

Úvod do kvantové mechaniky: Domácí úkoly z přednášek

Michal Grňo

30. srpna 2020

1 Projekce spinu do obecného směru

1.1 Zadání

Nechť projekce spinu do osy z je $1/2$. S jakou pravděpodobností naměříme projekci spinu $\pm 1/2$ do obecného směru?

1.2 Řešení

Zavedeme si jednotkový vektor \vec{n} parametrizovaný sférickými souřadnicemi:

$$\vec{n} = \begin{pmatrix} \sin \vartheta \cos \varphi \\ \sin \vartheta \sin \varphi \\ \cos \vartheta \end{pmatrix}$$

Zavedeme si operátor $\hat{S}_{\vec{n}} = \vec{n} \cdot \hat{\vec{S}}$, kde $\hat{\vec{S}}$ reprezentujeme Pauliho maticemi:

$$\hat{\vec{S}} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \\ \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \\ \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \end{pmatrix}$$

Operátor $\hat{S}_{\vec{n}}$ nám potom vyjde:

$$\hat{S}_{\vec{n}} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \cos \vartheta & \sin \vartheta e^{-i\varphi} \\ \sin \vartheta e^{i\varphi} & -\cos \vartheta \end{pmatrix}$$

Víme, že vlastní čísla $\hat{S}_{\vec{n}}$ jsou $\pm 1/2$, přejdeme tedy rovnou k nalezení vlastních vektorů:

$$\ker(\hat{S}_{\vec{n}} - 1/2 \hat{I}) = \ker \begin{pmatrix} \cos \vartheta - 1 & \sin \vartheta e^{-i\varphi} \\ \sin \vartheta e^{i\varphi} & -\cos \vartheta - 1 \end{pmatrix} = \text{span} \left\{ \begin{pmatrix} e^{-i\varphi}(\cot \vartheta + \csc \vartheta) \\ 1 \end{pmatrix} \right\}$$

$$\ker(\hat{S}_{\vec{n}} + 1/2 \hat{I}) = \ker \begin{pmatrix} \cos \vartheta + 1 & \sin \vartheta e^{-i\varphi} \\ \sin \vartheta e^{i\varphi} & -\cos \vartheta + 1 \end{pmatrix} = \text{span} \left\{ \begin{pmatrix} e^{-i\varphi}(\cot \vartheta - \csc \vartheta) \\ 1 \end{pmatrix} \right\}$$

Normalizované vlastní stavy jsou tedy:

$$|\pm \vec{n}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{1}{\sqrt{1 \pm \cos \vartheta}} \begin{pmatrix} \cos \vartheta \pm 1 \\ e^{i\varphi} \sin \vartheta \end{pmatrix}$$

Pravděpodobnost naměření $|\pm \vec{n}\rangle$, je-li stav $|+z\rangle$, je:

$$P = |\langle +z | \pm \vec{n} \rangle|^2 = \left| \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \cdot \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{1}{\sqrt{1 \pm \cos \vartheta}} \begin{pmatrix} \cos \vartheta \pm 1 \\ e^{i\varphi} \sin \vartheta \end{pmatrix} \right|^2 = \left| \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{\cos \vartheta \pm 1}{\sqrt{1 \pm \cos \vartheta}} \right|^2 = \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \cos \theta.$$

2 Rabiho metoda

2.1 Zadání

Mějme částici se spinem $1/2$ v poli s intenzitou

$$\vec{B} = \begin{pmatrix} B_1 \cos \omega t \\ B_1 \sin \omega t \\ B_0 \end{pmatrix},$$

kde $B_1 \ll B_0$, $\omega \approx -KB_0$.

Stav spinu $|\psi(t)\rangle$ začíná v čase $t = 0$ jako $|\pm z\rangle$. S jakou pravděpodobností bude v obecném čase t ve stavu $|-z\rangle$?

2.2 Řešení

Hamiltonián systému je

$$\hat{H} = -K \hat{S} \cdot \vec{B},$$

kde \hat{S} reprezentujeme Pauliho maticemi. Využijeme rozklad \hat{S} na žebříkové operátory \hat{S}_\pm :

$$\hat{S}_\pm = \hat{S}_x \pm i\hat{S}_y = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \pm 1 \\ 1 \mp 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{cases} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \\ \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \end{cases} = |\pm\rangle \langle \mp|.$$

Navíc víme, že

$$\hat{S}_z = \frac{1}{2}(|+\rangle\langle+| - |-\rangle\langle-|).$$

Podobně rozložíme \vec{B} :

$$B_\pm = B_x \pm iB_y = B_1(\cos \omega t \pm i \sin \omega t) = B_1 e^{\pm i\omega t}.$$

Nyní můžeme vyjádřit hamiltonián ve tvaru

$$\hat{H} = -K \hat{S} \cdot \vec{B} = -K \left(\frac{1}{2}(\hat{S}_+ B_- + \hat{S}_- B_+) + \hat{S}_z B_z \right) = -\frac{K}{2} \left(B_1 e^{-i\omega t} |+\rangle\langle-| + B_1 e^{+i\omega t} |-\rangle\langle+| + |+\rangle\langle+| - |-\rangle\langle-| \right),$$

tedy v maticové formě

$$\langle \pm | \hat{H} | \pm \rangle = -\frac{K}{2} \begin{pmatrix} B_0 & B_1 e^{-i\omega t} \\ B_1 e^{+i\omega t} & -B_0 \end{pmatrix}.$$

Nyní se můžeme pustit do řešení samotné Schrödingerovy rovnice.

$$-i \frac{d}{dt} |\psi\rangle = \hat{H}(t) |\psi\rangle$$

$$-i \frac{d}{dt} \begin{pmatrix} c_+(t) \\ c_-(t) \end{pmatrix} = -\frac{K}{2} \begin{pmatrix} B_0 & B_1 e^{-i\omega t} \\ B_1 e^{+i\omega t} & -B_0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_+(t) \\ c_-(t) \end{pmatrix}$$

$$-i\dot{c}_+ = -\frac{KB_0}{2} c_+ - \frac{KB_1}{2} e^{-i\omega t} c_- \quad (1)$$

$$-i\dot{c}_- = +\frac{KB_0}{2} c_- - \frac{KB_1}{2} e^{+i\omega t} c_+ \quad (2)$$

$$\text{Z rovnice (1): } c_- = \frac{2}{KB_1} e^{+i\omega t} \left(i\dot{c}_+ - \frac{KB_0}{2} c_+ \right) = e^{+i\omega t} \left(i \frac{2}{KB_1} \dot{c}_+ - \frac{B_0}{B_1} c_+ \right)$$

Z rovnice (2):

$$-i \frac{d}{dt} e^{+i\omega t} \left(i \frac{2}{KB_1} \dot{c}_+ - \frac{B_0}{B_1} c_+ \right) = \frac{KB_0}{2} e^{+i\omega t} \left(i \frac{2}{KB_1} \dot{c}_+ - \frac{B_0}{B_1} c_+ \right) - \frac{KB_1}{2} e^{+i\omega t} c_+$$

\Downarrow

$$0 = \ddot{c}_+ + i\omega \dot{c}_+ + \underbrace{\left(\frac{B_0^2 K^2}{4} - \frac{B_0 K \omega}{2} - \frac{B_1^2 K^2}{4} \right)}_{\kappa} c_+$$

Máme tedy rovnici typu

$$\begin{aligned} f'' + i\omega f' + \kappa f &= 0 \\ \lambda^2 + i\omega \lambda + \kappa &= 0 \end{aligned}$$

$$\lambda = \frac{-i\omega \pm \sqrt{(i\omega)^2 - 4\kappa}}{2} = -\frac{i}{2}\omega \pm \frac{i}{2}\sqrt{\omega^2 + 4\kappa}$$

$$f = C_1 \exp i\left(-\frac{\omega}{2} + \frac{1}{2}\sqrt{\omega^2 + 4\kappa}\right)t + C_2 \exp i\left(-\frac{\omega}{2} - \frac{1}{2}\sqrt{\omega^2 + 4\kappa}\right)t$$

Odmocninu můžeme ještě dále zjednodušit zanedbáním členu s B_1^2 , který je výrazně menší než ostatní členy (viz zadání).

$$\sqrt{\omega^2 + 4\kappa} = \sqrt{\omega^2 + B_0^2 K^2 - 2B_0 K \omega - B_1^2 K^2} \approx \sqrt{\omega^2 - 2B_0 K \omega + B_0^2 K^2} = B_0 K - \omega$$

Pro c_+ tedy dostáváme:

$$c_+(t) = e^{-i\omega t/2} \left(C_1 e^{+it \frac{B_0 K - \omega}{2}} + C_2 e^{-it \frac{B_0 K - \omega}{2}} \right)$$

$$c_+(t) = e^{-i\omega t/2} \left(D_1 \cos \frac{B_0 K - \omega}{2} t + D_2 \sin \frac{B_0 K - \omega}{2} t \right)$$

Dosazením do (2) získáme:

$$c_-(t) = e^{+i\omega t} e^{-\omega t/2} \left(i \frac{2}{KB_1} \frac{d}{dt} \left(D_1 \cos \frac{B_0 K - \omega}{2} t + D_2 \sin \frac{B_0 K - \omega}{2} t \right) - \frac{B_0}{B_1} \left(D_1 \cos \frac{B_0 K - \omega}{2} t + D_2 \sin \frac{B_0 K - \omega}{2} t \right) \right)$$

Konstanty D_n určíme z počáteční podmínky $|\psi(t=0)\rangle = |\pm z\rangle$ a z požadavku, aby byl stav $|\psi(t)\rangle$ normalizovaný. Pro přehlednost si zavedeme označení $\psi_{\pm}(0) \equiv |\pm z\rangle$.

$$1 = \langle \pm z | \psi_{\pm}(0) \rangle = \begin{Bmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \\ \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \end{Bmatrix} \cdot \begin{pmatrix} D_1 \\ D_3 \end{pmatrix}$$

Tedy pro ψ_+ máme $D_1 = 1$, $D_2 = 0$, pro ψ_- zase $D_3 = 1$, $D_4 = 0$. Zbylé konstanty dopočítáme dosazením. Celkově platí:

$$|\psi_+(t)\rangle = \begin{pmatrix} e^{-i\omega t/2} \cos \frac{B_0 K - \omega}{2} t \\ i e^{+i\omega t/2} \sin \frac{B_0 K - \omega}{2} t \end{pmatrix}, \quad |\psi_-(t)\rangle = \begin{pmatrix} i e^{-i\omega t/2} \sin \frac{B_0 K - \omega}{2} t \\ e^{+i\omega t/2} \cos \frac{B_0 K - \omega}{2} t \end{pmatrix}.$$

Pokud by nastal případ $\omega = -B_0 K$, máme:

$$|\psi_+(t)\rangle = \begin{pmatrix} e^{+iKB_0 t/2} \cos B_0 K t \\ i e^{-iKB_0 t/2} \sin B_0 K t \end{pmatrix}, \quad |\psi_-(t)\rangle = \begin{pmatrix} i e^{+iKB_0 t/2} \sin B_0 K t \\ e^{-iKB_0 t/2} \cos B_0 K t \end{pmatrix}.$$

3 \mathcal{PT} -symetrický hamiltonián

3.1 Zadání

Máme zadány operátory

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} K & -ia \\ -ia & -K \end{pmatrix}, \quad \hat{\mathcal{P}} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix},$$

kde $K, a \in \mathbb{R}_+$. Ukažte, že

1. $\hat{\mathcal{P}}^2 = \mathbb{1}$, $\hat{H}^+ = \hat{\mathcal{P}} \hat{H} \hat{\mathcal{P}}$
2. $\hat{H} |\pm\rangle = \pm \Gamma |\pm\rangle$, $\Gamma = \sqrt{K^2 - a^2}$, tedy pro $a < K$ je neporušena \mathcal{PT} -symetrie.
3. pro $a > K$ platí $\langle \pm | \hat{\mathcal{P}} | \pm \rangle = 0$

Pro \mathcal{PT} -symetrické operátory platí upravená relace úplnosti

$$\mathbb{1} = \sum_n (-1)^n |n\rangle \langle n| \hat{\mathcal{P}}.$$

Ověřte její platnost pro \hat{H} při $a < K$.

Definujeme operátor

$$\hat{\mathcal{C}} := \sum_n |n\rangle \langle n| \hat{\mathcal{P}},$$

ten komutuje s \hat{H} i $\hat{\mathcal{P}}$ a tvoří základ skalárního součinu, pod kterým je $|n\rangle$ ortonormální systém:

$$\langle \psi, \phi \rangle_{\mathcal{CPT}} := \langle \psi | \hat{\mathcal{P}} \hat{\mathcal{C}} | \phi \rangle.$$

Vypočtěte $\hat{\mathcal{C}}$ a pro $a < K$ ověřte, že

1. $\hat{\mathcal{C}}^2 = \mathbb{1}$
2. $\hat{\mathcal{C}} |\pm\rangle = \pm |\pm\rangle$
3. $\hat{\mathcal{C}} |+\rangle \langle +| \hat{\mathcal{P}} + \hat{\mathcal{C}} |-\rangle \langle -| \hat{\mathcal{P}} = \mathbb{1}$
4. $\langle m | \hat{\mathcal{P}} \hat{\mathcal{C}} | n \rangle = \delta_{mn}$

3.2 Řešení

$$\hat{\mathcal{P}}^2 = \begin{pmatrix} 1 & \\ & -1 \end{pmatrix}^2 = \begin{pmatrix} 1 & \\ & 1 \end{pmatrix}$$

$$\hat{\mathcal{P}} \hat{H} \hat{\mathcal{P}} = \begin{pmatrix} 1 & \\ & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} K & -ia \\ -ia & -K \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & \\ & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} K & ia \\ ia & -K \end{pmatrix} = \hat{H}^+$$

$$0 = \left| \hat{H} - \lambda \mathbb{1} \right| = \begin{vmatrix} K - \lambda & -ia \\ -ia & -K - \lambda \end{vmatrix} = -(K - \lambda)(K + \lambda) + a^2 = \lambda^2 - (K^2 - a^2)$$

$$\lambda = \pm \sqrt{K^2 - a^2} \equiv \pm \Gamma$$

$$|\pm\rangle \propto \begin{pmatrix} \sqrt{\left(\frac{K}{a}\right)^2 - 1} \pm \frac{K}{a} \\ \mp i \end{pmatrix}$$

$$C_{\pm} = \left\| \begin{pmatrix} \sqrt{\left(\frac{K}{a}\right)^2 - 1} \pm \frac{K}{a} \\ \mp i \end{pmatrix} \right\|^2 = \left| \sqrt{\left(\frac{K}{a}\right)^2 - 1} \pm \frac{K}{a} \right|^2 - 1$$

Normalizovat vektory $|\pm\rangle$ by nám nepřineslo žádnou výhodu, zapamatujeme si tedy pouze, jakým faktorem chceme případný výsledek dělit. Přistoupíme k výpočtu $\langle \pm | \hat{\mathcal{P}} | \pm \rangle$:

$$\langle \pm | \hat{\mathcal{P}} | \pm \rangle \propto \begin{pmatrix} \text{conj} \sqrt{\left(\frac{K}{a}\right)^2 - 1} \pm \frac{K}{a} & \mp i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & \\ & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sqrt{\left(\frac{K}{a}\right)^2 - 1} \pm \frac{K}{a} \\ \mp i \end{pmatrix} = \left| \sqrt{\left(\frac{K}{a}\right)^2 - 1} \pm \frac{K}{a} \right|^2 - 1$$

Pro $a > K$ si můžeme a parametrizovat jako $a(t) = K \cosh t$, $t \in \mathbb{R}$. Potom nám vyjde:

$$\langle \pm | \hat{\mathcal{P}} | \pm \rangle \propto \left| \sqrt{\frac{1}{\cosh^2 t} - 1} \pm \frac{1}{\cosh t} \right|^2 + 1 = \left| \sqrt{\frac{1 - \cosh^2 t}{\cosh^2 t}} \pm \frac{1}{\cosh t} \right|^2 + 1$$