Úloha 1: Kvantové tečky v magetickém poli - řešení

Vojtěch Votruba

15. listopadu 2024

1. podúloha

Abychom obecně ukázali, že se veličina $\hat{R}$ v kvantové mechanice zachovává a je tedy *integrálem pohybu*, stačí ukázat, že $[\hat{R}, \hat{H}] = 0$. Jelikož je náš hamiltonián v této úloze složen direktním součinem z jakési „polohové“ části a spinové části, rozšíříme si operátor $\hat{S}_z$ na operátor $\hat{I} \otimes \hat{S}_z$. Pro studovaný komutátor pak můžeme psát

$$
\begin{aligned}
[\hat{I} \otimes \hat{S}_z, \hat{H}] &= [\hat{I} \otimes \hat{S}_z, a(|L\rangle\langle L| + |P\rangle\langle P|) \otimes \hat{S}_z + b(|L\rangle\langle P| - |P\rangle\langle L|) \otimes \hat{I}] \\
&= a[\hat{I} \otimes \hat{S}_z, (|L\rangle\langle L| + |P\rangle\langle P|) \otimes \hat{S}_z] + b[\hat{I} \otimes \hat{S}_z, (|L\rangle\langle P| - |P\rangle\langle L|) \otimes \hat{I}] \\
&= a\{\cancel{\hat{I}(|L\rangle\langle L| + |P\rangle\langle P|) \otimes \hat{S}_z^2} - \cancel{(|L\rangle\langle L| + |P\rangle\langle P|)\hat{I} \otimes \hat{S}_z^2}\} + b\{\cancel{\hat{I}(|L\rangle\langle P| - |P\rangle\langle L|) \otimes \hat{S}_z\hat{I}} \\
&\qquad - \cancel{(|L\rangle\langle P| - |P\rangle\langle L|)\hat{I} \otimes \hat{I}\hat{S}_z}\} = a\{0\} + b\{0\} = 0.
\end{aligned}
$$

2. podúloha

Střední hodnotu energie v nějakém stavu Ψ_i spočteme obecně jako $\Psi_i \hat{H} \Psi_i$, pro náš konkrétní stav Ψ_1 tedy máme jednoduchým počtem

$$
\begin{aligned}
E_1 = \Psi_1 \hat{H} \Psi_1 &= a\langle L|(|L\rangle\langle L| + |P\rangle\langle P|)|L\rangle\langle\uparrow|\hat{S}_z|\uparrow\rangle + b\langle L|(|L\rangle\langle P| - |P\rangle\langle L|)|L\rangle\langle\uparrow|\hat{I}|\uparrow\rangle \\
&= a\langle L|L\rangle\langle L|L\rangle\frac{\hbar}{2}\langle\uparrow|\uparrow\rangle + b(0)\langle\uparrow|\uparrow\rangle = \frac{a\hbar}{2} = \hbar\omega\cos\alpha
\end{aligned}
$$

a dále trochu složitěji pro stav Ψ_2. Spousta skalárních součinů nám na první pohled díky ortogonalitě zanikne, a proto

$$
\begin{aligned}
E_2 = \Psi_2 \hat{H} \Psi_2 &= a\frac{\hbar}{8}\langle L|L\rangle\langle L|L\rangle\langle\uparrow|\uparrow\rangle + \frac{b}{4}\langle P|P\rangle\langle L|L\rangle\langle\uparrow|\uparrow\rangle - a\frac{\hbar}{8}\langle P|P\rangle\langle P|P\rangle\langle\uparrow|\uparrow\rangle \\
&+ \frac{b}{4}\langle L|L\rangle\langle P|P\rangle\langle\uparrow|\uparrow\rangle - a\frac{\hbar}{8}\langle L|L\rangle\langle L|L\rangle\langle\downarrow|\downarrow\rangle + \frac{b}{4}\langle P|P\rangle\langle L|L\rangle\langle\downarrow|\downarrow\rangle + a\frac{\hbar}{8}\langle P|P\rangle\langle P|P\rangle\langle\downarrow|\downarrow\rangle \\
&+ \frac{b}{4}\langle L|L\rangle\langle P|P\rangle\langle\downarrow|\downarrow\rangle = \frac{a\hbar}{8}(1 - 1 - 1 + 1) + 4\frac{b}{4} = b = \hbar\omega\sin\alpha.
\end{aligned}
$$

3. podúloha

Abychom ukázali, že hamiltonián může být blokově diagonální, zvolíme si poměrně přirozenou bázi sestavenou z direktního součinu báze polohy a báze spinu

$$
\{\Phi_i\} = \{|L\rangle|\uparrow\rangle, |P\rangle|\uparrow\rangle, |L\rangle|\downarrow\rangle, |P\rangle|\downarrow\rangle\},
$$

jednotlivé složky matice hamiltoniánu v této reprezentaci pak spočteme jako $\hat{H}_{ij} = \Phi_i \hat{H} \Phi_j$. Dosazením do definice hamiltoniánu s využitím ortogonality báze tak dostáváme

$$
\hat{H} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}a\hbar & b & 0 & 0 \\ b & -\frac{1}{2}a\hbar & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{1}{2}a\hbar & b \\ 0 & 0 & b & \frac{1}{2}a\hbar \end{pmatrix},
$$

což je zřejmě blokově diagonální tvar. Tuto matici dále máme za úkol diagonalizovat, najít vlastní energie a vlastní stavy. Píšeme tedy

$$\begin{vmatrix} \frac{1}{2}a\hbar - \lambda & b & 0 & 0 \\ b & -\frac{1}{2}a\hbar - \lambda & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{1}{2}a\hbar - \lambda & b \\ 0 & 0 & b & \frac{1}{2}a\hbar - \lambda \end{vmatrix} = 0$$

neboli například pomocí Laplaceova rozvoje ve sloupci

$$\begin{aligned} \left(\frac{1}{2}a\hbar - \lambda\right)\left(-\frac{1}{2}a\hbar - \lambda\right)\left(-\frac{1}{4}a^2\hbar^2 + \lambda^2 - b^2\right) \\ - b^2\left(-\frac{1}{4}a^2\hbar^2 + \lambda^2 - b^2\right) &= \left(-\frac{1}{4}a^2\hbar^2 + \lambda^2 - b^2\right)^2 = 0 \\ \implies \lambda = \pm\sqrt{\frac{a^2\hbar^2}{4} + b^2} &= \pm\sqrt{\frac{4\omega^2\cos^2(\alpha)\hbar^2}{4} + \hbar^2\omega^2\sin^2(\alpha)} = \pm\hbar\omega. \end{aligned}$$

Máme tedy vlastní energie. Co naše vlastní stavy?

$$\hat{H} - \lambda\hat{I} = \hbar\omega\begin{pmatrix} \cos\alpha \mp 1 & \sin\alpha & 0 & 0 \\ \sin\alpha & -\cos\alpha \mp 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\cos\alpha \mp 1 & \sin\alpha \\ 0 & 0 & \sin\alpha & \cos\alpha \mp 1 \end{pmatrix}$$

Z této matice už náhledem dokážeme usoudit, že

$$|\hbar\omega\rangle' = \mathcal{L}\left(\begin{pmatrix} \sin\alpha \\ 1 - \cos\alpha \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \sin\alpha \\ 1 + \cos\alpha \end{pmatrix}\right), \quad |-\hbar\omega\rangle' = \mathcal{L}\left(\begin{pmatrix} \sin\alpha \\ -1 - \cos\alpha \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \sin\alpha \\ -1 + \cos\alpha \end{pmatrix}\right),$$

kde čárka značí nenanormovanost vlastních stavů. Vlastní stavy takto zatím necháme kvůli přehlednosti, normalizaci bychom dopočetli triviálně přes eukleidovskou normu.

4. podúloha

Evoluci obecného stavu Ψ nám udává časová Schrödingerova rovnice

$$-\frac{i}{\hbar}\hat{H}\Psi(t) = \frac{\mathrm{d}\Psi}{\mathrm{d}t} \implies \Psi(t) = \hat{U}(t)\Psi(0), \quad \hat{U}(t) = \exp\left[-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right],$$

kde $\hat{U}(t)$ je hledaný evoluční operátor. Ten bychom mohli počítat v bázi získané v předchozím úkolu, ale zkusme to jinak. Nejprve si uvědomme, že exponenciálu si můžeme vyjádřit ve formě nekonečně řady a tak

$$\hat{U}(t) = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-i)^n}{\hbar^n}\hat{H}^n\frac{t^n}{n!},$$

dále si s výhodou trochu přepišme zadaný hamiltonián. Dosadíme-li za $a = 2\omega\cos\alpha$, za $b = \hbar\omega\sin\alpha$ a za $\hat{S}_z = \frac{1}{2}\hbar\sigma_z$, můžeme ho zapsat jako

$$\hat{H} = \hbar\omega[\cos(\alpha)(|L\rangle\langle L| - |P\rangle\langle P|) \otimes \sigma_z + \sin(\alpha)(|L\rangle\langle P| + |P\rangle\langle L|) \otimes \sigma_z^2],$$

jednoduchým vynásobením můžeme nalézt také čtverec hamiltoniánu

$$
\begin{aligned}
\hat{H}^2 = \hbar^2\omega^2[&\cos^2(\alpha)(|L\rangle\langle L| + |P\rangle\langle P|) \otimes \sigma_z^2 + \cancel{\sin(\alpha)\cos(\alpha)(|L\rangle\langle P| - |P\rangle\langle L|) \otimes \sigma_z^3} \\
&\cancel{+ \sin(\alpha)\cos(\alpha)(-|L\rangle\langle P| + |P\rangle\langle L|) \otimes \sigma_z^3} + \sin^2(\alpha)(|L\rangle\langle L| + |P\rangle\langle P|) \otimes \sigma_z^4] \\
&= \hbar^2\omega^2(|L\rangle\langle L| + |P\rangle\langle P|) \otimes \hat{I} = \hbar^2\omega^2 \hat{I} \otimes \hat{I},
\end{aligned}
$$

kde jsme využili rozklad jedničky do ortogonální báze $\hat{I} = |L\rangle\langle L| + |P\rangle\langle P|$. Dál automaticky můžeme také napsat výraz pro libovolnou $2n$-tou mocninu

$$
\hat{H}^{2n} = \hbar^{2n}\omega^{2n}\hat{I} \otimes \hat{I}.
$$

Vynásobíme-li nyní tento výraz ještě jednou $\hat{H}$ získáme také výraz pro $(2n+1)$-ní mocninu ve tvaru

$$
\hat{H}^{2n+1} = \hbar^{2n}\omega^{2n}(\hat{I} \otimes \hat{I})\hat{H} = \hbar^{2n}\omega^{2n}\hat{H}.
$$

Nyní jsme s pomocnými výpočty hotovi a můžeme zpětně dosadit do řady počítající evoluční operátor

$$
\begin{aligned}
\hat{U}(t) &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-i)^{2n}}{\hbar^{2n}} \hat{H}^{2n} \frac{t^{2n}}{(2n)!} + \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-i)^{2n+1}}{\hbar^{2n+1}} \hat{H}^{2n+1} \frac{t^{2n+1}}{(2n+1)!} \\
&= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{\cancel{\hbar^{2n}}} \cancel{\hbar^{2n}} \omega^{2n} (\hat{I} \otimes \hat{I}) \frac{t^{2n}}{(2n)!} - i \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^{2n}}{\hbar^{2n+1}} \hbar^{2n}\omega^{2n}\hat{H} \frac{t^{2n+1}}{(2n+1)!} \\
&= \cos(\omega t)(\hat{I} \otimes \hat{I}) - \frac{i\hat{H}}{\hbar\omega} \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^{2n} \frac{(\omega t)^{2n+1}}{(2n+1)!} = \cos(\omega t)(\hat{I} \otimes \hat{I}) - i\sin(\omega t)\frac{\hat{H}}{\hbar\omega},
\end{aligned}
$$

s pomocí něj můžeme tedy napsat obecný stav $\Psi(t)$ jako

$$
\Psi(t) = \left(\cos(\omega t) - i\sin(\omega t)\frac{\hat{H}}{\hbar\omega}\right)\Psi(0).
$$

5. podúloha

Pro čas $t = 0$ je výpočet poměrně přímočarý, stačí spočítat vhodné kvadráty absolutních hodnot skalárních součinů

$$
\begin{aligned}
p(L, \uparrow, 0) &= |\langle L|\langle\uparrow|\Psi_2|^2 = |\frac{1}{2}\langle L|L\rangle\langle\uparrow|\uparrow\rangle|^2 = \frac{1}{4}, \\
p(P, \uparrow, 0) &= |\langle P|\langle\uparrow|\Psi_2|^2 = |\frac{1}{2}\langle L|L\rangle\langle\downarrow|\downarrow\rangle|^2 = \frac{1}{4}.
\end{aligned}
$$

Zajímavější budou pravděpodobnosti v čase $t = \frac{\pi}{2\omega}$. První spočteme jako

$$
\begin{aligned}
p(L, \uparrow, t) = |\langle L|\langle\uparrow|\hat{U}(t)\Psi_2|^2 = |&\frac{1}{2}\cos(\pi/2)\langle L|L\rangle\langle\uparrow|\uparrow\rangle \\
&- i\sin(\pi/2)\langle L|\langle\uparrow|(\frac{1}{2}\cos(\pi/4)|L\rangle \otimes \sigma_z|\uparrow\rangle + \frac{1}{2}\sin(\pi/4)|L\rangle \otimes \sigma_z^2|\uparrow\rangle)|^2 \\
&= |-i(\frac{1}{2}\frac{\sqrt{2}}{2} + \frac{1}{2}\frac{\sqrt{2}}{2})|^2 = \frac{1}{2}
\end{aligned}
$$

a druhou jako

$$
\begin{aligned}
p(P,\uparrow,t) = |\langle P|\langle\uparrow|\hat{U}(t)\Psi_2|^2 = |\frac{1}{2}\cos(\pi/2)\langle P|P\rangle\langle\uparrow|\uparrow\rangle \\
- i\sin(\pi/2)\langle P|\langle\uparrow|(\frac{1}{2}\sin(\pi/4)|P\rangle\otimes\sigma_z^2|\uparrow\rangle - \frac{1}{2}\cos(\pi/4)|P\rangle\otimes\sigma_z|\uparrow\rangle)|^2 \\
= |-i(\frac{1}{2}\frac{\sqrt{2}}{2} - \frac{1}{2}\frac{\sqrt{2}}{2})|^2 = 0.
\end{aligned}
$$