}, \hat{B})$$

$$\hat{X}'(\xi) = \hat{A} + \sum_{n=0}^{\infty} \xi^n \frac{1}{n!}\ \hat{K}_n(\hat{A}, \hat{B})$$

$$\hat{X}(\xi) = \int \left(\hat{A} + \sum_{n=0}^{\infty} \xi^n \frac{1}{n!}\ \hat{K}_n(\hat{A}, \hat{B}) \right)\ \mathrm{d}\xi$$

$$\hat{X}(\xi) = \xi\hat{A} + \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\xi^{n+1}}{n+1}\ \frac{1}{n!}\ \hat{K}_n(\hat{A}, \hat{B}) + \hat{X}(0)$$

Dosazením do $\mathrm{e}^{\hat{X}(\xi)} = \mathrm{e}^{\xi\hat{A}}\ \mathrm{e}^{\xi\hat{B}}$ vidíme, že $\hat{X}(0)$ musí být nula. Dosadíme-li nyní $\xi = 1$, máme tedy odvozený obecný tvar Bakerovy-Campbellovy-Hausdorffovy rovnice:

$$\mathrm{e}^{\hat{A}}\ \mathrm{e}^{\hat{B}} = \exp\left(\hat{A} + \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{(n+1)!}\ \hat{K}_n(\hat{A}, \hat{B}) \right).$$

Nakonec použijeme ze zadání podmínku, že operátory $\hat{A}, \hat{B}$ komutují se svým komutátorem, tedy $\hat{K}_0 = \hat{B}$, $\hat{K}_1 = \left[\hat{A}, \hat{B}\right]$, $\hat{K}_n = 0$ pro $n > 1$. Konečný výsledek je tedy:

$$\mathrm{e}^{\hat{A}}\mathrm{e}^{\hat{B}} = \mathrm{e}^{\hat{A}+\hat{B}+\frac{1}{2}\left[\hat{A},\hat{B}\right]}.$$

2 Cvičení 16. 10.

2.1 Zadání první části

Mějme dvouhladinový systém popsaný Hamiltoniánem:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1,$$

$$\hat{H}_0 = \begin{pmatrix} e & 0 \\ 0 & -e \end{pmatrix},$$

$$\hat{H}_1 = \begin{pmatrix} 0 & \nu \\ \nu & 0 \end{pmatrix}.$$

Spočtěte vlastní hodnoty E_+, E_- a vlastní vektory $\left|E_+\right\rangle, \left|E_-\right\rangle$ Hamiltoniánu, zakreslete závislost $E_\pm(\nu)$, vypočtěte vektory $\left|E_\pm(\nu = 0)\right\rangle$ a $\left|E_\pm(\nu \to \infty)\right\rangle$.

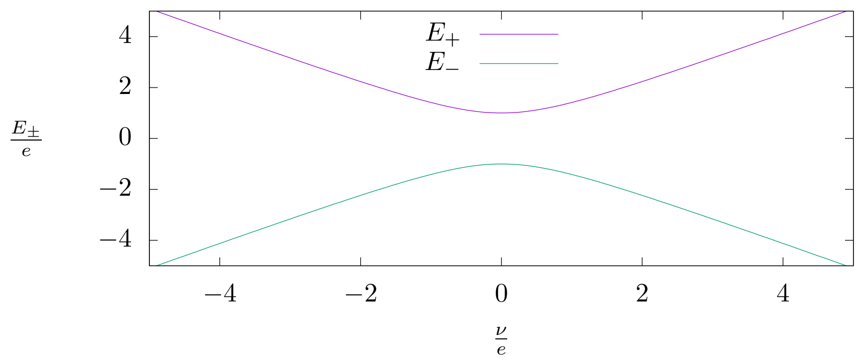
2.2 Řešení první části

Začneme nalezením vlastních energií:

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} e & 0 \\ 0 & -e \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & \nu \\ \nu & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e & \nu \\ \nu & -e \end{pmatrix},$$

$$\det\left(\hat{H} - E\,\hat{1}\right) = -\left(e^2 - E^2\right)\left(e^2 + E^2\right) - \nu^2 = E^2 - e^2 - \nu^2 = 0$$
$$\implies E_\pm = \pm\sqrt{e^2 + \nu^2}.$$

Závislost $E_\pm$ na ν je potom:



Pokračujeme vypočtením odpovídajících vlastních vektorů:

$$\ker\left(\hat{H} - E_+\,\hat{1}\right) = \ker\left(e - E_+ \quad \nu\right) \ni \frac{1}{\sqrt{\nu^2 + (E_+ - e)^2}} \begin{pmatrix} \nu \\ E_+ - e \end{pmatrix} = \left|E_+\right\rangle,$$

$$\ker\left(\hat{H} + E_+\,\hat{1}\right) = \ker\left(e + E_+ \quad \nu\right) \ni \frac{1}{\sqrt{\nu^2 + (E_+ + e)^2}} \begin{pmatrix} -\nu \\ E_+ + e \end{pmatrix} = \left|E_-\right\rangle.$$

Nakonec vypočteme vlastní vektory pro $\nu = 0$ a $\nu \to \infty$. Při $\nu = 0$ je $\hat{H} = \hat{H}_0$ a vlastní vektory známe přímo ze zadání. Případ $\nu \to \infty$ vyšetříme pomocí limity.

$$\left|E_+(\nu = 0)\right\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \qquad \left|E_-(\nu = 0)\right\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix},$$

$$\left|E_\pm(\nu = 0)\right\rangle = \lim_{\nu \to \infty} \frac{1}{\sqrt{\nu^2 + (E_+ \mp e)^2}} \begin{pmatrix} \pm\nu \\ E_+ \mp e \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \pm 1 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

2.3 Zadání druhé části

Mějme N-stavový systém s tridiagonálním Hamiltoniánem:

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} e & \nu & & & \\ \nu & e & \nu & & \\ & \nu & e & \nu & \\ & & \nu & e & \ddots \\ & & & \ddots & \ddots \end{pmatrix}.$$

Určete jeho vlastní hodnoty a normalizované vlastní vektory. Jak se bude měnit spektrum s rostoucím N?

2.4 První pokus o řešení druhé části

Úlohu jsem se nejprve pokoušel vyřešit tak, že vyjádřím determinant tridiagonální matice v uzavřené formě. Tento postup mě sice dovedl k charakteristické rovnici Hamiltoniánu v uzavřené formě, nepodařilo se mi ji ale vyřešit pro obecné N. Postup zde přesto nechávám pro zajímavost.

Z důvodů, které budou hned zřejmé, si zadefinujeme matice $A_N, B_N \in \mathbb{C}^{N\times N}$ lišící se pouze v prvním sloupci:

$$A_N = \underbrace{\begin{pmatrix} a & b & & \\ b & a & b & \\ & b & a & \ddots \\ & & \ddots & \ddots \end{pmatrix}}_{N \text{ sloupců}}, \qquad B_N = \underbrace{\begin{pmatrix} b & b & & \\ 0 & a & b & \\ & b & a & \ddots \\ & & \ddots & \ddots \end{pmatrix}}_{N \text{ sloupců}}.$$

Nyní si pomocí minorů vyjádříme jejich determinanty:

$$\det\begin{pmatrix} a & b & & & \\ b & a & b & & \\ & b & a & b & \\ & & b & a & \ddots \\ & & & \ddots & \ddots \end{pmatrix} = a\det\left(\begin{array}{c|cccc} & & & & \\ \hline & a & b & & \\ & b & a & b & \\ & & b & a & \ddots \\ & & & \ddots & \ddots \end{array}\right) - b\det\left(\begin{array}{c|c|cccc} & & & & & \\ \hline b & & b & & & \\ & & a & b & & \\ & & b & a & \ddots & \\ & & & \ddots & \ddots & \end{array}\right),$$

$$\det\begin{pmatrix} b & b & & & \\ 0 & a & b & & \\ & b & a & b & \\ & & b & a & \ddots \\ & & & \ddots & \ddots \end{pmatrix} = b\det\left(\begin{array}{c|cccc} & & & & \\ \hline & a & b & & \\ & b & a & b & \\ & & b & a & \ddots \\ & & & \ddots & \ddots \end{array}\right).$$

Totéž zapsáno v kompaktní formě:

$$\begin{aligned} \det A_N &= a\det A_{N-1} - b\det B_{N-1}, \\ \det B_N &= b\det A_{N-1}. \end{aligned}$$

$$\implies \det A_N = a\det A_{N-1} - b^2\det A_{N-2}.$$

Navíc vidíme, že platí:

$$\begin{aligned} \det A_1 &= a, \\ \det A_2 &= a^2 - b^2. \end{aligned}$$

Vyřešíme tedy diferenční rovnici. Charakteristický polynom rekurence[1] je:

$$p(t) = t^2 - at + b^2,$$

a jeho kořeny jsou

$$t_+ = \frac{a}{2} + \sqrt{\left(\frac{a}{2}\right)^2 - b^2},$$
$$t_- = \frac{a}{2} - \sqrt{\left(\frac{a}{2}\right)^2 - b^2}.$$

Hledáme tedy řešení ve tvaru

$$\det A_n = c\,t_+^n + d\,t_-^n,$$

dosazením známých hodnot A_1 a A_2 získáme hodnoty konstant. Po zjednodušení výrazu dostáváme pro determinant matice A_N vztah:

$$\det A_N = \frac{1}{2^{N+1}\sqrt{a^2-4b^2}}\left(\left(a+\sqrt{a^2-4b^2}\right)^{N+1} - \left(a-\sqrt{a^2-4b^2}\right)^{N+1}\right).$$

Nyní, protože $\det\left(\hat{H} - \lambda\hat{1}\right) = \det A_n$ pro $a = e - \lambda, b = \nu$. Charakteristický polynom Hamiltoniánu je tedy:

$$p(\lambda) = \frac{1}{2^{N+1}\sqrt{-4\nu^2 + (e-\lambda)^2}}\left(\left(e - \lambda + \sqrt{-4\nu^2 + (e-\lambda)^2}\right)^{N+1} - \left(e - \lambda - \sqrt{-4\nu^2 + (e-\lambda)^2}\right)^{N+1}\right).$$

Pomocí CAS je snadné najít řešení pro několik prvních $N \in \{1, 2, 3, \dots\}$:

$\boldsymbol{p(\lambda) = 0}$	$\boldsymbol{\lambda}$
$\boldsymbol{N = 1}$	e
$\boldsymbol{N = 2}$	$e - \nu,\ e + \nu$
$\boldsymbol{N = 3}$	$e,\ e - \sqrt{2}\,\nu,\ e + \sqrt{2}\,\nu$
$\boldsymbol{N = 4}$	$e + \frac{-1+\sqrt{5}}{2}\nu,\ e + \frac{+1+\sqrt{5}}{2}\nu,\ e + \frac{-1-\sqrt{5}}{2}\nu,\ e + \frac{+1-\sqrt{5}}{2}\nu$

Přestože řešení vypadají pravidelně, nepodařilo se mi najít vztah udávající řešení pro obecné N.

2.5 Druhý pokus o řešení druhé části

Vyjádříme-li si charakteristickou rovnici pro Hamiltonián, dostaneme:

$$\hat{H}\vec{u} = \lambda\vec{u},$$

$$\begin{pmatrix} e & \nu & & \\ \nu & e & \nu & \\ & \nu & e & \ddots \\ & & \ddots & \ddots \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \boldsymbol{u}^1 \\ \boldsymbol{u}^2 \\ \boldsymbol{u}^3 \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \lambda\boldsymbol{u}^1 \\ \lambda\boldsymbol{u}^2 \\ \lambda\boldsymbol{u}^3 \\ \vdots \end{pmatrix},$$

$$\begin{pmatrix} e\boldsymbol{u}^1 + \nu\boldsymbol{u}^2 \\ \nu\boldsymbol{u}^1 + e\boldsymbol{u}^2 + \nu\boldsymbol{u}^3 \\ \nu\boldsymbol{u}^2 + e\boldsymbol{u}^3 + \nu\boldsymbol{u}^4 \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \lambda\boldsymbol{u}^1 \\ \lambda\boldsymbol{u}^2 \\ \lambda\boldsymbol{u}^3 \\ \vdots \end{pmatrix}.$$

[1] Hlubší teorii k řešení diferenčních rovnic lze nalézt například na `https://en.wikipedia.org/wiki/Constant-recursive_sequence`

Dostáváme tedy N-tici rovnic o N neznámých:

$$\begin{aligned}
\lambda \boldsymbol{u}^1 &= e\boldsymbol{u}^1 + \nu \boldsymbol{u}^2 \\
\lambda \boldsymbol{u}^2 &= \nu\boldsymbol{u}^1 + e\boldsymbol{u}^2 + \nu \boldsymbol{u}^3 \\
&\vdots \\
\lambda \boldsymbol{u}^j &= \nu\boldsymbol{u}^{j-1} + e\boldsymbol{u}^j + \nu \boldsymbol{u}^{j+1} \\
&\vdots \\
\lambda \boldsymbol{u}^{N-1} &= \nu\boldsymbol{u}^{N-2} + e\boldsymbol{u}^{N-1} + \nu \boldsymbol{u}^{N} \\
\lambda \boldsymbol{u}^N &= \nu\boldsymbol{u}^{N-1} + e\boldsymbol{u}^N
\end{aligned}$$

Všimneme si, že okrajové podmínky lze zjednodušit doplněním smyšlené nulté a $(N+1)$. složky vlastního vektoru, dostáváme tak diferenční úlohu:

$$\lambda \boldsymbol{u}^j = \nu\boldsymbol{u}^{j-1} + e\boldsymbol{u}^j + \nu \boldsymbol{u}^{j+1},$$
$$\boldsymbol{u}^0 = 0, \quad \boldsymbol{u}^{N+1} = 0.$$

Z nápovědy víme, že máme řešení hledat pomocí násady[2]:

$$\boldsymbol{u}^j = c^j,$$

na levé straně má horní skript význam j-té složky vektoru, na pravé znamená j-tou mocninu.

$$\begin{aligned}
\lambda c^j &= \nu c^{j-1} + e c^j + \nu c^{j+1} \\
\lambda c &= \nu + ec + \nu c^2 \\
0 &= \nu c^2 + (e-\lambda)c + \nu
\end{aligned}$$

$$c_{\pm} = \frac{\lambda - e}{2\nu} \pm \sqrt{\left(\frac{\lambda-e}{2\nu}\right)^2 - 1}$$

Zajímavou vlastností kořenů je:

$$\begin{aligned}
c_+ \, c_- &= \left(\frac{\lambda - e}{2\nu} + \sqrt{\left(\frac{\lambda-e}{2\nu}\right)^2 - 1}\right)\left(\frac{\lambda - e}{2\nu} - \sqrt{\left(\frac{\lambda-e}{2\nu}\right)^2 - 1}\right) \\
&= \left(\frac{\lambda-e}{2\nu}\right)^2 - \left(\left(\frac{\lambda-e}{2\nu}\right)^2 - 1\right) = 1
\end{aligned}$$

Protože máme dva kořeny, hledáme řešení ve tvaru

$$\boldsymbol{u}^j = A\, {c_+}^j + B\, {c_-}^j.$$

Dosazením do okrajových podmínek získáme:

$$\begin{aligned}
0 \;&=\; \boldsymbol{u}^0 = A\, c_+^{\,0} + B\, c_-^{\,0} \qquad = \text{A+B} \;\Leftrightarrow\; B = -A \\
0 \;&=\; \boldsymbol{u}^{N+1} \;=\; A\, c_+^{\,N+1} + B\, c_-^{\,N+1} \\
&\qquad\qquad\;\; = \; A\,(c_+^{\,N+1} - c_-^{\,N+1}) \;\Leftrightarrow\; A = 0 \\
&\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\quad \vee \;\; c_+ = c_- = 0 \\
&\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\quad \vee \;\; \left({}^{c_+}\!/_{c_-}\right)^{N+1} = 1
\end{aligned}$$

[2] Násada, v cizojazyčné literatuře „ansatz“, je odhad tvaru řešení. Typicky omezuje možná řešení na užší rodinu – nemusí tedy nutně vést k nalezení všech řešení, výrazně ale usnadňuje jejich hledání. V našem případě vede použití násady k nalezení N řešení, což je maximální počet vlastních vektorů matice $N \times N$, žádné řešení nám tedy neušlo, stačí pouze zkontrolovat, že jsou to skutečně řešení původní úlohy.

Protože vlastní vektor z definice nemůže být nulový, vyřadíme řešení $A = 0,\ c_+ = c_- = 0$, zůstává nám tedy

$$\boldsymbol{u}^j = A\,(c_+^{\,j} - c_-^{\,j}), \quad \left({}^{c_+}\!/_{c_-}\right)^{N+1} = 1.$$

$$\begin{aligned}
&\left({}^{c_+}\!/_{c_-}\right)^{N+1} = 1 = \mathrm{e}^{2k\mathrm{i}\pi}, \quad k \in \mathbb{N},\\
\implies\ & {}^{c_+}\!/_{c_-} = \mathrm{e}^{\frac{2k}{N+1}\,\mathrm{i}\pi},\\
\implies\ & \left({}^{c_+}\!/_{c_-}\right)\left(c_+\,c_-\right) = \mathrm{e}^{\frac{2k}{N+1}\,\mathrm{i}\pi}, \quad (\text{s použitím } c_+\,c_- = 1)\\
\implies\ & c_+^2 = \mathrm{e}^{\frac{2k}{N+1}\,\mathrm{i}\pi},\\
\implies\ & c_+ = \pm\,\mathrm{e}^{\frac{k}{N+1}\,\mathrm{i}\pi}, \quad (*)\\
\implies\ & c_+ = \mathrm{e}^{\frac{k}{N+1}\,\mathrm{i}\pi}, \quad c_- = \mathrm{e}^{\frac{-k}{N+1}\,\mathrm{i}\pi},\\
\implies\ & \boldsymbol{u}^j = A\left(\mathrm{e}^{\frac{jk}{N+1}\,\mathrm{i}\pi} - \mathrm{e}^{\frac{-jk}{N+1}\,\mathrm{i}\pi}\right), \quad k \in \{1, 2, \dots N\}\,.
\end{aligned}$$

Kde v $(*)$ jsme využili skutečnosti, že řešení $c_+ = -\,\mathrm{e}^{\frac{k}{N+1}\,\mathrm{i}\pi}$, $c_- = -\,\mathrm{e}^{\frac{-k}{N+1}\,\mathrm{i}\pi}$ je stejné, jako řešení $c_- = +\,\mathrm{e}^{\frac{-(N+1-k)}{N+1}\,\mathrm{i}\pi}$, $c_+ = +\,\mathrm{e}^{\frac{N+1-k}{N+1}\,\mathrm{i}\pi}$, můžeme tedy přestat psát $\pm$. Na posledním řádku jsme vyřadili řešení $k = 0$ a $k = N + 1$ – v nich c_+ a c_- splývají, vlastní vektor by tedy vyšel nulový.

Podařilo se nám najít N vlastních vektorů $\vec{u}_k$, díky násadě i bez ohledu na konkrétní hodnoty e, ν, λ. Můžeme si tedy nyní vyjádřit vlastní hodnoty jako funkce $\lambda(e, \nu, k)$. Nejprve ale zjednodušíme a normalizujeme vektor $\vec{u}$:

$$\begin{aligned}
& \boldsymbol{u}^j = A\left(\mathrm{e}^{\frac{jk}{N+1}\,\mathrm{i}\pi} - \mathrm{e}^{\frac{-jk}{N+1}\,\mathrm{i}\pi}\right),\\
\implies\ & \boldsymbol{u}^j = 2\mathrm{i}A\sin\left(\frac{jk\pi}{N+1}\right),\\
\implies\ & \boldsymbol{u}^j = C\sin\left(\frac{jk\pi}{N+1}\right).
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& 1 = \left\|\vec{u}\right\|,\\
\implies\ & 1 = \sum_{j=1}^{N}\left(\boldsymbol{u}^j\right)^2,\\
\implies\ & 1 = \sum_{j=1}^{N} C^2\sin^2\left(\frac{jk\pi}{N+1}\right),\\
\implies\ & C = \left(\sum_{j=1}^{N}\sin^2\left(\frac{jk\pi}{N+1}\right)\right)^{-1/2},\\
\implies\ & C = 2\left(-\sin\left(\frac{2N+1}{N+1}\,k\pi\right)\csc\left(\frac{k\pi}{N+1}\right) + 2N + 1\right)^{-1/2}.
\end{aligned}$$

Poslední krok byl navržen programem Wolfram Mathematica a numericky zkontrolován pro $N \in \{1, \dots 15\}$, csc je kosekans, platí pro něj $\csc\varphi = \frac{1}{\sin\varphi}$. Normalizační konstanta ovšem není příliš důležitá, v praxi můžeme vždy normalizovat stavový vektor numericky.

Pojďme nyní vyjádřit λ. Začneme charakteristickou rovnicí pro první souřadnici:

$$\lambda \boldsymbol{u}^1 = e\boldsymbol{u}^1 + \nu \boldsymbol{u}^2,$$

$$(\lambda - e)\,\boldsymbol{u}^1 = \nu \boldsymbol{u}^2,$$

$$\frac{\lambda - e}{\nu} = \frac{\boldsymbol{u}^2}{\boldsymbol{u}^1} = \frac{\sin\left(\frac{2k\pi}{N+1}\right)}{\sin\left(\frac{k\pi}{N+1}\right)} = 2\cos\left(\frac{k\pi}{N+1}\right),$$

$$\lambda = e + 2\nu\cos\left(\frac{k\pi}{N+1}\right).$$

Mohli jsme dělit $\boldsymbol{u}^1$, pro povolené hodnoty k nikdy není nulové. Protože vlastní číslo Hamiltoniánu odpovídá energetické hladině, máme pro energii k-tého stavu vztah:

$$E_k = e + 2\nu\cos\left(\frac{k\pi}{N+1}\right).$$

Nakonec by bylo vhodné zkontrolovat, zda násada $\boldsymbol{u}^j = c^j$ skutečně vedla na správné řešení a nalezená $\vec{u}, \lambda$ splňují charakteristickou rovnici:

$$\lambda \boldsymbol{u}^j = \nu \boldsymbol{u}^{j-1} + e\boldsymbol{u}^j + \nu \boldsymbol{u}^{j+1},$$

$$0 = \nu \boldsymbol{u}^{j-1} - 2\nu\cos\left(\frac{k\pi}{N+1}\right)\boldsymbol{u}^j + \nu \boldsymbol{u}^{j+1},$$

$$0 = \sin\left(\frac{(j-1)k\pi}{N+1}\right) + \sin\left(\frac{(j+1)k\pi}{N+1}\right) - 2\cos\left(\frac{k\pi}{N+1}\right)\sin\left(\frac{jk\pi}{N+1}\right).$$

Tato rovnost je zřejmá ze vzorce $\sin(a+b) = \cos(a)\sin(b) + \sin(a)\cos(b)$, nalezená řešení jsou tedy platná.

2.6 Výsledek druhé části

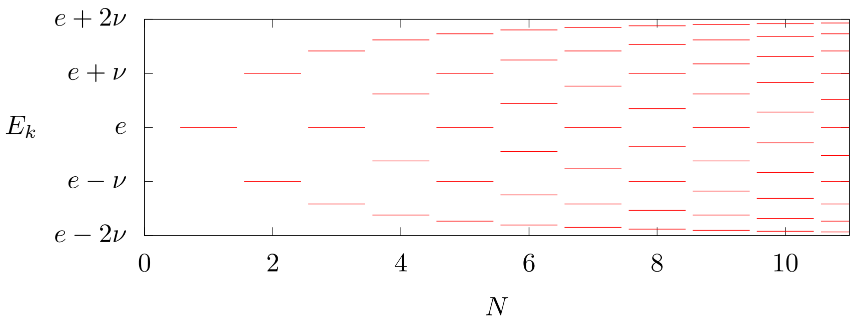
Zadaný Hamiltonián má vázané stavy $k \in \{1, \dots N\}$, jim odpovídající vlastní vektory jsou:

$$|k\rangle = C \begin{pmatrix} \sin\left({}^{k\pi}/_{N+1}\right) \\ \sin\left({}^{2k\pi}/_{N+1}\right) \\ \vdots \\ \sin\left({}^{Nk\pi}/_{N+1}\right) \end{pmatrix}, \qquad \text{kde} \quad C = 2\left(-\sin\left(\frac{2N+1}{N+1}\,k\pi\right)\csc\left(\frac{k\pi}{N+1}\right) + 2N + 1\right)^{-1/2}.$$

Energie k-tého stavu je:

$$E_k = e + 2\nu\cos\left(\frac{k\pi}{N+1}\right).$$

V grafu je vidět zhušťování energetických hladiny s rostoucím N:



Pro $N \to \infty$ je energetické spektrum spojité a energie stavů se pohybují mezi $e - 2\nu$ a $e + 2\nu$.

3 Cvičení 29. 10.

3.1 Harmonický oscilátor

Máme zadaný Hamiltonián jednorozměrného harmonického oscilátoru:

$$\hat{H} = \frac{1}{2M}\,\hat{p}^2 + \frac{1}{2}M\Omega^2\,\hat{x}^2, \qquad [\hat{x},\hat{p}] = \mathrm{i}\hbar.$$

Tentýž Hamiltonián lze vyjádřit pomocí posunovacích[3] operátorů $\hat{a}, \hat{a}^\dagger$:

$$\hat{H} = \hbar\Omega\left(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{1}{2}\right), \qquad \left[\hat{a},\hat{a}^\dagger\right] = 1,$$

$$\hat{x} = \sqrt{\hbar/2M\Omega}\,\left(\hat{a}^\dagger + \hat{a}\right), \qquad \hat{p} = \mathrm{i}\sqrt{\hbar M\Omega/2}\,\left(\hat{a}^\dagger - \hat{a}\right).$$

Ze cvičení víme, že platí:

$$\begin{aligned}
&\hat{n} = \hat{a}^\dagger\hat{a},\\
&\hat{n}\,|n\rangle = n\,|n\rangle\,,\ n \in \mathbb{N}_0,\\
&\hat{a}\ \ |n\rangle = \qquad \sqrt{n}\ |n-1\rangle\,,\\
&\hat{a}^\dagger\,|n\rangle = \sqrt{n+1}\ |n+1\rangle\,.
\end{aligned}$$

Vypočteme maticové elementy $\hat{x}^2$:

$$\begin{aligned}
\langle m|\,\hat{x}^2\,|n\rangle &= \langle m|\left(\sqrt{\hbar/2M\Omega}\,\left(\hat{a}^\dagger + \hat{a}\right)\right)^2|n\rangle\\
&= \frac{\hbar}{2M\Omega}\,\langle m|\left(\hat{a}^{\dagger 2} + \hat{a}^\dagger\hat{a} + \hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^2\right)|n\rangle\\
&= \frac{\hbar}{2M\Omega}\,\langle m|\left(\hat{a}^{\dagger 2} + 2\hat{n} + \hat{1} + \hat{a}^2\right)|n\rangle\\
&= \frac{\hbar}{2M\Omega}\,\langle m|\left(\sqrt{n+1}\,\sqrt{n+2}\,|n+2\rangle + 2n\,|n\rangle + |n\rangle + \sqrt{n}\,\sqrt{n-1}\,|n-2\rangle\right)\\
&= \frac{\hbar}{2M\Omega}\,\left(\sqrt{(n+1)(n+2)}\,\langle m|n+2\rangle + (2n+1)\,\langle m|n\rangle + \sqrt{n(n-1)}\,\langle m|n-2\rangle\right).
\end{aligned}$$

Vidíme, že nenulové budou pouze členy na diagonále, dva řádky nad diagonálou a dva řádky pod diagonálou.

Než se pustíme do výpočtu maticových elementů $\hat{x}^4$, nejprve roznásobíme výraz $(\hat{a}^\dagger + \hat{a})^4$:

$$\begin{aligned}
\left(\hat{a}^\dagger + \hat{a}\right)^4 &= \left(\hat{a}^\dagger + \hat{a}\right)^2\left(\hat{a}^\dagger + \hat{a}\right)^2\\
&= \left(\hat{a}^{\dagger 2} + 2\hat{a}^\dagger\hat{a} + \hat{a}^2 + \hat{1}\right)\left(\hat{a}^{\dagger 2} + 2\hat{a}^\dagger\hat{a} + \hat{a}^2 + \hat{1}\right)\\
&= \hat{a}^{\dagger 4} + \hat{a}^4 + 2\hat{a}^{\dagger 2} + 2\hat{a}^2 + 4\hat{n}^2 + 4\hat{n}\\
&+ 2\hat{a}^{\dagger 2}\hat{n} + 2\hat{n}\hat{a}^{\dagger 2} + 2\hat{a}^2\hat{n} + 2\hat{n}\hat{a}^2\\
&+ \hat{a}^{\dagger 2}\hat{a}^2 + \hat{a}^2\hat{a}^{\dagger 2} + \hat{1}\\
&= \hat{a}^{\dagger 4} + \hat{a}^4 + 6\hat{a}^{\dagger 2} - 2\hat{a}^2 + 6\hat{n}^2 + 6\hat{n} + 4\hat{a}^{\dagger 2}\hat{n} + 4\hat{a}^2\hat{n} + \hat{3}
\end{aligned}$$

[3] V anglické literatuře se posunovací operátory nazývají „ladder operators“.

Nyní snadno dopočteme maticové elementy $\hat{x}^4$:

$$
\begin{aligned}
\langle m|\,\hat{x}^4\,|n\rangle = &\left(\frac{\hbar}{2M\Omega}\right)^2\sqrt{\frac{(n+4)!}{n!}}\,\langle m|n+4\rangle \\
&+\left(\frac{\hbar}{2M\Omega}\right)^2\sqrt{\frac{(n+2)!}{n!}}\,(4n+6)\,\langle m|n+2\rangle \\
&+\left(\frac{\hbar}{2M\Omega}\right)^2\left(6n^2+6n+3\right)\langle m|n\rangle \\
&+\left(\frac{\hbar}{2M\Omega}\right)^2\sqrt{\frac{n!}{(n-2)!}}\,(4n-2)\,\langle m|n-2\rangle \\
&+\left(\frac{\hbar}{2M\Omega}\right)^2\sqrt{\frac{n!}{(n-4)!}}\,\langle m|n-4\rangle\,.
\end{aligned}
$$

Ve vyjádření $\langle m|\,\hat{x}^4\,|n\rangle$ byla použita konvence $0\cdot\infty=0,\quad n<0\implies|n\rangle=0$, roznásobením faktoriálů je možné dostat méně kompaktní, korektnější vyjádření.

3.2 Kvadratický oscilátor

Máme Hamiltonián odpovídající kvadratickému oscilátoru:

$$\hat{H}=\frac{1}{2M}\hat{p}^2+\frac{1}{2}M\Omega^2\hat{x}^2+\frac{1}{2}b\hat{x}^4.$$

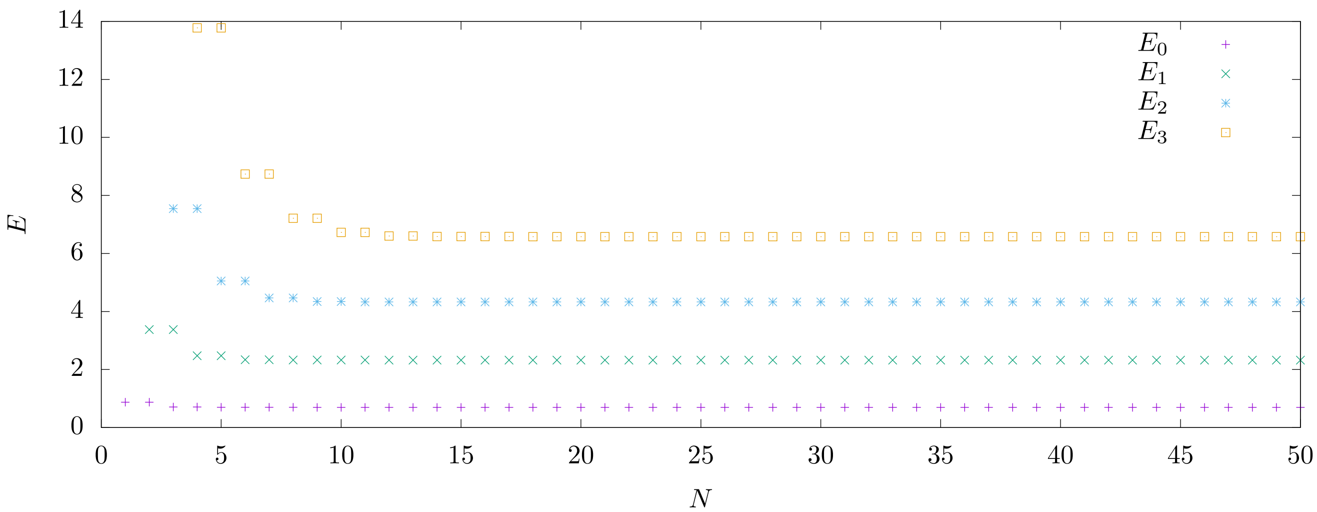
Chceme-li vypočítat vlastní čísla Hamiltoniánu, budeme to muset udělat numericky. Je výhodné použít maticové vyjádření $\hat{H}$ pomocí vlastních vektorů *harmonického* oscilátoru ($|n\rangle$ v předchozí úloze). Tím nám vznikne řídká matice[4], kterou lze rychle diagonalizovat. Už jsme vypočetli maticové vyjádření $\hat{x}^2,\hat{x}^4$, úplně stejným způsobem je možné dostat maticové vyjádření $\hat{p}^2$:

$$
\begin{aligned}
\langle m|\,\hat{p}^2\,|n\rangle &= \frac{1}{2}\mathrm{i}\hbar M\Omega\,\langle m|\left(\hat{a}^{\dagger 2}-2\hat{n}-\hat{1}+\hat{a}^2\right)|n\rangle \\
&=\frac{1}{2}\mathrm{i}\hbar M\Omega\left(\sqrt{(n+1)(n+2)}\,\langle m|n+2\rangle-(2n+1)\,\langle m|n\rangle+\sqrt{n(n-1)}\,\langle m|n-2\rangle\right)
\end{aligned}
$$

Pro maticové vyjádření Hamiltoniánu tedy platí:

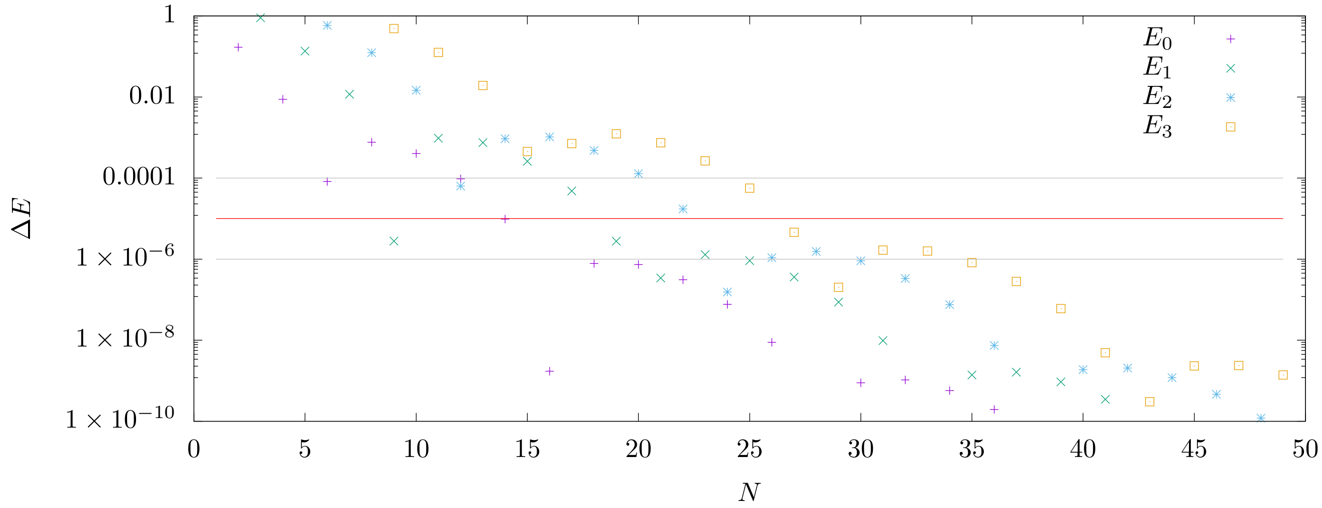
$$
\begin{aligned}
H_{mn} &= \langle m|\,\hat{H}\,|n\rangle \\
&=\frac{\hbar}{8M^2\Omega^2}\left(\begin{array}{l}
4M^2\Omega^3\,(2n+1)\,\langle m\,|n\rangle+4b\hbar n^{\frac{3}{2}}\sqrt{n-1}\,\langle m\,|n-2\rangle+b\hbar\sqrt{n}\sqrt{n-3}\sqrt{n-2}\sqrt{n-1}\,\langle m\,|n-4\rangle \\
-2b\hbar\sqrt{n}\sqrt{n-1}\,\langle m\,|n-2\rangle+6b\hbar n^2\,\langle m\,|n\rangle+4b\hbar n\sqrt{n^2+3n+2}\,\langle m\,|n+2\rangle+6b\hbar n\,\langle m\,|n\rangle \\
+6b\hbar\sqrt{n^2+3n+2}\,\langle m\,|n+2\rangle+b\hbar\sqrt{n^4+10n^3+35n^2+50n+24}\,\langle m\,|n+4\rangle+3b\hbar\,\langle m\,|n\rangle
\end{array}\right).
\end{aligned}
$$

Ze zadání jsem dosadil $M=\Omega=\hbar=b=1$. Pomocí tohoto vzorce jsem vygeneroval matici $N\times N$ a numericky ji diagonalizoval pomocí knihovny mpmath. Vývoj prvních čtyř energetických hladin (základní E_0 a tři excitované $E_{1,2,3}$) v závislosti na N je vidět v následujícím grafu.



[4] Angl. „sparse matrix“

Je vidět, že energie konvergují rychle. Lépe rychlost konvergence uvidíme v grafu závislosti $\Delta E(N)$, tedy změny E při zvýšení N o jedna.



Vidíme, že pro $N = 30$ jsou již změny spolehlivě menší než řádu 10^{-5} (tudíž pod červenou čárou), pro $N = 35$ jsou potom menší než 10^6. Podrobnější analýza ukazuje, že pro určení prvních čtyř energií na pět platných cifer stačí $N = 23$. Použitá přesnost mpmath byla řádově vyšší, zaokrouhlovací chyby a numerická stabilita použitého diagonalizačního algoritmu by tedy neměly mít vliv. Vypočtené hodnoty energetických hladin byly:

E_0	E_1	E_2	E_3
0.69618	2.3244	4.3275	6.5784

3.3 Dvoujámový potenciál

Máme zadaný Hamiltonián:

$$\hat{H} = \frac{1}{2M}\hat{p}^2 - \frac{1}{2}a\hat{x}^2 + \frac{1}{2}b\hat{x}^4$$

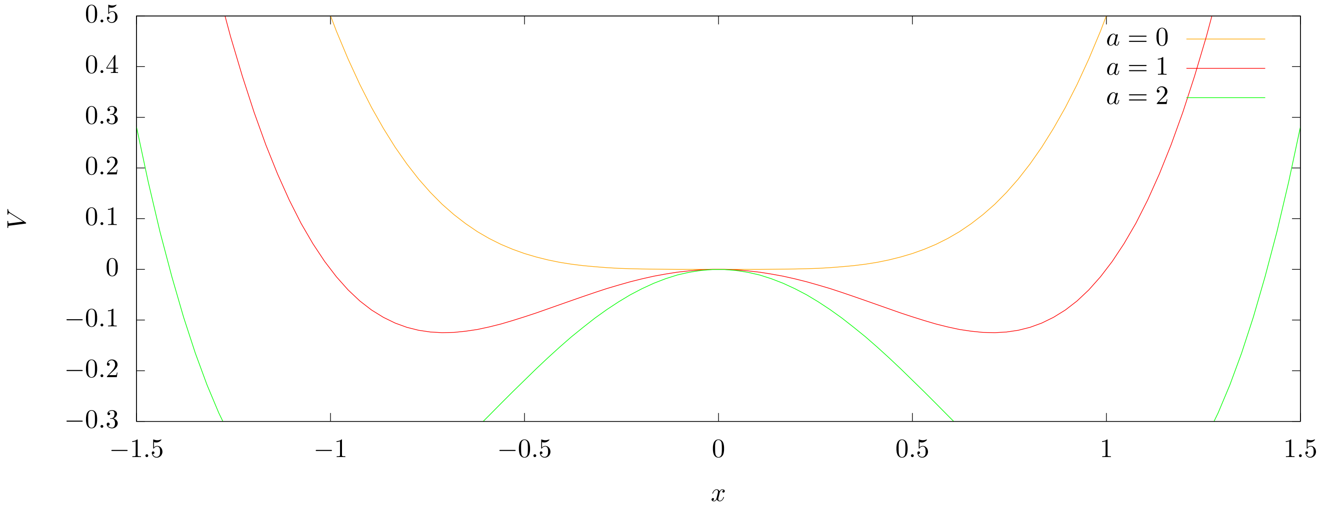
Potenciál má tři stacionární body – dvě globální minima a jedno lokální maximum:

$$0 = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left(-\frac{1}{2}ax^2 + \frac{1}{2}bx^4\right)$$

$$0 = -ax + 2b^3$$

$$0 = x\left(x + \sqrt{\frac{a}{2b}}\right)\left(x - \sqrt{\frac{a}{2b}}\right)$$

Máme vyšetřit energetické hladiny pro $\hbar = 0.03$, $M = \Omega = a = b = 1$. Pro porovnání přikládám graf s $a \in 0, 1, 2$:



Použijeme opět maticové vyjádření v diagonální bázi harmonického oscilátoru. Maticová reprezentace Hamiltoniánu po dosazení $M = \Omega = b = 1$ je:

$$\begin{aligned}\langle m| \hat{H} |n\rangle = &\frac{\hbar^2}{8}\sqrt{n(n-1)(n-2)(n-3)}\ \langle m |n-4\rangle \\ &+ \frac{\hbar^2}{8}\sqrt{(n+1)(n+2)(n+3)(n+4)}\ \langle m |n+4\rangle \\ &+ \frac{\hbar}{4}\sqrt{n(n-1)}\ (2\hbar n - \hbar - a - 1)\langle m |n-2\rangle \\ &+ \frac{\hbar}{4}\sqrt{(n+1)(n+2)}\ (2\hbar n + 3\hbar - a - 1)\langle m |n+2\rangle \\ &+ \frac{\hbar}{8}\left(-4an - 2a + 6\hbar n^2 + 6\hbar n + 3\hbar + 4n + 2\right)\langle m |n\rangle.\end{aligned}$$

Pro $\hbar = 0.03$ jsou první čtyři energetické hladiny:

E_0	E_1	E_2	E_3
-0.10426	-0.10426	-0.064909	-0.0649

Z vypočtených hodnot je vidět, že se energetické stavy vyskytují v dubletech. Lze to vysvětlit pomocí vlnové funkce v x-reprezentaci[5]. Vlnové funkce stavů E_0, E_1 jsou totiž (anti)symetrickými superpozicemi vlnových funkcí ψ_l, ψ_r, které by odpovídaly částici v levém, resp. pravém údolí potenciálu. Takové superpozice jsou dvě:

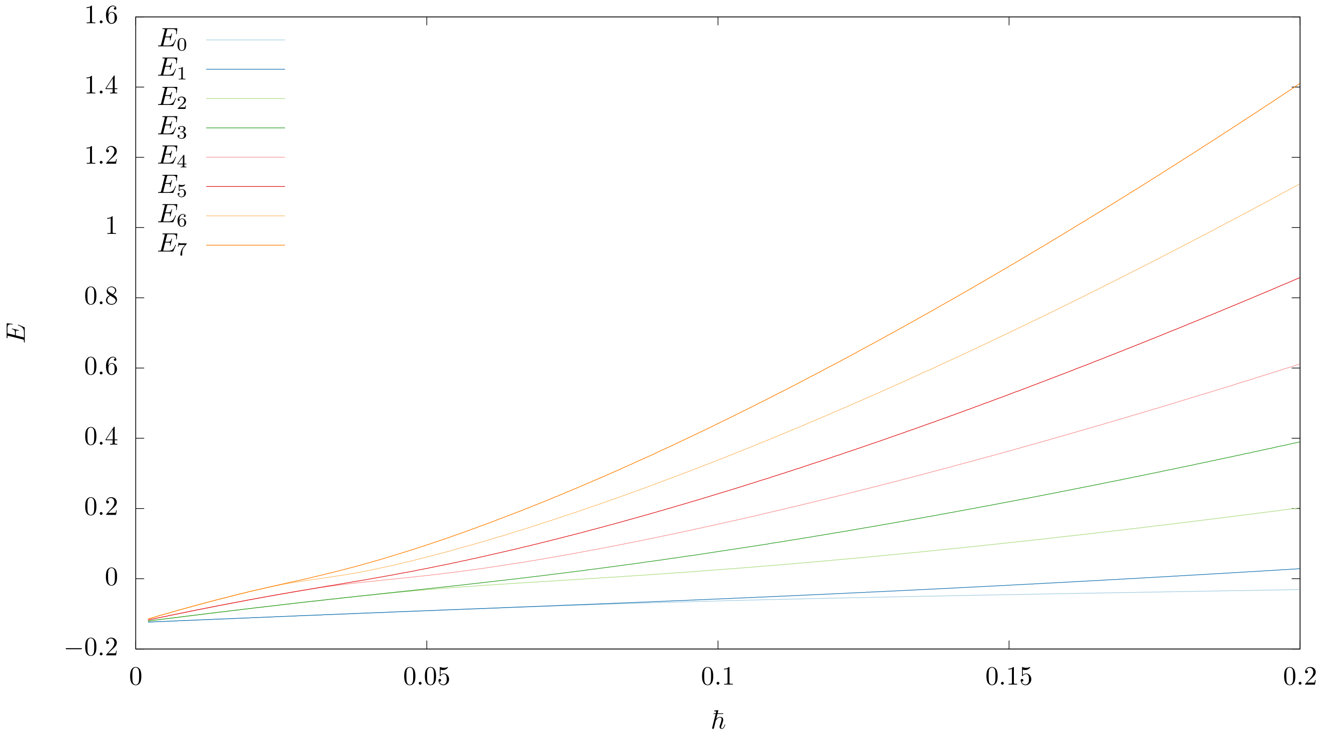
$$\psi_\pm(x) = C_N\left(\psi_l(x) \pm \psi_r(x)\right).$$

Hamiltonián v x-reprezentaci obsahuje kladný člen $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}$, a protože antisymetrické řešení ψ_- má o trochu větší druhou derivaci než symetrické řešení ψ_+, bude mít i o trochu větší energii.

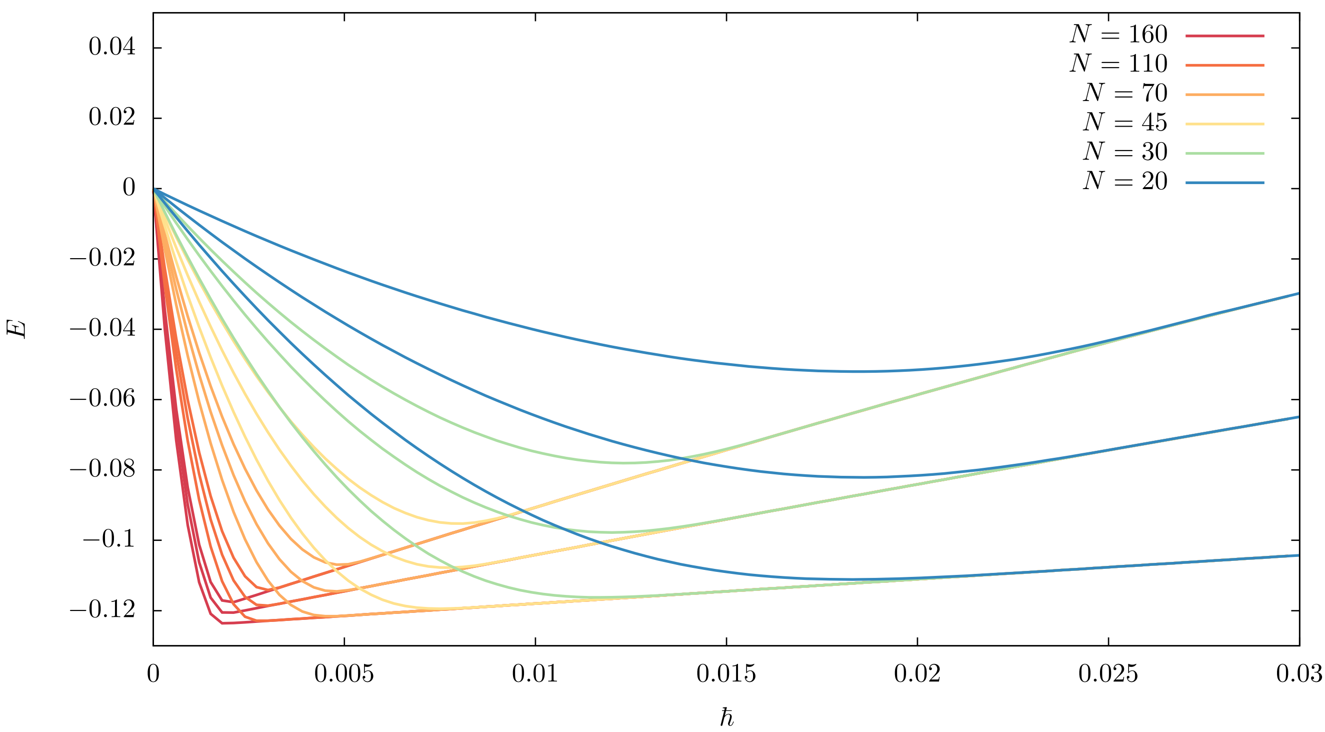
V grafu na obrázku č. 1 je vynesená závislost energetických hladin na hodnotě $\hbar$. Vidíme, že pro $\hbar \to \infty$ se energie stavů rozprostřou rovnoměrně, dublety zaniknou. Naopak v klasické limitě $\hbar \to 0$ se energetické stavy vzájemně přibližují a dublety splynou v jeden stav.

Zajímavá je nestejnoměrná konvergence pro $N \to \infty$ v okolí $\hbar = 0$ – zatímco pro $\hbar = 0.015$ zkonvergují energetické hladiny už při $N \approx 30$, pro $\hbar = 0.002$ už je potřeba matice o straně $N = 160$. Konvergence stavů E_0, E_2, E_4 je vynesena v grafu na obrázku č. 2.

[5] Pro podrobnější vysvětlení viz `http://www2.chem.umd.edu/groups/alexander/chem691/double_well.pdf`



Obrázek 1: Energetické hladiny v závislosti na $\hbar$.



Obrázek 2: Konvergence v okolí $\hbar = 0$.

4 Další cvičení