Úvod do kvantové mechaniky: Domácí úkoly z přednášek

Michal Grňo

9. 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:

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

2 Rabiho metoda

2.1 Zadání

Mějme částici se spinem 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 $\big|\psi(t)\big\rangle$ 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 $\hat{S}_\pm$:

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

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

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

tedy v maticové formě

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

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

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

$$\Downarrow$$

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

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 $\psi_\pm(0) \equiv |\pm z\rangle$.

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

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:

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

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

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

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

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

Definujeme operátor

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

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

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

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

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

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 $a = K\cosh t,\ t \in \mathbb{R}$.

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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.

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

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 $|\pm\pm\rangle$:

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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.

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

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

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

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

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 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 $|{\pm\,\ell}\rangle$:

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

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

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

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

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

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

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

Vidíme, že hamiltonián je blokově diagonální. Stavy $|{+}{+}\rangle$ a $|{-}{-}\rangle$ jsou stacionární stavy s energií $A/2$. Podprostory span$\{|{+}\,0\,\rangle, |{-}{+}\rangle\}$ a 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.

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

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

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

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

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 $|j,m\rangle$.

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

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

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

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

Nakonec nalezneme vlastní čísla hamiltoniánu

$$\hat{H} \;=\; A\,\hat{\vec{S}}\cdot\hat{\vec{L}} - K\Big(\hat{\vec{S}} + \frac{1}{2}\hat{\vec{L}}\Big)\cdot\vec{B} \;=\; \hat{H}_0 - KB\Big(\hat{S}_z + \tfrac{1}{2}\hat{L}_z\Big)\,,$$

kde $\hat{H}_0 = A\,\hat{\vec{S}}\cdot\hat{\vec{L}}$ je hamiltonián z prvního úkolu. Je výhodné opět pracovat v bázi $|\pm\pm\rangle$.

$$\Big(\hat{S}_z + \tfrac{1}{2}\hat{L}_z\Big)\left|++\right\rangle = \Big(+\frac{1}{2}+\frac{1}{2}(+1)\Big)\left|++\right\rangle = +\left|++\right\rangle$$

$$\Big(\hat{S}_z + \tfrac{1}{2}\hat{L}_z\Big)\left|--\right\rangle = \Big(-\frac{1}{2}+\frac{1}{2}(-1)\Big)\left|--\right\rangle = -\left|--\right\rangle$$

$$\Big(\hat{S}_z + \tfrac{1}{2}\hat{L}_z\Big)\left|+0\right\rangle = \Big(+\frac{1}{2}+\frac{1}{2}(\;0\;)\Big)\left|+0\right\rangle = +\frac{1}{2}\left|+0\right\rangle$$

$$\Big(\hat{S}_z + \tfrac{1}{2}\hat{L}_z\Big)\left|-0\right\rangle = \Big(-\frac{1}{2}+\frac{1}{2}(\;0\;)\Big)\left|-0\right\rangle = -\frac{1}{2}\left|-0\right\rangle$$

$$\Big(\hat{S}_z + \tfrac{1}{2}\hat{L}_z\Big)\left|+-\right\rangle = \Big(+\frac{1}{2}+\frac{1}{2}(-1)\Big)\left|+-\right\rangle = \;0\;\left|+-\right\rangle$$

$$\Big(\hat{S}_z + \tfrac{1}{2}\hat{L}_z\Big)\left|-+\right\rangle = \Big(-\frac{1}{2}+\frac{1}{2}(+1)\Big)\left|-+\right\rangle = \;0\;\left|-+\right\rangle$$

$$\hat{H}_0\left|++\right\rangle = \frac{A}{2}\left|++\right\rangle \qquad \hat{H}_0\left|--\right\rangle = \frac{A}{2}\left|--\right\rangle \qquad \hat{H}_0\left|+-\right\rangle = \frac{A}{\sqrt{2}}\left|-0\right\rangle - \frac{A}{2}\left|+-\right\rangle$$

$$\hat{H}_0\left|+0\right\rangle = \frac{A}{\sqrt{2}}\left|-+\right\rangle \qquad \hat{H}_0\left|-0\right\rangle = \frac{A}{\sqrt{2}}\left|+-\right\rangle \qquad \hat{H}_0\left|-+\right\rangle = \frac{A}{\sqrt{2}}\left|+0\right\rangle - \frac{A}{2}\left|-+\right\rangle$$

$$\hat{H}\,|{+}{+}\rangle = \Big(\frac{A}{2} - KB\Big)\,|{+}{+}\rangle$$

$$\hat{H}\,|{-}{-}\rangle = \Big(\frac{A}{2} + KB\Big)\,|{-}{-}\rangle$$

$$\hat{H}\,|{+}\,0\,\rangle = \frac{A}{\sqrt{2}}\,|{-}{+}\rangle - \frac{KB}{2}\,|{+}\,0\,\rangle$$

$$\hat{H}\,|{-}\,0\,\rangle = \frac{A}{\sqrt{2}}\,|{+}{-}\rangle + \frac{KB}{2}\,|{-}\,0\,\rangle$$

$$\hat{H}_0\,|{+}{-}\rangle = \frac{A}{\sqrt{2}}\,|{-}\,0\,\rangle - \frac{A}{2}\,|{+}{-}\rangle$$

$$\hat{H}_0\,|{-}{+}\rangle = \frac{A}{\sqrt{2}}\,|{+}\,0\,\rangle - \frac{A}{2}\,|{-}{+}\rangle$$

$$M_+ = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} -KB & \sqrt{2}A \\ \sqrt{2}A & -A \end{pmatrix} \qquad M_- = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} KB & \sqrt{2}A \\ \sqrt{2}A & -A \end{pmatrix}$$

$$E = \frac{1}{4}\Big(- A - BK \pm (3A - BK)\Big) \qquad E = \frac{1}{4}\Big(- A - BK \pm (3A + BK)\Big)$$

Dostáváme tedy šest nedegenerovaných energetických hladin:

E_1	$-A - \frac{KB}{2}$
E_2	$-A$
E_3	$\frac{A}{2} - KB$
E_4	$\frac{A}{2} - \frac{KB}{2}$
E_5	$\frac{A}{2}$
E_6	$\frac{A}{2} + KB$

6 Střední hodnota spinu

6.1 Zadání

Jaká je střední hodnota jednotlivých složek operátoru spinu?

$$\Big\langle \hat{S}_j \Big\rangle = ?\,, \quad j = x, y, z$$

vypočtěte pro spin-1/2 částici s $|\psi\rangle = \big|{+}\vec{n}\big\rangle$ a pro spin-1 částici s $|\psi\rangle = \big|\,0\,\vec{n}\big\rangle$.

Vypočtěte časový vývoj střední hodnoty spinu pro částici s obecným spinem v magnetickém poli.

$$\hat{H} = -K\,\hat{\vec{S}}\cdot\vec{B}, \quad \vec{B} = (0,0,B), \quad \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\Big\langle \hat{S}_j \Big\rangle = ?$$

6.2 Řešení

Použijeme vyjádření $\left|+\vec{n}\right\rangle$ a $\left|0\vec{n}\right\rangle$ z úloh 1 a 4.

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

$$\hat{\vec{S}}_{1/2} = \left(\tfrac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \tfrac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & -\mathrm{i} \\ \mathrm{i} & 0 \end{pmatrix}, \tfrac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \right),$$

$$\hat{\vec{S}}_{1} = \left(\tfrac{1}{2}\begin{pmatrix} & 1 & \\ 1 & & 1 \\ & 1 & \end{pmatrix}, \tfrac{1}{2}\begin{pmatrix} & -\mathrm{i} & \\ \mathrm{i} & & \mathrm{i} \\ & -\mathrm{i} & \end{pmatrix}, \tfrac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & & \\ & 0 & \\ & & -1 \end{pmatrix} \right).$$

Nejprve se pustíme do řešení spin-$1/2$ částice.

$$\left\langle \hat{S}_x \right\rangle = \left\langle +\vec{n}\right| \hat{S}_x \left|+\vec{n}\right\rangle = \begin{pmatrix} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi/2}\cos\frac{\vartheta}{2} \\ \mathrm{e}^{+\mathrm{i}\varphi/2}\sin\frac{\vartheta}{2} \end{pmatrix}^{+} \tfrac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi/2}\cos\frac{\vartheta}{2} \\ \mathrm{e}^{+\mathrm{i}\varphi/2}\sin\frac{\vartheta}{2} \end{pmatrix} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi/2}\sin\frac{\vartheta}{2} & \mathrm{e}^{+\mathrm{i}\varphi/2}\cos\frac{\vartheta}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi/2}\cos\frac{\vartheta}{2} \\ \mathrm{e}^{+\mathrm{i}\varphi/2}\sin\frac{\vartheta}{2} \end{pmatrix}$$

$$= \frac{1}{2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi}\sin\tfrac{\vartheta}{2}\cos\tfrac{\vartheta}{2} + \frac{1}{2}\mathrm{e}^{+\mathrm{i}\varphi}\cos\tfrac{\vartheta}{2}\sin\tfrac{\vartheta}{2} = \frac{1}{2}\underbrace{\left(\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi} + \mathrm{e}^{+\mathrm{i}\varphi}\right)}_{2\cos\varphi}\underbrace{\left(\sin\tfrac{\vartheta}{2}\cos\tfrac{\vartheta}{2}\right)}_{\frac{1}{2}\sin\vartheta} = \frac{1}{2}\sin\vartheta\,\cos\varphi\,.$$

$$\left\langle \hat{S}_y \right\rangle = \left\langle +\vec{n}\right| \hat{S}_y \left|+\vec{n}\right\rangle = \begin{pmatrix} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi/2}\cos\frac{\vartheta}{2} \\ \mathrm{e}^{+\mathrm{i}\varphi/2}\sin\frac{\vartheta}{2} \end{pmatrix}^{+} \tfrac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & -\mathrm{i} \\ \mathrm{i} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi/2}\cos\frac{\vartheta}{2} \\ \mathrm{e}^{+\mathrm{i}\varphi/2}\sin\frac{\vartheta}{2} \end{pmatrix} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} \mathrm{e}^{+\mathrm{i}\varphi/2}\cos\frac{\vartheta}{2} & \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi/2}\sin\frac{\vartheta}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -\mathrm{i}\,\mathrm{e}^{+\mathrm{i}\varphi/2}\sin\frac{\vartheta}{2} \\ +\mathrm{i}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi/2}\cos\frac{\vartheta}{2} \end{pmatrix}$$

$$= -\mathrm{i}\,\frac{1}{2}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi}\,\cos\tfrac{\vartheta}{2}\sin\tfrac{\vartheta}{2} + \mathrm{i}\,\frac{1}{2}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi}\,\sin\tfrac{\vartheta}{2}\cos\tfrac{\vartheta}{2} = \frac{1}{2}\underbrace{\left(\mathrm{i}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi} - \mathrm{i}\,\mathrm{e}^{+\mathrm{i}\varphi}\right)}_{2\sin\varphi}\underbrace{\left(\sin\tfrac{\vartheta}{2}\cos\tfrac{\vartheta}{2}\right)}_{\frac{1}{2}\sin\vartheta} = \frac{1}{2}\sin\vartheta\,\sin\varphi\,.$$

$$\left\langle \hat{S}_z \right\rangle = \left\langle +\vec{n}\right| \hat{S}_z \left|+\vec{n}\right\rangle = \begin{pmatrix} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi/2}\cos\frac{\vartheta}{2} \\ \mathrm{e}^{+\mathrm{i}\varphi/2}\sin\frac{\vartheta}{2} \end{pmatrix}^{+} \tfrac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi/2}\cos\frac{\vartheta}{2} \\ \mathrm{e}^{+\mathrm{i}\varphi/2}\sin\frac{\vartheta}{2} \end{pmatrix} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} \mathrm{e}^{+\mathrm{i}\varphi/2}\cos\frac{\vartheta}{2} & \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi/2}\sin\frac{\vartheta}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} +\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi/2}\cos\frac{\vartheta}{2} \\ -\mathrm{e}^{+\mathrm{i}\varphi/2}\sin\frac{\vartheta}{2} \end{pmatrix}$$

$$= \frac{1}{2}\left(\cos^2\tfrac{\vartheta}{2} - \sin^2\tfrac{\vartheta}{2}\right) = \frac{1}{2}\cos\vartheta\,.$$

Pokračujeme výpočtem středních hodnot pro spin-1.

$$\left\langle \hat{S}_x \right\rangle = \left\langle 0\vec{n}\right| \hat{S}_x \left|0\vec{n}\right\rangle = \begin{pmatrix} -\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi}\sin\vartheta \\ \sqrt{2}\cos\vartheta \\ \mathrm{e}^{+\mathrm{i}\varphi}\sin\vartheta \end{pmatrix}^{+} \tfrac{1}{2}\begin{pmatrix} & 1 & \\ 1 & & 1 \\ & 1 & \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi}\sin\vartheta \\ \sqrt{2}\cos\vartheta \\ \mathrm{e}^{+\mathrm{i}\varphi}\sin\vartheta \end{pmatrix} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} -\mathrm{e}^{+\mathrm{i}\varphi}\sin\vartheta & \sqrt{2}\cos\vartheta & \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi}\sin\vartheta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sqrt{2}\cos\vartheta \\ (-\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi} + \mathrm{e}^{+\mathrm{i}\varphi})\sin\vartheta \\ \sqrt{2}\cos\vartheta \end{pmatrix}$$

$$= \frac{1}{2}\left(-\mathrm{e}^{+\mathrm{i}\varphi} + \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi}\right)\sin\vartheta\,\sqrt{2}\cos\vartheta + \frac{1}{2}\sqrt{2}\cos\vartheta\,\left(-\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi} + \mathrm{e}^{+\mathrm{i}\varphi}\right)\sin\vartheta$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}}\,\sin\vartheta\,\cos\vartheta\,\left((-\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi} + \mathrm{e}^{+\mathrm{i}\varphi}) - (-\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi} + \mathrm{e}^{+\mathrm{i}\varphi})\right) = 0$$

$$\left\langle \hat{S}_y \right\rangle = \left\langle 0\vec{n}\right| \hat{S}_y \left|0\vec{n}\right\rangle = \begin{pmatrix} -\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi}\sin\vartheta \\ \sqrt{2}\cos\vartheta \\ \mathrm{e}^{+\mathrm{i}\varphi}\sin\vartheta \end{pmatrix}^{+} \tfrac{1}{2}\begin{pmatrix} & -\mathrm{i} & \\ \mathrm{i} & & \mathrm{i} \\ & -\mathrm{i} & \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi}\sin\vartheta \\ \sqrt{2}\cos\vartheta \\ \mathrm{e}^{+\mathrm{i}\varphi}\sin\vartheta \end{pmatrix} = \text{(obdobně)} = 0$$

$$\left\langle \hat{S}_z \right\rangle = \left\langle 0\vec{n}\right| \hat{S}_z \left|0\vec{n}\right\rangle = \begin{pmatrix} -\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi}\sin\vartheta \\ \sqrt{2}\cos\vartheta \\ \mathrm{e}^{+\mathrm{i}\varphi}\sin\vartheta \end{pmatrix}^{+} \tfrac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & & \\ & 0 & \\ & & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi}\sin\vartheta \\ \sqrt{2}\cos\vartheta \\ \mathrm{e}^{+\mathrm{i}\varphi}\sin\vartheta \end{pmatrix} = \frac{1}{2}\left(\mathrm{e}^{+\mathrm{i}\varphi}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi}\sin^2\vartheta - \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi}\mathrm{e}^{+\mathrm{i}\varphi}\sin^2\vartheta\right) = 0$$

Nakonec nás zajímá časový vývoj střední hodnoty $\hat{S}_j$. Pro obecný samoadjugovaný operátor $\hat{A}$ platí

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left\langle \hat{A} \right\rangle = \mathrm{i}\left\langle \left[\hat{H}, \hat{A}\right] \right\rangle$$

Tedy (v následujícím sčítáme přes zdvojený index k):

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left\langle \hat{S}_j \right\rangle = \mathrm{i}\left\langle \left[\hat{H}, \hat{S}_j\right] \right\rangle = \mathrm{i}\left\langle \left[KB\,\hat{S}_z,\ \hat{S}_j\right] \right\rangle = \mathrm{i}KB\left\langle \left[\hat{S}_z, \hat{S}_j\right] \right\rangle = \mathrm{i}KB\left\langle \mathrm{i}\,\varepsilon_{zjk}\hat{S}_k \right\rangle = -KB\,\varepsilon_{zjk}\left\langle \hat{S}_k \right\rangle$$

$$\begin{aligned}
\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left\langle \hat{S}_x \right\rangle &= -KB\,\varepsilon_{zxk}\left\langle \hat{S}_k \right\rangle = -KB\left\langle \hat{S}_y \right\rangle \\
\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left\langle \hat{S}_y \right\rangle &= -KB\,\varepsilon_{zyk}\left\langle \hat{S}_k \right\rangle = \quad KB\left\langle \hat{S}_x \right\rangle \\
\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left\langle \hat{S}_z \right\rangle &= -KB\,\varepsilon_{zzk}\left\langle \hat{S}_k \right\rangle = 0
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&f(t) \coloneqq \left\langle \hat{S}_x \right\rangle, \quad g(t) \coloneqq \left\langle \hat{S}_y \right\rangle, \quad \omega \coloneqq KB \\
&\dot{f} = -\omega g\,, \quad \dot{g} = \omega f \quad \Longrightarrow \quad \ddot{f} - \omega^2 f = 0 \\
&f(t) = A\cos(\omega t + \varphi)\,,\ g(t) = A\sin(\omega t + \varphi)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\left\langle \hat{S}_x \right\rangle &= A\cos(KB\,t + \varphi) \\
\left\langle \hat{S}_y \right\rangle &= A\sin(KB\,t + \varphi)
\end{aligned}$$

Konstanta A závisí na bližších informacích o systému, fáze φ na volbě $t = 0$.

7 Casimirův jev

7.1 Zadání

Doplňte odvození Casimirova jevu ve 3D, tedy vypočtěte tlak p působící mezi dvěma nekonečnými dokonale vodivými deskami ve vzdálenosti d.

7.2 Řešení

Máme elektromagnetické pole dané vektorovým potenciálem $\vec{A}$, pro který platí

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2\right)\vec{A}(t,\vec{r}) = 0\,, \quad \vec{\nabla}\cdot\vec{A}(t,\vec{r}) = 0\,.$$

Abychom uměli úlohu řešit pomocí standardních nástrojů, požadujeme potenciál navíc periodické podmínky, s periodou L. Obecné řešení takového potenciálu lze hledat ve tvaru

$$\vec{A}(t,\vec{r}) = \sum_{\vec{k}}\sum_{\lambda=1,2} q_{\vec{k},\lambda}(t)\,\vec{T}_{\vec{k},\lambda}(\vec{r})\,,$$

kde

$$\vec{T}_{\vec{k},\lambda}(\vec{r}) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{L^3}}\,(\cos\vec{k}\cdot\vec{r})\,\vec{\epsilon}_\lambda \\ \sqrt{\frac{2}{L^3}}\,(\sin\vec{k}\cdot\vec{r})\,\vec{\epsilon}_\lambda \end{cases},$$

přičemž platí, že $\vec{k} \perp \vec{\epsilon}_1 \perp \vec{\epsilon}_2 \perp \vec{k}$. Konkrétně požadujeme takové podmínky, že

$$\vec{k} = \left(\frac{\pi}{d}n_x,\ \frac{2\pi}{L}n_y,\ \frac{2\pi}{L}n_z\right), \quad \vec{n} \in \mathbb{Z}^3$$

Je potřeba se ještě krátce zamyslet nad tím, zda je přiřazení $\vec{n} \mapsto \vec{T}$ jednoznačné. Zdálo by se, že některá řešení počítáme dvakrát, protože $\cos\vec{k}\cdot\vec{r}$ jsou sudé funkce a $\sin\vec{k}\cdot\vec{r}$ jsou liché funkce, oproti tomu ale jedním číslem potřebujeme klasifikovat jak řešení s cos, tak řešení se sin – nabízí se jednoduché řešení: kladným n přiřadíme řešení se sin, záporným cos. Podél osy x nás ovšem zajímají pouze sinová řešení, omezíme se tedy na $\vec{n} \in \mathbb{N}\times\mathbb{Z}^2$.

Hamiltonián takového pole je

$$\hat{H} = \sum_{\vec{n}\,\in\,\mathbb{N}\times\mathbb{Z}^2}\ \sum_{\lambda=1,2}\omega_{\vec{k}}\left(\hat{a}^+_{\vec{k},\lambda}\hat{a}_{\vec{k},\lambda} + \frac{1}{2}\right), \quad \omega_{\vec{k}} = \left\|\vec{k}\right\|\,.$$

Nás zajímají energie nulových kmitů, pro ty platí

$$E_0 = \sum_{\vec{n} \,\in\, \mathbb{N}\times\mathbb{Z}^2} \sum_{\lambda=1,2} \frac{\omega_{\vec{k}}}{2} = \sum_{\vec{n} \,\in\, \mathbb{N}\times\mathbb{Z}^2} \omega_{\vec{k}}$$

Taková řada zjevně diverguje, předpoklad dokonale vodivých desek je ale pravděpodobně příliš odvážný. Zavedeme tedy regularizační funkci, která bude pro vysoká $\omega_{\vec{k}}$ dostatečně rychle klesat.

$$\begin{gathered} g \in \mathcal{C}^2(\mathbb{R}^+)\,, \quad g(0) = 1\,, \quad g \text{ je nezáporná a nerostoucí}\,, \\ \lim_{n\to\infty} n^4 g(n) = 0\,, \quad g \text{ je analytická na nějakém okolí nuly}\,. \end{gathered}$$

Tedy $g(n)$ klesá rychleji než n^{-4}. Protože $\omega_{\vec{k}} \approx n$, dostáváme sumu $\sum n^{-3}$, která už konverguje. Dále zavedeme regularizační parametr ε v dobré víře, že odvozený výsledek bude platit i pro téměř dokonalé vodiče a budeme moci regularizaci opět odstranit. Celková energie má potom tvar

$$E_0 = \sum_{\vec{n} \,\in\, \mathbb{N}\times\mathbb{Z}^2} \omega_{\vec{k}} \;\; g(\varepsilon\,\omega_{\vec{k}})$$

Protože restrikce na periodu L je umělá a ve skutečnosti nás zajímá, co se stane, když $L \to \infty$, bude pro nás výhodné přejít od sčítání přes n_y, n_z ke sčítání přes k_y, k_z. Zadefinujeme si proto pomocnou množinu

$$M_L := \left\{ (k_y, k_z) \;\middle|\; k_y = \frac{2\pi}{L} n_y\,,\; k_z = \frac{2\pi}{L} n_z\,,\; (n_y, n_z) \in \mathbb{Z}^2 \right\}$$

Všimněme si, že pro rostoucí L je M_L čím dál hustějším pokrytím $\mathbb{R}^2$. Přesněji, můžeme pozorovat, že pro funkci f, která v nekonečnu klesá dostatečně rychle, platí

$$\int_{M_L} L^{-2} f(x,y)\, \mathrm{d}\alpha(x,y) \xrightarrow{L\to\infty} \int_{\mathbb{R}^2} f(x,y)\, \mathrm{d}\lambda(x,y)\,,$$

kde $\alpha(M)$ je aritmetická míra a $\lambda(M)$ je Lebesgueova míra[1].

Ještě než se pustíme do samotného výpočtu, je třeba si uvědomit, že energie mezi nekonečnými deskami bude zjevně nekonečná – je potřeba přejít k energii na jednotkovou plochu, tedy k plošné hustotě energie. Nyní už můžeme provést limitní přechod $L \to \infty$.

$$I = \frac{E_0}{L^2} = \sum_{\vec{n}\,\in\,\mathbb{N}\times\mathbb{Z}^2} L^{-2}\,\omega_{\vec{k}}\; g(\varepsilon\,\omega_{\vec{k}}) = \sum_{\vec{n}\,\in\,\mathbb{N}\times\mathbb{Z}^2} L^{-2} \underbrace{\sqrt{\left(\tfrac{\pi}{d}n_x\right)^2 + {k_y}^2 + {k_z}^2}\;\; g(\varepsilon \sqrt{\left(\tfrac{\pi}{d}n_x\right)^2 + {k_y}^2 + {k_z}^2}\;)}_{F(n_x,k_y,k_z)} = \sum_{\vec{n}\,\in\,\mathbb{N}\times\mathbb{Z}^2} L^{-2} F(n_x,k_y,k_z)$$

$$= \sum_{n_x\in\mathbb{N}} \sum_{(k_y,k_z)\in M_L} L^{-2} F(n_x,k_y,k_z) = \sum_{n_x\in\mathbb{N}} \int_{M_L} L^{-2} F(n_x,k_y,k_z)\,\mathrm{d}\alpha(k_y,k_z) \longrightarrow \sum_{n_x\in\mathbb{N}} \int_{\mathbb{R}^2} F(n_x,k_y,k_z)\,\mathrm{d}\lambda(k_y,k_z)$$

$$= \sum_{n=1}^{\infty} \int_{\mathbb{R}^2} \sqrt{\left(\tfrac{\pi}{d}n\right)^2 + \underbrace{{k_y}^2 + {k_z}^2}_{\rho^2}}\;\; g(\varepsilon \sqrt{\left(\tfrac{\pi}{d}n\right)^2 + \underbrace{{k_y}^2 + {k_z}^2}_{\rho^2}}\;)\;\mathrm{d}k_y\,\mathrm{d}k_z$$

Následuje technická pasáž, kdy nám jde pouze o upravení integrálu do co nejjednodušší formy. Nejprve provedeme přechod k polárním souřadnicím $(k_y, k_z) \mapsto (\rho, \theta)$, následně substituci $\rho =: \frac{\pi}{d} n\xi$ a poté substituci $\zeta := \sqrt{1+\xi^2}$.

$$I = \sum_{n=1}^{\infty} \int_0^{\infty} \sqrt{\left(\tfrac{\pi}{d}n\right)^2 + \rho^2}\;\; g(\varepsilon \sqrt{\left(\tfrac{\pi}{d}n\right)^2 + \rho^2}\;)\; 4\pi\rho\,\mathrm{d}\rho = \sum_{n=1}^{\infty} \int_0^{\infty} \left(\tfrac{\pi}{d}n\right)^3 \sqrt{1+\xi^2}\;\; g\left(\underbrace{\varepsilon\left(\tfrac{\pi}{d}n\right)}_{\varepsilon_n} \sqrt{1+\xi^2}\right)\; 4\pi\xi\,\mathrm{d}\xi$$

$$= \sum_{n=1}^{\infty} 4\pi\left(\tfrac{\pi}{d}n\right)^3 \int_0^{\infty} \xi\,\underbrace{\sqrt{1+\xi^2}}_{\zeta}\;\; g\Big(\varepsilon_n \underbrace{\sqrt{1+\xi^2}}_{\zeta}\Big)\;\;\mathrm{d}\xi = \sum_{n=1}^{\infty} 4\pi\left(\tfrac{\pi}{d}n\right)^3 \int_1^{\infty} \xi\,\zeta\, g(\varepsilon_n\,\zeta)\;\frac{1}{(\sqrt{1+\xi^2}\,)'}\;\mathrm{d}\zeta$$

$$= \sum_{n=1}^{\infty} 4\pi\left(\tfrac{\pi}{d}n\right)^3 \underbrace{\int_1^{\infty} \zeta^2\, g(\varepsilon_n\,\zeta)\;\;\mathrm{d}\zeta}_{J}$$

[1] Ve výpočtu v přednášce se nějakým záhadným způsobem objeví ještě faktor $(4\pi)^{-2}$, který nám na konci výpočtu bude chybět. Strávil jsem nad tím hodiny a pořád jsem nepřišel na to, kde se vzal.

Integrál J jsme zjednodušili do nejvhodnějšího možného tvaru, nyní stačí provést výpočet *per partes*. Pro přehlednost výpočtu vynecháme člen ε_n v argumentu funkce g, který po výpočtu opět doplníme.

$$\begin{aligned} J &= \int_1^\infty x^2 g(x)\,\mathrm{d}x \\ &= \Big[x^2 \textsc{g}(x)\Big]_1^\infty - \int_1^\infty 2x\,\textsc{g}(x)\,\mathrm{d}x \\ &= \Big[x^2 \textsc{g}(x)\Big]_1^\infty - 2\left[x\,G(x)\right]_1^\infty + 2\int_1^\infty G(x)\,\mathrm{d}x \\ &= \Big[x^2 \textsc{g}(x)\Big]_1^\infty - 2\left[x\,G(x)\right]_1^\infty + 2\left[\Gamma(x)\right]_1^\infty \end{aligned}$$

$$\Gamma'''(x) = G''(x) = \textsc{g}'(x) = g(x)$$

Z definice g máme zaručeno, že se v nekonečnu chová alespoň jako $g \approx n^{-4}$, všechny tři členy budou tedy v nekonečnu nulové. Doplníme do argumentu ε_n a vypočteme výsledek.

$$\begin{aligned} J &= {\varepsilon_n}^{-1}\Big[x^2 \textsc{g}(\varepsilon_n\,x)\Big]_1^\infty - 2{\varepsilon_n}^{-2}\left[x\,G(\varepsilon_n\,x)\right]_1^\infty + 2{\varepsilon_n}^{-3}\left[\Gamma(\varepsilon_n\,x)\right]_1^\infty \\ &= -{\varepsilon_n}^{-1}\,\textsc{g}(\varepsilon_n) + 2{\varepsilon_n}^{-2}\,G(\varepsilon_n) - 2{\varepsilon_n}^{-3}\,\Gamma(\varepsilon_n) \end{aligned}$$

Zajímá nás chování $I(\varepsilon_n)$ v okolí nuly, proto použijeme Taylorův rozvoj g. Platí:

$$\begin{aligned} g(x) &= a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + O(x^3) \\ x^{-1}\,\textsc{g}(x) &= a_0 + \frac{a_1}{2}x + \frac{a_2}{3}x^2 + O(x^3) \\ x^{-2}\,G(x) &= \frac{a_0}{2} + \frac{a_1}{6}x + \frac{a_2}{12}x^2 + O(x^3) \\ x^{-3}\,\Gamma(x) &= \frac{a_0}{6} + \frac{a_1}{24}x + \frac{a_2}{60}x^2 + O(x^3) \end{aligned}$$

$$J(x) = \left(-1 + \frac{2}{2} - \frac{2}{6}\right)a_0 + \left(-\frac{1}{2} + \frac{2}{6} - \frac{2}{24}\right)a_1\,x + \left(-\frac{1}{6} + \frac{2}{24} - \frac{2}{60}\right)a_2 x^2 + O(x^3)$$

$$J(\varepsilon_n) = -\frac{1}{3}a_0 - \frac{1}{4}a_1\,\varepsilon_n - \frac{7}{60}a_2\,{\varepsilon_n}^2 + O({\varepsilon_n}^3)$$

Tímto, nebo podobným způsobem by jistě bylo možné vyřešit úlohu s obecnou regularizační funkcí g. Z důvodu časové tísně se ovšem autor nakonec rozhodl zvolit konkrétní regularizační funkci, a to:

$$g(x) = \mathrm{e}^{-x}\,, \quad x \in [0, \infty)\,.$$

Můžeme tedy dosadit do J (ještě před použitím Taylorova rozvoje), dostaneme:

$$J = \frac{2}{{\varepsilon_n}^3}\left({\varepsilon_n}^2 + 2\varepsilon_n + 2\right)\mathrm{e}^{-\varepsilon_n}$$

Dosadíme zpět do I:

$$I = \sum_{n=1}^{\infty} 4\pi\left(\tfrac{\pi}{d}n\right)^3 \frac{2}{{\varepsilon_n}^3}\left({\varepsilon_n}^2 + 2\varepsilon_n + 2\right)\mathrm{e}^{-\varepsilon_n} = \underbrace{\sum_{n=1}^{\infty} 4\pi\frac{2}{\varepsilon^3}\left(\varepsilon^2\left(\tfrac{\pi}{d}n\right)^2 + 2\varepsilon\left(\tfrac{\pi}{d}n\right) + 2\right)\mathrm{e}^{-\varepsilon\frac{\pi}{d}n}}_{\text{konverguje stejnoměrně}}$$

$$= \sum_{n=1}^{\infty} 4\pi\frac{2}{\varepsilon^3}\left(\varepsilon^2\frac{\partial^2}{\partial\varepsilon^2} - 2\varepsilon\frac{\partial}{\partial\varepsilon} + 2\right)\mathrm{e}^{-\varepsilon\frac{\pi}{d}n} = 4\pi\frac{2}{\varepsilon^3}\left(\varepsilon^2\frac{\partial^2}{\partial\varepsilon^2} - 2\varepsilon\frac{\partial}{\partial\varepsilon} + 2\right)\sum_{n=1}^{\infty}\mathrm{e}^{-\varepsilon\frac{\pi}{d}n}$$

$$= 4\pi\frac{2}{\varepsilon^3}\left(\varepsilon^2\frac{\partial^2}{\partial\varepsilon^2} - 2\varepsilon\frac{\partial}{\partial\varepsilon} + 2\right)\sum_{n=1}^{\infty}\mathrm{e}^{-\varepsilon\frac{\pi}{d}n} = 4\pi\frac{2}{\varepsilon^3}\left(\varepsilon^2\frac{\partial^2}{\partial\varepsilon^2} - 2\varepsilon\frac{\partial}{\partial\varepsilon} + 2\right)\frac{1}{\mathrm{e}^{\frac{\varepsilon\pi}{d}} - 1}$$

Použili jsme fakt, že sčítaný výraz jako funkce ε konverguje lokálně stejnoměrně na $(0,\infty)$ při $n \to \infty$. Proto můžeme zaměnit pořadí sumy a derivace pro $\varepsilon \geq \kappa \in \mathbb{R}^+$. Řadu jsme sečetli vzorcem pro součet geometrické řadu. Protože nás zajímá chování kolem $\varepsilon \to 0$, vyjádříme si funkci jako Laurentovu řadu v nule. Dá se ukázat[2], že

$$h(z) := \frac{1}{\mathrm{e}^z - 1} = \frac{1}{z} + \sum_{k=0}^{\infty} \frac{B_{k+1}}{(k+1)!}\, z^k\,,$$

kde B_k jsou Bernouliho čísla: $B_1 = -\frac{1}{2},\ B_2 = \frac{1}{6},\ B_3 = 0,\ B_4 = -\frac{1}{30}$ atd. S pomocí tohoto vyjádření vypočteme požadované derivace.

$$\left(\frac{1}{z}\frac{\partial^2}{\partial z^2} - \frac{2}{z^2}\frac{\partial}{\partial z} + \frac{2}{z^3}\right) h(\alpha z) = \left(\frac{1}{z}\frac{\partial^2}{\partial z^2} - \frac{2}{z^2}\frac{\partial}{\partial z} + \frac{2}{z^3}\right)\left(\frac{1}{\alpha z} + \sum_{k=0}^{\infty} \frac{B_{k+1}}{(k+1)!}\,(\alpha z)^k\right)$$

$$= \frac{(-1)(-2) - 2(-1) + 2}{\alpha z^4} + \frac{1}{z}\sum_{k=0}^{\infty}(k+1)(k+2)\frac{B_{k+3}\,\alpha^{k+2}}{(k+3)!}\, z^k - \frac{2}{z^2}\sum_{k=0}^{\infty}(k+1)\frac{B_{k+2}\,\alpha^{k+1}}{(k+2)!}\, z^k + \frac{2}{z^3}\sum_{k=0}^{\infty}\frac{B_{k+1}\,\alpha^k}{(k+1)!}\, z^k$$

$$= \frac{6}{\alpha z^4} + \sum_{k=0}^{\infty}\frac{\alpha^{k+2}\,B_{k+3}}{k!(k+3)}\, z^{k-1} + \sum_{k=0}^{\infty}\frac{-2\alpha^{k+1}\,B_{k+2}}{k!(k+2)}\, z^{k-2} + \sum_{k=0}^{\infty}\frac{2\alpha^k\,B_{k+1}}{(k+1)!}\, z^{k-3}$$

$$= \frac{6}{\alpha z^4} + \frac{2B_1}{z^3} + \frac{-2\alpha B_2}{3z^2} + \frac{2\alpha B_2}{3z^2} + \sum_{k=0}^{\infty}\frac{\alpha^{k+2}\,B_{k+3}}{k!(k+3)}\, z^{k-1} + \sum_{k=1}^{\infty}\frac{-2\alpha^{k+1}\,B_{k+2}}{k!(k+2)}\, z^{k-2} + \sum_{k=2}^{\infty}\frac{2\alpha^k\,B_{k+1}}{(k+1)!}\, z^{k-3}$$

$$= \frac{6}{\alpha z^4} - \frac{1}{z^3} + \sum_{k=-1}^{\infty}\frac{\alpha^{k+3}\,B_{k+4}}{(k+1)!(k+4)}\, z^k + \sum_{k=-1}^{\infty}\frac{-2\alpha^{k+3}\,B_{k+4}}{(k+2)!(k+4)}\, z^k + \sum_{k=-1}^{\infty}\frac{2\alpha^{k+3}\,B_{k+4}}{(k+4)!}\, z^k$$

$$= \frac{6}{\alpha z^4} - \frac{1}{z^3} + \sum_{k=-1}^{\infty}\left(\frac{1}{(k+1)!(k+4)} + \frac{-2}{(k+2)!(k+4)} + \frac{1}{(k+4)!}\right)\alpha^{k+3}\,B_{k+4}\, z^k$$

$$= \frac{6}{\alpha z^4} - \frac{1}{z^3} + \sum_{k=-1}^{\infty}\frac{k^2+3k+1}{(k+4)!}\,\alpha^{k+3}\,B_{k+4}\, z^k = \frac{6}{\alpha z^4} - \frac{1}{z^3} + \underbrace{(\ldots)B_3}_{0} + \frac{\alpha^3 B_4}{4!} + \sum_{k=1}^{\infty}\frac{k^2+3k+1}{(k+4)!}\,\alpha^{k+3}\,B_{k+4}\, z^k$$

$$= \frac{6}{\alpha z^4} - \frac{1}{z^3} - \frac{\alpha^3}{360} + \sum_{k=1}^{\infty}\frac{k^2+3k+1}{(k+4)!}\,\alpha^{k+3}\,B_{k+4}\, z^k$$

Dosadíme zpět do I:

$$I(\varepsilon,d) = 8\pi\Big(\frac{d}{\pi}\frac{6}{\varepsilon^4} - \frac{1}{\varepsilon^3} - \frac{\pi^3}{d^3}\frac{1}{360} + O(\varepsilon)\Big) = \frac{48d}{\varepsilon^4} - \frac{8\pi}{\varepsilon^3} + \frac{\pi^4}{45d^2} + O(\varepsilon)$$

Tlak mezi deskmi můžeme vypočítat jako

$$p = \frac{1}{S}\,F = \frac{1}{S}\frac{\partial E}{\partial d} = \frac{\partial}{\partial d}\,\frac{E}{S} = \frac{\partial}{\partial d}\,I\,,$$

tedy

$$p(\varepsilon,d) = \frac{\partial}{\partial d}\,\Big(\frac{48d}{\varepsilon^4} - \frac{8\pi}{\varepsilon^3} + \frac{\pi^4}{45d^2} + O(\varepsilon)\Big) = \frac{48}{\varepsilon^4} - \frac{2\pi^4}{45d^3} + O(\varepsilon)$$

Tento tlak vyjde pro dokonalé vodiče ($\varepsilon \to 0$) nekonečný. Ukazuje se ovšem, že dostaneme konečné číslo, pokud uvážíme tři desky – dvě pevné ve vzdálenosti D a jednu pohyblivou mezi nimi, ve vzdálenosti d od první, přičemž $0 < d \ll D$.

$$I_3(\varepsilon,d,D) := I(\varepsilon,d) + I(\varepsilon,D-d)$$

[2] viz např. `https://math.stackexchange.com/a/3394367/142487`

$$I_3 = \Big(\frac{48d}{\varepsilon^4} - \frac{8\pi}{\varepsilon^3} + \frac{\pi^4}{45d^2} + O(\varepsilon)\Big) + \Big(\frac{48(D-d)}{\varepsilon^4} - \frac{8\pi}{\varepsilon^3} + \frac{\pi^4}{45(D-d)^2} + O(\varepsilon)\Big)$$

$$= \frac{48D}{\varepsilon^4} - \frac{16\pi}{\varepsilon^3} + \frac{\pi^4}{45}\Big(\frac{1}{d^2} + \frac{1}{(D-d)^2}\Big) + O(\varepsilon)$$

Pro tuto hustotu energie bude tlak zjevně konečný.

$$p(\varepsilon, d, D) = \frac{\partial}{\partial d}\left(\frac{48D}{\varepsilon^4} - \frac{16\pi}{\varepsilon^3} + \frac{\pi^4}{45}\Big(\frac{1}{d^2} + \frac{1}{(D-d)^2}\Big) + O(\varepsilon)\right) = \frac{\pi^4}{45}\frac{\partial}{\partial d}\Big(\frac{1}{d^2} + \frac{1}{(D-d)^2}\Big) + O(\varepsilon)$$

$$= \frac{2\pi^4}{45}\Big(-\frac{1}{d^3} + \frac{1}{(D-d)^3}\Big) + O(\varepsilon)$$

Nyní můžeme poslat $\varepsilon \to 0$ a $D \to \infty$. Dostaneme:

$$p(d) = \varpi \lim_{\varepsilon\to 0}\lim_{D\to\infty} p(\varepsilon, d, D) = -\frac{\pi^2}{720}\,\frac{1}{d^3}\,,$$

kde $\varpi = (4\pi)^{-2}$ je magický faktor, který se někde vytratil oproti přednášce (viz poznámka 1). Tento výsledek je v souladu s odvozením ukázaným na přednášce, ale v rozporu například s výsledkem odvození na Wikipedii[3], kde je $-\pi^2/720d^3$ *energie* systému a tlak je derivace z toho, tedy $-\pi^2/240d^4$.

8 Ramseyho interference

8.1 Zadání

Je zadaný hamiltonián systému

$$\hat{H} = \omega_c \hat{a}^+\hat{a} + \omega_a \hat{S}_z - \frac{\Omega}{2}\Big(\hat{a}\hat{S}_+ + \hat{a}^+\hat{S}_-\Big)\,,$$

kde $\hat{S}$ je operátor spinu $1/2$. Nalezněte stacionární stavy a jim odpovídající energetické hladiny.

8.2 Řešení

Budeme pracovat v součinové bázi

$$|\pm n\rangle = |\pm\rangle \otimes |n\rangle\,,$$

přičemž

$$\hat{S}_z\,|\pm n\rangle = \pm\,|\pm n\rangle\,,\quad \hat{S}_\pm\,|\pm n\rangle = 0\,,\quad \hat{S}_\pm\,|\mp n\rangle = |\pm n\rangle\,,$$
$$\hat{a}\,|\pm n\rangle = \sqrt{n}\,\big|\pm(n-1)\big\rangle\,,\quad \hat{a}\,|\pm 0\rangle = 0\,,\quad \hat{a}^+\,|\pm n\rangle = \sqrt{n+1}\,\big|\pm(n+1)\big\rangle\,.$$

Vypočteme působení hamiltoniánu na stavy $|+n\rangle$ a $\big|-(n+1)\big\rangle$:

$$\hat{H}\,|+n\rangle = \Big(\omega_c n + \frac{\omega_a}{2}\Big)\,|+n\rangle + \frac{\Omega}{2}\sqrt{n+1}\,\big|-(n+1)\big\rangle$$
$$\hat{H}\,\big|-(n+1)\big\rangle = \frac{\Omega}{2}\sqrt{n+1}\,|+n\rangle + \Big(\omega_c n + \frac{\omega_a}{2}\Big)\,\big|-(n+1)\big\rangle$$

Vidíme, že je hamiltonián blokově diagonální, stačí diagonalizovat jednotlivé podprostory $V_n = \mathrm{span}\Big\{|+n\rangle\,,\ \big|-(n+1)\big\rangle\Big\}$.

$$M_n = \begin{pmatrix} \omega_c n + \frac{\omega_a}{2} & \frac{\Omega}{2}\sqrt{n+1} \\ \frac{\Omega}{2}\sqrt{n+1} & \omega_c n - \frac{\omega_a}{2} \end{pmatrix}\,,\quad 0 = |M - \lambda\mathbb{1}| = \Big(\omega_c n + \frac{\omega_a}{2} - \lambda\Big)\Big(\omega_c n - \frac{\omega_a}{2} - \lambda\Big)\frac{\Omega^2}{2}(n+1)$$

Vyřešením dostaneme pro každé n dvě energetické hladiny:

$$E_{\pm n} = \frac{\omega_c(1+2n)}{2} \pm \frac{1}{2}\sqrt{(\omega_c - \omega_a)^2 + \Omega^2(n+1)}\,.$$

[3]dostupné na `https://en.wikipedia.org/wiki/Casimir_effect#Derivation_of_Casimir_effect_assuming_zeta-regularization`