Úvod do kvantové mechaniky: Domácí úkoly z přednášek

Michal Grňo

4. září 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:

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

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

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

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

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

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

Normalizované vlastní stavy jsou tedy:

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

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

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

2 Rabiho metoda

2.1 Zadání

Mějme částici se spinem ½ 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 $\left|\psi(t)\right\rangle$ 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

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

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

$$\hat{S}_\pm = \hat{S}_\mathrm{x} \pm \mathrm{i}\hat{S}_\mathrm{y} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \pm 1 \\ 1 \mp 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{Bmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \\ \\ \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \end{Bmatrix} = \left|\pm\right\rangle\left\langle\mp\right|.$$

Navíc víme, že

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

Podobně rozložíme $\vec{B}$:

$$B_\pm = B_\mathrm{x} \pm \mathrm{i}B_\mathrm{y} = B_1(\cos\omega t \pm \mathrm{i}\sin\omega t) = B_1\,\mathrm{e}^{\pm\mathrm{i}\omega t}.$$

Nyní můžeme vyjádřit hamiltonián ve tvaru

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

tedy v maticové formě

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

Nyní se můžeme pustit do řešení samotné Schrödingerovy rovnice.

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

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

$$-\mathrm{i}\dot{c}_+ = -\frac{KB_0}{2}\,c_+ - \frac{KB_1}{2}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}\,c_- \tag{1}$$

$$-\mathrm{i}\dot{c}_- = +\frac{KB_0}{2}\,c_- - \frac{KB_1}{2}\,\mathrm{e}^{+\mathrm{i}\omega t}\,c_+ \tag{2}$$

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

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

$$\Downarrow$$

$$0 = \ddot{c}_+ + \mathrm{i}\omega\dot{c}_+ + \underbrace{\left(\frac{{B_0}^2K^2}{4} - \frac{B_0K\omega}{2} - \frac{{B_1}^2K^2}{4}\right)}_{\kappa} c_+$$

Máme tedy rovnici typu

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

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

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

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

$$\sqrt{\omega^2+4\kappa}\ = \sqrt{\omega^2 + {B_0}^2K^2 - 2B_0K\omega - {B_1}^2K^2}\ \approx \sqrt{\omega^2 - 2B_0K\omega + {B_0}^2K^2}\ = B_0K - \omega$$

Pro c_+ tedy dostáváme:

$$c_+(t) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t/2}\left(C_1\mathrm{e}^{+\mathrm{i}t\ \frac{B_0K-\omega}{2}} + C_2\mathrm{e}^{-\mathrm{i}t\ \frac{B_0K-\omega}{2}}\right)$$

$$c_+(t) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t/2}\left(D_1\cos\frac{B_0K-\omega}{2}t + D_2\sin\frac{B_0K-\omega}{2}t\right)$$

Dosazením do (2) získáme:

$$c_-(t) = \mathrm{e}^{+\mathrm{i}\omega t}\mathrm{e}^{-\omega t/2}\left(\mathrm{i}\ \frac{2}{KB_1}\ \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\ \left(D_1\cos\tfrac{B_0K-\omega}{2}t + D_2\sin\tfrac{B_0K-\omega}{2}t\right) - \frac{B_0}{B_1}\ \left(D_1\cos\tfrac{B_0K-\omega}{2}t + D_2\sin\tfrac{B_0K-\omega}{2}t\right)\right)$$

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

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

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:

$$\big|\psi_+(t)\big\rangle = \begin{pmatrix}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t/2}\ \ \cos\dfrac{B_0K-\omega}{2}t\\ \\ \mathrm{i}\,\mathrm{e}^{+\mathrm{i}\omega t/2}\ \ \sin\dfrac{B_0K-\omega}{2}t\end{pmatrix}\ ,\quad \big|\psi_-(t)\big\rangle = \begin{pmatrix}\mathrm{i}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t/2}\ \ \sin\dfrac{B_0K-\omega}{2}t\\ \\ \mathrm{e}^{+\mathrm{i}\omega t/2}\ \ \cos\dfrac{B_0K-\omega}{2}t\end{pmatrix}.$$

Pokud by nastal případ $\omega = -B_0K$, máme:

$$\big|\psi_+(t)\big\rangle = \begin{pmatrix}\mathrm{e}^{+\mathrm{i}KB_0t/2}\ \ \cos B_0Kt\\ \\ \mathrm{i}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}KB_0t/2}\ \ \sin B_0Kt\end{pmatrix}\ ,\quad \big|\psi_-(t)\big\rangle = \begin{pmatrix}\mathrm{i}\,\mathrm{e}^{+\mathrm{i}KB_0t/2}\ \ \sin B_0Kt\\ \\ \mathrm{e}^{-\mathrm{i}KB_0t/2}\ \ \cos B_0Kt\end{pmatrix}.$$

3 $\mathcal{PT}$-symetrický hamiltonián

3.1 Zadání

Máme zadány operátory

$$\hat{\Gamma} = \begin{pmatrix} K & -\mathrm{i}a \\ -\mathrm{i}a & -K \end{pmatrix}, \quad \hat{\mathcal{P}} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix},$$

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

1. $\hat{\mathcal{P}}^2 = \mathbb{1}, \quad \hat{\Gamma}^+ = \hat{\mathcal{P}}\,\hat{\Gamma}\,\hat{\mathcal{P}}$
2. $\hat{\Gamma}\,|\pm\rangle = \pm\Gamma\,|\pm\rangle\,, \quad \Gamma = \sqrt{K^2 - a^2}\,,$ tedy pro $a < K$ je neporušena $\mathcal{PT}$-symetrie.
3. pro $a > K$ platí $\langle\pm|\,\hat{\mathcal{P}}\,|\pm\rangle = 0$
4. pro $a < K$ platí $\langle m|\,\hat{\mathcal{P}}\,|n\rangle = (-1)^m\,\delta_{mn}$

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 $\hat{\Gamma}$ při $a < K$.

Definujeme operátor

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

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

$$(\psi, \phi)_{\mathcal{CPT}} \coloneqq \langle\psi|\,\hat{\mathcal{P}}\hat{\mathcal{C}}\,|\phi\rangle\,.$$

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

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

$$\hat{\mathcal{P}}\,\hat{\Gamma}\,\hat{\mathcal{P}} = \begin{pmatrix} 1 & \\ & -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} K & -\mathrm{i}a \\ -\mathrm{i}a & -K \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & \\ & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} K & \mathrm{i}a \\ \mathrm{i}a & -K \end{pmatrix} = \hat{\Gamma}^+$$

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

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

Nyní nalezneme vlastní vektory pro $a > K$, využijeme parametrizaci $a = K\cosh t,\ t \in \mathbb{R}$.

$$\hat{\Gamma} = K\begin{pmatrix} 1 & -\mathrm{i}\cosh t \\ -\mathrm{i}\cosh t & -1 \end{pmatrix}, \quad \Gamma = \sqrt{K^2 - K^2\cosh^2 t} = \mathrm{i}K\sinh t\,, \quad |\pm\rangle = \begin{pmatrix} A_\pm \\ B_\pm \end{pmatrix}$$

$$\hat{\Gamma}\,|\pm\rangle = \pm\Gamma\,|\pm\rangle$$

$$\begin{aligned} A_\pm - \mathrm{i}B_\pm\cosh t &= \pm\mathrm{i}A_\pm\sinh t \\ -B_\pm - \mathrm{i}A_\pm\cosh t &= \pm\mathrm{i}B_\pm\sinh t \end{aligned}$$

$$B_\pm = A_\pm\frac{-\mathrm{i} \pm \sinh t}{\cosh t}$$

$$
\begin{aligned}
\langle\pm|\,\hat{\mathcal{P}}\,|\pm\rangle &= \begin{pmatrix} A_\pm \\ B_\pm \end{pmatrix}^+ \begin{pmatrix} 1 & \\ & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_\pm \\ B_\pm \end{pmatrix} = {A_\pm}^2 \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{-\mathrm{i}\pm\sinh t}{\cosh t} \end{pmatrix}^+ \begin{pmatrix} 1 & \\ & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{-\mathrm{i}\pm\sinh t}{\cosh t} \end{pmatrix} = {A_\pm}^2 \left(1 + \frac{\mathrm{i}\pm\sinh t}{\cosh t}\,\frac{\mathrm{i}\mp\sinh t}{\cosh t} \right) \\
&= {A_\pm}^2 \left(1 + \frac{\mathrm{i}^2 - \sinh^2 t}{\cosh^2 t} \right) = {A_\pm}^2 \left(1 - \frac{1+\sinh^2 t}{\cosh^2 t} \right) = 0
\end{aligned}
$$

Tím jsme dokázali první tři body zadání. Nyní budeme pracovat s $a < K$, zvolíme parametrizaci $a = K\sin t,\ t \in (0,\pi)$.

$$
\hat{\Gamma} = K \begin{pmatrix} 1 & -\mathrm{i}\sin t \\ -\mathrm{i}\sin t & -1 \end{pmatrix}, \quad \Gamma = K\sqrt{1-\sin^2 t} = K\cos t\,, \quad |\pm\rangle = \begin{pmatrix} A_\pm \\ B_\pm \end{pmatrix}
$$

$$
\hat{\Gamma}\,|\pm\rangle = \pm\Gamma\,|\pm\rangle
$$

$$
\begin{aligned}
A_\pm - \mathrm{i}B_\pm \sin t &= \pm A_\pm \cos t \\
-B_\pm - \mathrm{i}A_\pm \sin t &= \pm B_\pm \cos t
\end{aligned}
$$

$$
B_\pm = \mathrm{i}A_\pm\,\frac{-1\pm\cos t}{\sin t}
$$

$$
|\pm\rangle = A_\pm \begin{pmatrix} 1 \\ \mathrm{i}\,\frac{-1\pm\cos t}{\sin t} \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2\cos t}} \begin{pmatrix} \frac{\mathrm{i}\sin t}{\sqrt{1\mp\cos t}} \\ \sqrt{1\mp\cos t} \end{pmatrix}
$$

Dokážeme čtvrtý bod zadání:

$$
\langle\pm|\,\hat{\mathcal{P}}\,|\pm\rangle = \frac{1}{2\cos t} \begin{pmatrix} \frac{\mathrm{i}\sin t}{\sqrt{1\mp\cos t}} \\ \sqrt{1\mp\cos t} \end{pmatrix}^+ \begin{pmatrix} 1 & \\ & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{\mathrm{i}\sin t}{\sqrt{1\mp\cos t}} \\ \sqrt{1\mp\cos t} \end{pmatrix} = \frac{1}{2\cos t} \left(\frac{\sin^2 t}{1\mp\cos t} - (1\mp\cos t) \right) = \frac{\pm 2\cos t}{2\cos t} = \pm 1
$$

$$
\langle\pm|\,\hat{\mathcal{P}}\,|\mp\rangle = \frac{1}{2\cos t} \begin{pmatrix} \frac{\mathrm{i}\sin t}{\sqrt{1\mp\cos t}} \\ \sqrt{1\mp\cos t} \end{pmatrix}^+ \begin{pmatrix} 1 & \\ & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{\mathrm{i}\sin t}{\sqrt{1\pm\cos t}} \\ \sqrt{1\pm\cos t} \end{pmatrix} = \frac{1}{2\cos t} \left(\frac{\sin^2 t}{\sqrt{1-\cos^2 t}} - \sqrt{1-\cos^2 t} \right) = 0
$$

Nyní přistoupíme k odvození relace úplnosti a skalárního součinu.

$$
\sum_n (-1)^n\,|n\rangle\,\langle n|\,\hat{\mathcal{P}} \;=\; \big(|+\rangle\langle+| \;-\; |-\rangle\langle-|\big)\,\hat{\mathcal{P}}
$$

$$
(2\cos t)\,|\pm\rangle\langle\pm|\,\hat{\mathcal{P}} = \begin{pmatrix} \frac{\mathrm{i}\sin t}{\sqrt{1\mp\cos t}} \\ \sqrt{1\mp\cos t} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{\mathrm{i}\sin t}{\sqrt{1\mp\cos t}} \\ \sqrt{1\mp\cos t} \end{pmatrix}^+ \begin{pmatrix} 1 & \\ & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\sin^2 t}{1\mp\cos t} & \mathrm{i}\sin t \\ -\mathrm{i}\sin t & 1\mp\cos t \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & \\ & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\sin^2 t}{1\mp\cos t} & -\mathrm{i}\sin t \\ -\mathrm{i}\sin t & -1\pm\cos t \end{pmatrix}
$$

$$
\sum_n (-1)^n\,|n\rangle\,\langle n|\,\hat{\mathcal{P}} = \frac{1}{2\cos t} \begin{pmatrix} \frac{\sin^2 t}{1-\cos t} & -\mathrm{i}\sin t \\ -\mathrm{i}\sin t & -1+\cos t \end{pmatrix} - \frac{1}{2\cos t} \begin{pmatrix} \frac{\sin^2 t}{1+\cos t} & -\mathrm{i}\sin t \\ -\mathrm{i}\sin t & -1-\cos t \end{pmatrix} = \frac{1}{2\cos t} \begin{pmatrix} \frac{\sin^2 t(2\cos t)}{1-\cos^2 t} & 0 \\ 0 & 2\cos t \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & \\ & 1 \end{pmatrix}
$$

$$
\hat{\mathcal{C}} = \sum_n |n\rangle\,\langle n|\,\hat{\mathcal{P}} = \frac{1}{2\cos t} \begin{pmatrix} \frac{\sin^2 t}{1-\cos t} & -\mathrm{i}\sin t \\ -\mathrm{i}\sin t & -1+\cos t \end{pmatrix} + \frac{1}{2\cos t} \begin{pmatrix} \frac{\sin^2 t}{1+\cos t} & -\mathrm{i}\sin t \\ -\mathrm{i}\sin t & -1-\cos t \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sec t & -\mathrm{i}\,\mathrm{tg}\,t \\ -\mathrm{i}\,\mathrm{tg}\,t & -\sec t \end{pmatrix}
$$

Přistoupíme k poslední části, kterou je ověření vlastností operátoru $\hat{\mathcal{C}}$.

$$
\hat{\mathcal{C}}^2 = \begin{pmatrix} \sec t & -\mathrm{i}\,\mathrm{tg}\,t \\ -\mathrm{i}\,\mathrm{tg}\,t & -\sec t \end{pmatrix}^2 = \begin{pmatrix} \sec^2 t - \mathrm{tg}^2\,t & -\mathrm{i}\,\mathrm{tg}\,t\sec t + \mathrm{i}\,\mathrm{tg}\,t\sec t \\ \mathrm{i}\,\mathrm{tg}\,t\sec t + \mathrm{i}\,\mathrm{tg}\,t\sec t & -\mathrm{tg}^2\,t + \sec^2 t \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1-\sin^2 t}{\cos^2 t} & 0 \\ 0 & \frac{1-\sin^2 t}{\cos^2 t} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & \\ & 1 \end{pmatrix}
$$

$$
\sqrt{2\cos t}\,\hat{\mathcal{C}}\,|\pm\rangle = \begin{pmatrix} \sec t & -\mathrm{i}\,\mathrm{tg}\,t \\ -\mathrm{i}\,\mathrm{tg}\,t & -\sec t \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{\mathrm{i}\sin t}{\sqrt{1\mp\cos t}} \\ \sqrt{1\mp\cos t} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathrm{i}\,\frac{\sin t}{\cos t}\,\frac{1-1\mp\cos t}{\sqrt{1\mp\cos t}} \\ \frac{\sin^2 t - 1\mp\cos t}{\cos t\sqrt{1\mp\cos t}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\pm\mathrm{i}\sin t}{\sqrt{1\mp\cos t}} \\ \pm\sqrt{1\mp\cos t} \end{pmatrix} = \pm\sqrt{2\cos t}\,|\pm\rangle\,,
$$

tedy $\hat{\mathcal{C}}\,|\pm\rangle = \pm\,|\pm\rangle$. Poslední dva body plynou triviálně z tohoto výsledku a již dokázaných tvrzení.

$$
\begin{gathered}
\hat{\mathcal{C}}\,|+\rangle\langle+|\,\hat{\mathcal{P}} + \hat{\mathcal{C}}\,|-\rangle\langle-|\,\hat{\mathcal{P}} = |+\rangle\langle+|\,\hat{\mathcal{P}} - |-\rangle\langle-|\,\hat{\mathcal{P}} = \mathbb{1} \\
\langle m|\,\hat{\mathcal{P}}\hat{\mathcal{C}}\,|n\rangle = \langle m|\,\hat{\mathcal{P}}(-1)^n\,|n\rangle = (-1)^n\,(-1)^m\,\delta_{mn} = \delta_{mn}
\end{gathered}
$$

4 Hyperjemné štěpení (spin-spinová interakce), spin-1, pozitronium

4.1 Zadání

Máme atom vodíku, složený z elektronu se spinem 1/2 a protonu se spinem 1/2. Hamiltonián systému je

$$\hat{H} = A\,\hat{\vec{S}}^{\mathrm{e}}\cdot\hat{\vec{S}}^{\mathrm{p}} - K_e\,\hat{\vec{S}}^{\mathrm{e}}\cdot\vec{B} - K_p\,\hat{\vec{S}}^{\mathrm{p}}\cdot\vec{B}\,, \quad \vec{B} = (0,0,B)\,.$$

Nalezněte energie stacionárních stavů.

Dále uvažujte, spin-1 částici se spinem orientovaným ve směru osy z a vypočtěte $\left|\left\langle +z \middle| 0\vec{n}\right\rangle\right|^2$ (tj. pravděpodobnost naměření spinu 0 podél obecné osy $\vec{n}$) a $\langle 0z|\,\hat{P}_{\pm x}\,|0z\rangle$ (tedy pravděpodobnost naměření $0z$ po průchodu přístrojem, který změří spin ve směru x a odstíní stav $0x$).

Nakonec mějme pozitronium (proton v atomu vodíku nahradíme pozitronem) s hamiltoniánem

$$\hat{H} = A\,\hat{\vec{S}}^{\mathrm{e}^-}\cdot\,\hat{\vec{S}}^{\mathrm{e}^+} + B\hat{S}^2\,,$$

nalezněte energie stacionárních stavů.

4.2 Řešení

Budeme pracovat v součinové bázi vlastních stavů operátorů $\hat{S}^{\mathrm{e}}_z$ a $\hat{S}^{\mathrm{p}}_z$:

$$|\pm\pm\rangle \coloneqq |\pm z_{\mathrm{e}}\rangle \otimes |\pm z_{\mathrm{p}}\rangle\ .$$

Provedeme polární rozklad hamiltoniánu a vyjádříme ho v bázi $|\pm\pm\rangle$:

$$\hat{H} = A\,\hat{\vec{S}}^{\mathrm{e}^+}\cdot\hat{\vec{S}}^{\mathrm{e}^-} + B\hat{S}^2 = A\,\frac{1}{2}\Big(\hat{S}^{\mathrm{e}}_+\hat{S}^{\mathrm{p}}_- + \hat{S}^{\mathrm{e}}_-\hat{S}^{\mathrm{p}}_+\Big) + A\,\hat{S}^{\mathrm{e}}_z\,\hat{S}^{\mathrm{p}}_z - K_{\mathrm{e}}\,B\,\hat{S}^{\mathrm{e}}_z - K_{\mathrm{p}}\,B\,\hat{S}^{\mathrm{p}}_z$$

$$\begin{aligned}
\hat{H}\,|{+}{+}\rangle &= \left(A\,\frac{1}{2}\Big(\hat{S}^{\mathrm{e}}_+\hat{S}^{\mathrm{p}}_- + \hat{S}^{\mathrm{e}}_-\hat{S}^{\mathrm{p}}_+\Big) + A\,\hat{S}^{\mathrm{e}}_z\,\hat{S}^{\mathrm{p}}_z - K_{\mathrm{e}}\,B\,\hat{S}^{\mathrm{e}}_z - K_{\mathrm{p}}\,B\,\hat{S}^{\mathrm{p}}_z\right)|{+}{+}\rangle \\
&= \left(A\,\frac{1}{2}\,0 + A\,\tfrac{1}{2}\,\tfrac{1}{2} - K_{\mathrm{e}}\,B\,\tfrac{1}{2} - K_{\mathrm{p}}\,B\,\tfrac{1}{2}\right)|{+}{+}\rangle = \left(\frac{A}{4} - \frac{B}{2}\,(K_{\mathrm{e}} + K_{\mathrm{p}})\right)|{+}{+}\rangle
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\hat{H}\,|{-}{-}\rangle &= \left(A\,\frac{1}{2}\Big(\hat{S}^{\mathrm{e}}_+\hat{S}^{\mathrm{p}}_- + \hat{S}^{\mathrm{e}}_-\hat{S}^{\mathrm{p}}_+\Big) + A\,\hat{S}^{\mathrm{e}}_z\,\hat{S}^{\mathrm{p}}_z - K_{\mathrm{e}}\,B\,\hat{S}^{\mathrm{e}}_z - K_{\mathrm{p}}\,B\,\hat{S}^{\mathrm{p}}_z\right)|{-}{-}\rangle \\
&= \left(A\,\frac{1}{2}\,0 + A\left(-\tfrac{1}{2}\right)\left(-\tfrac{1}{2}\right) - K_{\mathrm{e}}\,B\left(-\tfrac{1}{2}\right) - K_{\mathrm{p}}\,B\left(-\tfrac{1}{2}\right)\right)|{-}{-}\rangle = \left(\frac{A}{4} + \frac{B}{2}\,(K_{\mathrm{e}} + K_{\mathrm{p}})\right)|{-}{-}\rangle
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\hat{H}\,|{+}{-}\rangle &= \left(A\,\frac{1}{2}\Big(\hat{S}^{\mathrm{e}}_+\hat{S}^{\mathrm{p}}_- + \hat{S}^{\mathrm{e}}_-\hat{S}^{\mathrm{p}}_+\Big) + A\,\hat{S}^{\mathrm{e}}_z\,\hat{S}^{\mathrm{p}}_z - K_{\mathrm{e}}\,B\,\hat{S}^{\mathrm{e}}_z - K_{\mathrm{p}}\,B\,\hat{S}^{\mathrm{p}}_z\right)|{+}{-}\rangle \\
&= A\,\frac{1}{2}\big(0\ +\ |{-}{+}\rangle\big) + \left(A\,\tfrac{1}{2}\left(-\tfrac{1}{2}\right) - K_{\mathrm{e}}\,B\,\tfrac{1}{2} - K_{\mathrm{p}}\,B\left(-\tfrac{1}{2}\right)\right)|{+}{-}\rangle \\
&= \frac{A}{2}\,|{-}{+}\rangle + \left(-\frac{A}{4} + \frac{B}{2}\,(-K_{\mathrm{e}} + K_{\mathrm{p}})\right)|{+}{-}\rangle
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\hat{H}\,|{-}{+}\rangle &= \left(A\,\frac{1}{2}\Big(\hat{S}^{\mathrm{e}}_+\hat{S}^{\mathrm{p}}_- + \hat{S}^{\mathrm{e}}_-\hat{S}^{\mathrm{p}}_+\Big) + A\,\hat{S}^{\mathrm{e}}_z\,\hat{S}^{\mathrm{p}}_z - K_{\mathrm{e}}\,B\,\hat{S}^{\mathrm{e}}_z - K_{\mathrm{p}}\,B\,\hat{S}^{\mathrm{p}}_z\right)|{-}{+}\rangle \\
&= A\,\frac{1}{2}\big(|{+}{-}\rangle\ +\ 0\big) + \left(A\left(-\tfrac{1}{2}\right)\tfrac{1}{2} - K_{\mathrm{e}}\,B\left(-\tfrac{1}{2}\right) - K_{\mathrm{p}}\,B\,\tfrac{1}{2}\right)|{-}{+}\rangle \\
&= \frac{A}{2}\,|{+}{-}\rangle + \left(-\frac{A}{4} + \frac{B}{2}\,(K_{\mathrm{e}} - K_{\mathrm{p}})\right)|{-}{+}\rangle
\end{aligned}$$

Vidíme, že je hamiltonián částečně diagonalizovaný, stavy $|{+}{+}\rangle$ a $|{-}{-}\rangle$ jsou jeho vlastní stavy. Nalezneme ještě vlastní energie odpovídající superpozicím stavů $|{+}{-}\rangle$ a $|{-}{+}\rangle$:

$$\langle\pm\mp|\,\hat{H}\,|\pm\mp\rangle = \begin{pmatrix} -\frac{A}{4}+\frac{B}{2}\left(-K_\mathrm{e}+K_\mathrm{p}\right) & \frac{A}{2} \\ \frac{A}{2} & -\frac{A}{4}-\frac{B}{2}\left(-K_\mathrm{e}+K_\mathrm{p}\right) \end{pmatrix} =: M\,, \quad \alpha := \frac{A}{4}\,, \quad \beta := \frac{B}{2}\left(-K_\mathrm{e}+K_\mathrm{p}\right)\,.$$

$$M = \begin{pmatrix} -\alpha+\beta & 2\alpha \\ 2\alpha & -\alpha-\beta \end{pmatrix}\,, \quad 0 = |M-\lambda\mathbb{1}| = \begin{vmatrix} -\alpha+\beta-\lambda & 2\alpha \\ 2\alpha & -\alpha-\beta-\lambda \end{vmatrix} = \lambda^2+2\alpha\lambda+\left(-3\alpha^2-\beta^2\right)$$

$$\lambda = \frac{-2\alpha\pm\sqrt{4\alpha^2-4\left(-3\alpha^2-\beta^2\right)}}{2} = -\alpha\pm\sqrt{4\alpha^2+\beta^2} = -\frac{A}{4}\pm\frac{1}{2}\sqrt{A^2+B^2\left(K_\mathrm{e}-K_\mathrm{p}\right)^2}$$

Vidíme tedy, že magnetické pole sejmulo degeneraci stacionárních stavů a máme 4 různé energetické hladiny:

E_0	$-\frac{A}{4}-\frac{1}{2}\sqrt{A^2+B^2\left(K_\mathrm{e}-K_\mathrm{p}\right)^2}$
E_1	$-\frac{A}{4}+\frac{1}{2}\sqrt{A^2+B^2\left(K_\mathrm{e}-K_\mathrm{p}\right)^2}$
E_2	$+\frac{A}{4}-\frac{B}{2}\left(K_\mathrm{e}+K_\mathrm{p}\right)$
E_3	$+\frac{A}{4}+\frac{B}{2}\left(K_\mathrm{e}+K_\mathrm{p}\right)$

Pokračujeme spin-1 částicí. Zvolíme si bázi $|{+z}\rangle\,,|0z\rangle\,,|{-z}\rangle$, v ní vyjádříme $\hat{\vec{S}}$:

$$\hat{S}_x = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}\,, \qquad \hat{S}_y = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 0 & -\mathrm{i} & 0 \\ \mathrm{i} & 0 & -\mathrm{i} \\ 0 & \mathrm{i} & 0 \end{pmatrix}\,, \qquad \hat{S}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}\,, \qquad \hat{\vec{S}} = \begin{pmatrix} \hat{S}_x \\ \hat{S}_y \\ \hat{S}_z \end{pmatrix}\,.$$

Budeme měřit spin v obecném směru $\vec{n}$, který si parametrizujeme sférickými souřadnicemi:

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

Zajímá nás, s jakou pravděpodobností naměříme stav

$$\left(\hat{\vec{S}}\cdot\vec{n}\right)\left|0\vec{n}\right\rangle = 0\left|0\vec{n}\right\rangle \iff \ker\hat{\vec{S}}\cdot\vec{n} = \{\,\left|0\vec{n}\right\rangle\,\}$$

$$\hat{S}\cdot\vec{n} = \begin{pmatrix} \cos\vartheta & \frac{\sin\vartheta}{\sqrt{2}}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi} & 0 \\ \frac{\sin\vartheta}{\sqrt{2}}\,\mathrm{e}^{+\mathrm{i}\varphi} & 0 & \frac{\sin\vartheta}{\sqrt{2}}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi} \\ 0 & \frac{\sin\vartheta}{\sqrt{2}}\,\mathrm{e}^{+\mathrm{i}\varphi} & -\cos\vartheta \end{pmatrix} \sim \begin{pmatrix} \sqrt{2}\,\mathrm{ctg}\,\vartheta\,\mathrm{e}^{+\mathrm{i}\varphi} & 1 & 0 \\ \mathrm{e}^{+\mathrm{i}\varphi} & 0 & \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi} \\ 0 & 1 & -\sqrt{2}\,\mathrm{ctg}\,\vartheta\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi} \end{pmatrix} \to \begin{pmatrix} -\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi} \\ \sqrt{2}\,\mathrm{ctg}\,\vartheta \\ \mathrm{e}^{+\mathrm{i}\varphi} \end{pmatrix}$$

$$\sqrt{|-\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi}|^2+|\sqrt{2}\,\mathrm{ctg}\,\vartheta|^2+|\mathrm{e}^{+\mathrm{i}\varphi}|^2} = \sqrt{2+2\,\mathrm{ctg}^2\,\vartheta} = \sqrt{2}\,\sqrt{1+\frac{\cot^2\vartheta}{\sin^2\vartheta}} = \frac{\sqrt{2}}{\sin\vartheta}$$

$$\left|0\vec{n}\right\rangle = \frac{1}{\frac{\sqrt{2}}{\sin\vartheta}}\begin{pmatrix} -\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi} \\ \sqrt{2}\,\mathrm{ctg}\,\vartheta \\ \mathrm{e}^{+\mathrm{i}\varphi} \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} -\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi}\sin\vartheta \\ \sqrt{2}\cos\vartheta \\ \mathrm{e}^{+\mathrm{i}\varphi}\sin\vartheta \end{pmatrix}$$

$$\left|\left\langle +z\middle|0\vec{n}\right\rangle\right|^2 = \left|\frac{1}{\sqrt{2}}\,\left(-\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi}\sin\vartheta\right)\right|^2 = \frac{1}{2}\sin^2\vartheta\,.$$

Projekci do obecného směru tedy máme spočtenou. Vypočítáme ještě výsledek vylepšeného Stern-Gerlachova experimentu:

$$\hat{P}_{\pm x} = |x+\rangle\langle x+| \;+\; |x-\rangle\langle x-| = \begin{pmatrix} 1/2 \\ 1/\sqrt{2} \\ 1/2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1/2 & 1/\sqrt{2} & 1/2 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1/2 \\ -1/\sqrt{2} \\ 1/2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1/2 & -1/\sqrt{2} & 1/2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1/2 & 0 & 1/2 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1/2 & 0 & 1/2 \end{pmatrix}$$

$$\left|\langle 0z|\,\hat{P}_{\pm x}\,|0z\rangle\right|^2 = \left|\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1/2 & 0 & 1/2 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1/2 & 0 & 1/2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}\right|^2 = 1\,.$$

Nakonec nalezneme energie stacionárních stavů pozitronia. Budeme opět pracovat v součinové bázi

$$|\pm\pm\rangle \coloneqq |\pm z_{\mathrm{e}^+}\rangle \otimes |\pm z_{\mathrm{e}^-}\rangle\;,$$

a opět si vyjádříme polární rozklad hamiltoniánu. Abychom se v neutopili v indexech, přejmenujeme si operátory spinů elektronu a pozitronu na $\hat{\vec{X}}, \hat{\vec{Y}}$.

$$\hat{\vec{X}} \coloneqq \hat{\vec{S}}^{\mathrm{e}^-}, \quad \hat{\vec{Y}} \coloneqq \hat{\vec{S}}^{\mathrm{e}^+}$$

$$\begin{aligned}
\hat{H} = A\,\hat{\vec{X}}\cdot\hat{\vec{Y}} + B\hat{S}^2 = A\,\hat{\vec{X}}\cdot\hat{\vec{Y}} + B\left(\hat{\vec{X}}+\hat{\vec{Y}}\right)\cdot\left(\hat{\vec{X}}+\hat{\vec{Y}}\right) &= B(\hat{X}^2+\hat{Y}^2) + (A+2B)\,\hat{\vec{X}}\cdot\hat{\vec{Y}} - B\left[\hat{\vec{X}}\,;\hat{\vec{Y}}\right] \\
= B\Big(\frac{1}{2}(\hat{X}_+\hat{X}_- + \hat{X}_-\hat{X}_+ + \hat{Y}_+\hat{Y}_- + \hat{Y}_-\hat{Y}_+) + \hat{X}_z{}^2 + \hat{Y}_z{}^2\Big) &+ (A+2B)\Big(\frac{1}{2}(\hat{X}_+\hat{Y}_- + \hat{X}_-\hat{Y}_+) + \hat{X}_z\hat{Y}_z\Big) \\
= \frac{B}{2}\Big(\hat{X}_+\hat{X}_- + \hat{X}_-\hat{X}_+ + \hat{Y}_+\hat{Y}_- + \hat{Y}_-\hat{Y}_+ + 2\hat{X}_z{}^2 + 2\hat{Y}_z{}^2\Big) &+ \Big(\frac{A}{2}+B\Big)\Big(\hat{X}_+\hat{Y}_- + \hat{X}_-\hat{Y}_+ + 2\hat{X}_z\hat{Y}_z\Big)\,,
\end{aligned}$$

kde $[\hat{\vec{A}}\,;\hat{\vec{B}}]$ je komutátor skalárního součinu

$$\left[\hat{\vec{A}}\,;\hat{\vec{B}}\right] = \hat{\vec{A}}\cdot\hat{\vec{B}} - \hat{\vec{B}}\cdot\hat{\vec{A}} = \left[\hat{A}_x,\hat{B}_x\right] + \left[\hat{A}_y,\hat{B}_y\right] + \left[\hat{A}_z,\hat{B}_z\right]\;,$$

a pro $\hat{\vec{X}}, \hat{\vec{Y}}$ je nulový, protože operují na jiných částech součinového prostoru.

Pokračujeme výpočtem působení $\hat{H}$ na bázové stavy.

$$\begin{aligned}
\hat{H}\,|{+}{+}\rangle &= \left(\frac{B}{2}\Big(\hat{X}_+\hat{X}_- + \hat{X}_-\hat{X}_+ + \hat{Y}_+\hat{Y}_- + \hat{Y}_-\hat{Y}_+ + 2\hat{X}_z{}^2 + 2\hat{Y}_z{}^2\Big) + \Big(\frac{A}{2}+B\Big)\Big(\hat{X}_+\hat{Y}_- + \hat{X}_-\hat{Y}_+ + 2\hat{X}_z\hat{Y}_z\Big)\right)|{+}{+}\rangle \\
&= \left(\frac{B}{2}\Big(1+0+1+0+2\,(1/2)^2 + 2\,(1/2)^2\Big) + \Big(\frac{A}{2}+B\Big)\Big(0+0+2\,(1/2)\,(1/2)\Big)\right)|{+}{+}\rangle = \left(\frac{A}{4}+2B\right)|{+}{+}\rangle
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\hat{H}\,|{-}{-}\rangle &= \left(\frac{B}{2}\Big(\hat{X}_+\hat{X}_- + \hat{X}_-\hat{X}_+ + \hat{Y}_+\hat{Y}_- + \hat{Y}_-\hat{Y}_+ + 2\hat{X}_z{}^2 + 2\hat{Y}_z{}^2\Big) + \Big(\frac{A}{2}+B\Big)\Big(\hat{X}_+\hat{Y}_- + \hat{X}_-\hat{Y}_+ + 2\hat{X}_z\hat{Y}_z\Big)\right)|{-}{-}\rangle \\
&= \left(\frac{B}{2}\Big(0+1+0+1+2\,(-1/2)^2 + 2\,(-1/2)^2\Big) + \Big(\frac{A}{2}+B\Big)\Big(0+0+2\,(-1/2)\,(-1/2)\Big)\right)|{-}{-}\rangle = \left(\frac{A}{4}+2B\right)|{-}{-}\rangle
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\hat{H}\,|{+}{-}\rangle &= \left(\frac{B}{2}\Big(\hat{X}_+\hat{X}_- + \hat{X}_-\hat{X}_+ + \hat{Y}_+\hat{Y}_- + \hat{Y}_-\hat{Y}_+ + 2\hat{X}_z{}^2 + 2\hat{Y}_z{}^2\Big) + \Big(\frac{A}{2}+B\Big)\Big(\hat{X}_+\hat{Y}_- + \hat{X}_-\hat{Y}_+ + 2\hat{X}_z\hat{Y}_z\Big)\right)|{+}{-}\rangle \\
&= \frac{B}{2}\Big(1+0+0+1+2\,(1/2)^2 + 2\,(-1/2)^2\Big)\,|{+}{-}\rangle + \Big(\frac{A}{2}+B\Big)\Big(0+|{-}{+}\rangle + 2\,(1/2)\,(-1/2)\,|{+}{-}\rangle\Big) \\
&= \Big(-\frac{A}{4}+B\Big)\,|{+}{-}\rangle + \Big(\frac{A}{2}+B\Big)\,|{-}{+}\rangle
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\hat{H}\,|{-}{+}\rangle &= \left(\frac{B}{2}\Big(\hat{X}_+\hat{X}_- + \hat{X}_-\hat{X}_+ + \hat{Y}_+\hat{Y}_- + \hat{Y}_-\hat{Y}_+ + 2\hat{X}_z{}^2 + 2\hat{Y}_z{}^2\Big) + \Big(\frac{A}{2}+B\Big)\Big(\hat{X}_+\hat{Y}_- + \hat{X}_-\hat{Y}_+ + 2\hat{X}_z\hat{Y}_z\Big)\right)|{-}{+}\rangle \\
&= \frac{B}{2}\Big(0+1+1+0+2\,(-1/2)^2 + 2\,(1/2)^2\Big)\,|{-}{+}\rangle + \Big(\frac{A}{2}+B\Big)\Big(|{+}{-}\rangle + 0 + 2\,(-1/2)\,(1/2)\,|{-}{+}\rangle\Big) \\
&= \Big(-\frac{A}{4}+B\Big)\,|{-}{+}\rangle + \Big(\frac{A}{2}+B\Big)\,|{+}{-}\rangle
\end{aligned}$$

Vidíme tedy, že $|++\rangle, |--\rangle$ jsou vlastní stavy degenerované energetické hladiny $E = \frac{A}{4} + 2B$. Dopočítáme vlastní energie v podprostoru $|\pm\mp\rangle$:

$$\langle\pm\mp|\,\hat{H}\,|\pm\mp\rangle = \begin{pmatrix} -\dfrac{A}{4}+B & \dfrac{A}{2}+B \\ \dfrac{A}{2}+B & -\dfrac{A}{4}+B \end{pmatrix} =: M\,, \quad 0 = |M - \lambda\mathbb{1}|^2 = \begin{vmatrix} -\dfrac{A}{4}+B-\lambda & \dfrac{A}{2}+B \\ \dfrac{A}{2}+B & -\dfrac{A}{4}+B-\lambda \end{vmatrix}$$

$$0 = \Big(-\frac{A}{4}+B-\lambda\Big)^2 - \Big(\frac{A}{2}+B\Big)^2 \iff \lambda = -\frac{A}{4}+B \pm \Big(\frac{A}{2}+B\Big) \iff \lambda \in \Big\{-\frac{3A}{4},\ \frac{A}{4}+2B\Big\}$$

Vidíme tedy, že pozitronium má jednu nedegenerovanou energetickou hladinu $E_0 = -{}^3\!/\!{}_4\,A$ a jednu trojnásobně degenerovanou hladinu $E_1 = {}^A\!/\!{}_4 + 2B$. Tyto dvě hladiny odpovídají stavům s celkovým spinem $S = 0$, resp. $S = 1$.

5 Jemné štěpení (spin-orbitální interakce)

5.1 Zadání

Máme atom vodíku v p-stavu, jeho hamiltonián je

$$\hat{H} = A\,\hat{\vec{S}}\cdot\hat{\vec{L}}\,.$$

Spočtěte energie stacionárních stavů. Ukažte, že operátor $\hat{\vec{J}} = \hat{\vec{S}} + \hat{\vec{L}}$ komutuje s hamiltoniánem a vypočítejte působení $\hat{J}^2$ a $\hat{J}_z$ na stacionární stavy.

Tento atom následně vložíme do magnetického pole. Výsledný hamiltonián je

$$\hat{H} = A\,\hat{\vec{S}}\cdot\hat{\vec{L}} - K\Big(\hat{\vec{S}} + \frac{1}{2}\hat{\vec{L}}\Big)\cdot\vec{B}\,, \quad \vec{B} = (0,0,B)\,,$$

jaké jsou energie stacionárních stavů?

5.2 Řešení

V p-stavu může L_z nabývat hodnot -1, 0, $+1$, chová se tedy v podstatě jako spin-1. Budeme pracovat se součinovou bází vlastních stavů operátorů $\hat{S}_z, \hat{L}_z$:

$$|\pm\pm\rangle \coloneqq |\pm_S\rangle \otimes |1, \pm1_L\rangle$$
$$|\pm\,0\,\rangle \coloneqq |\pm_S\rangle \otimes |1, \quad 0_L\rangle$$

Opět si vyjádříme hamiltonián v polární formě a vypočteme jeho působení na $|\pm\,\ell\,\rangle$:

$$\hat{H} = \frac{A}{2}\Big(\hat{S}_+\hat{L}_- + \hat{S}_-\hat{L}_+\Big) + A\,\hat{S}_z\hat{L}_z$$

$$\hat{H}\,|++\rangle = \Big(\frac{A}{2}\Big(\hat{S}_+\hat{L}_- + \hat{S}_-\hat{L}_+\Big) + A\,\hat{S}_z\hat{L}_z\Big)|++\rangle = \Big(\frac{A}{2}\Big(0\sqrt{2}+0\Big) + A\,(+{}^1\!/\!{}_2)\,(+1)\Big)|++\rangle = \frac{A}{2}\,|++\rangle$$

$$\hat{H}\,|--\rangle = \Big(\frac{A}{2}\Big(\hat{S}_+\hat{L}_- + \hat{S}_-\hat{L}_+\Big) + A\,\hat{S}_z\hat{L}_z\Big)|--\rangle = \Big(\frac{A}{2}\Big(0+0\sqrt{2}\Big) + A\,(-{}^1\!/\!{}_2)\,(-1)\Big)|--\rangle = \frac{A}{2}\,|--\rangle$$

$$\hat{H}\,|+0\,\rangle = \Big(\frac{A}{2}\Big(\hat{S}_+\hat{L}_- + \hat{S}_-\hat{L}_+\Big) + A\,\hat{S}_z\hat{L}_z\Big)|+0\,\rangle = \frac{A}{2}\Big(0+\sqrt{2}\,|-+\rangle\Big) + A\,({}^1\!/\!{}_2)\,0 = \sqrt{2}\frac{A}{2}\,|-+\rangle = \frac{A}{\sqrt{2}}\,|-+\rangle$$

$$\hat{H}\,|-0\,\rangle = \Big(\frac{A}{2}\Big(\hat{S}_+\hat{L}_- + \hat{S}_-\hat{L}_+\Big) + A\,\hat{S}_z\hat{L}_z\Big)|-0\,\rangle = \frac{A}{2}\Big(\sqrt{2}\,|+-\rangle+0\Big) + A\,({}^1\!/\!{}_2)\,0 = \sqrt{2}\frac{A}{2}\,|+-\rangle = \frac{A}{\sqrt{2}}\,|+-\rangle$$

$$\hat{H}\,|+-\rangle = \Big(\frac{A}{2}\Big(\hat{S}_+\hat{L}_- + \hat{S}_-\hat{L}_+\Big) + A\,\hat{S}_z\hat{L}_z\Big)|+-\rangle = \frac{A}{2}\Big(0+\sqrt{2}\,|-0\,\rangle\Big) + A\,(+{}^1\!/\!{}_2)\,(-1)\,|+-\rangle = \frac{A}{\sqrt{2}}\,|-0\,\rangle - \frac{A}{2}\,|+-\rangle$$

$$\hat{H}\,|-+\rangle = \Big(\frac{A}{2}\Big(\hat{S}_+\hat{L}_- + \hat{S}_-\hat{L}_+\Big) + A\,\hat{S}_z\hat{L}_z\Big)|-+\rangle = \frac{A}{2}\Big(\sqrt{2}\,|+0\,\rangle+0\Big) + A\,(-{}^1\!/\!{}_2)\,(+1)\,|+-\rangle = \frac{A}{\sqrt{2}}\,|+0\,\rangle - \frac{A}{2}\,|-+\rangle$$

Vidíme, že hamiltonián je blokově diagonální. Stavy $|{+}{+}\rangle$ a $|{-}{-}\rangle$ jsou stacionární stavy s energií $^A/_2$. Podprostory $\mathrm{span}\{|{+}0\rangle, |{-}{+}\rangle\}$ a $\mathrm{span}\{|{-}0\rangle, |{+}{-}\rangle\}$ můžeme diagonalizovat samostatně.

$$M_+ \coloneqq \begin{pmatrix} \langle +0| \frac{2}{A}\hat{H} |+0\rangle & \langle +0| \frac{2}{A}\hat{H} |-+\rangle \\ \langle -+| \frac{2}{A}\hat{H} |+0\rangle & \langle -+| \frac{2}{A}\hat{H} |-+\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{2} \\ \sqrt{2} & -1 \end{pmatrix}$$

Vlastní čísla matice M jsou -2 a 1, jim odpovídají vlastní vektory $(1, -\sqrt{2})$ a $(\sqrt{2}, 1)$. Nové stacionární stavy si nazveme nenápaditě $|A\rangle, |B\rangle$.

$$|A\rangle \coloneqq \frac{1}{\sqrt{3}}\Big(|+0\rangle - \sqrt{2}\,|-+\rangle \Big), \quad |B\rangle \coloneqq \frac{1}{\sqrt{3}}\Big(\sqrt{2}\,|+0\rangle + |-+\rangle \Big),$$

$$\hat{H}\,|A\rangle = \frac{A}{2}(-2)\,|A\rangle = -A\,|A\rangle \ , \quad \hat{H}\,|B\rangle = \frac{A}{2}\,|B\rangle \ .$$

Obdobně pracujeme i se stavy $|{-}0\rangle, |{+}{-}\rangle$.

$$M_- \coloneqq \begin{pmatrix} \langle -0| \frac{2}{A}\hat{H} |-0\rangle & \langle -0| \frac{2}{A}\hat{H} |+-\rangle \\ \langle +-| \frac{2}{A}\hat{H} |-0\rangle & \langle +-| \frac{2}{A}\hat{H} |+-\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{2} \\ \sqrt{2} & -1 \end{pmatrix}$$

$$|C\rangle \coloneqq \frac{1}{\sqrt{3}}\Big(|-0\rangle - \sqrt{2}\,|+-\rangle \Big), \quad |D\rangle \coloneqq \frac{1}{\sqrt{3}}\Big(\sqrt{2}\,|-0\rangle + |+-\rangle \Big),$$

$$\hat{H}\,|C\rangle = \frac{A}{2}(-2)\,|C\rangle = -A\,|C\rangle \ , \quad \hat{H}\,|D\rangle = \frac{A}{2}\,|D\rangle \ .$$

Vidíme, že hamiltonián má jednu čtyřikrát degenerovanou energetickou hladinu $^A/_2$ a jednu dvakrát degenerovanou hladinu $-A$. Stacionární stavy tvoří bázi hilbertova prostoru, aby se nám s nimi lépe dále pracovalo, přejmenujeme si je:

$$\begin{aligned}
\left|{}^3/_2, +{}^3/_2\right\rangle &\coloneqq |++\rangle \ , \\
\left|{}^3/_2, +{}^1/_2\right\rangle &\coloneqq |B\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}\Big(\sqrt{2}\,|+0\rangle + |-+\rangle \Big), \\
\left|{}^3/_2, -{}^1/_2\right\rangle &\coloneqq |D\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}\Big(\sqrt{2}\,|-0\rangle + |+-\rangle \Big), \\
\left|{}^3/_2, -{}^3/_2\right\rangle &\coloneqq |--\rangle \ , \\
\left|{}^1/_2, +{}^1/_2\right\rangle &\coloneqq |A\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}\Big(|+0\rangle - \sqrt{2}\,|-+\rangle \Big), \\
\left|{}^1/_2, -{}^1/_2\right\rangle &\coloneqq |C\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}\Big(|-0\rangle - \sqrt{2}\,|+-\rangle \Big).
\end{aligned}$$

Dále budeme pracovat s operátorem $\hat{\vec{J}} = \hat{\vec{S}} + \hat{\vec{L}}$. Nejprve ukážeme, že komutuje s hamiltoniánem.

$$\left[\hat{S}_j,\ \hat{H}\right] = A\left[\hat{S}_j,\ \hat{\vec{S}}\cdot\hat{\vec{L}}\right] = A\sum_k \left[\hat{S}_j,\ \hat{S}_k\hat{L}_k\right] = A\sum_k \left[\hat{S}_j,\ \hat{S}_k\right]\hat{L}_k + A\sum_k \hat{S}_k\left[\hat{S}_j,\ \hat{L}_k\right] = A\sum_k \mathrm{i}\,\varepsilon_{jk\ell}\,\hat{S}_\ell\hat{L}_k$$

$$\left[\hat{L}_j,\ \hat{H}\right] = A\left[\hat{L}_j,\ \hat{\vec{S}}\cdot\hat{\vec{L}}\right] = A\sum_k \left[\hat{L}_j,\ \hat{S}_k\hat{L}_k\right] = A\sum_k \left[\hat{L}_j,\ \hat{S}_k\right]\hat{L}_k + A\sum_k \hat{S}_k\left[\hat{L}_j,\ \hat{L}_k\right] = A\sum_k \mathrm{i}\,\varepsilon_{jk\ell}\,\hat{S}_k\hat{L}_\ell$$

$$\left[\hat{J}_j,\ \hat{H}\right] = \left[\hat{S}_j,\ \hat{H}\right] + \left[\hat{L}_j,\ \hat{H}\right] = A\sum_k \mathrm{i}\,\varepsilon_{jk\ell}\,\hat{S}_\ell\hat{L}_k \ + \ A\sum_k \mathrm{i}\,\varepsilon_{jk\ell}\,\hat{S}_k\hat{L}_\ell = A\sum_k \mathrm{i}\Big(\underbrace{\varepsilon_{jk\ell} + \varepsilon_{j\ell k}}_{0}\Big)\hat{S}_\ell\hat{L}_k = 0$$

$$\left[\hat{\vec{J}},\ \hat{H}\right] = \Big(\left[\hat{J}_x, \hat{H}\right],\ \left[\hat{J}_y, \hat{H}\right],\ \left[\hat{J}_z, \hat{H}\right] \Big) = \Big(0,\ 0,\ 0\Big)$$

Pokračujeme výpočtem působení $\hat{J}_z$ na $|j,m\rangle$.

$$\hat{J}_z \left|{}^3\!/\!_2, +{}^3\!/\!_2\right\rangle = \Big(\hat{S}_z + J_z\Big) \left|++\right\rangle = \Big(+\frac{1}{2} + 1\Big) \left|++\right\rangle = +\frac{3}{2} \left|{}^3\!/\!_2, +{}^3\!/\!_2\right\rangle$$

$$\hat{J}_z \left|{}^3\!/\!_2, -{}^3\!/\!_2\right\rangle = \Big(\hat{S}_z + J_z\Big) \left|--\right\rangle = \Big(-\frac{1}{2} + 1\Big) \left|--\right\rangle = -\frac{3}{2} \left|{}^3\!/\!_2, -{}^3\!/\!_2\right\rangle$$

$$\hat{J}_z \left|{}^3\!/\!_2, +{}^1\!/\!_2\right\rangle = \Big(\hat{S}_z + J_z\Big)\frac{1}{\sqrt{3}}\Big(\sqrt{2}\left|+0\right\rangle + \left|-+\right\rangle\Big) = \frac{1}{\sqrt{3}}\Big(\sqrt{2}(+\frac{1}{2}+0)\left|+0\right\rangle + (-\frac{1}{2}+1)\left|-+\right\rangle\Big) = +\frac{1}{2}\left|{}^3\!/\!_2, +{}^1\!/\!_2\right\rangle$$

$$\hat{J}_z \left|{}^3\!/\!_2, -{}^1\!/\!_2\right\rangle = \Big(\hat{S}_z + J_z\Big)\frac{1}{\sqrt{3}}\Big(\sqrt{2}\left|-0\right\rangle + \left|+-\right\rangle\Big) = \frac{1}{\sqrt{3}}\Big(\sqrt{2}(-\frac{1}{2}+0)\left|-0\right\rangle + (+\frac{1}{2}-1)\left|+-\right\rangle\Big) = -\frac{1}{2}\left|{}^3\!/\!_2, -{}^1\!/\!_2\right\rangle$$

$$\hat{J}_z \left|{}^1\!/\!_2, +{}^1\!/\!_2\right\rangle = \Big(\hat{S}_z + J_z\Big)\frac{1}{\sqrt{3}}\Big(\left|+0\right\rangle - \sqrt{2}\left|-+\right\rangle\Big) = \frac{1}{\sqrt{3}}\Big((+\frac{1}{2}+0)\left|+0\right\rangle - \sqrt{2}(-\frac{1}{2}+1)\left|-+\right\rangle\Big) = +\frac{1}{2}\left|{}^1\!/\!_2, +{}^1\!/\!_2\right\rangle$$

$$\hat{J}_z \left|{}^1\!/\!_2, -{}^1\!/\!_2\right\rangle = \Big(\hat{S}_z + J_z\Big)\frac{1}{\sqrt{3}}\Big(\left|-0\right\rangle - \sqrt{2}\left|+-\right\rangle\Big) = \frac{1}{\sqrt{3}}\Big((-\frac{1}{2}+0)\left|-0\right\rangle - \sqrt{2}(+\frac{1}{2}-1)\left|+-\right\rangle\Big) = -\frac{1}{2}\left|{}^1\!/\!_2, -{}^1\!/\!_2\right\rangle$$

Dále vypočítáme působení $\hat{J}^2$ na $|j,m\rangle$.

$$\hat{J}^2 = \left(\hat{\vec{S}} + \hat{\vec{L}}\right)^2 = \hat{S}^2 + \hat{L}^2 + 2\,\hat{\vec{S}}\cdot\hat{\vec{L}} - \left[\hat{\vec{S}}\,;\hat{\vec{L}}\right] = \hat{S}^2 + \hat{L}^2 + \frac{2}{A}\hat{H}$$

$$\hat{J}^2 = \frac{1}{2}\Big(\hat{S}_+\hat{S}_- + \hat{S}_-\hat{S}_+ + \hat{L}_+\hat{L}_- + \hat{L}_-\hat{L}_+\Big) + \hat{S}_z{}^2 + \hat{L}_z{}^2 + \frac{2}{A}\hat{H}$$

Vynásobíme-li výraz stavem $|j,m\rangle$, stejným způsobem jako nahoře, vyjde nám:

$$\hat{J}^2\left|{}^3\!/\!_2, m\right\rangle = {}^3\!/\!_2\;({}^3\!/\!_2+1)\;\left|{}^3\!/\!_2, m\right\rangle\;, \qquad \hat{J}^2\left|{}^1\!/\!_2, m\right\rangle = {}^1\!/\!_2\;({}^1\!/\!_2+1)\;\left|{}^1\!/\!_2, m\right\rangle\;, \qquad \forall m = -\tfrac{3}{2},\;...,\;\tfrac{3}{2}\;.$$