

# Úvod do kvantové mechaniky: Domácí úkoly z přednášek

Michal Grňo

5. 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:

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

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

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

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

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

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

Normalizované vlastní stavy jsou tedy:

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

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

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

## 2 Rabiho metoda

### 2.1 Zadání

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

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

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

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

### 2.2 Řešení

Hamiltonián systému je

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

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

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

Navíc víme, že

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

Podobně rozložíme  $\vec{B}$ :

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

Nyní můžeme vyjádřit hamiltonián ve tvaru

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

tedy v maticové formě

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

Nyní se můžeme pustit do řešení samotné Schrödingerovy rovnice.

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

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

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

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

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

Z rovnice (2):

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

$\Downarrow$

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

Máme tedy rovnici typu

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

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

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

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

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

Pro  $c_+$  tedy dostáváme:

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

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

Dosazením do (2) získáme:

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

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

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

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

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

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

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

### 3 $\mathcal{PT}$ -symetrický hamiltonián

#### 3.1 Zadání

Máme zadány operátory

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

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

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

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

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

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

Definujeme operátor

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

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

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

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

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

#### 3.2 Řešení

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Dokážeme čtvrtý bod zadání:

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

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

Nyní přistoupíme k odvození relace úplnosti a skalárního součinu.

$$\begin{aligned}
\sum_n (-1)^n |n\rangle \langle n| \hat{\mathcal{P}} &= (|+\rangle \langle +| - |-\rangle \langle -|) \hat{\mathcal{P}} \\
(2 \cos t) |\pm\rangle \langle \pm| \hat{\mathcal{P}} &= \begin{pmatrix} \frac{i \sin t}{\sqrt{1 \mp \cos t}} \\ \sqrt{1 \mp \cos t} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{i \sin t}{\sqrt{1 \mp \cos t}} \\ \sqrt{1 \mp \cos t} \end{pmatrix}^+ \begin{pmatrix} 1 & \\ & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\sin^2 t}{1 \mp \cos t} & i \sin t \\ -i \sin t & 1 \mp \cos t \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & \\ & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\sin^2 t}{1 \mp \cos t} & -i \sin t \\ -i \sin t & -1 \pm \cos t \end{pmatrix} \\
\sum_n (-1)^n |n\rangle \langle n| \hat{\mathcal{P}} &= \frac{1}{2 \cos t} \begin{pmatrix} \frac{\sin^2 t}{1 - \cos t} & -i \sin t \\ -i \sin t & -1 + \cos t \end{pmatrix} - \frac{1}{2 \cos t} \begin{pmatrix} \frac{\sin^2 t}{1 + \cos t} & -i \sin t \\ -i \sin t & -1 - \cos t \end{pmatrix} = \frac{1}{2 \cos t} \begin{pmatrix} \frac{\sin^2 t (2 \cos t)}{1 - \cos^2 t} & 0 \\ 0 & 2 \cos t \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & \\ & 1 \end{pmatrix} \\
\hat{\mathcal{C}} = \sum_n |n\rangle \langle n| \hat{\mathcal{P}} &= \frac{1}{2 \cos t} \begin{pmatrix} \frac{\sin^2 t}{1 - \cos t} & -i \sin t \\ -i \sin t & -1 + \cos t \end{pmatrix} + \frac{1}{2 \cos t} \begin{pmatrix} \frac{\sin^2 t}{1 + \cos t} & -i \sin t \\ -i \sin t & -1 - \cos t \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sec t & -i \operatorname{tg} t \\ -i \operatorname{tg} t & -\sec t \end{pmatrix}
\end{aligned}$$

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

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

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

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

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

## 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

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

Nalezněte energie stacionárních stavů.

Dále uvažujte, spin-1 částici se spinem orientovaným ve směru osy  $z$  a vypočtěte  $\left| \langle +z | 0\vec{n} \rangle \right|^2$  (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

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

nalezněte energie stacionárních stavů.

### 4.2 Řešení

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

$$|\pm\pm\rangle := |\pm z_e\rangle \otimes |\pm z_p\rangle.$$

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

$$\hat{H} = A \hat{S}^{e+} \cdot \hat{S}^{e-} + B \hat{S}^2 = A \frac{1}{2} (\hat{S}_+^e \hat{S}_-^p + \hat{S}_-^e \hat{S}_+^p) + A \hat{S}_z^e \hat{S}_z^p - K_e B \hat{S}_z^e - K_p B \hat{S}_z^p$$

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

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

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

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

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

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

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

$$\lambda = \frac{-2\alpha \pm \sqrt{4\alpha^2 - 4(-3\alpha^2 - \beta^2)}}{2} = -\alpha \pm \sqrt{4\alpha^2 + \beta^2} = -\frac{A}{4} \pm \frac{1}{2} \sqrt{A^2 + B^2 (K_e - K_p)^2}$$

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

$E_0$	$-\frac{A}{4} - \frac{1}{2} \sqrt{A^2 + B^2 (K_e - K_p)^2}$
$E_1$	$-\frac{A}{4} + \frac{1}{2} \sqrt{A^2 + B^2 (K_e - K_p)^2}$
$E_2$	$+\frac{A}{4} - \frac{B}{2} (K_e + K_p)$
$E_3$	$+\frac{A}{4} + \frac{B}{2} (K_e + K_p)$

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

$$|\pm\pm\rangle := |\pm z_{e^+}\rangle \otimes |\pm z_{e^-}\rangle ,$$

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

$$\hat{X} := \hat{S}^{e^-}, \quad \hat{Y} := \hat{S}^{e^+}$$

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

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

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

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

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

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

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

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

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



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

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

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

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

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

Spočítejte energie stacionárních stavů. Ukažte, že operátor  $\hat{J} = \hat{\vec{S}} + \hat{\vec{L}}$  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

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

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 součinnou bází vlastních stavů operátorů  $\hat{S}_z, \hat{L}_z$ :

$$\begin{aligned} |\pm\pm\rangle &:= |\pm_S\rangle \otimes |1, \pm 1_L\rangle \\ |\pm 0\rangle &:= |\pm_S\rangle \otimes |1, 0_L\rangle \end{aligned}$$

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

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

$$\hat{H} |++\rangle = \left( \frac{A}{2} (\hat{S}_+ \hat{L}_- + \hat{S}_- \hat{L}_+) + A \hat{S}_z \hat{L}_z \right) |++\rangle = \left( \frac{A}{2} (0\sqrt{2} + 0) + A (+1/2)(+1) \right) |++\rangle = \frac{A}{2} |++\rangle$$

$$\hat{H} |--\rangle = \left( \frac{A}{2} (\hat{S}_+ \hat{L}_- + \hat{S}_- \hat{L}_+) + A \hat{S}_z \hat{L}_z \right) |--\rangle = \left( \frac{A}{2} (0 + 0\sqrt{2}) + A (-1/2)(-1) \right) |--\rangle = \frac{A}{2} |--\rangle$$

$$\hat{H} | +0 \rangle = \left( \frac{A}{2} (\hat{S}_+ \hat{L}_- + \hat{S}_- \hat{L}_+) + A \hat{S}_z \hat{L}_z \right) | +0 \rangle = \frac{A}{2} (0 + \sqrt{2} | -+ \rangle) + A (1/2) 0 = \sqrt{2} \frac{A}{2} | -+ \rangle = \frac{A}{\sqrt{2}} | -+ \rangle$$

$$\hat{H} | -0 \rangle = \left( \frac{A}{2} (\hat{S}_+ \hat{L}_- + \hat{S}_- \hat{L}_+) + A \hat{S}_z \hat{L}_z \right) | -0 \rangle = \frac{A}{2} (\sqrt{2} | + - \rangle + 0) + A (1/2) 0 = \sqrt{2} \frac{A}{2} | + - \rangle = \frac{A}{\sqrt{2}} | + - \rangle$$

$$\hat{H} | + - \rangle = \left( \frac{A}{2} (\hat{S}_+ \hat{L}_- + \hat{S}_- \hat{L}_+) + A \hat{S}_z \hat{L}_z \right) | + - \rangle = \frac{A}{2} (0 + \sqrt{2} | -0 \rangle) + A (+1/2)(-1) | + - \rangle = \frac{A}{\sqrt{2}} | -0 \rangle - \frac{A}{2} | + - \rangle$$

$$\hat{H} | - + \rangle = \left( \frac{A}{2} (\hat{S}_+ \hat{L}_- + \hat{S}_- \hat{L}_+) + A \hat{S}_z \hat{L}_z \right) | - + \rangle = \frac{A}{2} (\sqrt{2} | +0 \rangle + 0) + A (-1/2)(+1) | - + \rangle = \frac{A}{\sqrt{2}} | +0 \rangle - \frac{A}{2} | - + \rangle$$

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

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

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  $|A\rangle, |B\rangle$ .

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

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

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

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

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

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

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:

$$|3/2, +3/2\rangle := |++\rangle,$$

$$|3/2, +1/2\rangle := |B\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}(\sqrt{2}|+0\rangle + |-+\rangle),$$

$$|3/2, -1/2\rangle := |D\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}(\sqrt{2}|-0\rangle + |+-\rangle),$$

$$|3/2, -3/2\rangle := |--\rangle,$$

$$|1/2, +1/2\rangle := |A\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}(|+0\rangle - \sqrt{2}|-+\rangle),$$

$$|1/2, -1/2\rangle := |C\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}(|-0\rangle - \sqrt{2}|+-\rangle).$$

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

$$[\hat{S}_j, \hat{H}] = A [\hat{S}_j, \hat{S} \cdot \hat{L}] = A \sum_k [\hat{S}_j, \hat{S}_k \hat{L}_k] = A \sum_k [\hat{S}_j, \hat{S}_k] \hat{L}_k + A \sum_k \hat{S}_k [\hat{S}_j, \hat{L}_k] = A \sum_k i \varepsilon_{jkl} \hat{S}_\ell \hat{L}_k$$

$$[\hat{L}_j, \hat{H}] = A [\hat{L}_j, \hat{S} \cdot \hat{L}] = A \sum_k [\hat{L}_j, \hat{S}_k \hat{L}_k] = A \sum_k [\hat{L}_j, \hat{S}_k] \hat{L}_k + A \sum_k \hat{S}_k [\hat{L}_j, \hat{L}_k] = A \sum_k i \varepsilon_{jkl} \hat{S}_k \hat{L}_\ell$$

$$[\hat{J}_j, \hat{H}] = [\hat{S}_j, \hat{H}] + [\hat{L}_j, \hat{H}] = A \sum_k i \varepsilon_{jkl} \hat{S}_\ell \hat{L}_k + A \sum_k i \varepsilon_{jkl} \hat{S}_k \hat{L}_\ell = A \sum_k i \underbrace{(\varepsilon_{jkl} + \varepsilon_{jlk})}_0 \hat{S}_\ell \hat{L}_k = 0$$

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

$$\hat{J}^2 |3/2, m\rangle = 3/2 (3/2 + 1) |3/2, m\rangle, \quad \hat{J}^2 |1/2, m\rangle = 1/2 (1/2 + 1) |1/2, m\rangle, \quad \forall m = -\frac{3}{2}, \dots, \frac{3}{2}.$$

Nakonec nalezneme vlastní čísla hamiltoniánu

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

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

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

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

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

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

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

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

$$\begin{array}{lll} \hat{H}_0 |++\rangle = \frac{A}{2} |++\rangle & \hat{H}_0 |--\rangle = \frac{A}{2} |--\rangle & \hat{H}_0 |+-\rangle = \frac{A}{\sqrt{2}} |-0\rangle - \frac{A}{2} |+-\rangle \\ \hat{H}_0 |+0\rangle = \frac{A}{\sqrt{2}} |-+\rangle & \hat{H}_0 |-0\rangle = \frac{A}{\sqrt{2}} |+-\rangle & \hat{H}_0 |-+\rangle = \frac{A}{\sqrt{2}} |+0\rangle - \frac{A}{2} |-+\rangle \end{array}$$

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

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

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

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

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

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

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

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

$$E = \frac{1}{4} \left( -A - BK \pm (3A - BK) \right)$$

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

Dostáváme tedy šest nedegenerovaných energetických hladin:

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