

# Úvod do kvantové mechaniky: Domácí úkoly od cvičícího

Michal Grňo

20. srpna 2020

## 1 Úloha č. 2

### 1.1 Zadání

V roce 2084 měří pozorovatel qubity v bázi

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

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:

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

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

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

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

$$|+\rangle + |-\rangle = \frac{2}{\sqrt{2}}|0\rangle,$$

$$|+\rangle - |-\rangle = \frac{2}{\sqrt{2}}|1\rangle,$$

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

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

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 „(...)“.

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= \frac{1}{\sqrt{5}}|1\rangle|0\rangle|1\rangle + \frac{2}{\sqrt{5}}|0\rangle|1\rangle|0\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{5}}|1\rangle|0\rangle \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle - |-\rangle) + \frac{2}{\sqrt{5}}|0\rangle|1\rangle \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle + |-\rangle) \\ &= \frac{1}{\sqrt{10}} \left( (2|0\rangle|1\rangle + |1\rangle|0\rangle) |+\rangle + (2|0\rangle|1\rangle - |1\rangle|0\rangle) |-\rangle \right) \\ &= \frac{1}{\sqrt{10}} \left( (2|0\rangle \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle - |-\rangle) + |1\rangle \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle + |-\rangle)) |+\rangle + \right. \\ &\quad \left. + (2|0\rangle \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle - |-\rangle) - |1\rangle \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle + |-\rangle)) |-\rangle \right) \\ &= \frac{1}{\sqrt{20}} \left( 2|0\rangle|+\rangle|+\rangle + |1\rangle|+\rangle|+\rangle - 2|0\rangle|-\rangle|-\rangle - |1\rangle|-\rangle|-\rangle \right) + (\dots) \end{aligned}$$

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

Nyní velice snadno vypočteme pravděpodobnosti:

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

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

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:

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

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:

$$\begin{aligned}
\langle m | \hat{H} | n \rangle &= H = \begin{pmatrix} \epsilon_1 & J \\ J & \epsilon_2 \end{pmatrix}, \\
0 = |H - EI| &= \det \begin{pmatrix} \epsilon_1 - E & J \\ J & \epsilon_2 - E \end{pmatrix} = (\epsilon_1 - E)(\epsilon_2 - E) - J^2 \\
E &= \frac{1}{2} \left( \epsilon_1 + \epsilon_2 \pm \sqrt{(\epsilon_1 - \epsilon_2)^2 + 4J^2} \right)
\end{aligned}$$

Nyní si vyjádříme hamiltonián řečí poruchové teorie druhého řádu:

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

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

$$\begin{aligned}
E_k^{(n)} &= \left\langle \psi_k^0 \left| \sum_{m=0}^{n-1} \hat{H}^{(n-m)} \right| \psi_k^{(m)} \right\rangle \\
|\psi_k^{(n)}\rangle &= \sum_{\ell \neq k} \frac{1}{E_\ell^0 - E_k^0} |\psi_\ell^0\rangle \langle \psi_\ell^0| \left( \hat{H}^{(n)} |\psi_k^0\rangle + \sum_{m=1}^{n-1} (\hat{H}^{(n-m)} - E_k^{(n-m)}) |\psi_k^{(m)}\rangle \right)
\end{aligned}$$

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  $\vec{\psi}_k' \perp \vec{\psi}_k^\circ$ :

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

$$\begin{aligned}
H''\vec{\psi}_2^{\circ} + H'\vec{\psi}_2' + H^{\circ}\vec{\psi}_2'' &= E_2''\vec{\psi}_2^{\circ} + E_2'\vec{\psi}_2' + E_2^{\circ}\vec{\psi}_2'' \\
\begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{-1}{\epsilon_1 - \epsilon_2} \\ 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \epsilon_1 & 0 \\ 0 & \epsilon_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} d \\ 0 \end{pmatrix} &= E_2'' \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} + 0 \begin{pmatrix} \frac{-1}{\epsilon_1 - \epsilon_2} \\ 0 \end{pmatrix} + \epsilon_2 \begin{pmatrix} d \\ 0 \end{pmatrix} \\
\begin{pmatrix} 0 \\ \frac{-1}{\epsilon_1 - \epsilon_2} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \epsilon_1 d \\ 0 \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} 0 \\ E_2'' \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \epsilon_2 d \\ 0 \end{pmatrix} \\
\frac{-1}{\epsilon_1 - \epsilon_2} &= E_2''
\end{aligned}$$

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

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

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

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

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

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

#### 3.2 Řešení

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

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

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

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