

Kvantová mechanika I: Domácí úkoly

Michal Grňo

6. ledna 2020

1 Cvičení 9. 10.

1.1 Zadání

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

$$\begin{aligned} [\hat{A}, \hat{B}] &\neq 0, \\ [\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]] &= [\hat{B}, [\hat{A}, \hat{B}]] = 0. \end{aligned}$$

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

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

1.2 Řešení

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

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

Derivací vztahu získáme:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \xi} e^{\hat{X}(\xi)} &= \frac{\partial}{\partial \xi} e^{\xi\hat{A}} e^{\xi\hat{B}} \\ \hat{X}'(\xi) e^{\hat{X}(\xi)} &= \hat{A} e^{\xi\hat{A}} e^{\xi\hat{B}} + e^{\xi\hat{A}} \hat{B} e^{\xi\hat{B}} \\ \hat{X}'(\xi) e^{\hat{X}(\xi)} &= \left(\hat{A} + e^{\xi\hat{A}} \hat{B} e^{\xi\hat{B}} e^{-\xi\hat{B}} e^{-\xi\hat{A}} \right) e^{\xi\hat{A}} e^{\xi\hat{B}} \\ \hat{X}'(\xi) e^{\hat{X}(\xi)} &= \left(\hat{A} + e^{\xi\hat{A}} \hat{B} e^{-\xi\hat{A}} \right) e^{\hat{X}(\xi)} \\ \hat{X}'(\xi) &= \hat{A} + e^{\xi\hat{A}} \hat{B} e^{-\xi\hat{A}} \end{aligned}$$

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

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

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

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

Dosazením do naší rovnice získáme:

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

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

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

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

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

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

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

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

2 Cvičení 16. 10.

2.1 Zadání první části

Mějme dvouhladinový systém popsany Hamiltoniánem:

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \hat{H}_0 + \hat{H}_1, \\ \hat{H}_0 &= \begin{pmatrix} e & 0 \\ 0 & -e \end{pmatrix}, \\ \hat{H}_1 &= \begin{pmatrix} 0 & \nu \\ \nu & 0 \end{pmatrix}.\end{aligned}$$

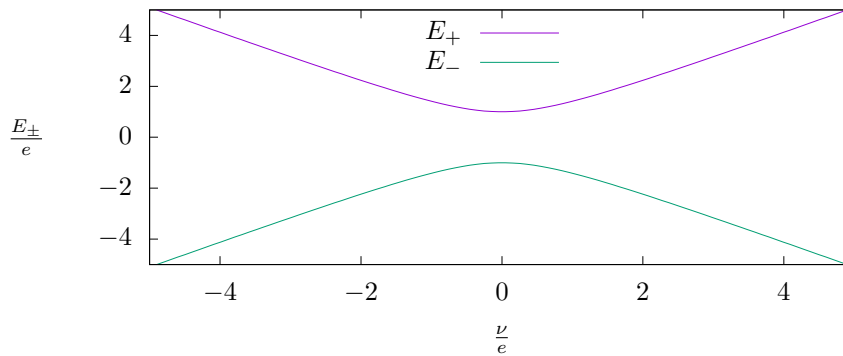
Spočtěte vlastní hodnoty E_+, E_- a vlastní vektory $|E_+\rangle, |E_-\rangle$ Hamiltoniánu, zakreslete závislost $E_{\pm}(\nu)$, vypočtěte vektory $|E_{\pm}(\nu=0)\rangle$ a $|E_{\pm}(\nu \rightarrow \infty)\rangle$.

2.2 Řešení první části

Začneme nalezením vlastních energií:

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \begin{pmatrix} e & 0 \\ 0 & -e \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & \nu \\ \nu & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e & \nu \\ \nu & -e \end{pmatrix}, \\ \det(\hat{H} - E \hat{1}) &= -(e^2 - E^2)(e^2 + E^2) - \nu^2 = E^2 - e^2 - \nu^2 = 0 \\ \implies E_{\pm} &= \pm \sqrt{e^2 + \nu^2}.\end{aligned}$$

Závislost E_{\pm} na ν je potom:



Pokračujeme vypočtením odpovídajících vlastních vektorů:

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

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

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

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

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:

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

Nyní si pomocí minorů vyjádříme jejich determinanty:

$$\det \begin{pmatrix} a & b & & & \\ b & a & b & & \\ & b & a & b & \\ & & b & a & \ddots \\ & & & \ddots & \ddots \end{pmatrix} = a \det \begin{pmatrix} & a & b & & \\ & b & a & b & \\ & & b & a & \ddots \\ & & & \ddots & \ddots \end{pmatrix} - b \det \begin{pmatrix} & & b & & \\ & a & b & & \\ & b & a & b & \\ & & b & a & \ddots \\ & & & \ddots & \ddots \end{pmatrix},$$

$$\det \begin{pmatrix} b & b & & & \\ 0 & a & b & & \\ & b & a & b & \\ & & b & a & \ddots \\ & & & \ddots & \ddots \end{pmatrix} = b \det \begin{pmatrix} & a & b & & \\ & b & a & b & \\ & & b & a & \ddots \\ & & & \ddots & \ddots \end{pmatrix}.$$

Totéž zapsáno v kompaktní formě:

$$\begin{aligned} \det A_N &= a \det A_{N-1} - b \det B_{N-1}, \\ \det B_N &= b \det A_{N-1}. \\ \implies \det A_N &= a \det A_{N-1} - b^2 \det A_{N-2}. \end{aligned}$$

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 rekurence¹ 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 platí $\det(\hat{H} - \lambda \hat{1}) = \det A_n$ 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 $N \in \{1, 2, 3, \dots\}$:

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

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

2.5 Druhý pokus o řešení druhé části

Vyjádríme-li si charakteristickou rovnici pro Hamiltonián, dostaneme:

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

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

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

¹Hlubší 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:

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

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

$$\begin{aligned}\lambda \mathbf{u}^j &= \nu \mathbf{u}^{j-1} + e \mathbf{u}^j + \nu \mathbf{u}^{j+1}, \\ \mathbf{u}^0 &= 0, \quad \mathbf{u}^{N+1} = 0.\end{aligned}$$

Z nápovědy víme, že máme řešení hledat pomocí násady²:

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

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

$$\begin{aligned}\lambda c^j &= \nu c^{j-1} + e c^j + \nu c^{j+1} \\ \lambda c &= \nu + e c + \nu c^2 \\ 0 &= \nu c^2 + (e - \lambda) c + \nu \\ c_{\pm} &= \frac{\lambda - e}{2\nu} \pm \sqrt{\left(\frac{\lambda - e}{2\nu}\right)^2 - 1}\end{aligned}$$

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

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

Dosazením do okrajových podmínek získáme:

$$\begin{aligned}0 &= \mathbf{u}^0 = A c_+^0 + B c_-^0 = A + B \Leftrightarrow B = -A \\ 0 &= \mathbf{u}^{N+1} = A c_+^{N+1} + B c_-^{N+1} \\ &= A (c_+^{N+1} - c_-^{N+1}) \Leftrightarrow A = 0 \\ &\quad \vee \quad c_+ = c_- = 0 \\ &\quad \vee \quad (c_+/c_-)^{N+1} = 1\end{aligned}$$

²Násada, 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

$$\mathbf{u}^j = A (c_+^j - c_-^j), \quad (c_+/c_-)^{N+1} = 1.$$

$$(c_+/c_-)^{N+1} = 1 = e^{2ki\pi}, \quad k \in \mathbb{N},$$

$$\implies c_+/c_- = e^{\frac{2k}{N+1}i\pi},$$

$$\implies (c_+/c_-) (c_+ c_-) = e^{\frac{2k}{N+1}i\pi}, \quad (\text{s použitím } c_+ c_- = 1)$$

$$\implies c_+^2 = e^{\frac{2k}{N+1}i\pi},$$

$$\implies c_+ = \pm e^{\frac{k}{N+1}i\pi}, \quad (*)$$

$$\implies c_+ = e^{\frac{k}{N+1}i\pi}, \quad c_- = e^{\frac{-k}{N+1}i\pi},$$

$$\implies \mathbf{u}^j = A \left(e^{\frac{jk}{N+1}i\pi} - e^{\frac{-jk}{N+1}i\pi} \right), \quad k \in \{1, 2, \dots, N\}.$$

Kde v (*) jsme využili skutečnosti, že řešení $c_+ = -e^{\frac{k}{N+1}i\pi}$, $c_- = -e^{\frac{-k}{N+1}i\pi}$ je stejné, jako řešení $c_- = +e^{\frac{-(N+1-k)}{N+1}i\pi}$, $c_+ = +e^{\frac{N+1-k}{N+1}i\pi}$, 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} :

$$\mathbf{u}^j = A \left(e^{\frac{jk}{N+1}i\pi} - e^{\frac{-jk}{N+1}i\pi} \right),$$

$$\implies \mathbf{u}^j = 2iA \sin \left(\frac{jk\pi}{N+1} \right),$$

$$\implies \mathbf{u}^j = C \sin \left(\frac{jk\pi}{N+1} \right).$$

$$1 = \|\vec{u}\|,$$

$$\implies 1 = \sum_{j=1}^N \left(\mathbf{u}^j \right)^2,$$

$$\implies 1 = \sum_{j=1}^N C^2 \sin^2 \left(\frac{jk\pi}{N+1} \right),$$

$$\implies C = \left(\sum_{j=1}^N \sin^2 \left(\frac{jk\pi}{N+1} \right) \right)^{-1/2},$$

$$\implies C = 2 \left(-\sin \left(\frac{2N+1}{N+1} k\pi \right) \csc \left(\frac{k\pi}{N+1} \right) + 2N+1 \right)^{-1/2}.$$

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:

$$\begin{aligned}\lambda \mathbf{u}^1 &= e \mathbf{u}^1 + \nu \mathbf{u}^2, \\ (\lambda - e) \mathbf{u}^1 &= \nu \mathbf{u}^2, \\ \frac{\lambda - e}{\nu} &= \frac{\mathbf{u}^2}{\mathbf{u}^1} = \frac{\sin\left(\frac{2k\pi}{N+1}\right)}{\sin\left(\frac{k\pi}{N+1}\right)} = 2 \cos\left(\frac{k\pi}{N+1}\right), \\ \lambda &= e + 2\nu \cos\left(\frac{k\pi}{N+1}\right).\end{aligned}$$

Mohli jsme dělit \mathbf{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 $\mathbf{u}^j = c^j$ skutečně vedla na správné řešení a nalezená \vec{u}, λ splňují charakteristickou rovnici:

$$\begin{aligned}\lambda \mathbf{u}^j &= \nu \mathbf{u}^{j-1} + e \mathbf{u}^j + \nu \mathbf{u}^{j+1}, \\ 0 &= \nu \mathbf{u}^{j-1} - 2\nu \cos\left(\frac{k\pi}{N+1}\right) \mathbf{u}^j + \nu \mathbf{u}^{j+1}, \\ 0 &= \sin\left(\frac{(j-1)k\pi}{N+1}\right) + \sin\left(\frac{(j+1)k\pi}{N+1}\right) - 2 \cos\left(\frac{k\pi}{N+1}\right) \sin\left(\frac{jk\pi}{N+1}\right).\end{aligned}$$

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

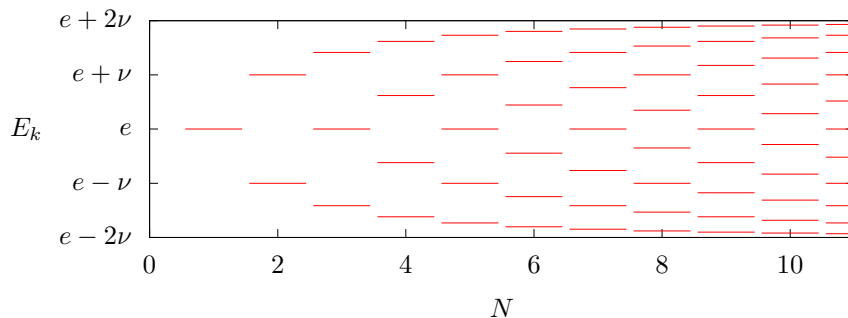
Zadaný Hamiltonián má vázané stavy $k \in \{1, \dots, N\}$, jim odpovídající vlastní vektory jsou:

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

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 $N \rightarrow \infty$ je energetické spektrum spojitě 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:

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

Tentýž Hamiltonián lze vyjádřit pomocí posunovacích³ operátorů \hat{a}, \hat{a}^\dagger :

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \hbar\Omega \left(\hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2} \right), \quad [\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1, \\ \hat{x} &= \sqrt{\hbar/2M\Omega} \left(\hat{a}^\dagger + \hat{a} \right), \quad \hat{p} = i\sqrt{\hbar M\Omega/2} \left(\hat{a}^\dagger - \hat{a} \right). \end{aligned}$$

Ze cvičení víme, že platí:

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

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 $(\hat{a}^\dagger + \hat{a})^4$:

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

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

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

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

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

3.2 Kvadratický oscilátor

Máme Hamiltonián odpovídající kvadratickému oscilátoru:

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

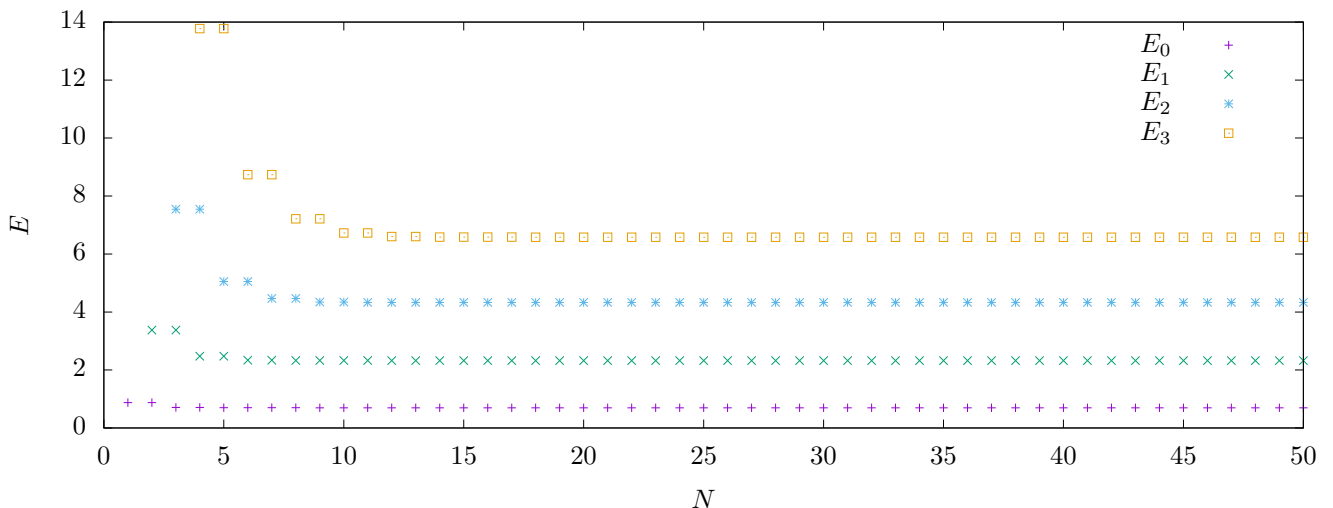
Chceme-li vypočítat vlastní čísla Hamiltoniánu, budeme to muset udělat numericky. Je výhodné použít maticové vyjádření \hat{H} pomocí vlastních vektorů *harmonického* oscilátoru ($|n\rangle$ v předchozí úloze). Tím nám vznikne řídká matice⁴, kterou lze rychle diagonalizovat. Už jsme vypočetli maticové vyjádření \hat{x}^2, \hat{x}^4 , úplně stejným způsobem je možné dostat maticové vyjádření \hat{p}^2 :

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

Pro maticové vyjádření Hamiltoniánu tedy platí:

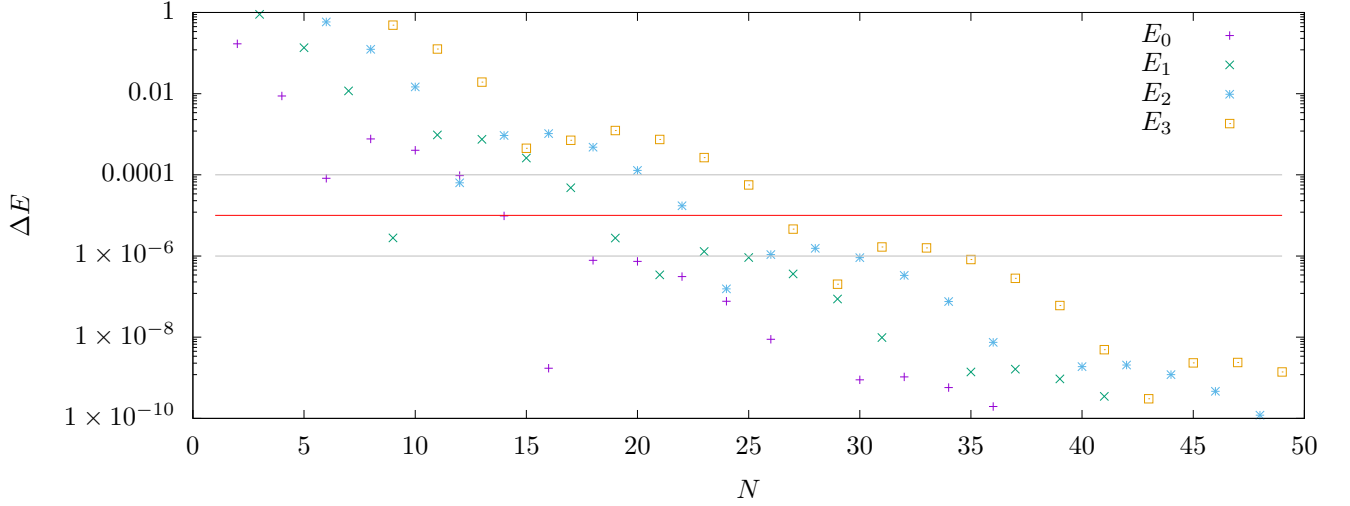
$$\begin{aligned}H_{mn} &= \langle m | \hat{H} | n \rangle \\ &= \frac{\hbar}{8M^2\Omega^2} \left(\begin{aligned} &4M^2\Omega^3(2n+1) \langle m | n \rangle + 4b\hbar n^{\frac{3}{2}} \sqrt{n-1} \langle m | n-2 \rangle + b\hbar\sqrt{n} \sqrt{n-3} \sqrt{n-2} \sqrt{n-1} \langle m | n-4 \rangle \\ &-2b\hbar\sqrt{n}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

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.



⁴Angl. „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 čarou), 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 knihovny *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:

$$\hat{H} = \frac{1}{2M}\hat{p}^2 - \frac{1}{2}ax^2 + \frac{1}{2}bx^4$$

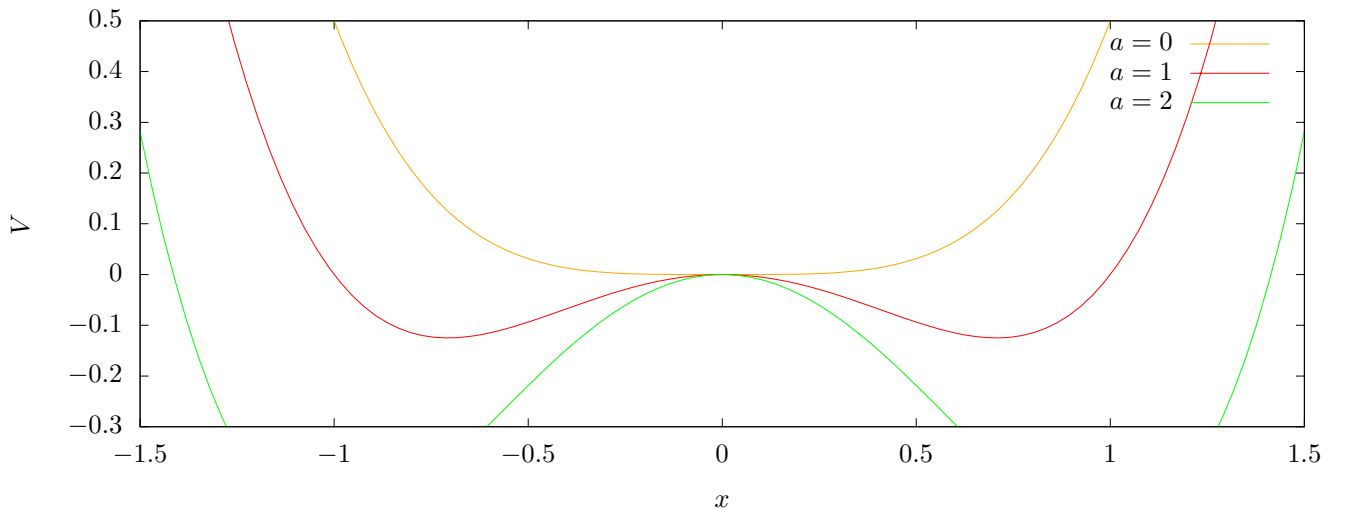
Potenciál má tři stacionární body – dvě globální minima a jedno lokální maximum:

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

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

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

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:

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

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 -reprezentaci⁵. 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:

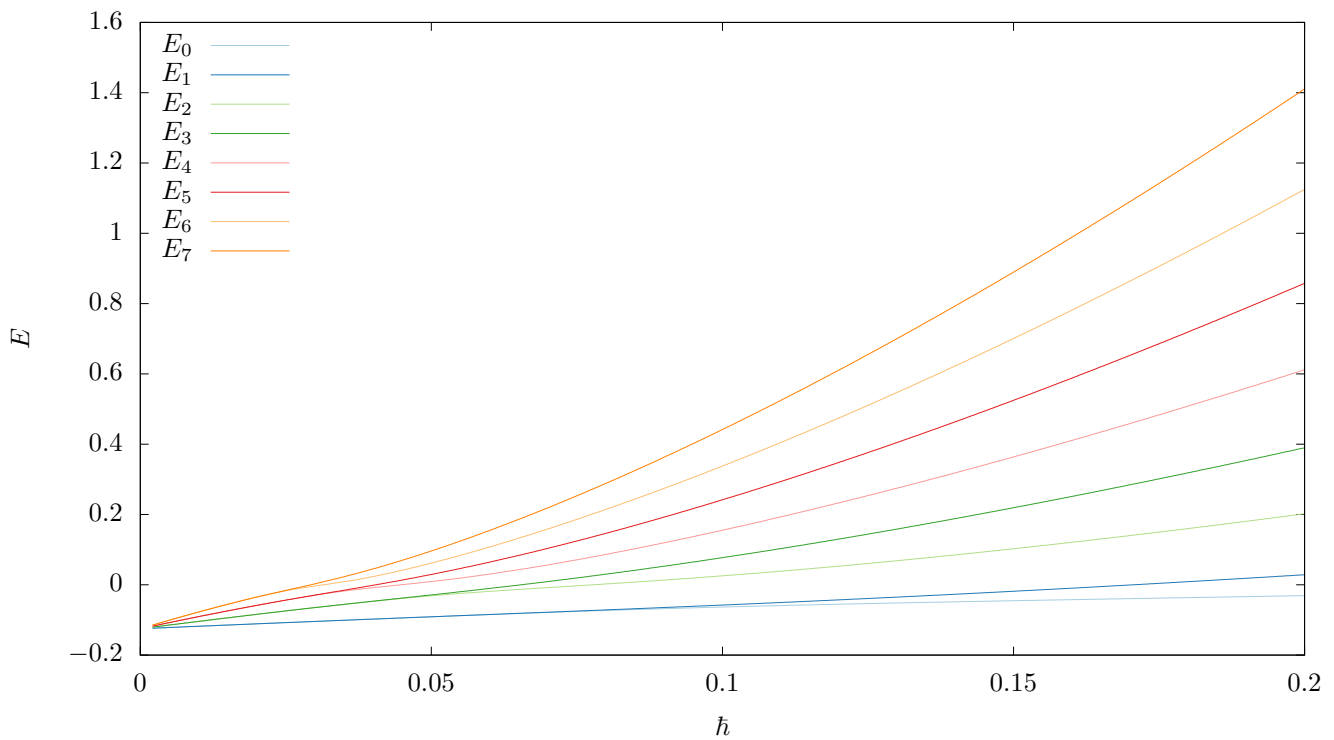
$$\psi_{\pm}(x) = C_N (\psi_l(x) \pm \psi_r(x)).$$

Hamiltonián v x -reprezentaci obsahuje kladný člen $\frac{d^2}{dx^2}$, a protože antisymetrické řešení ψ_- má o trochu větší druhou derivaci než symetrické řešení ψ_+ , bude mít i o trochu větší energii.

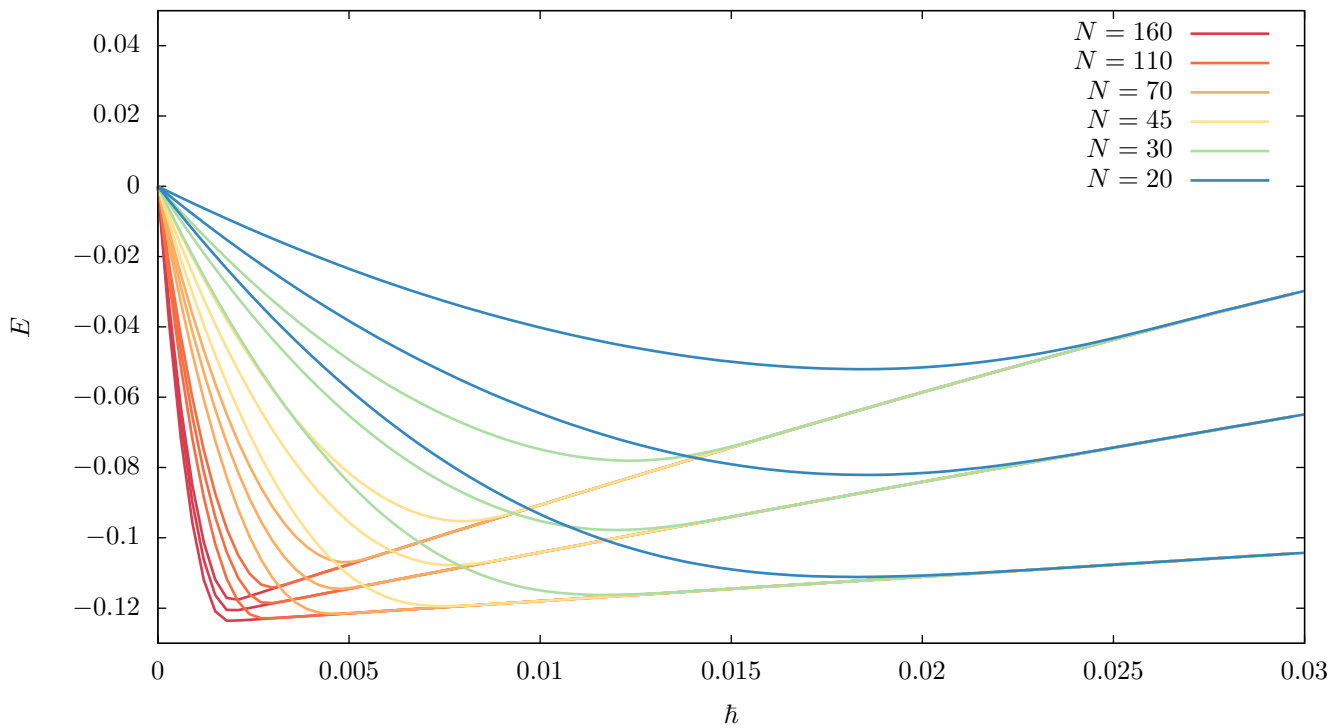
V grafu na obrázku č. 1 je vynesena závislost energetických hladin na hodnotě \hbar . Vidíme, že pro $\hbar \rightarrow \infty$ se energie stavů rozprostřou rovnoměrně, dublety zaniknou. Naopak v klasické limitě $\hbar \rightarrow 0$ se energetické stavy vzájemně přibližují a dublety splynou v jeden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

Zajímavá je nestejnoměrná konvergence pro $N \rightarrow \infty$ 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.

⁵Pro 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 stavů E_0, E_2, E_4 v okolí $\hbar = 0$.

4 Cvičení 18. 12.

4.1 Zadání

Máme částici se spinem 1, velikostí magnetického momentu μ , popsanou vlnovou funkcí

$$|\psi(t)\rangle = \psi_+(t) |+\rangle + \psi_0(t) |0\rangle + \psi_-(t) |-\rangle,$$

kde $|-\rangle, |0\rangle, |+\rangle$ odpovídají stavům, kdy je projekce spinu na osu z rovná $-1, 0$, resp. 1 .

Částice se pohybuje v magnetickém poli: nejprve je po dobu τ vystavena poli $B_0 + B_1$, poté je po dobu T v poli B_0 a nakonec opět po dobu τ v poli $B_0 + B_1$. Platí:

$$B_0 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ b_0 \end{pmatrix} \quad B_1 = \begin{pmatrix} b_1 \cos \omega t \\ -b_1 \sin \omega t \\ 0 \end{pmatrix}$$

Rotace částice generují matice

$$s_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad s_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}, \quad s_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Vypočtěte⁶:

$$[s_j, s_k] = ?$$

$$s_j^{n+2} = ?$$

$$\mathbf{s} = (s_1, s_2, s_3) \\ \exp i\varphi \hat{n} \cdot \mathbf{s} = ?$$

$$\omega_{0,1} = 2\mu\hbar^{-1}b_{0,1}$$

$$\Omega = \sqrt{(\omega - \omega_0)^2 + \omega_1^2}$$

$$\hat{n}_\Omega = \Omega^{-1} \begin{pmatrix} -\omega_1 & 0 & \omega - \omega_0 \end{pmatrix}^T$$

$$U(t) = e^{i\omega t s_3} e^{-i\Omega t (\hat{n}_\Omega \cdot \mathbf{s})}$$

$$\langle j | U(t) | k \rangle = ?$$

4.2 Řešení

Komutátor je antisymetrická lineární operace, pro tři elementy s_1, s_2, s_3 máme tedy tři unikátní komutátory:

$$[s_1, s_2], \quad [s_2, s_3], \quad [s_3, s_1].$$

$$\begin{aligned} & \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix} - \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} = \frac{i}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & -1 \end{pmatrix} - \frac{i}{2} \begin{pmatrix} -1 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \end{pmatrix} = i \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \\ & \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix} = \frac{i}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} - \frac{i}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix} = \frac{i}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \\ & \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} - \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix} - \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = i \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Zjevně tedy

$$[s_j, s_k] = i \varepsilon_{jkl} s_l.$$

⁶Povšimněte si, že následující skupina rovnic by mohla klidně posloužit jako přebal nového výtisku básnické sbírky Alkoholy od Guillaumea Apollinaira. Pokud znáte nakladatele, který zvažuje tuto sbírku znovu natisknout, nezděrahejte se ho oslovit.

Pokračujeme ověřením cyklické povahy s_j^2 :

$$\begin{aligned}
s_1^3 &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 0 & 2 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} = s_1 \\
s_2^3 &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & -1 \\ 0 & 2 & 0 \\ -1 & 0 & 1 \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} = s_2 \\
s_3^3 &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} = s_3
\end{aligned}$$

Platí tedy:

$$s_j^{n+2} = s_j^{n-1} s_j^3 = s_j^{n-1} s_j = s_j^n$$

$$\begin{aligned}
\exp i\varphi \hat{n} \cdot \mathbf{s} &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} (i\varphi (\hat{n}_1 s_1 + \hat{n}_2 s_2 + \hat{n}_3 s_3))^n \\
&= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(i\varphi)^n}{n!} \sum_{k+l+m=n} \frac{n!}{k! l! m!} (\hat{n}_1 s_1)^k (\hat{n}_2 s_2)^l (\hat{n}_3 s_3)^m \\
&= \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{k=0}^n \sum_{l=0}^{n-k} \frac{(i\varphi)^n}{k! l! (n-k-l)!} (\hat{n}_1 s_1)^k (\hat{n}_2 s_2)^l (\hat{n}_3 s_3)^{n-k-l}
\end{aligned}$$

Což je blbost žejo uhh čas jít spát