# Quantum Mechanics Seminars

Sergey Barseghyan

30 сентября 2019 г.

## 1 Семинар 1

**Упражнение 1.1.** *Покажите, что унитарные матрицы, как и эрмитовы, диагонализуемы. Указание: покажите, что эрмитова и анти-эрмитова часть унитарного оператора диагонализуемы совместно*

**Решение.**

$$U^\dagger U = UU^\dagger = I$$

*Матрица $A$ диагонализируема если*

$$\exists P: \; P^{-1}AP = \begin{pmatrix} \lambda_1 & & & \\ & \lambda_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & \lambda_n \end{pmatrix}$$

$$U = A + B = \underbrace{\frac{U+U^\dagger}{2}}_{\text{эрмитова}} + \underbrace{\frac{U-U^\dagger}{2}}_{\text{антиэрмитова}}$$

*Две матрицы $A$ и $B$ совместно диагонализируемы* $\leftrightarrow [A{,}B] = 0$

$$[A{,}B] = \frac{1}{4}\left(\left(U+U^\dagger\right)\left(U-U^\dagger\right) + \left(U-U^\dagger\right)\left(U+U^\dagger\right)\right)$$
$$= \frac{1}{4}\left(UU + U^\dagger U - UU^\dagger - U^\dagger U^\dagger\right) - \frac{1}{4}\left(UU - U^\dagger U + UU^\dagger - U^\dagger U^\dagger\right) = 0$$

**Упражнение 1.2.** *В квантовой механике замена базиса реализуется унитарными преобразованиями* $|\psi'\rangle = \hat{U}|\psi\rangle$

1. *Покажите, что гамильтониан при этом заменяется на* $\hat{H}' = \hat{U}\hat{H}\hat{U}^\dagger$
2. *Последнее утверждение необходимо модифицировать, если унитарное преобразование зависит явно от времени* $\hat{U} = \hat{U}(t)$. *Покажите, что в таком случае гамильтониан необходимо заменить на* $\hat{H}' = \hat{U}\hat{H}\hat{U}^\dagger - i\hat{U}\partial_t\hat{U}^\dagger$

**Решение.** *1.*

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi\rangle = \hat{H}|\psi\rangle$$

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\hat{U}^\dagger|\psi'\rangle = \hat{H}\hat{U}^\dagger|\psi'\rangle$$

$$i\hbar\hat{U}\hat{U}^\dagger\frac{\partial}{\partial t}|\psi'\rangle = \hat{U}\hat{H}\hat{U}^\dagger|\psi'\rangle$$

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\left|\psi'\right\rangle = \hat{U}\hat{H}\hat{U}^\dagger\left|\psi'\right\rangle$$

$$\hat{H}' = \hat{U}\hat{H}\hat{U}^\dagger$$

2. *Если же* $\hat{U} = \hat{U}(t)$

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\hat{U}^\dagger(t)\left|\psi'\right\rangle = i\hbar\left(\hat{U}^\dagger\partial_t\left|\psi'\right\rangle + \partial_t\hat{U}^\dagger\left|\psi'\right\rangle\right)$$

$$i\hbar\hat{U}\frac{\partial}{\partial t}\hat{U}^\dagger(t)\left|\psi'\right\rangle = i\hbar\left(\hat{U}\hat{U}^\dagger\partial_t\left|\psi'\right\rangle + \hat{U}\partial_t\hat{U}^\dagger\left|\psi'\right\rangle\right)$$

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\left|\psi'\right\rangle = \left(\hat{U}\hat{H}\hat{U}^\dagger - i\hbar\hat{U}\partial_t\hat{U}^\dagger\right)\left|\psi'\right\rangle$$

$$\hat{H}' = \hat{U}\hat{H}\hat{U}^\dagger - i\hbar\hat{U}\partial_t\hat{U}^\dagger$$

**Упражнение 1.3.** *Покажите следующие свойства матриц Паули (по повторяющимся индексам подразумевается суммирование):*

1. *Они, совместно с единичной матрицей* $\sigma^0 = \hat{\mathbb{I}}_{2\times 2}$*, представляют собой базис в пространстве эрмитовых матриц* $2 \times 2$.

2. *Они удовлетворяют следующими правилами перемножения:*

$$\hat{\sigma}^\alpha\hat{\sigma}^\beta = \delta_{\alpha\beta}\hat{\mathbb{I}} + i\epsilon_{\alpha\beta\gamma}\hat{\sigma}^\gamma\,(\alpha,\beta,\gamma \in \{x,y,z\}, \epsilon_{\alpha\beta\gamma} - \text{символ Леви-Чевиты })$$

3. *Они удобно экспоненциируются:* $\exp\left(ian_\alpha\hat{\sigma}^\alpha\right) = \cos a + in_\alpha\hat{\sigma}^\alpha\sin a$ *(тут* $\boldsymbol{n}$ *— произвольный единичный вектор). Указание: разложите экспоненту в ряд; из-за простого правила произведения матриц Паули, произвольные степени от их линейных комбинаций вычисляются достаточно просто*

**Решение.** 1. $M \in M_2(\mathbb{C})$ $M = \begin{pmatrix} z_{11} & z_{12} \\ z_{21} & z_{22} \end{pmatrix}$, *где* $z_{ij} \in \mathbb{C}$

$$\sigma_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$c_\mu \in \mathbb{C}$$

*Докажем линейную независимость*

$$c_0\sigma_0 + c_1\sigma_1 + c_2\sigma_2 + c_3\sigma_3 = \mathbf{o}$$

$$\begin{pmatrix} c_0 + c_3 & c_1 - ic_2 \\ c_1 + ic_2 & c_0 - c_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

*Это система имеет имеет только тривиальное решение*

$$c_0 = c_1 = c_1 = c_3 = 0$$

*Теперь покажем что они покрывают всё пространство* $M_2(\mathbb{C})$

$$M = c_0 I + c_1\sigma_1 + c_2\sigma_2 + c_3\sigma_3$$

$$\begin{pmatrix} c_0 + c_3 & c_1 - ic_2 \\ c_1 + ic_2 & c_0 - c_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} z_{11} & z_{12} \\ z_{21} & z_{22} \end{pmatrix}$$

$$c_0 + c_3 = z_{11}, c_0 - c_3 = z_{22}, c_1 - ic_2 = z_{12}, c_1 + ic_2 = z_{21}$$

$$c_0 = \frac{1}{2}\left(z_{11} + z_{22}\right), c_1 = \frac{1}{2}\left(z_{12} + z_{21}\right), c_2 = \frac{1}{2}i\left(z_{12} - z_{21}\right), c_3 = \frac{1}{2}\left(z_{11} - z_{22}\right)$$

*2. Проверим*

$$\sigma_x\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}\delta_{11} + i\varepsilon_{11\gamma}\hat{\sigma}^{\gamma}$$

$$\sigma_x\sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} i & 0 \\ 0 & -i \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}\delta_{12} + i\varepsilon_{123}\hat{\sigma}_3$$

$$\sigma_y\sigma_z = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & i \\ i & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}\delta_{23} + i\varepsilon_{231}\hat{\sigma}_1$$

$$\sigma_z\sigma_x = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}\delta_{32} + i\varepsilon_{312}\hat{\sigma}_2$$

*3.*

$$(\vec{a}\vec{\sigma})(\vec{b}\vec{\sigma}) = a_i b_k \sigma_i \sigma_k = a_i b_k\left(\delta_{ik} + ie_{ikl}\sigma_l\right) = (\vec{a}\vec{b}) + i[\vec{a}\times\vec{b}]\vec{\sigma}$$

$$(\vec{a}\vec{\sigma})(\vec{a}\vec{\sigma}) = \vec{a}\vec{a} = |\vec{a}|^2$$

$$e^X = \sum_{k=0}^{\infty}\frac{1}{k!}X^k$$

$$\begin{aligned}&(\vec{\sigma}\vec{n})^2 = 1\\ &(\vec{\sigma}\vec{n})^3 = (\vec{\sigma}\vec{n})^2(\vec{\sigma}\vec{n}) = (\vec{\sigma}\vec{n})\\ &(\vec{\sigma}\vec{n})^4 = (\vec{\sigma}\vec{n})^2(\vec{\sigma}\vec{n})^2 = 1\end{aligned}$$

$$\left\{1 + \frac{1}{2!}\left(a\right)^2 + \frac{1}{4!}\left(a\right)^4 - \ldots\right\} + i(\vec{\sigma}\vec{n})\left\{a - \frac{1}{3!}\left(a\right)^3 + \frac{1}{5!}\left(a\right)^5 - \ldots\right\}$$

$$\exp\left(ian_\alpha\hat{\sigma}^\alpha\right) = \cos a + in_\alpha\hat{\sigma}^\alpha\sin a$$

**Задача 1.1.** ***Осцилляции Раби*** *На двухуровневую систему накладывается периодическое поле, которое может вызывать переходы между этой парой уровней:*

$$\hat{H}(t) = \begin{pmatrix} \varepsilon_1 & Ve^{-i\omega t} \\ Ve^{i\omega t} & \varepsilon_2 \end{pmatrix}$$

*В начальный момент времени система находилась в состоянии $|\psi(t=0)\rangle = |\uparrow\rangle$. Определите вероятность обнаружить её в состоянии $|\downarrow\rangle$ через произвольное время $t$. Что происходит при резонансе, когда отстройка частоты $\delta \equiv \varepsilon_1 - \varepsilon_2 - \omega$ обращается в ноль? Указание: покажите, что от зависимости гамильтониана от времени можно избавиться «переходом во вращающуюся систему отсчёта» (rotating wave approximation) — унитарным преобразованием вида $\hat{U}(t) = e^{i\hat{\sigma}_z\omega_0 t}$. Чему равна соответствующая частота $\omega_0$?*

**Решение.** *Для начала преобразуем Гамильтониан.*

$$\hat{H}' = \hat{U}\hat{H}\hat{U}^\dagger - i\hbar\hat{U}\partial_t\hat{U}^\dagger$$

$$\hat{U}(t) = e^{i\hat{\sigma}_z\omega_0 t} = \cos\omega_0 t + i\hat{\sigma}_z \sin\omega_0 t$$

$$\hat{H}' = (\cos\omega_0 t + i\hat{\sigma}_z\sin\omega_0 t)\begin{pmatrix} \varepsilon_1 & Ve^{-i\omega t} \\ Ve^{i\omega t} & \varepsilon_2 \end{pmatrix}(\cos\omega_0 t - i\hat{\sigma}_z\sin\omega_0 t) +$$

$$+i\hbar\omega_0\left(\cos\omega_0 t + i\hat{\sigma}_z\sin\omega_0 t\right)\left(\sin\omega_0 t + i\hat{\sigma}_z\cos\omega_0 t\right)$$

$$\hat{H}' = \begin{pmatrix} \epsilon_1 - \omega_0 & Ve^{it\omega_0 - it\omega + it\omega_0} \\ Ve^{-it\omega_0 + it\omega - it\omega_0} & \omega_0 + \epsilon_2 \end{pmatrix}$$

$$\omega_0 = \frac{\omega}{2}$$

**Задача 1.2.** ***Два спина***

*Найдите уровни энергии и собственные состояния для следующего гамильтониана, описывающего систему двух взаимодействующих спинов 1/2:*

$$\hat{H} = -J\left(\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2\right) = -J\left(\sigma_1^x \sigma_2^x + \sigma_1^y \sigma_2^y + \sigma_1^z \sigma_2^z\right)$$

**Решение.** *Будем решать*

$$\hat{H}\left|\psi\right\rangle = E\left|\psi\right\rangle \qquad \psi \in \mathbb{H} = \mathbb{H}_1 \otimes \mathbb{H}_2$$

$$\hat{H}\left|\psi_1\right\rangle\left|\psi_2\right\rangle = E\left|\psi_1\right\rangle\left|\psi_2\right\rangle \qquad \left|\psi\right\rangle \in \mathbb{H} = \mathbb{H}_1 \otimes \mathbb{H}_2$$

*Выберем базис*

$$\left|\uparrow\uparrow\right\rangle, \left|\uparrow\downarrow\right\rangle, \left|\downarrow\uparrow\right\rangle, \left|\downarrow\downarrow\right\rangle$$

$$\begin{pmatrix} \left|\uparrow\uparrow\right\rangle \\ \left|\uparrow\downarrow\right\rangle \\ \left|\downarrow\uparrow\right\rangle \\ \left|\downarrow\downarrow\right\rangle \end{pmatrix}$$

$$\hat{H} = \sigma_1^x \otimes \sigma_2^x + \sigma_1^y \otimes \sigma_2^y + \sigma_1^z \otimes \sigma_2^z$$

$$\hat{H} = -J\left(\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}\right) =$$

$$= -J\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & 0 \\ 0 & 2 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

*Собственные состояния*

$$-J\begin{pmatrix} 0 & -1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \left|\uparrow\uparrow\right\rangle \\ \left|\uparrow\downarrow\right\rangle \\ \left|\downarrow\uparrow\right\rangle \\ \left|\downarrow\downarrow\right\rangle \end{pmatrix}$$

$$\left|1\right\rangle = \frac{\left|\uparrow\downarrow\right\rangle - \left|\downarrow\uparrow\right\rangle}{\sqrt{2}} \qquad E = -3$$

$$\left|2\right\rangle = \left|\downarrow\downarrow\right\rangle \qquad E = 1$$

$$\left|3\right\rangle = \frac{\left|\uparrow\downarrow\right\rangle + \left|\downarrow\uparrow\right\rangle}{\sqrt{2}} \qquad E = 1$$

$$\left|4\right\rangle = \left|\uparrow\uparrow\right\rangle \qquad E = 1$$

# 2 Семинар 2

**Упражнение 2.1.** *Вычислите среднее значение спина* $\langle \boldsymbol{S} \rangle$ *и его дисперсию* $\langle (\boldsymbol{S} - \langle \boldsymbol{S} \rangle)^2 \rangle$ *для чистого* $|\chi\rangle = (|{\uparrow}\rangle + |{\downarrow}\rangle)/\sqrt{2}$ *2 и смешанного* $\hat{\rho} = \left(\hat{\mathbb{P}}_\uparrow + \hat{\mathbb{P}}_\downarrow\right)/2$ *состояний спина* $1/2$*. Комментарий: первая величина — это вектор, а вторая — это скаляр, длина вектора. Указание: Для частицы со спином* $1/2$ *2 (например, электрон) оператор спина а (собственного момента) равен* $\hat{\boldsymbol{S}} = (\hbar/2)\hat{\boldsymbol{\sigma}}$ *(то есть* $\hat{S}_x = (\hbar/2)\hat{\sigma}_x$ *и т. д.).*

**Решение.** $\langle \boldsymbol{S} \rangle = \langle \chi | \hat{\boldsymbol{S}} | \chi \rangle = \dfrac{\hbar}{2} \cdot \dfrac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{\sigma}_x \\ \hat{\sigma}_y \\ \hat{\sigma}_z \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$

$$\left\langle (\boldsymbol{S} - \langle \boldsymbol{S} \rangle)^2 \right\rangle = \langle \chi | (\boldsymbol{S} - \langle \boldsymbol{S} \rangle)^2 | \chi \rangle = \frac{\hbar^2}{4 \cdot 2} \begin{pmatrix} 1 & 1 \end{pmatrix} \left((\hat{\sigma}_x - 1)^2 + \hat{\sigma}_y^2 + \hat{\sigma}_z^2\right) \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$\frac{\hbar^2}{4 \cdot 2} \begin{pmatrix} 1 & 1 \end{pmatrix} (3\mathbb{I} - 2\hat{\sigma}_x + 1) \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{\hbar^2}{2}$$

$$\hat{\rho} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\operatorname{Tr} \hat{\rho} \hat{\boldsymbol{S}} = \frac{\hbar}{2} \operatorname{Tr} \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{\sigma}_x \\ \hat{\sigma}_y \\ \hat{\sigma}_z \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \operatorname{Tr} \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix} \\ \operatorname{Tr} \begin{pmatrix} \frac{i}{2} & -\frac{i}{2} \\ \frac{i}{2} & -\frac{i}{2} \end{pmatrix} \\ \operatorname{Tr} \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix} \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\operatorname{Tr} \hat{\rho} \, (\boldsymbol{S} - \langle \boldsymbol{S} \rangle)^2 = \operatorname{Tr} \hat{\rho} \left((\hat{\sigma}_x - 1)^2 + \hat{\sigma}_y^2 + \hat{\sigma}_z^2\right) = \operatorname{Tr} \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 & -1 \\ -1 & 2 \end{pmatrix} = \frac{\hbar^2}{2}$$

**Задача 2.1.** *Блоховское представление двухуровневой системы*

1. *Покажите, что матрицу плотности произвольной двухуровневой системы самого общего вида можно разложить по матрицам Паули в следующем виде:*

$$\hat{\rho} = \frac{1}{2}(\hat{\mathbb{I}} + \hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \boldsymbol{n})$$

2. *При каком условии на* $\boldsymbol{n}$*, эта матрица плотности описывает чистое состояние?*

3. *Вычислите средние значения* $\langle \hat{\sigma}_{x,y,z} \rangle$ *по состоянию, описываемому такой матрицей плотности.*

**Решение.** *1.*

$$\hat{\rho} = \sum_\alpha p_\alpha |\alpha\rangle \langle \alpha|$$

*Так как* $\hat{\rho} = \hat{\rho}^\dagger$ *тогда* $\hat{\rho}$ *можно раложить по базису*

$$\hat{\rho} = \hat{\boldsymbol{\sigma}} \boldsymbol{n} + n_0 \sigma^0 \qquad \operatorname{Tr} \hat{\rho} = 1$$

$$\operatorname{Tr} \hat{\sigma}^i = 0 \qquad i \in \{1,2,3\}$$

$$\operatorname{Tr}\hat{\sigma}^0 = 2 \Longrightarrow n_0 = \frac{1}{2}$$

$$\hat{\rho} = \frac{1}{2}\left(\hat{\hat{\sigma}}^0 + n^i\hat{\sigma}_i\right)$$

$$\langle\psi|\,\hat{\rho}\,|\psi\rangle \geq 0 \quad \hat{\rho} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1+n_z & n_x - in_y \\ n_x + in_y & 1-n_z \end{pmatrix}$$

$$\begin{cases} |n_z| \leq 1 \\ 1 - n_z^2 - n_x^2 - n_y^2 \geq 0 \end{cases} \Longrightarrow \vec{n} \in \bar{B}_1(0)$$

*2.*

$$\rho^2 = \rho$$

$$\hat{\rho}^2 = \frac{1}{4}\left(\hat{\sigma}_0 + n_i\hat{\sigma}_i\right)^2 = \frac{1}{4}\left(\left(\overline{n\sigma}\right)^2 + 2\left(n_0\sigma_0\right)\left(\overline{n\sigma}\right) + \left(n_0\sigma_0\right)^2\right) = \frac{1}{4}\hat{\sigma}_0 + \frac{1}{2}n^i\hat{\sigma}_i + \frac{1}{4}(\vec{n})^2\hat{\sigma}_0 =$$

$$= \frac{1}{2}\left(\frac{1+|\vec{n}^2|}{2}\sigma_0 + n^i\sigma_i\right)$$

$$\frac{1+|\vec{n}^2|}{2} = 1 \Longrightarrow |\vec{n}|^2 = 1 \Longleftrightarrow \vec{n} \in \mathbb{S}^2$$

*3.*

$$\langle\sigma_i\rangle = \operatorname{Tr}\left(\frac{1}{2}\left(\hat{\sigma}_0 + n^k\hat{\sigma}_k\right)\hat{\sigma}_i\right)$$

$$\operatorname{Tr}\left(\frac{1}{2}\left(\hat{\sigma}_i + n^k\left(\delta_{ki}\hat{\sigma}_0 + \varepsilon_{kin}\hat{\sigma}_n\right)\right)\right) = n_i$$

$$\langle\hat{\sigma}\rangle = \vec{n}$$