Kvantna mehanika I

Rešene naloge z vaj

Tomaž Rejec

Univerza v Ljubljani
Fakulteta za matematiko on fiziko
Oddelek za fiziko
2013

Zahvaljujem se študentom tretjih letnikov 2006/07, 2007/08, 2008/09 in 2009/10, ki so rokopise rešitev nalog z vaj prelili v računalniško obliko.

Kazalo

Del I

Vezana stanja v 1D

Neskončna potencialna jama

Rok Bohinc

26. februar 2008

- *Pokaži, da imajo lastne funkcije dobro določeno parnost - so ali sode ali lihe, če je potencial sod $V(-x) = V(x)$ in so lastna stanja nedegenerirana*

Napišimo Schrodingerjevo enačbo:

$$(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x))\psi(x) = E\psi(x)$$

Če namesto argumenta x pišemo argument -x in upoštevamo, da je potencial V(x) soda funkcija, dobimo sledečo enačbo:

$$(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x))\psi(-x) = E\psi(-x)$$

Očitno imata funkciji $\psi(x)$ in $\psi(-x)$ enako energijo. Torej sta ti dve funkciji enaki do faktorja z absolutno vrednostjo ena natančno. To pa sledi iz tega, da če hočemo izračunati vrjetnost, da se delec nahaja na nekem območju, moremo vzeti absolutni kvadrat funkcije $\Rightarrow P = \int |\psi(x)|^2 dx$.

Če sedaj predpostavimo, da stanja niso degenerirana lahko napišemo $\psi(x) = \alpha\psi(-x)$ oziroma $\psi(-x) = \alpha\psi(x)$. Vstavimo $\psi(x)$ iz prve enačbe v drugo dobimo:

$$\psi(-x) = \alpha^2\psi(-x)$$

$$\alpha = \pm 1$$

Naredimo sklep, da če imamo potencial, ki je sod, je lastna funkcija ali soda ali liha.

- *Poišči lastne energije in lastne funkcije delca v neskončni potencialni jami z dolžino a.*

Poiščimo lastne energije E in lastne funkcije $\psi(x)$ neskončne potencialne jame s pomočjo stacionarne Schrodingerjeve:

$$(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+V(x))\psi(x)=E\psi(x)$$

V našem primeru ima potencial sledečo obliko

$$V(x)=\begin{cases} 0; |x|<\frac{a}{2} \\ \infty; sicer \end{cases}$$

Torej, če rešujemo stacionarno Schrodingerjevo enačbo območju $|x|<\frac{a}{2}$ dobimo preprosto diferencialno enačbo oblike:$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi(x,t)=E\Psi(x,t)$, katere rešitve so

$$\psi_1(x)=A\sin kx+B\cos kx \;\; ; \quad k=\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

Sedaj pa upoštevamo, da more biti $\psi(x)=0$ na območju $|x|>\frac{a}{2}$. To ugotovitev pride iz razmisleka, da delec ne more imeti neskončne energije E. Zato moremo nujno postaviti valovno funkcijo na nič, kjer je potenciala neskončna. Edino tako lahko zadušimo člen $V\psi$ v stacionarni Schrodingerjevi enačbi. Tako lahko zapišemo:

$$\psi_2(x)=0; |x|\geq\frac{a}{2}$$

$$\psi \text{ more biti zvezna zato je } \psi_1(\pm\tfrac{a}{2})=0$$

Z upoštevanjem robnih pogojev dobimo $k_n=\frac{\pi}{a}n$, pri čemer more biti n liho število za $\psi_n(x)=Acos(k_nx)$ in sodo število za $\psi_n(x)=Bsin(k_nx)$. Konstanti A in B dobimo iz pogoja, da more biti valovna funkcija normirana:

$$A^2\int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}}\cos^2\frac{2\pi n}{a}x=A^2\frac{a}{2}=1\Rightarrow A=\sqrt{\frac{2}{a}}=B$$

Delec v neskončni potencialni jami z dolžino a ob času t = 0 opišemo z valovno funkcijo

$$\psi(x) = C\left(\cos\frac{\pi x}{a} + \frac{1}{2}\sin\frac{2\pi x}{a}\right).$$

- *Izracčunaj časovni razvoj valovne funkcije.*
- *Kako se s časom spreminja verjetnost, da se delec nahaja v desni polovici potencialne jame?*
- *Izračunaj časovno odvisnost pričakovane vrednosti položaja in gibalne količine delca.*
- *Kako sta ti dve količini povezani?*

Razvijmo najprej funkcijo $\psi(x)$ po lastnih funkcijah $\psi_n(x)$. Hitro lahko opazimo, da je naša funkcija linearna kombinacija prvih dveh lastnih funcij $\psi_1(x)$ in $\psi_2(x)$.

$$\psi(x) = C\left(\sqrt{\frac{a}{2}}\psi_1(x) + \frac{1}{2}\sqrt{\frac{a}{2}}\psi_2(x)\right)$$

Konstanto C določimo s tem, da more biti $\psi(x)$ normirana.

$$C^2\int\left(\frac{a}{2}\psi_1^2 + \frac{a}{4}\psi_1\psi_2 + \frac{a}{8}\psi_2^2\right)\mathrm{d}x = C^2\frac{a}{2}\int\psi_1^2\mathrm{d}x + C^2\frac{a}{8}\int\psi_2^2\mathrm{d}x = C^2\frac{a}{2} + C^2\frac{a}{8} = 1$$

Tu smo upoštevali ortonormiranost lastnih funkcij: integral mešanega člena je nič, integral kvadratov pa ena.

$$C = \sqrt{\frac{8}{5a}}$$

Če hočemo vedeti kako se funkcija razvija s časom potem moremo vsaki lastni funkciji zraven "pripopat"exp $\frac{-iE_n t}{\hbar}$.

$$\Psi(x,t) = \sqrt{\frac{4}{5}}\left(\psi_1(x)e^{\frac{-iE_1}{\hbar}t} + \frac{1}{2}\psi_2(x)e^{\frac{-iE_2 t}{\hbar}t}\right)$$

- *Kako se s časom spreminja verjetnost, da se delec nahaja v desni polovici potencialne jame?*

V splošnem velja $E_m = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2ma^2}$.
Za lažje računanje izrazimo E_2 z $E_1 \rightarrow E_2 = 4E_1$

Da izračunamo kako se s časom spreminja verjetnost, da se delec nahaja v desni polovici potencialne jame, moremo integrirati vrjetnostno gostoto od 0 do a/2.

$$\int_0^{\frac{a}{2}} \Psi^*(x,t)\Psi(x,t)\mathrm{d}x = \frac{4}{5}\int_0^{\frac{a}{2}} \left(\psi_1(x)e^{\frac{iE_1 t}{\hbar}t} + \frac{1}{2}\psi_2(x)e^{\frac{i4E_1 t}{\hbar}t}\right)\left(\psi_1(x)e^{\frac{-iE_1 t}{\hbar}t} + \frac{1}{2}\psi_2(x)e^{\frac{-i4E_1 t}{\hbar}t}\right)\mathrm{d}x =$$

$$\frac{4}{5}\int_0^{\frac{a}{2}} \left(\psi_1^2 + \frac{1}{4}\psi_2^2 + \frac{1}{2}\psi_1\psi_2\left(e^{\frac{-i3E_1 t}{\hbar}t} + e^{\frac{+i3E_1 t}{\hbar}t}\right)\right)\mathrm{d}x =$$

$$\frac{4}{5}\left(\frac{1}{2} + \frac{1}{8} + \cos\left(\frac{3E_1}{\hbar}t\right)\frac{2}{a}\int_0^{\frac{a}{2}} \cos\frac{\pi x}{a}\cdot\sin\frac{2\pi x}{a}\mathrm{d}x\right) =$$

Uporabimo pravilo $\sin 2x = 2\sin x\cos x$ in uvedemo substitucijo $u = \cos\frac{\pi x}{a}$, $\mathrm{d}u = -\frac{\pi}{a}\sin\frac{\pi x}{a}\mathrm{d}x$ in dobimo

$$\frac{1}{2} + \frac{16}{5a}\cos\left(\frac{3E_1}{\hbar}t\right)\int_0^1 \frac{a}{\pi}u^2\mathrm{d}u = \frac{1}{2} + \frac{16}{15\pi}\cos\left(\frac{3E_1}{\hbar}t\right)$$

- *Izračunaj časovno odvisnost pričakovane vrednosti položaja in gibalne količine delca.*

Izračunati moremo naslednja integrala:

$$\langle x \rangle = \int \Psi^*(x,t)\hat{x}\Psi(x,t)\mathrm{d}x$$

$$\langle p \rangle = \int \Psi^*(x,t)\hat{p}\Psi(x,t)\mathrm{d}x$$

pri čemer je $\hat{x} = x$ in $\hat{p} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$

Soda funkcija na simetričnem intervalu da neko končno vrednost, liha pa 0. Pri obeh integralih preživita tako samo mešana člena$C\int \psi_1\psi_2 x dx$, kajti ψ_1 je soda, ψ_2 je liha in x je pravtako liha funkcija, kar da celokupno sodo funcijo. $\frac{\partial}{\partial x}\psi_2$ je soda, ψ_1 je soda, kar da spet sodo funkcijo. Ker je v Latexu zoprno pisat dalše račune bom napisal samo rezultate

$$\langle x \rangle = \frac{64a\cos\left(\frac{3E_1}{\hbar}t\right)}{45\pi^2}$$

$$\langle p \rangle = \frac{32\hbar\sin\left(\frac{3E_1}{\hbar}t\right)}{15a}$$

- *Kako sta ti dve količini povezani?*

$$\langle p \rangle = \frac{\hbar^2\pi^2}{2a^2E_1}\frac{\mathrm{d}\langle x \rangle}{\mathrm{d}t} = m\frac{\mathrm{d}\langle x \rangle}{\mathrm{d}t}$$

Velja torej klasična zveza.

Končna potencialna jama

Mitja Blažinčič

26. mar 2007

Za končno potencialno jamo s širino a in potencialom

$$V(x) = \begin{cases} 0 & , \quad -\frac{a}{2} < x < \frac{a}{2} \\ V_0 & , \quad \text{sicer} \end{cases}$$

1. Poišči transcendentni enačbi, ki določata lastne energije delca v lihih in sodih lastnih stanjih in ju grafično reši.

2. Poišči pogoj za obstoj prvega vzbujenega stanja.

3. Določi lastne energije v limiti $V_0 \to \infty$.

4. Poišči lastne energije in lastne funkcije v limiti $a \to 0$ pri ěmer je $V_0 a$ konstanten.

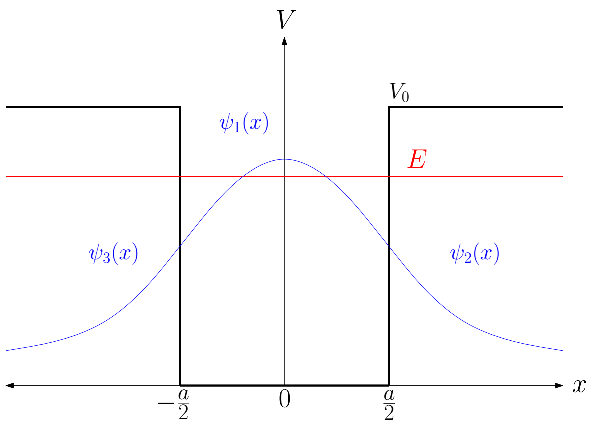


Figure 1: Skica potenciala (črno) in nivo energije E (rdeče). Skicirana je tudi valovna funkcija (modro).

1 Lastne rešitve

Poiščimo najprej vezana lastna stanja ($E < V_0$). Nastavek za rešitev Schrödingerjeve enačbe za ta problem je

$$\begin{aligned} \psi_1(x) &= A\cos(k_1 x) \\ \psi_2(x) &= Be^{-k_2 x} \qquad \text{(sode rešitve)} \\ \psi_3(x) &= Be^{k_2 x}\,, \end{aligned} \tag{1}$$

za sode rešitve, in

$$\begin{aligned} \psi_1(x) &= A\sin(k_1 x) \\ \psi_2(x) &= Be^{-k_2 x} \qquad \text{(lihe rešitve)} \\ \psi_3(x) &= -Be^{k_2 x}\,, \end{aligned} \tag{2}$$

za lihe. Gornja zlepka (en. 1 in 2) dobimo direktno z reševanjem Schrödingerjeve enačbe. Za lastne rešitve zapišemo pogoj

$$H\phi(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi(x)}{\partial x^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x)\,. \tag{3}$$

Na območju 1 uporabimo nastavek za rešitev valovne funkcije ko je $E > V$

$$\psi(x) = A\cos(k_1 x) + B\sin(k_1 x)\,, \qquad k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}\,, \tag{4}$$

(saj $E > V(-\frac{a}{2} < x < \frac{a}{2}) = 0$), le robni pogoji se bodo spremenili. Za območje 2 pa gornjo enačbo (3) razpišemo

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + V_0\psi = E\psi\,.$$

To lahko prepišem v

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi = \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}\psi\,, \qquad E < V_0\,.$$

To diferencialno enačbo reši nastavek

$$\psi_2(x) = Be^{-k_2 x} + Ce^{k_2 x}\,, \qquad k_2 = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}\,. \tag{5}$$

Valovna funkcija je definirana kot tista rešitev Schrödingerjeve enačbe, ki je v kvadratu normalizabilna, tj. $\int \psi^*\psi \mathrm{d}x = 1$ (z izjemo ravnega vala ki ga normaliziramo s tokom), je zvezna in zvezno odvedljiva, torej iz L^2 prostora.

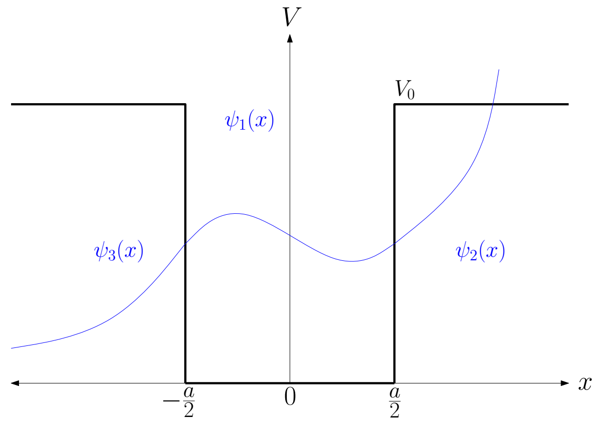


Figure 2: Primer rešitve Schrödingerjeve enačbe, ki ni valovna funkcija.

Robna pogoja sta torej zveznost in zvezna odvedljivost. Tema pogojema, sicer ustrezajo tudi rešitve Schrödingerjeve enačbe oblike (skica na sliki 2)

$$\begin{aligned}\psi_1(x) &= C_1 \sin(k_1 x)\\ \psi_2(x) &= C_2 e^{k_2 x}\\ \psi_3(x) &= C_3 e^{k_2 x}\ ,\end{aligned}$$

vendar ne ustrezajo pogoju normalizabilnosti in zato niso valovne funkcije. Izbrati moramo tak zlepek, da zadostimo temu pogoju. Vemo, da bodo zaradi sodosti potenciala lastne valovne funkcije ali sode ali lihe in ne superpozicija sodih in lihih. Lastne valovne funkcije torej iščemo med rešitvami oblike (en. 2 in 1).
Na meji $a/2$ lahko zapišem pogoj zveznosti

$$A\cos(k_1 x)|_{\frac{a}{2}} = Be^{-k_2 x}|_{\frac{a}{2}} \tag{6}$$

in zvezne odvedljivosti

$$-Ak_1 \sin(k_1 x)|_{\frac{a}{2}} = -Bk_2 e^{-k_2 x}|_{\frac{a}{2}} \tag{7}$$

Da se znebimo koeficientov, enačbi zdelimo in dobimo zvezo

$$k_2 = k_1 \tan(k_1 \frac{a}{2}) \qquad \text{(lihe)}\ . \tag{8}$$

Analogno iz nastacka za lihe rešitve (en. 2) dobimo zvezo

$$k_2 = -k_1 \cot(k_1 \frac{a}{2}) \qquad \text{(lihe)}\ . \tag{9}$$

Iz enačb (4) in (5) lahko zapišemo vsoto za $k_1^2 + k_2^2$, jo pomnožimo z a^2 in dobimo

$$k_1^2 a^2 + k_2^2 a^2 = a^2 \frac{2mV_0}{\hbar^2} .$$

Sedaj proglasim $k_1 a = x$ in $a^2 \frac{2mV_0}{\hbar^2} = x_0^2$ in enačba dobi obliko $k_2^2 a^2 = x_0^2 - x^2$. V to vstavim k_2 (enačbi 8 in 9) in dobim sistem trancendentnih enačb za x

$$\begin{aligned} \tan(\frac{x}{2}) &= \frac{\sqrt{x_0^2 - x^2}}{x} \\ -\cot(\frac{x}{2}) &= \frac{\sqrt{x_0^2 - x^2}}{x} . \end{aligned} \tag{10}$$

Te enačbe nadalje rešujemo z računalnikom, za šolske potrebe pa to rešimo grafično (slika 3). Število rešitev je odvisno od $x_0 = x_0(V, a)$.

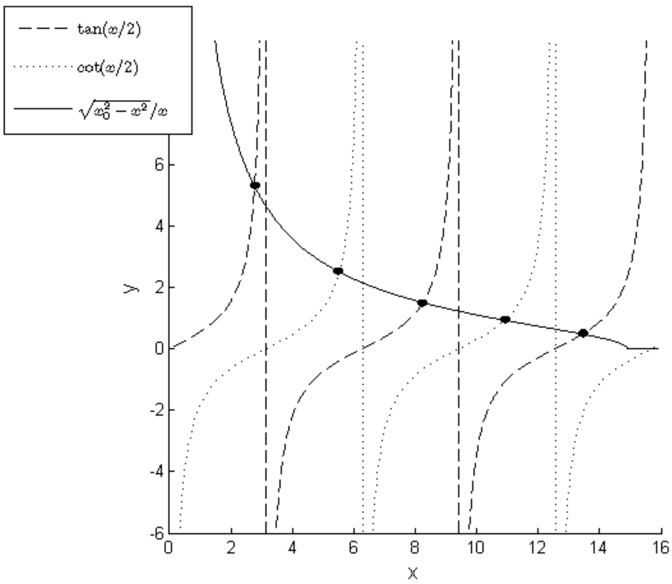


Figure 3: Grafične rešitve transcendentnih enačb označene s črnimi pikami.

2 Pogoj za prvo vzbujeno stanje

Iz slike (3) lahko takoj vidimo, da druga rešitev transcendentnih enačb (tj. prvo vzbujeno stanje) obstaja ob pogoju da je $x_0 > \pi$ oz.

$$a^2 V_0 > \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m} \, .$$

3 Lastne energije v limiti $V_0 \to \infty$

V limiti $V_0 \to \infty$, je problem natanko neskončna potencialna jama. V tej limiti, gre tudi $x_0 \to \infty$, torej gredo rešitve transcendentnih enačb za $\tan(x/2)$ k $x_n \to (2n+1)\pi$ in za $\cot(x/2)$ $x_n \to 2n\pi$. Torej so rešitve za k_1

$$k_1 = \frac{(2n+1)\pi}{a} \, , \qquad n = 0, 1, \ldots \qquad \text{(za sode rešitve)} \tag{11}$$

$$k_1 = \frac{2n\pi}{a} \, , \qquad n = 1, 2, \ldots \qquad \text{(za lihe rešitve)} \, . \tag{12}$$

Iz tega lahko izračunamo energije in ugotovimo, da so enake energijam za neskončno potencialno jamo.

4 Lastne energije v limiti δ funkcije

Sedaj si oglejmo še limito $a \to 0$ pri čemer je $V_0 a$ konstantna. Fizikalna intuicija nam da takoj vedeti, da je to pravzaprav δ funkcija, saj je v limiti potencial neskončno ozek, a s končnim integralom.
V tej limiti gre očitno tudi

$$x_0 = \sqrt{\frac{a^2 2m V_0}{\hbar^2}} \to 0 \, ,$$

saj konstanto $2mV_0 a/\hbar^2$ množimo z a. Obstaja le osnovna rešitev

$$\tan(\frac{x}{2}) = \frac{\sqrt{x_0^2 - x^2}}{x} \, , \tag{13}$$

ki je $x \in (0, x_0)$ in gre zato tudi $x \to 0$. Sedaj zapišem

$$x = x_0 - \epsilon \, .$$

Iz enačbe (13) vidimo, da je $\epsilon << x_0$. Leva stran ($\tan(x/2)$) je v tem režimu zelo majhna. Ker je x v imenovalcu na desni mahjen, mora biti izraz pod

korenom veliko manjši, ali bolje rečeno je $x_0^2 \approx x^2$, torej je $\epsilon << x_0$. Lahko bi rekli, da je x veliko bližje vrednosti x_0 kot 0.
V enačbi (13) lahko desno stran prepišemo v (izpeljava poteka iz leve proti desni)

$$\frac{\sqrt{x_0^2 - x^2}}{x} = \sqrt{\left(\frac{x_0}{x}\right)^2 - 1} = \sqrt{\left(\frac{x_0}{x_0 - \epsilon}\right)^2 - 1} = \sqrt{\left(\frac{1}{1 - \frac{\epsilon}{x_0}}\right)^2 - 1}\,. \quad (14)$$

Ker je $\epsilon << x_0$ lahko razvijem $\frac{1}{1-\epsilon/x_0} \approx 1 + \frac{\epsilon}{x_0}$, to kvadriram in obdržim linearne člene. Levo stran lahko prav tako razvijem $\tan(x) \approx x$ in dobim enačbo

$$\frac{x_0 - \epsilon}{2} = \sqrt{\frac{2\epsilon}{x_0}}\,.$$

Na levi strani lahko ϵ zanemarim in dobim rešitev

$$x = x_0 - \frac{x_0^3}{8}\,.$$

Z upoštevanjem $k_1 a = x$ (noter vstavim izraz za k_1 in zgoraj dobljeni x) dobim za energijo

$$E = \frac{\hbar^2}{2ma^2}\left(x_0 - \frac{x_0^3}{8}\right)^2 \approx \frac{\hbar^2}{2ma^2}\left(x_0^2 - \frac{x_0^4}{4}\right) = V_0\left(1 - \frac{m}{2\hbar^2}a^2V_0\right)\,. \quad (15)$$

Lastna energija je za majhen popravek pod nivojem potenciala. V limiti ψ_1 izgine in ostaneta le eksponentno padajoči ψ_2, ψ_3. V enačbo za k_2 (en. 5) še vstavim gornji približek (en. 15) za energijo in rešitev v tem primeru je

$$\psi(x) = \sqrt{k_2}e^{-k_2|x|}\,, \qquad k_2 = \frac{maV_0}{\hbar^2}\,.$$

Domača naloga- kvantna mehanika 1

Jure Senegačnik

26. februar 2008

Imamo delec v δ potencialu.

$$V(x) = -\lambda\delta(x)$$

Izračunaj vezana stanja!

$$\int_{-\epsilon}^{\epsilon} \delta(x)dx = 1$$

Zaradi simetrije (sodosti) so lastne funkcije (rešitve) spet bodisi sode bodisi lihe. Ker išemo vezana stanja, je energija manjša od potenciala, torej E<0

SODE REŠITVE:

$$\psi = Ae^{-nx} + Be^{nx}$$

Za x $>$ 0 je B $=$ 0, sicer funkcija ne bi bila normalizirana. Rešitev je bodisi soda, bodisi liha.

$$n = \sqrt{\frac{2m(V-E)}{\hbar^2}} = \sqrt{\frac{2m(-E)}{\hbar^2}}$$

Saj je V $=$ 0 skoraj povsod.

$$\psi_1(x) = Ae^{nx} = Ae^{\sqrt{\frac{2m(-E)}{\hbar^2}}x}$$

To je rešitev Schrödingerjeve enačbe (spodaj) za $\forall x < 0$, se pravi levo od „delta špice“.

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + V(x)\psi = E\psi$$

Desno od le te ($x > 0$) pa je rešitev Schrödingerjeve enačbe:

$$\psi_2(x) = Ae^{-nx} = Ae^{-\sqrt{\frac{2m(-E)}{\hbar^2}}x}$$

Ker imamo δ potencial je ψ zvezna, $\frac{\partial\psi}{\partial x}$ pa ne.

ROBNI POGOJI:

$$\psi_1(0) = \psi_2(0) \tag{1}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi^*\psi dx = 1 \tag{2}$$

$$\psi_2'(0) - \psi_1'(0) = \frac{2m}{\hbar^2}\int_{-\infty}^{\infty} V(x)\psi(x)dx = \frac{2m}{\hbar^2}\int_{-\infty}^{\infty} -\lambda\delta(x)\psi dx = -\frac{2m\lambda}{\hbar^2}\psi(0) \tag{3}$$

$$\frac{\partial \psi_2}{\partial x} = -Ane^{-nx}; \frac{\partial \psi_1}{\partial x} = Ane^{nx}$$

$$\psi_2(0) - \psi_1(0) = -An - An = -2An = -\frac{2m\lambda}{\hbar^2}\psi(0)$$

$$n = \frac{m\lambda}{\hbar^2}$$

$$E = -\frac{m\lambda^2}{2\hbar^2}$$

Iz normalizacije sledi $A = \sqrt{n}$

$$\psi(x) = \sqrt{n}e^{-n|x|}; n = \frac{m\lambda}{\hbar}$$

Lihih rešitev ni.

Ali delec krši Heisenbergovo načelo nedoločenosti?

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$$

Nedoločenost lege se izračuna:

$$\Delta x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2}$$

Povprečna lega:

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* x \psi dx = 0$$

ker sem liho funkcijo integriral na sodem intervalu.
Povprečen kvadrat lege:

$$\langle x^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* x^2 \psi dx = 2\int_0^{\infty} ne^{-2nx} x^2 dx =$$

Pri funkciji sem izrabil njeno sodost. Zdaj še uvedem novo spremenljivko: $u = 2nx$, $du = 2ndx$.

$$= 2\int_0^{\infty} \frac{u^2 e^{-u} du}{4n^2} = \frac{\Gamma(3)}{4n^2} = \frac{2!}{4n^2} = \frac{1}{2n^2}$$

Izračunati moram še nedoločenost gibalne količine. Začnem s povprečjem gibalne količine.

$$\langle p \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* (-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}) \psi dx = 0,$$

ker integriram liho funkcijo po sodem intervalu. Nadaljujem z

$$\langle p^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* (-\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2}) \psi dx$$

Najprej izračunajmo odvod

$$\frac{\partial\psi}{\partial x} = -\sqrt{n}ne^{-n|x|}sign(x)$$

kjer je sign(x) funkcija, ki je -1 za negativne x in 1 za pozitivne x, pri 0 pa je 0. Izračunamo še drugi odvod:

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} = n^{\frac{3}{2}}ne^{-n|x|}sign(x) - n^{\frac{3}{2}}e^{-n|x|}2\delta(x)$$

Saj je sign(x)=2H(x)-1 in njen odvod torej $2\delta(x)$. Zdaj to vstavimo v izraz za $< p^2 >$ in dobimo:

$$\langle p^2\rangle = \int_0^\infty (-\hbar^2)n^2e^{-2nx} - 2(-\hbar^2)\int_{-\infty}^\infty n^2e^{-2n|x|}\delta(x)dx$$

Uvedemo novo spremenljivko u = 2nx -> du =2 n dx

$$= \hbar^2(\int_0^\infty e^{-u}du - 2n^2e^0) = n^2\hbar^2$$

$\langle p^2\rangle$ pa se da dobiti tudi po lažji poti. Vemo, da je

$$H = T + V$$

kjer je T kinetična energija $T = \frac{p^2}{2m}$

$$\langle\hat{H}\rangle = \frac{\langle p^2\rangle}{2m} + \langle V(x)\rangle$$

Vemo, da je H seštevek kinetične in potencialne energije, se pravi nekakšna skupna energija delca. Delec ima lahko v takem potencialu le eno možno energijo, ki smo jo prej označili z E. ($\hat{H}\psi = E\psi$)

$$-\frac{m\lambda^2}{2\hbar^2} = \frac{\langle p^2\rangle}{2m} + \int_{-\infty}^\infty -\lambda\delta(x)ne^{-2n|x|}dx$$

$$-\frac{m\lambda^2}{2\hbar^2} = \frac{\langle p^2\rangle}{2m} - \lambda n = \frac{\langle p^2\rangle}{2m} - \frac{m\lambda^2}{\hbar^2}$$

$$\frac{\langle p^2\rangle}{2m} = \frac{m\lambda^2}{2\hbar^2}$$

$$\langle p^2\rangle = \frac{m^2\lambda^2}{\hbar^2} = n^2\hbar^2$$

Zdaj pa to vstavimo v Heisenbergovo neenačbo in poglejmo, da ne dobimo česa premajhnega:

$$\frac{\hbar}{2} \leq \Delta x\Delta p = \frac{n\hbar}{\sqrt{2}n} = \frac{\hbar}{\sqrt{2}}$$

Vidimo, da je produkt nedoločenosti za faktor $\sqrt{2}$ večji od minimalnega dovoljenega.

Del II

Sipanje v 1D

Sipanje na končni potencialni jami (KPJ)

Ajasja Ljubetič

29. marec 2007

1 Sodi potencial in degenerirana stanja

1.1 Naloga

Pokaži, da lahko tudi pri degeneriranih stanjih izberemo sode in lihe lastne funkcije, če je potencial $V(-x) = V(x)$.

1.2 Rešitev

Če je potencial sodi sledi, da je tudi Hamiltonian $\hat{H}(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)$ sodi:

$$\hat{H}(-x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial(-x)^2} + V(-x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial(x)^2} + V(x) = \hat{H}(x) \tag{1.1}$$

Če zapišemo Schrödingerjevo enačbo z Hamiltonianom

$$\hat{H}(x)\psi(x) = E\psi(x)$$

in v enačbi zamenjamo $x \to -x$

$$\hat{H}(-x)\psi(-x) = E\psi(-x)$$

ter uporabimo enačbo (1.1) dobimo

$$\hat{H}(x)\psi(-x) = E\psi(-x)$$

iz česar sledi, da je tudi $\psi(-x)$ rešitev Schrödingerjeve enačbe z enako energijo.

$\psi(x)$ in $\psi(-x)$ sta lahko linearno odvisni ali linearno neodvisni. Če sta linearno odvisni (torej, če imamo nedegenerirano stanje) smo že pri prvi vaji pokazali da mora $\psi(x)$ biti bodisi liha, bodisi soda. Če pa sta $\psi(x)$ in $\psi(-x)$

linearno neodvisni (torej, če imamo degenerirano stanje) potem lahko iz niju tvorimo novo bazo lihih in sodih funkcij:

$$\psi_S(x) = \psi(x) + \psi(-x) \tag{1.2}$$

$$\psi_L(x) = \psi(x) - \psi(-x) \tag{1.3}$$

Tako smo pokazali, da lahko tudi za degenerirana stanja vedno izberemo sode in lihe lastne funkcije.

2 Prepustnost končne potencialne jame

2.1 Naloga

Izračunaj amplitudo za prepustnost končne potencialne jame z globino V_0 in širino a. [1]

2.2 Rešitev

Imamo potencialno jamo, se pravi potencial oblike

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{če } x \leq b & \text{- območje 1} \\ -V_0 & \text{če } |x| < b & \text{- območje 2} \\ 0 & \text{če } x \geq b & \text{- območje 3} \end{cases}$$

Sipanje je zanimivo predvsem za valovne pakete. Valovni paket pa lahko (na srečo) zapišemo kot linearno kombinacijo ravnih valov. Tako da se lahko za potrebe krede in table brez izgube splošnosti omejimo samo na ravne (potujoče) valove.

Prosti val, ki potuje v desno predstavlja e^{ik_1x}, tistega, ki potuje v levo pa e^{-ik_1x}.

$\left(k_1 = k_3 = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}\right)$ Tudi znotraj potencialne jame rešitve že poznamo, to so linearne kombinacije $\sin(k_2x)$ in $\cos(k_2x)$.

$\left(k_2 = \sqrt{\frac{2m(E+V_0)}{\hbar^2}}\right)$

Tako imamo lahko v območji 1 val, ki potuje v levo in val, ki potuje v desno, enako pa velja za območje 3. V splošnem imamo torej valovne funkcije

[1] Rajši sem uvedel novo spremenljivko $a = 2b$ in vzel jamo od $-b$ do b kot pa od $-\frac{a}{2}$ do $\frac{a}{2}$, tako da mi ni treba vleči tistih polovičk vedno sabo. Na koncu pa bom v enačbah ponovno uvedel $a = 2b$.

$$\begin{aligned}\psi_1(x) &= Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x}\\ \psi_2(x) &= C\sin(k_2x) + D\cos(k_2x)\\ \psi_3(x) &= Fe^{ik_3x} + Ge^{-ik_3x}\end{aligned}$$

Vendar pa je dovolj poučen in zanimiv že primer, če prihaja val iz leve in se na potencialu sipa (del se odbije, del pa se prepusti). Tako na desni strani ni vala, ki bi potoval v levo ($G = 0$). Zanima nas prepustnost, ki je definirana kot delež amplitude vala, ki potencial preide. V našem primeru torej:

$$T = \frac{|F|^2}{|A|^2} \tag{2.1}$$

Ker nas zanima samo razmerje, lahko brez škode za splošnost privzamemo, da je $A = 1$. S tem smo "potihem" naredili normalizacijo.

Naše valovne funkcije so torej:

$$\psi_1(x) = e^{ik_1x} + Be^{-ik_1x} \tag{2.2}$$

$$\psi_2(x) = C\sin(k_2x) + D\cos(k_2x) \tag{2.3}$$

$$\psi_3(x) = Fe^{ik_1x} \tag{2.4}$$

Tako nam ostanejo še 4 neznanke (B, C, D, F) katerih vrednosti lahko dobimo iz zahteve, da je celotna valovna funkcja zvezna in zvezno odvedljiva (problematične so samo meje potencialne jame pri $-b$ in b).

$$\begin{aligned}\psi_1(-b) = \psi_2(-b) &\Rightarrow Be^{ik_1b} + C\sin(k_2b) - D\cos(k_2b) = -e^{-ik_1b}\\ \psi_1'(-b) = \psi_2'(-b) &\Rightarrow Bik_1e^{ik_1b} + Ck_2\cos(k_2b) + Dk_2\sin(k_2b) = ik_1e^{-ik_1b}\\ \psi_2(b) = \psi_3(b) &\Rightarrow C\sin(k_2b) + D\cos(k_2b) - Fe^{ik_1b} = 0\\ \psi_2'(b) = \psi_3'(b) &\Rightarrow Ck_2\cos(k_2b) - Dk_2\sin(k_2b) - Fik_1e^{ik_1b} = 0\end{aligned}$$

Tako dobimo (linearni) sistem 4 enačb z 4 neznankami. C in D lahko izrazimo iz prvih dveh z B ter vstavimo v drugi dve. Nato pa še iz preostalih dveh eliminiramo B in tako dobimo F. Seveda lahko koeficiente damo tudi v 4×4 matriko ter poiščemo njen inverz. Lahko pa se lotimo tudi zvitega trika. Valovne funkcije razpišemo po sodi in lihi bazi (saj smo v prejšnjem primeru pokazali, da lahko to vedno naredimo). Potem pa rešujemo problem za sode in lihe funkcije ločeno. Tako razdelimo naš prvotni 4×4 sistem na dva manjša 2×2 sistema. Rešimo vsakega posebej in potem izrazimo F z linearno kombinacijo rešitev 2×2 sistema.

Prvi pristop se mi zdi še najbolj intuitiven (posebno za sipanje) in tudi najbolj (konceptualno) enostaven:

Iz prvih dveh enačb izrazimo C in D z B

$$D = \left(Be^{ibk_1} + e^{-ibk_1}\right)\cos(bk_2) - i\frac{k_1}{k_2}\left(Be^{ibk_1} - e^{-ibk_1}\right)\sin(bk_2)$$

$$C = -i\frac{k_1}{k_2}\left(Be^{ibk_1} - e^{-ibk_1}\right)k_1\cos(bk_2) - B\left(e^{ibk_1} + e^{-ibk_1}\right)\sin(bk_2)$$

Nato vstavimo v drugi dve enačbi in rešimo 2×2 za F.

$$F = \frac{e^{-2ibk_1}}{\cos(2bk_2) - i\frac{\left(k_1^2+k_2^2\right)}{2k_1k_2}\sin(2bk_2)} \tag{2.5}$$

Če upoštevamo še $a = 2b$ dobimo:

$$F = \frac{e^{-iak_1}}{\cos(ak_2) - i\frac{\left(k_1^2+k_2^2\right)}{2k_1k_2}\sin(ak_2)} \tag{2.6}$$

Prepustnostni koeficient je potem (upoštevamo $A = 1$ in enačbo (2.1))

$$T = |F|^2 = \frac{1}{1 + \sin^2(ak_2)\left(\frac{(k_1-k_2)^2}{2k_1k_2}\right)} \tag{2.7}$$

3 Popolna prepustnost

3.1 Naloga

Pokaži pri katerih energijah je prepustnost jame enaka 1.

3.2 Rešitev

Popolno prepustnost si lahko "razložimo" tako, da si predstavljamo, da se val, ki prihaja iz desne strani odbije pri prehodu desne "stene" ($x = \frac{a}{2}$) in ponovno pri levi "steni" ($x = -\frac{a}{2}$). Če je širina jame v primerjavi z valovno dolžino ustrezna, potem se val sipa v fazi in dobimo popolno prepustnost.

Če pogledamo enačbo (2.7) potem hitro opazimo, da je $T = 1$ ko je

$$\sin^2(k_2a)\left(\frac{(k_1-k_2)^2}{2k_1k_2}\right) = 0$$

Če je $k_1 = k_2$ to pomeni, da imamo konstanten potencial (in je logično, da je prepustnost popolna:), tako da ta primer ni zanimiv.

Zanimiv primer je torej, ko je $\sin(k_2 a) = 0$, to pa se zgodi, ko

$$k_2 a = n\pi$$

Če vstavimo $k_2 = \sqrt{\frac{2m(E+V_0)}{\hbar^2}}$ in malo preuredimo člene dobimo

$$E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2} - V_0 \tag{3.1}$$

kar pa so ravno vezana stanja v neskončni potencialni jami!

Sipanje na končni potencialni jami II

Mitja Krnel

6. marec 2008

Naloga:

Obravnavaj prepustnost pri sipanju na potencialni jami širine a in globine V_0 v limiti $\sqrt{\frac{2mV_0a^2}{\hbar^2}} \gg 1$.

1. Pokaži, da ima prepustnost pri energijah malo nad robom potencialne jame resonance, ki jih lahko opišemo z Lorentzovo krivuljo.

2. Pokaži, da ima amplituda za prepustnost pole pri energijah $E_n - i\frac{\Gamma_n}{2}$, kjer so E_n in Γ_n energije in širine resonanc v prepustnosti. Kakšna lastna stanja ustrezajo tem polom?

3. Kako sta povezana razpadni čas kvazivezanega stanja in širina ustrezne resonance?

Potencial je tak kot pri prejšnji nalogi:

$$V(x) = \begin{cases} -V_0 & \text{za } |x| \le \frac{a}{2}, \\ 0 & \text{za } |x| > \frac{a}{2}. \end{cases}$$

Potencial obravnavamo v primeru, ko je $x_0 = \sqrt{\frac{2mV_0a^2}{\hbar^2}} \gg 1$.

1. Računamo obliko prepustnosti T(E) za sipanje na potencialni jami in širino resonanc v T(E).

Za izračun oblike T(E) potrebujemo izraz: [1]

$$\frac{F}{A} = \frac{e^{-ika}}{\cos k'a - \frac{i}{2}(\frac{k}{k'} + \frac{k'}{k}) \sin k'a} \tag{1}$$

Prepustnost za valovanje, ki prihaja z leve strani je v tem primeru enaka:

$$T = \left|\frac{F}{A}\right|^2 = \frac{1}{1 + \frac{1}{4}(\frac{k'}{k} - \frac{k}{k'})^2 \sin^2 k'a} \tag{2}$$

kjer sta $k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$ valovni vektor izven jame in

$k' = \sqrt{\frac{2m(E+V_0)}{\hbar^2}}$ valovni vektor v jami,

E pa je energija lastnega stanja.

[1] Izraza (1) in (2) sta bila izpeljana na vajah dne 28.2.2008

Resonance imamo tam, kjer je T = 1, torej pri $\sin^2 k'a = 0 \Rightarrow k'a = n\pi$.

Zaradi lažjega računanja uvedemo brezdimenzijski količini $x = ka$ in $x' = k'a$.

Zanima nas obnašanje prepustnosti v bližini resonančnega vrha, zato vzamemo $x' = n\pi + \varepsilon$, kjer je $\varepsilon \ll n\pi$.

Tak x' vstavimo v enačbo (1) in člene razvijemo v Taylorjevo vrsto do prvega reda:

$$\cos k'a = \cos(n\pi + \varepsilon) = \cos n\pi \cos\varepsilon - \sin n\pi \sin\varepsilon = \tag{3}$$

$$= (-1)^n \cos\varepsilon \approx (-1)^n (1 - \mathcal{O}(\varepsilon^2)) \tag{4}$$

Upoštevali smo: $\cos u = 1 - \frac{u^2}{2!} + \frac{u^4}{4!} - \frac{u^6}{6!} + \cdots$

Podobno je: $\sin k'a = \sin(n\pi + \varepsilon) = \sin n\pi \cos\varepsilon + \cos n\pi \sin\varepsilon =$

$$= (-1)^n \sin\varepsilon \approx (-1)^n (\varepsilon + \mathcal{O}(\varepsilon^3)) \tag{5}$$

Upoštevali smo: $\sin u = u - \frac{u^3}{3!} + \frac{u^5}{5!} - \frac{u^7}{7!} + \cdots$

Člena e^{-ika} ne rabimo razvijat, ker je $|e^{-ika}| = 1$.

Člen $(\frac{k}{k'} + \frac{k'}{k})$ razvijemo samo do ničtega reda. Če bi ga razvili do prvega reda, bi zaradi $\sin k'a$, ki smo ga tudi razvili do prvega reda, dobili popravke drugega reda, ki pa jih zanemarimo.

Člen $(\frac{k}{k'} + \frac{k'}{k})$ zapišemo z energijami:

$(\frac{k}{k'} + \frac{k'}{k}) = \frac{\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}}{\sqrt{\frac{2m(E+V_0)}{\hbar^2}}} + \frac{\sqrt{\frac{2m(E+V_0)}{\hbar^2}}}{\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}} = \sqrt{\frac{E}{E+V_0}} + \sqrt{\frac{E+V_0}{E}}$

Naša potencialna jama naj bo globoka, energija pa naj bo tik nad robom pot. jame. To pomeni, da bo $V_0 \gg E$. Ko to upoštevamo, dobimo:

$(\frac{k}{k'} + \frac{k'}{k}) \approx \sqrt{\frac{E+V_0}{E}}$

Energijo n-te resonance E_n dobimo tako, da iz enačbe za k' izrazimo E in upoštevamo $x' = n\pi$:

$E + V_0 = k'^2 \frac{\hbar^2}{2m} = (\frac{x'}{a})^2 \frac{\hbar^2}{2m} = \frac{\hbar^2 n^2 \pi^2}{2ma^2} \Rightarrow$

$E_n = \frac{\hbar^2 n^2 \pi^2}{2ma^2} - V_0$

Zato, da izraz poenostavimo, vpeljemo z izrazom $V_0 = \frac{\hbar^2 n_0^2 \pi^2}{2ma^2}$ novo količino n_0:

$E_n = \frac{\hbar^2 n^2 \pi^2}{2ma^2} - \frac{\hbar^2 n_0^2 \pi^2}{2ma^2}$

n_0 šteje število vezanih stanj v pot. jami, vendar ni nujno celo število. Če dobimo npr. $n_0 = 99.3$, imamo 99 vezanih stanj, 100-to stanje pa je nad potencialom $V = 0$.

Potem velja:

$$(\frac{k}{k'} + \frac{k'}{k}) \approx \sqrt{\frac{\frac{\hbar^2 n^2 \pi^2}{2ma^2}}{\frac{\hbar^2 n^2 \pi^2}{2ma^2} - \frac{\hbar^2 n_0^2 \pi^2}{2ma^2}}} = \sqrt{\frac{n^2}{n^2 - n_0^2}} \tag{6}$$

V enačbo (1) zdaj vstavimo vse popravke do 1. reda in dobimo:

$$\frac{F}{A} = \frac{e^{-ika}}{(-1)^n - \frac{i}{2}\sqrt{\frac{n^2}{n^2-n_0^2}}\,(-1)^n\,\varepsilon} \tag{7}$$

Zdaj namesto $x' = n\pi$ v izraz za energijo E vstavimo $x' = n\pi + \varepsilon$:

$E = \frac{(n\pi+\varepsilon)^2\,\hbar^2}{2ma^2} - V_0 \Rightarrow$

$E = \frac{(n^2\pi^2+2n\pi\varepsilon+\varepsilon^2)\,\hbar^2}{2ma^2} - V_0$

Ko zanemarimo člen z ε^2, dobimo:

$E = E_n + \frac{n\pi\varepsilon\hbar^2}{ma^2} \Rightarrow \varepsilon = \frac{(E-E_n)\,ma^2}{n\pi\hbar^2}$

Tak ε vstavimo v enačbo za $\frac{F}{A}$, $(-1)^n$ ne povzroča problemov, ker $|(-1)^n| = 1 \Rightarrow$

$$\frac{F}{A} = \frac{e^{-ika}(-1)^{-n}}{1 - \frac{i}{2}\sqrt{\frac{n^2}{n^2-n_0^2}}\frac{ma^2}{n\pi\hbar^2}(E - E_n)} \tag{8}$$

Vpeljemo novo količino Γ_n, tako da je:

$$\frac{F}{A} = \frac{e^{-ika}(-1)^{-n}}{1 - \frac{2i(E-E_n)}{\Gamma_n}}. \tag{9}$$

Ko primerjamo enačbi (8) in (9), dobimo:

$$\Gamma_n = \frac{4\pi\hbar^2\sqrt{n^2 - n_0^2}}{ma^2}. \tag{10}$$

Enačbo (9) izboljšamo tako, da jo v števcu in imenovalcu pomnožimo z $\frac{i\Gamma_n}{2}$:

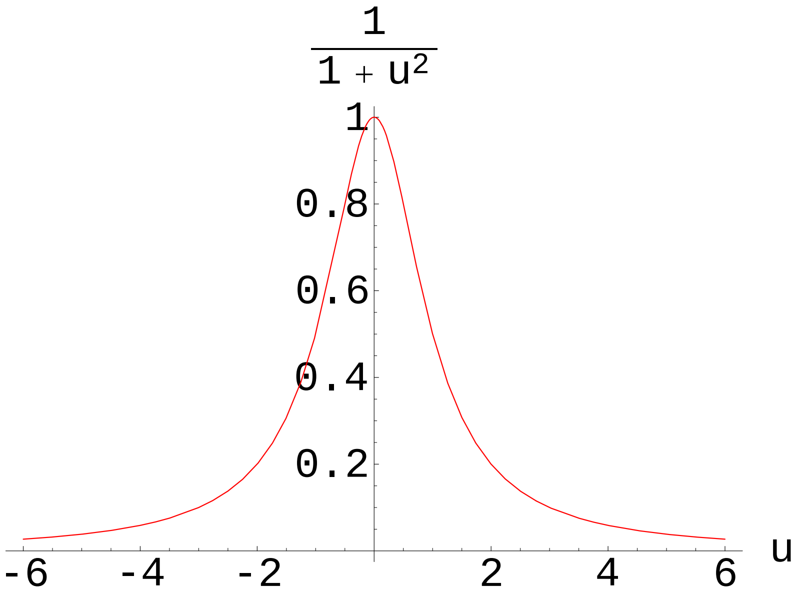
$$\frac{F}{A} = \frac{e^{-ika}(-1)^n i\frac{\Gamma_n}{2}}{E - E_n + i\frac{\Gamma_n}{2}} \tag{11}$$

T(E) je potem v bližini resonanc enak:

$$T(E) = \left|\frac{F}{A}\right|^2 = \frac{\frac{\Gamma_n^2}{4}}{\frac{\Gamma_n^2}{4} + (E - E_n)^2} \tag{12}$$

$T(E) = \frac{1}{1+u^2}$, pri čemer je $u = \frac{2(E-E_n)}{\Gamma_n}$.

To je Lorentzova krivulja, ki ima obliko, kot jo kaže spodnja skica:



Γ_n pri Lorentzovi krivulji predstavlja širino resonance na polovični višini. To vidimo, ko v enačbo (12) vstavimo $E - E_n = \frac{\Gamma_n}{2}$ in dobimo $T = \frac{1}{2}$. $u = 0$ na sliki predstavlja $E = E_n$.

Ko se n povečuje, se širina resonance povečuje, ker v izrazu za Γ_n nastopa $\sqrt{n^2 - n_0^2}$, ki je naraščajoča funkcija n-ja, n_0 pa je konstanta odvisna od dimenzij jame. Zato so pri visokih energijah krivulje širše kot pri nizkih energijah. Tako krivuljo imamo samo v primeru, ko je $x_0 = \sqrt{\frac{2mV_0a^2}{\hbar^2}} \gg 1$.

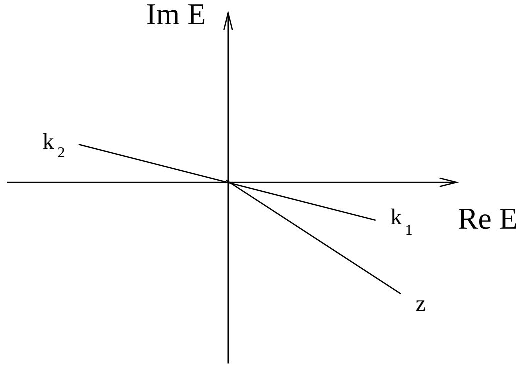
2. Iz enačbe (11) vidimo, da ima amplituda za prepustnost $\frac{F}{A}$ pol pri $E_n - i\frac{\Gamma_n}{2}$. Pri neskončni pot. jami so poli v prepustnosti povezani z vezanimi stanji sistema. Vezana stanja imajo realno energijo.

V našem primeru ima vsaka resonanca svoj pol, ampak ta pol je pri kompleksni energiji. Dobimo stanja s kompleksno energijo, ki jih imenujemo kvazivezana stanja. Delec v takem stanju lahko pobegne iz potencialne jame.

Energiji $E = E_n - i\frac{\Gamma_n}{2} \in \mathbb{C}$ ustreza $k \in \mathbb{C}$:

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} = \sqrt{\frac{2m(E_n - i\frac{\Gamma_n}{2})}{\hbar^2}} = \sqrt{z} \tag{13}$$

Kompleksno število z korenimo grafično. Pri tem dobimo rešitvi k_1 in $k_2 \in \mathbb{C}$:



Ker sta $E_n > 0$ in $\Gamma_n > 0$, se z nahaja v kompleksni ravnini v 4. kvadrantu. Pri korenjenju kompleksnega števila z se $|z|$ koreni, kot pa razpolovi. Obe rešitvi k_1 in k_2 sta fizikalno smiselni.

Ker je $k \in \mathbb{C}$, ga lahko zapišemo kot $k = k' + ik'' \Rightarrow$ za prepuščeni val Fe^{ikx} dobimo:

$Fe^{ik_1'x - k_1''x}$; $k_1' > 0,\ k_1'' < 0$ in

$Fe^{ik_2'x - k_2''x}$; $k_2' < 0,\ k_2'' > 0$

Rešitev, ki ustreza val. vektorju k_1 v limiti, ko gre $x \to +\infty$ eksponentno narašča.

Rešitev, ki ustreza val. vektorju k_2 v limiti, ko gre $x \to +\infty$ pa eksponentno pada.

3. Zanima nas časovni razvoj naše valovne funkcije. Recimo, da imamo $\psi(x,0)$ ob času 0. Časovni razvoj za lastna stanja, ki ustrezajo kompleksnim energijam $E = E_n - i\frac{\Gamma_n}{2}$ je potem:

$$\Psi(x,t) = \psi(x,0)\, e^{\frac{-iEt}{\hbar}} = \psi(x,0)\, e^{\frac{-i(E_n - i\frac{\Gamma_n}{2})t}{\hbar}} \tag{14}$$

Stanja s kompleksno energijo ustrezajo fizikalno stanjem, ki imajo določen razpadni čas (so kvazivezana).

Primer: Pot. jama predstavlja jedro uranovega atoma, ki razpada. Verjetnost, da najdemo jedro v nerazpadnem stanju s časom eksponentno pada.

Za izračun razpadnega časa potrebujemo verjetnostno gostoto za razpad:

$$\rho(x,t) = |\psi(x,t)|^2 = |\psi(x,0)|^2\, |e^{-\frac{\Gamma_n t}{2\hbar}}|^2\, |e^{-\frac{iE_n t}{\hbar}}|^2 = |\psi(x,0)|^2\, e^{-\frac{\Gamma_n t}{\hbar}} \tag{15}$$

$$\rho(x,t) = |\psi(x,0)|^2\, e^{-\frac{t}{\tau}} \tag{16}$$

Upoštevali smo, da je $|e^{-\frac{iE_n t}{\hbar}}|^2 = 1$.

Razpadni čas je potem $\tau = \frac{\hbar}{\Gamma_n}$. Večja kot je širina resonance, krajši je razpadni čas.

Del III

Gaussov valovni paket

Heisenbergov princip nedoločenosti

Kvantna mehanika I

naloga

Gregor Traven
Astronomsko geofizikalna smer
28030377

marec 2008

NALOGA

Radi bi izpeljali produkt nedoločenosti dveh splošnih operatorjev A in B. Predpostavili bomo da sta operatorja hermitska ter uporabili nekaj pravil, ki bodo sproti razložena. Zanima nas torej vrednost $\delta A \delta B$.

Če je operator A sebi hermitsko adjungiran ali na kratko **hermitski**, potem velja

$$A^\dagger = A$$
$$\langle \Psi_1 | A \Psi_2 \rangle = \langle A^\dagger \Psi_1 | \Psi_2 \rangle = \langle A \Psi_1 | \Psi_2 \rangle.$$

Nedoločenost količine (operatorja) A je definirana kot

$$\delta A = \sqrt{\langle (A - \langle A \rangle)^2 \rangle}.$$

Definirajmo nova operatorja

$$A' = A - \langle A \rangle \quad \text{ter} \quad B' = B - \langle B \rangle$$

in pokažimo da sta, upoštevajoč $\langle A \rangle^* = \langle A \rangle$, tudi ta dva hermitska:

$$\langle \Psi | A' | \Psi \rangle = \langle \Psi | A | \Psi \rangle - \langle \Psi | \langle A \rangle | \Psi \rangle = \langle A \Psi | \Psi \rangle - \langle \langle A \rangle^* \Psi | \Psi \rangle = \langle A' \Psi | \Psi \rangle.$$

Zdaj se lahko lotimo izpeljave našega produkta nedoločenosti. Začeli bomo s kvadriranjem izraza.

$$(\delta A)^2 (\delta B)^2 = \langle A'^2 \rangle \langle B'^2 \rangle = \langle \Psi | A'^2 | \Psi \rangle \langle \Psi | B'^2 | \Psi \rangle = \langle A' \Psi | A' | \Psi \rangle \langle B' \Psi | B' | \Psi \rangle$$

Ob upoštevanju Cauchy-Schwarzove neenakosti lahko za zgornji izraz zapišemo

$$\langle A' \Psi | A' | \Psi \rangle \langle B' \Psi | B' | \Psi \rangle = \langle A' \Psi | A' \Psi \rangle \langle B' \Psi | B' \Psi \rangle \geq \left| \langle A' \Psi | B' \Psi \rangle \right|^2 = \left| \langle \Psi | A' B' \Psi \rangle \right|^2 \qquad (1)$$

$A'B'$ lahko zapišemo z dekompozicijo produkta kot

$$A'B' = \frac{A'B' + B'A'}{2} + \frac{A'B' - B'A'}{2} = \frac{\{A', B'\}}{2} + \frac{[A', B']}{2}$$

kjer je $[A', B']$ **komutator** ter $\{A', B'\}$ **antikomutator**.

Poglejmo kaj se zgodi če komutator in antikomutator hermitsko adjungiramo. Na tem mestu uporabimo zvezo za hermitiranje produkta $(AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger$.

$$\{A', B'\}^\dagger = (A'B')^\dagger + (B'A')^\dagger = B'^\dagger A'^\dagger + A'^\dagger B'^\dagger = B'A' + A'B' = \{A', B'\}$$
$$\Longrightarrow \text{antikomutator je hermitski}$$
$$[A', B']^\dagger = (A'B')^\dagger - (B'A')^\dagger = B'^\dagger A'^\dagger - A'^\dagger B'^\dagger = B'A' - A'B' = -[A', B']$$
$$\Longrightarrow \text{komutator je antihermitski } (C^\dagger = -C) \text{ kjer velja}$$
$$\langle C \rangle = \langle \Psi | C | \Psi \rangle = -\langle C \Psi | \Psi \rangle = -\langle \Psi | C \Psi \rangle^* = -\langle C \rangle^* \quad \Rightarrow \quad \text{C je čisto imaginarno število}$$

Ob upoštevanju zgornjih relacij nadaljujemo izpeljavo iz (1)

$$(\delta A)^2 (\delta B)^2 \geq |\langle \Psi | A' B' \Psi \rangle|^2 = \left| \langle \Psi | \frac{1}{2} \left(\{A', B'\} + [A', B'] \right) \Psi \rangle \right|^2 =$$
$$= \left| \left\langle \Psi \left| \frac{\{A', B'\}}{2} \Psi \right. \right\rangle + \left\langle \Psi \left| \frac{[A', B']}{2} \Psi \right. \right\rangle \right|^2 \geq \left| \left\langle \Psi \left| \frac{[A', B']}{2} \Psi \right. \right\rangle \right|^2 = \left| \left\langle \Psi \left| \frac{[A, B]}{2} \Psi \right. \right\rangle \right|^2$$

Pričakovana vrednost komutatorja je imaginarno, antikomutatorja pa realno število, zato je kvadrat absolutne vrednosti njune vsote kar enak vsoti kvadratov absolutnih vrednosti posameznih členov in zadnja neenakost na prejšnji strani velja. Upoštevali smo še izraz

$$[A', B'] = [A - \langle A \rangle, B - \langle B \rangle] = [A, B] - [A, \langle B \rangle] - [\langle A \rangle, B] + [\langle A \rangle, \langle B \rangle]$$

v katerem je od nič različen le prvi člen, saj sta pričakovani vrednosti operatorjev A in B števili, ki komutirata tako s poljubnim operatorjem kot med seboj. Velja torej $[A', B'] = [A, B]$.

Na koncu lahko zapišemo končno obliko Heisenbergovega načela nedoločenosti kot

$$\delta A \delta B \geq \frac{1}{2} \left| \langle \Psi \left| [A, B] \ \Psi \right\rangle \right|^2 .$$

Valovni paket I

Matjaž Žganec

21. marec 2008

Naloga

Zanima nas, katera valovna funkcija ima najmanjši produkt nedoločenosti lege in gibalne količine.

Rešitev

Za hermitska operatorja $A = A^\dagger$ in $B = B^\dagger$ z uvedbo operatorjev $A' = A - \langle A\rangle$ in $B' = B - \langle B\rangle$ izpeljemo

$$\begin{aligned} \delta^2 A \delta^2 B &= \langle\psi|A'^2|\psi\rangle\langle\psi|B'^2|\psi\rangle \\ &= \langle A'\psi|A'\psi\rangle\langle B'\psi|B'\psi\rangle \\ &\geq |\langle A'\psi|B'\psi\rangle|^2 \\ &= \left|\frac{\langle[A,B]\rangle}{2}\right|^2 + \left|\frac{\langle\{A,B\}\rangle}{2}\right|^2. \end{aligned} \quad (1)$$

Pri neenačaju smo uporabili Cauchy - Schwarzevo neenakost. Podrobnejša izpeljava je na voljo v vaji *Heisenbergovo načelo nedoločenosti.*

Produkt nedoločenosti lege in gibalne količine je najmanjši, če imamo pri Cauchy - Schwarzevi neenakosti enačaj in če je antikomutator v drugem členu (1) enak nič. Iz prve zahteve sledi vzporednost vektorjev

$$\langle A'\psi|A'\psi\rangle\langle B'\psi|B'\psi\rangle = |\langle A'\psi|B'\psi\rangle|^2 \quad \longleftrightarrow \quad \langle A'\psi| = \lambda\langle B'\psi|. \quad (2)$$

Pri tem je λ zaenkrat še poljubno kompleksno število. Antikomutator v (1) razpišemo v

$$\begin{aligned} \langle\psi|\{A',B'\}\psi\rangle &= \langle\psi|(A'B' + B'A')\psi\rangle \\ &= \langle\psi|A'B'\psi\rangle + \langle\psi|B'A'\psi\rangle \\ &= \langle A'\psi|B'\psi\rangle + \langle B'\psi|A'\psi\rangle \\ &= \langle A'\psi|B'\psi\rangle + \langle A'\psi|B'\psi\rangle^* \\ &= \lambda\langle B'\psi|B'\psi\rangle + \lambda^*\langle B'\psi|B'\psi\rangle \\ &= (\lambda + \lambda^*)\langle B'\psi|B'\psi\rangle = 0. \end{aligned} \quad (3)$$

Zadnjemu enačaju zadostimo v dveh primerih. Skalarni produkt $\langle B'\psi|B'\psi\rangle$ lahko postavimo na nič. Na koncu bomo pokazali, da ta zahteva ni smiselna. Druga možnost je, da je vsota v oklepaju enaka nič. Sledi, da je parameter λ čisto imaginarno število

$$\mathrm{Re}(\lambda) \quad = \quad 0. \tag{4}$$

Zato lahko vpeljemo $\lambda = -\mathrm{i}\lambda'$, kjer je λ' realno število.

V enačbo za vzporednost vektorjev (2) vstavimo operatorja lege $A = x$ in gibalne količine $B = p$.

$$\begin{aligned}(x - \langle x\rangle)\psi(x) &= \mathrm{i}\lambda' \left(p - \langle p\rangle\right) \psi(x) \\ &= \mathrm{i}\lambda' \left(-\mathrm{i}\hbar \frac{\partial}{\partial x} - \langle p\rangle\right) \psi(x)\end{aligned} \tag{5}$$

Dobili smo *navadno* diferencialno enačbo, ki jo prepišemo v obliko

$$\frac{\mathrm{d}\psi(x)}{\psi(x)} \quad = \quad \left(\frac{x - \langle x\rangle}{\lambda'\hbar} + \mathrm{i}\frac{\langle p\rangle}{\hbar}\right) \mathrm{d}x \tag{6}$$

in integriramo

$$\ln\psi(x) \quad = \quad \left(\frac{x/2 - \langle x\rangle}{\lambda'\hbar} + \mathrm{i}\frac{\langle p\rangle}{\hbar}\right) x + \ln C. \tag{7}$$

Prvi člen v oklepaju dopolnimo do popolnega kvadrata in ostanek spravimo v novo konstanto C'.

$$\psi(x) \quad = \quad C' \exp\left(\frac{(x - \langle x\rangle)^2}{2\lambda'\hbar} + \mathrm{i}\frac{\langle p\rangle x}{\hbar}\right) \tag{8}$$

Da določimo normalizacijsko konstanto C', zapišemo verjetnostno gostoto.

$$|\psi(x)|^2 \quad = \quad C'^2 \exp\left(\frac{(x - \langle x\rangle)^2}{\lambda'\hbar}\right) \tag{9}$$

Ta je integrabilna le za $\lambda' < 0$. Ker ima funkcija Gaussovo obliko, uvedemo standardno deviacijo σ kot $\lambda'\hbar = -2\sigma^2$. Sledi

$$|\psi(x)|^2 = C'^2 \exp\left(\frac{(x - \langle x\rangle)^2}{-2\sigma^2}\right) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp\left(\frac{(x - \langle x\rangle)^2}{-2\sigma^2}\right). \tag{10}$$

Valovna funkcija z najmanjšim produktom nedoločenosti lege in gibalne količine $\delta x \delta p = \hbar/2$, ki je še dovoljen po Heisenbergovem načelu, je *valovni paket*

$$\psi(x) \quad = \quad \frac{1}{\sqrt[4]{2\pi\sigma^2}} \exp\left(-\frac{(x - \langle x\rangle)^2}{4\sigma^2}\right) \exp\left(\mathrm{i}\frac{\langle p\rangle x}{\hbar}\right) \tag{11}$$

s parametri $\langle x\rangle$, $\langle p\rangle$ in σ.

Rezultat (11) smo namenoma zapisali z ločenima eksponentnima faktorjema. Prvi faktor predstavlja ovojnico Gaussove oblike in je realen. Drugi faktor opisuje sinusno nihanje s periodo $2\pi\hbar/\langle p\rangle$, kjer sta fazi imaginarnega in realnega dela zamaknjeni za $\Delta x = \pi\hbar/2\langle p\rangle$. Razmere prikazuje Slika 1.

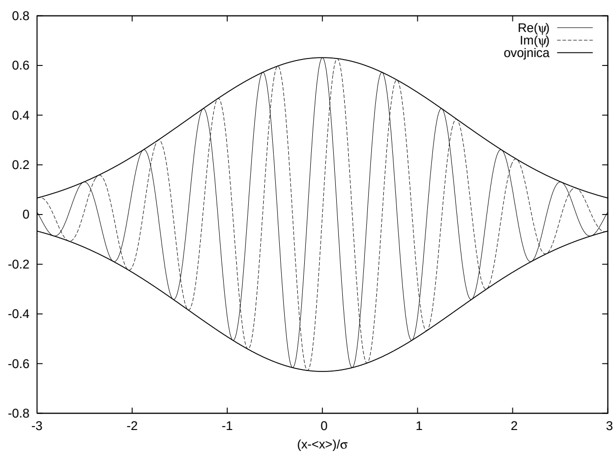
Končajmo z obljubljeno razlago, zakaj zahteva $\langle B'\psi|B'\psi\rangle = 0$ ni smiselna[1]. Ko vstavimo $B' = B - \langle B\rangle$, dobimo

$$\langle B'\psi|B'\psi\rangle = \langle B^2\rangle - \langle B\rangle^2 = \delta^2 B = 0. \tag{12}$$

Ker sta $|A'\psi\rangle$ in $|B'\psi\rangle$ vzporedna, so lastne funkcije operatorja B hkrati tudi lastne funkcije operatorja A. Velja torej

$$\begin{aligned} B|\psi\rangle &= \langle B\rangle|\psi\rangle \\ A|\psi\rangle &= \langle A\rangle|\psi\rangle. \end{aligned} \tag{13}$$

To pomeni, da je produkt nedoločenosti operatorjev A in B enak nič. Ker sta A in B operatorja lege in gibalne količine, ne moremo zadostiti Heisenbergovemu načelu nedoločenosti.



Slika 1: Realni in imaginarni del valovnega paketa (11) z ovojnico pri brezdimenzijskem parametru $\langle p\rangle\sigma/\hbar = 10$. V primeru $\langle p\rangle = 0$ je imaginarni del valovne funkcije enak nič. Realni del sovpada z zgornjo polovico ovojnice.

[1]Spomnimo, da smo ob neupoštevanju te zahteve za λ dobili čisto imaginarno število (4).

Valovni paket II

Jure Grbec
13. marec 2008

Naloga:

Izračunaj časovni razvoj valovnega paketa za delec, ki se giblje v konstantnem potencialu in časovno odvisnost verjetnostne gostote.

Rešitev:

Če začnemo s poljubno valovno funkcijo $|\psi\rangle = \sum_k C_k |\psi_k\rangle$, lahko njen časovni razvoj zapišemo kot: $|\psi, t\rangle = \sum_k C_k |\psi_k\rangle e^{-i\frac{E_k}{\hbar}t}$ Pri tem je $E_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{<p>^2}{2m}$.

Vsoto lahko zaradi zveznosti zapišemo tudi kot integral. Tako pridemo do uporabne oblike:

$$\Psi(x,t) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{\sqrt[4]{2\pi\sigma^2}} e^{-\frac{(x-<x>)^2}{4\sigma^2}} e^{i\frac{<p>}{\hbar}x} e^{-i\frac{\hbar k^2}{2m}t} dk$$

C_k lahko izračunamo tako, da izračunamo $\Psi(x,0)$.

$$\Psi(x,0) = \int_{-\infty}^{\infty} C_k e^{ikx} dk$$

Pozorni bralec prepozna v tej enačbi Fourierevo transformacijo, tako lahko preprosto izračunamo ***C_k*** z inverzno Fourierevo transformacijo:

$$C_k = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(x,0) e^{-ikx} dx =$$

$$= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{\sqrt[4]{2\pi\sigma^2}} e^{-\frac{(x-<x>)^2}{4\sigma^2}} e^{i(\frac{<p>}{\hbar}-k)x} dx =$$

Integral lahko izračunamo in pridemo do:

$$C_k = \sqrt[4]{\frac{\sigma^2}{2\pi^3}} e^{-\sigma^2\left(k - \frac{<p>}{\hbar}\right)^2}$$

Vstavimo vse v $\Psi(x,t)$ in dobimo:

$$\Psi(x,t) = \sqrt[4]{\frac{\sigma^2}{2\pi^3}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\sigma^2\left(k - \frac{<p>}{\hbar}\right)^2} e^{ikx} e^{-i\frac{\hbar k^2}{2m}t} dk =$$

$$= \frac{1}{\sqrt[4]{2\pi\sigma^2}\sqrt{1 + i\frac{\hbar}{2m\sigma^2}t}} e^{\frac{(ix + 2\sigma^2 \frac{<p>}{m})^2}{4\sigma^2(1 + \frac{i\hbar}{2m\sigma^2}t)} - \frac{\sigma^2 <p>^2}{m^2}}$$

To je časovno razvit valovni paket v končni obliki. Od tu lahko izpeljemo časovno odvisnost verjetnostne gostote.

$$|\Psi(x,t)|^2 = |A|^2 e^{2\,\mathrm{Re}(B)}$$

Kjer je

$$|A|^2 = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}\sqrt{1 + i\frac{\hbar}{2m\sigma^2}t}\sqrt{1 - i\frac{\hbar}{2m\sigma^2}t}} =$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}\sqrt{1 + \left(\frac{\hbar}{2m\sigma^2}t\right)^2}}$$

$$2\,\mathrm{Re}(B) = 2\,\mathrm{Re}\left(\frac{(ix + 2\sigma^2 \frac{< p >}{m})^2}{4\sigma^2 (1 + i\frac{\hbar}{2m\sigma^2}t)} - \frac{\sigma^2 < p >^2}{m^2} \right) =$$

$$= \frac{-(x - \frac{< p >}{m}t)^2}{2\sigma^2 \left(1 + (\frac{\hbar t}{2m\sigma^2})^2 \right)}$$

Poračunamo in dobimo:

$$\left|\Psi(x,t)\right|^2 = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}\sqrt{1 + \left(\frac{\hbar}{2m\sigma^2}t\right)^2}} e^{-\frac{(x - \frac{< p >}{m}t)^2}{2\sigma^2 \left(1 + (\frac{\hbar t}{2m\sigma^2})^2\right)}}$$

To lahko veliko lepše zapišemo, če opazimo:

$$\sigma(t) = \sqrt{1 + \left(\frac{\hbar}{2m\sigma^2}t\right)^2}\,\sigma$$

Končni izraz je potem:

$$\left|\Psi(x,t)\right|^2 = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma(t)^2}} e^{-\frac{(x - \frac{< p >}{m}t)^2}{2\sigma(t)^2}}$$

Del IV

Harmonski oscilator

- Glavna stran
- Forum
- Trenutni dogodki
- Zadnje spremembe
- Naključni članek
- Pomoč

Go to Search

Harmonski oscilator I

Iz Kvantna Mehanika I 2006 - 2007

Vsebina

Naloga

1. Kako se s časom spreminjata pričakovani vrednosti operatorjev x in x^2 v stanju $|\psi, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle)$ harmonskega oscilatorja $H = \frac{p^2}{2m} + \frac{kx^2}{2}$?
2. Izračunaj časovno odvisnost anihilacijskega operatorja $a(t) = e^{\frac{iHt}{\hbar}} a e^{-\frac{iHt}{\hbar}}$ in rezultat uporabi za izračun količin iz naloge 1.

Rešitev

Formalizem harmonskega oscilatorja

K reševanju problema harmonskega oscilatorja navadno pristopimo z uporabo/uvedbo t.i. "lestvičnih" ("ladder") operatorjev, s čimer, ob upoštevanju Diracive pisave, hitreje pridemo do vseh pomembnejših rezultatov (brez zamudnega reševanja diferencialnih enačb običajnega kvantnomehanskega formalizma).

Kreacijski in anihilacijski operator

Uvedemo anihilacijski operator a in njemu adjungiran kreacijski operator $a^\dagger$:

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{\widehat{x}}{x_0} + i\frac{\widehat{p}}{p_0}\right) \quad \text{in} \quad a^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{\widehat{x}}{x_0} - i\frac{\widehat{p}}{p_0}\right),$$

kjer sta:

$x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$ in $p_0 = \frac{\hbar}{x_0}$, pri čemer je frekvenca harmonskega oscilatorja: $\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$.

Lastnosti

1. $\left[a, a^\dagger\right] = 1.$
2. $a^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle \quad \Rightarrow \quad \left(a^\dagger\right)^n|0\rangle = \sqrt{n!}|n\rangle$
3. $a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle$
4. $a|0\rangle = 0$

Kreacijski operator torej zvišuje stanje harmonskega oscilatorja, medtem, ko nam anihilacijski operator stanje znižuje. Pri delovanju anihilacijskega operatorja na lastno valovno funkcijo osnovenega stanja, pa jo ta izniči.

Hamiltonov operator

S tako definiranima operatorjema na novo zapišemo še Hamiltonov operator:

$$H = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}k\hat{x}^2 = \hbar\omega\left(a^\dagger a + \frac{1}{2}\right).$$

Lastne energije harmonskega oscilatorja v stanju n so:

$E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)$, kjer med n - to lastno energijo in Hamiltonovim operatorjem velja zveza: $E_n|n\rangle = H|n\rangle$.

Operatorja kraja in gibalne količine

Operatorja kraja $\hat{x}$ in gibalne količine $\hat{p}$, sta sebi adjungirana oz. hermitska, na novo pa ju z anihilacijskim in kreacijskim operatorjem zapišemo v obliki:

$\hat{x} = \frac{x_0}{\sqrt{2}}\left(a + a^\dagger\right)$ in $\hat{p} = \frac{p_0}{i\sqrt{2}}\left(a - a^\dagger\right)$.

Reševanje

Nalogo bomo reševali na dva načina, in sicer:

- V prvem primeru bomo računali pričakovano vrednost ustreznega operatorja tako, da bomo v času razvili valovno funkcijo in nato z njo delovali na operator. Za splošen operator torej računamo takole:

  $$\langle A\rangle = \langle\psi, t|A|\psi, t\rangle$$

- V drugem primeru bomo računali pričakovano vrednost ustreznega operatorja tako, da ga bomo najprej razvili v času in nato nanj delovali s stacionarno valovno funkcijo. Za splošen operator torej računamo takole:

  $$\langle A\rangle = \langle\psi|A(t)|\psi\rangle$$

Časovna odvisnost pričakovane vrednosti *x* in njegovega kvadrata

Časovni razvoj valovne funkcije

Ob *t=0* imamo harmonski oscilator v stanju z valovno funkcijo:

$$|\psi, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|0\rangle + |1\rangle\right).$$

Časovni razvoj valovne funkcije je:

$$|\psi,t\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|0\rangle e^{-i\frac{E_0}{\hbar}t} + |1\rangle e^{-i\frac{E_1}{\hbar}t}\right) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|0\rangle e^{-i\frac{\omega}{2}t} + |1\rangle e^{-i\frac{3\omega}{2}t}\right).$$

Uporabimo sedaj časovni razvoj valovne funkcije za izračun $\langle x\rangle$ in $\langle x^2\rangle$. Pri tem bomo za $|\psi,t\rangle$ pisali kar $|\psi\rangle$.

Časovna odvisnost pričakovane vrednosti *x*

$$\begin{aligned}\langle x\rangle &= \langle\psi|\hat{x}|\psi\rangle = \langle\psi|\tfrac{x_0}{\sqrt{2}}\left(a+a^\dagger\right)|\psi\rangle = \tfrac{x_0}{\sqrt{2}}\left(\langle a\rangle + \langle a\rangle^*\right) = \tfrac{x_0}{\sqrt{2}}2\mathrm{Re}\langle a\rangle = \sqrt{2}x_0\mathrm{Re}\langle\psi|a|\psi\rangle = \\ &= \sqrt{2}x_0\mathrm{Re}\left(\tfrac{1}{\sqrt{2}}\left[\langle 0|e^{i\frac{\omega}{2}t} + \langle 1|e^{i\frac{3\omega}{2}t}\right] a\left[|0\rangle e^{-i\frac{\omega}{2}t} + |1\rangle e^{-i\frac{3\omega}{2}t}\right]\tfrac{1}{\sqrt{2}}\right) \\ &= \sqrt{2}x_0\mathrm{Re}\left(\tfrac{1}{2}\langle 0|e^{i\frac{\omega}{2}t}\sqrt{1}|0\rangle e^{-i\frac{3\omega}{2}t}\right) = \\ &= \tfrac{1}{\sqrt{2}}x_0\cos(\omega t)\end{aligned}$$

1. VRSTICA: Tu smo najprej namesto operatorja kraja vstavili njegov zapis z kreacijskim in anihilacijskim operatorjem, nato pa upoštevali distributivnost skalarnega produkta v Hilbertovem prostoru. Nazadnje smo upoštevali še, da je kreacijski operator adjungiran anihilacijskemu, od koder sledi, da je njegova pričakovana vrednost enaka konjugirani pričakovani vrednosti anihilacijskega operatorja.
2. VRSTICA: Bra in ket razpišemo z baznimi valovnimi funkcijami. Nato z anihilacijskim operatorjem delujemo na ket, kjer upoštevamo $a|0\rangle = 0$ in $a|1\rangle = \sqrt{1}|0\rangle$. Nato upoštevamo še $\langle i|j\rangle = \delta_{ij}$. Ostanemo s konstantami in realnim delom časovnega razvoja valovne funkcije.

Časovna odvisnost pričakovane vrednosti kvadrata *x*

$$\begin{aligned}\langle x^2\rangle &= \langle\psi|\hat{x}^2|\psi\rangle = \tfrac{x_0^2}{2}\langle\psi|\left(a+a^\dagger\right)^2|\psi\rangle = \tfrac{x_0^2}{2}\langle\psi|aa + aa^\dagger + a^\dagger a + a^\dagger a^\dagger|\psi\rangle = \\ &= \tfrac{x_0^2}{2}\left(2\mathrm{Re}\langle\psi|a^2|\psi\rangle + \langle\psi|\left(1+2aa^\dagger\right)|\psi\rangle\right) = \tfrac{x_0^2}{2}\left(0 + 1 + \tfrac{2}{\sqrt{2}}\langle\psi|1\rangle\right) = \tfrac{x_0^2}{2}(1+1) = \\ &= x_0^2\end{aligned}$$

1. VRSTICA: Najprej namesto kvadrata operatorja kraja, operator zapišemo z uporabo kreacijskega in anihilacijskega operatorja, nato izraz razpišemo.
2. VRSTICA:
   I. Tu skalarni produkt najprej razbijemo na dva dela:
      - Velja: $\langle\psi|aa + a^\dagger a^\dagger|\psi\rangle = 2\mathrm{Re}\langle\psi|a^2|\psi\rangle$, saj velja $\langle\psi|a^\dagger a^\dagger|\psi\rangle = \langle\psi|(aa)^\dagger|\psi\rangle = \langle\psi|aa|\psi\rangle^*$ in se zato imaginarni deli odštejejo.
      - Velja: $\langle\psi|aa^\dagger + a^\dagger a|\psi\rangle = \langle\psi|1 + 2a^\dagger a|\psi\rangle$, kjer smo uporabili: $\left[a, a^\dagger\right] = 1 = aa^\dagger - a^\dagger a \quad\Rightarrow\quad aa^\dagger + a^\dagger a = 1 + 2a^\dagger a$

   II. Nato upoštevamo, da velja:
      - $2\mathrm{Re}\langle\psi|a^2|\psi\rangle = 0$, ker velja $a^2|\psi\rangle = 0$, saj z anihilacijskim operatorjem dvakrat delujemo na valovno funkcijo oblike $|\psi\rangle = \cdots|0\rangle + \cdots|1\rangle$
      - $\langle\psi|1 + 2a^\dagger a|\psi\rangle = \langle\psi|1|\psi\rangle + \langle\psi|2a^\dagger a|\psi\rangle$, kjer velja: $\langle\psi|1|\psi\rangle = 1$, saj je valovna funkcija ψ normirana. V drugem delu velja: $a^\dagger a|\psi\rangle = 0 + \frac{1}{\sqrt{2}}e^{-i\frac{3\omega}{2}t}\sqrt{1}\sqrt{1}|1\rangle$, tako, da dobimo

        $\langle\psi|2a^\dagger a|\psi\rangle = \frac{2}{\sqrt{2}}\left[\langle 0|e^{i\frac{\omega}{2}t} + \langle 1|e^{i\frac{3\omega}{2}t}\right]\frac{1}{\sqrt{2}}\left[e^{-i\frac{3\omega}{2}t}|1\rangle\right] = \frac{2}{\sqrt{2}}\langle\psi|1\rangle = 1$, kjer upoštevamo še $\langle i|j\rangle = \delta_{ij}$

Časovna odvisnost anihilacijskega operatorja

Časovni razvoj in Hamiltonov operator

Pokažimo najprej, da valovno funkcijo, s pomočjo Hamiltonovega operatorja, razvijemo v času kot:

$$|\psi,t\rangle = e^{-i\frac{\hat{H}}{\hbar}t}|\psi,0\rangle.$$

Začnemo z izrazom $|\psi,0\rangle = \sum c_n|n\rangle$, ki ga razvijemo v času z uporabo gornjega izraza:

$$|\psi,t\rangle = e^{-i\frac{\hat{H}}{\hbar}t}\sum c_n|n\rangle = \sum c_n e^{-i\frac{\hat{H}}{\hbar}t}|n\rangle = \sum_n c_n \sum_m \frac{\left(-i\frac{t}{\hbar}\right)^m}{m!}\hat{H}^m|n\rangle = \sum_n c_n \sum_m \frac{\left(-i\frac{t}{\hbar}\right)^m}{m!}E_n^m|n\rangle =$$
$$= \sum c_n e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t}|n\rangle$$

V računu smo eksponentni del najprej razvili v potenčno vrsto, upoštevali zvezo $\hat{H}^m|n\rangle = E_n^m|n\rangle$, nato pa vrsto spet izrazili v funkcijski obliki.

Izračun časovne odvisnosti

$$\langle\psi,t|\hat{x}|\psi,t\rangle = \langle\psi,0|\underbrace{e^{i\frac{\hat{H}}{\hbar}t}\hat{x}e^{-i\frac{\hat{H}}{\hbar}t}}_{\hat{x}(t)}|\psi,0\rangle = \langle\psi,0|\hat{x}\left(t\right)|\psi,0\rangle$$

Podobno, kot smo definirali $\hat{x}\left(t\right)$, definiramo $a\left(t\right)$:

$$a\left(t\right) = e^{i\frac{\hat{H}}{\hbar}t}ae^{-i\frac{\hat{H}}{\hbar}t}.$$

Izraz odvajamo in dobimo:

$$\dot{a}\left(t\right) = \frac{i}{\hbar}\underbrace{\hat{H}e^{i\frac{\hat{H}}{\hbar}t}}_{=e^{i\frac{\hat{H}}{\hbar}t}\hat{H}}ae^{-i\frac{\hat{H}}{\hbar}t} + e^{i\frac{\hat{H}}{\hbar}t}\underbrace{\frac{\partial a}{\partial t}}_{=0}e^{-i\frac{\hat{H}}{\hbar}t} - e^{i\frac{\hat{H}}{\hbar}t}a\frac{i}{\hbar}\hat{H}e^{-i\frac{\hat{H}}{\hbar}t} = \frac{i}{\hbar}e^{i\frac{\hat{H}}{\hbar}t}\left[\hat{H},a\right]e^{-i\frac{\hat{H}}{\hbar}t} =$$
$$= \frac{i}{\hbar}\left(\underbrace{e^{i\frac{\hat{H}}{\hbar}t}\hat{H}e^{-i\frac{\hat{H}}{\hbar}t}}_{=\hat{H}}\underbrace{e^{i\frac{\hat{H}}{\hbar}t}ae^{-i\frac{\hat{H}}{\hbar}t}}_{=a(t)} - \underbrace{e^{i\frac{\hat{H}}{\hbar}t}ae^{-i\frac{\hat{H}}{\hbar}t}}_{=a(t)}\underbrace{e^{i\frac{\hat{H}}{\hbar}t}\hat{H}e^{-i\frac{\hat{H}}{\hbar}t}}_{=\hat{H}}\right) =$$
$$= \frac{i}{\hbar}\left[\hat{H},a\left(t\right)\right]$$

V računu smo upoštevali, da operatorja $\hat{H}$ in $e^{\pm i\frac{\hat{H}}{\hbar}t}$ komutirata, tako, da velja:

$$\hat{H}e^{\pm i\frac{\hat{H}}{\hbar}t} = e^{\pm i\frac{\hat{H}}{\hbar}t}\hat{H} \quad\Rightarrow\quad e^{i\frac{\hat{H}}{\hbar}t}\hat{H}e^{-i\frac{\hat{H}}{\hbar}t} = e^{i\frac{\hat{H}}{\hbar}t}e^{-i\frac{\hat{H}}{\hbar}t}\hat{H} = \hat{H}.$$

Preden nadaljujemo z izračunom, si za poljubna operatorja *A* in *B* poglejmo še nekaj lastnosti časovnega razvoja operatorjev:

- $\dot{A}\left(t\right) = \frac{i}{\hbar}\left[\hat{H},A\left(t\right)\right] + \left(\frac{\partial A}{\partial t}\right)\left(t\right)$
- Pokažimo, da velja zveza: $\left[\hat{H},A\right]\left(t\right) = \left[\hat{H}\left(t\right),A\left(t\right)\right]$
  $$\left[\hat{H},A\right]\left(t\right) = e^{i\frac{\hat{H}}{\hbar}t}\left[\hat{H},A\right]e^{-i\frac{\hat{H}}{\hbar}t} = e^{i\frac{\hat{H}}{\hbar}t}\left(\hat{H}A - A\hat{H}\right)e^{-i\frac{\hat{H}}{\hbar}t} = e^{i\frac{\hat{H}}{\hbar}t}\hat{H}Ae^{-i\frac{\hat{H}}{\hbar}t} - e^{i\frac{\hat{H}}{\hbar}t}A\hat{H}e^{-i\frac{\hat{H}}{\hbar}t} =$$
  $$= \underbrace{e^{i\frac{\hat{H}}{\hbar}t}\hat{H}e^{-i\frac{\hat{H}}{\hbar}t}}_{=\hat{H}(t)}\underbrace{e^{i\frac{\hat{H}}{\hbar}t}Ae^{-i\frac{\hat{H}}{\hbar}t}}_{=A(t)} - \underbrace{e^{i\frac{\hat{H}}{\hbar}t}Ae^{-i\frac{\hat{H}}{\hbar}t}}_{=A(t)}\underbrace{e^{i\frac{\hat{H}}{\hbar}t}\hat{H}e^{-i\frac{\hat{H}}{\hbar}t}}_{=\hat{H}(t)} = \left[\hat{H}\left(t\right),A\left(t\right)\right]$$
- $\left(AB\right)\left(t\right) = A\left(t\right)B\left(t\right)$
- $\left(A+B\right)\left(t\right) = A\left(t\right) + B\left(t\right)$
- $\left(\lambda A\right)\left(t\right) = \lambda A\left(t\right)$

Nadaljujmo z izračunom časovne odvisnosti anihilacijskega operatorja:

$$\dot{a}\left(t\right) = \frac{i}{\hbar}\left[\hat{H}\left(t\right),a\left(t\right)\right] + \underbrace{\left(\frac{\partial a}{\partial t}\right)\left(t\right)}_{=0} = \frac{i}{\hbar}\left[\hat{H},a\right]\left(t\right)$$

- Velja: $\left[\hat{H},a\right] = \left[\hbar\omega\left(a^\dagger a + \frac{1}{2}\right),a\right] = \hbar\omega\left(\underbrace{\left[a^\dagger,a\right]}_{=-1}a + a^\dagger\underbrace{\left[a,a\right]}_{=0}\right) = -\hbar\omega a$

Od tod dobimo diferencialno enačbo za anihilacijski operator, ki je oblike:

$$\dot{a}\left(t\right)=\frac{i}{\hbar}\hbar\omega e^{i\frac{\hat{H}}{\hbar}t}ae^{-i\frac{\hat{H}}{\hbar}t}=-i\omega a\left(t\right)$$

Rešitev enačbe je $a\left(t\right)=Ce^{-i\omega t}$, kjer upoštevamo še: $a\left(0\right)=C=a$.

Časovni razvoj anihilacijskega operatorja je torej:

$a\left(t\right)=ae^{-i\omega t}$.

Časovna odvisnost pričakovane vrednosti *x*

Izračunajmo sedaj pričakovano vrednost koordinate še s časovnim razvojem anihilatorskega operatorja. Iz prvega izračuna vemo, da je $\langle x\rangle=\sqrt{2}x_0\mathrm{Re}\langle a\rangle$.

$$\langle x\rangle=\sqrt{2}x_0\mathrm{Re}\langle a\rangle=\sqrt{2}x_0\mathrm{Re}\langle\psi|a\left(t\right)|\psi\rangle=\sqrt{2}x_0\mathrm{Re}\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\langle 0|+\langle 1|\right)ae^{-i\omega t}\frac{1}{\sqrt{2}}\left(|0\rangle+|1\rangle\right)\right)=$$
$$=\frac{1}{\sqrt{2}}x_0\mathrm{Re}\left(\left(\langle 0|+\langle 1|\right)e^{-i\omega t}|0\rangle\right)=\frac{x_0}{\sqrt{2}}\cos\left(\omega t\right)$$

Časovna odvisnost pričakovane vrednosti kvadrata *x*

Izračunajmo s časovnim razvojem anihilatorskega operatorja še pričakovano vrednost kvadrata koordinate . Iz prvega izračuna vemo, da je $\langle x^2\rangle=\frac{x_0^2}{2}\left(2\mathrm{Re}\langle\psi|\left(a\left(t\right)\right)^2|\psi\rangle+\langle\psi|\left(1+2a\left(t\right)a^\dagger\left(t\right)\right)|\psi\rangle\right)$.

Upoštevamo naslenje zveze:

- Ko v enačbo vstavimo $\left(a\left(t\right)\right)^2$, z enakimi argumenti, kot v prvem primeru velja: $\langle\psi|a^2|\psi\rangle=0$.
- Ker je valovna funkcija ψ normirana, je $\langle\psi|1|\psi\rangle=1$.
- Za adjungirane operatorje velja: $\left(AB\right)^\dagger=B^\dagger A^\dagger$. Od tod dobimo iz časovnega razvoja anihilacijskega operatorja kreacijskega: $a^\dagger\left(t\right)=\left(ae^{-i\omega t}\right)^\dagger=e^{i\omega t}a^\dagger$.

V enačbo vstavimo časovni razvoj kreacijskega operatorja, upoštevamo ostali zvezi in zveze, ki smo jih uporabili v prvem primeru ter dobimo:

$$\langle x^2\rangle=\frac{x_0^2}{2}\left(0+1+2\langle\psi|\left(a\,\underbrace{e^{-i\omega t}e^{i\omega t}}_{=1}a^\dagger\right)|\psi\rangle\right)=\frac{x_0^2}{2}\left(0+1+\frac{2}{\sqrt{2}}\left[\langle 0|+\langle 1|\right]\frac{1}{\sqrt{2}}\left[|1\rangle\right]\right)=\frac{x_0^2}{2}\left(0+1+1\right)=x_0^2$$

.

Vzpostavljeno iz »http://burana.ijs.si/wiki/index.php/Harmonski_oscilator_I«

- |
- Članek |
- Pogovor |
- Uredite stran |
- Zgodovina strani |

- |
- Kaj se povezuje sem |
- Sorodne spremembe |
- Naloži datoteko |
- Posebne strani |
- Prijavite se / registrirajte se |

Čas zadnje spremembe: 16:21, 16 julij 2007. Stran je bila naložena 3.313-krat.

- Z Kvantna Mehanika I 2006 - 2007 |
- Zanikanja odgovornosti |
- Powered by MediaWiki |
- Design by Paul Gu

Koherentna stanja harmonskega oscilatorja

Ana Dergan

24. marec 2008

1 Koherentno stanje

Koherentno stanje je lastno stanje anihilacijskega operatorja:

$$a|z\rangle = z|z\rangle, \qquad z \in \mathbb{C} \qquad \text{lastna vrednost.} \tag{1}$$

Poiščemo ga tako, da ga razvijemo po lastnih stanjih Hamiltonovega operatorja:

$$|z\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} c_n|n\rangle, \qquad c_n = \langle n|z\rangle \tag{2}$$

Na enačbo (1) od leve delujemo z $\langle n|$:

$$\begin{aligned} \langle n|a|z\rangle &= z\langle n|z\rangle \\ \langle a^\dagger n|z\rangle &= z\langle n|z\rangle \\ \sqrt{n+1}\langle n+1|z\rangle &= z\langle n|z\rangle \\ \sqrt{n+1}c_{n+1} &= zc_n \\ c_n &= \frac{z^n}{\sqrt{n!}}c_0 \end{aligned} \tag{3}$$

Dobili smo rekurzijsko zvezo za koeficiente razvoja. c_0 določimo iz normalizacijskega pogoja:

$$\begin{aligned} \langle z|z\rangle &= 1 \\ \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!}|c_0|^2|z^3n|^2\langle n|n\rangle &= 1 \\ |c_0|^2 e^{|z|^2} &= 1 \\ |c_0| = e^{-\frac{|z^2|}{2}} &= c_0 \end{aligned}$$

Koeficiente vstavimo v razvoj (2):

$$|z\rangle = \sum e^{-\frac{|z|^2}{2}} \frac{z^n}{\sqrt{n!}}|n\rangle \tag{4}$$

2 Časovni razvoj koherentnega stanja

Ker smo naredili razvoj po lastnih stanjih Hamiltonovega operatorja, dobimo časovni razvoj enostavno tako, da vsakemu členu pritaknemo faktor $e^{-iE_n/\hbar}$.

$$|z,t\rangle = \sum e^{-\frac{|z|^2}{2}} \frac{z^n}{\sqrt{n!}} e^{-i\omega(n+\frac{1}{2})t}|n\rangle$$

Izraz $|z|$ smemo zamenjati z $|ze^{-i\omega t}|$, ker je $|e^{-i\omega t}| = 1$. Gornjo vsoto še malo preoblikujemo:

$$|z,t\rangle = e^{-i\omega t/2} \sum \frac{1}{\sqrt{n!}}(ze^{-i\omega t})^n e^{-|ze^{-i\omega t}|^2/2}$$

Če primerjamo dobljeni izraz s (4) ugotovimo, da je tudi $|z,t\rangle$ koherentno stanje. Njegova lastna vrednost je $ze^{-i\omega t}$.

3 Pričakovane vrednosti: $\langle x\rangle, \langle x^2\rangle, \langle p\rangle, \langle p^2\rangle$ in ustrezne nedoločenosti

Najprej si izpeljemo zvezo, ki nam bo koristila pri vseh nadaljnih izračunih.

$$\langle z|a^{\dagger n}a^m|z\rangle = \langle a^n z|a^m z\rangle = (z^n)^* z^m \langle z|z\rangle = (z^n)^* z^m \tag{5}$$

Operatorje bomo izrazili z a in $a^\dagger$:

$$x = \frac{x_0}{\sqrt{2}}(a + a^\dagger)$$

$$x^2 = \frac{x_0^2}{2}(a^\dagger a + a^\dagger a^\dagger + aa + aa^\dagger)$$

Za izračun $\langle aa^\dagger\rangle$ si s (5) ne moremo pomagati, zato $aa^\dagger$ izrazimo s pomočjo komutatorja: $aa^\dagger = 1 + a^\dagger a$. S pomočjo (5) tako dobimo:

$$\langle x\rangle = \langle z|x|z\rangle = \frac{x_0}{\sqrt{2}}(z^* + z) = x_0\sqrt{2}Re(z)$$

$$\langle x^2\rangle = \frac{{x_0}^2}{2}(2z^*z + z^{*2} + z^2 + 1) = \frac{{x_0}^2}{2}((z + z^*)^2 + 1) = \frac{{x_0}^2}{2}((2Re(z))^2 + 1)$$

Izračunamo še nedoločenost:

$$\delta x = \sqrt{\langle x^2\rangle - \langle x\rangle^2} = \frac{x_0}{\sqrt{2}}$$

Pogledamo si še nedoločenost gibalne količine.
Najprej izrazimo gibalno količino in njen kvadrat z operatorjema a in $a^\dagger$:

$$p = p_0 \frac{1}{\sqrt{2}i}(a - a^\dagger)$$

$$p^2 = -\frac{p_0^2}{2}(a^2 - aa^\dagger - a^\dagger a + a^{\dagger 2})$$

Zdaj lahko izračunamo $\langle p\rangle$ in $\langle p^2\rangle$:

$$\langle p\rangle = p_0 \frac{1}{\sqrt{2}i}(z - z^*) = \sqrt{2}p_0 Im(z)$$

$$\langle p^2\rangle = -\frac{p_0^2}{2}(z^2 - 1 - 2z^*z + z^{*2}) = -\frac{p_0^2}{2}((z - z^*)^2 - 1) = 2p_0^2 Im(z)^2 + \frac{p_0^2}{2}$$

Nedoločenost gibalne količine je:

$$\delta p = \sqrt{\langle p^2\rangle - \langle p\rangle^2} = \frac{p_0}{\sqrt{2}}$$

Na koncu izračunamo produkt nedoločenosti koordinate x in gibalne količine:

$$\delta x \delta p = \frac{1}{2}p_0^2 x_0^2.$$

Ker med p_0 in x_0 obstaja povezava $p_0 = \frac{\hbar}{x_0}$, je produkt nedoločenosti ravno $\hbar/2$. V eni izmed prejšnjih nalog pa smo dokazali, da ima najmanjši možen produkt nedoločenosti koordinate in gibalne količine valovna funkcija Gaussove oblike. Tako smo pokazali, da je koherentno stanje harmonskega oscilatorja:

$$\Psi(x) = \frac{1}{\sqrt[4]{x_0^2\pi}} exp(-\frac{(x - \sqrt{2}x_0 Re(z))^2}{2x_0^2}) exp(\frac{i\sqrt{2}p_0 Im(z)x}{\hbar})$$

Koherentna stanja harmonskega oscilatorja II

Iz Kvantna mehanika I 2007 - 2008

Naloga

Delec z nabojem *e* je v osnovnem stanju harmonskega oscilatorja $H = \frac{p^2}{2m} + \frac{kx^2}{2}$. Ob $t = 0$ v trenutku vključimo homogeno električno polje *E*. Kako se s časom spreminjajo pričakovane vrednosti položaja, gibalne količine in energije delca?

Rešitev

S klasično mehaniko bi ta problem lahko predstavljal žogico, nabito z nabojem e^+, ki je pritrjena na vzmet s konstanto vzmeti k, v času $t = 0$ vključimo zunanje električno polje $\vec{E}$, ki kaže v smeri vzmeti. Žogica se potem odmakne za $\delta\vec{x} = \frac{e\vec{E}}{k}$ in začne nihati s frekvenco $\omega = \frac{k}{m}$, tako da sta pričakovani vrednosti položaja in gibalne količine:

$< x(t) >= \delta x - \delta x \cos(\omega t) = \delta x(1 - \cos(\omega t))$ in $< p(t) >= m < \dot{x}(t) >= m\omega\delta x \sin(\omega t)$. Pričakovana vrednost energije pa je: $W = \frac{k\delta x^2}{2}$.

Reševanje v kvantni mehaniki

Stanja oscilatorja(nabitega delca) bodo za čase $t < 0$, opisovale količine brez vijuge, za čase $t \geq 0$ pa količine z vijugo.

$t < 0$:

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{kx^2}{2}$$

$t \geq 0$:

$$\tilde{H} = \frac{p^2}{2m} + \frac{kx^2}{2} + e\phi(x)$$

$\vec{E} = -\nabla\phi(x)$, ker je $\vec{E} = konst = -\nabla\phi(x)$ in je $\vec{E} = (E_x, 0, 0)$ je $\phi(x) = -E_x x \Rightarrow \tilde{H} = \frac{p^2}{2m} + \frac{kx^2}{2} - eE_x x$ Člen $\frac{kx^2}{2} - eE_x x$ bom zapisal kot $\frac{kx^2}{2} - eE_x x = \frac{k}{2}(x - \frac{eE_x}{k})^2 - \frac{e^2E_x^2}{2k}$ in ga še polepšam z novima oznakama $\delta x = \frac{eE_x}{k}$ in $\delta E = \frac{e^2E_x^2}{2k}$ da dobim: $\frac{kx^2}{2} - eE_x x = \frac{k}{2}(x - \delta x)^2 - \delta E$

Povezava med x ***in*** $\tilde{x}$:

$\tilde{x} = x - \delta x$ -za novo izhodišče koordinatnega sistema po vklopu polja sem izbral novo mirovno lego delca, ki je prvotne legepremaknjena za δx v desno.

$\tilde{p} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\tilde{x}} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial(x - \delta x)} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x} \Rightarrow \tilde{p} = p$, operator gibalne količine se ne spremeni!

Z novimi koordinatami se hamilton zapiše:

$$\tilde{H} = \frac{\tilde{p}^2}{2m} + \frac{k\tilde{x}^2}{2} - \delta E = \frac{p^2}{2m} + \frac{k\tilde{x}^2}{2} - \delta E$$

$$H = \hbar\omega(a^\dagger a + \frac{1}{2})$$

$$\tilde{H} = \hbar\tilde{\omega}(\tilde{a}^\dagger\tilde{a} + \frac{1}{2}) - \delta E$$

Ker se frekvenca po vklopu polja ne spremeni je $\tilde{\omega} = \omega$ zato je $\tilde{H} = \hbar\omega(\tilde{a}^\dagger\tilde{a} + \frac{1}{2}) - \delta E$

Povezava med a in $\tilde{a}$:

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}}(\frac{x}{x_0} + i\frac{p}{p_0})$$

$$\tilde{a} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\frac{\tilde{x}}{x_0} + i\frac{\tilde{p}}{p_0}) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\frac{x - \delta x}{x_0} + i\frac{p}{p_0}) = a - \frac{1}{\sqrt{2}}\frac{\delta x}{x_0} \Rightarrow \tilde{a} = a - \frac{1}{\sqrt{2}}\frac{\delta x}{x_0}$$

Na začetku: $a|\psi\rangle = 0$, delec je v osnovnem stanju starega H.

$$0 = a|\psi(0)\rangle = (\tilde{a} + \frac{1}{\sqrt{2}}\frac{\delta x}{x_0})|\psi(0)\rangle \Rightarrow \tilde{a}|\psi(0)\rangle = -\frac{1}{\sqrt{2}}\frac{\delta x}{x_0}|\psi(0)\rangle \Rightarrow \text{staro stanje je koherentno stanje novega hamiltona } \tilde{a}\psi(0) = z\psi(0)$$

$$z = -\frac{1}{\sqrt{2}}\frac{\delta x}{x_0}$$

Za koherentna stanja z velja:

1. $a|z\rangle = z|z\rangle$
2. $< x >= \sqrt{2}x_0 Re(z)$
3. $< p >= \sqrt{2}p_0 Im(z)$

Za našo nalogo bom potreboval prejšnje tri lastnosti, ampak za časovno odvisna koherentna stanja, tako da jih bom še malo predelal:

$|z\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \exp(-\frac{|z|^2}{2})\frac{z^n}{\sqrt{n!}}|n\rangle$ -razvoj koherenčnega stanja po lastnih funkcijah hamiltonovega operatorja

$|z,t\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \exp(-\frac{iE_n}{\hbar}t)\exp(-\frac{|z|^2}{2})\frac{z^n}{\sqrt{n!}}|n\rangle$ -za časovni razvoj samo dodamo člen $\exp(-\frac{iE_n}{\hbar}t)$. E_n je v naši nalogi $\hbar\omega(n+\frac{1}{2}) - \delta E$

$$|z,t\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \exp(\frac{i\delta E}{\hbar}t)\exp(-i\omega(n+\frac{1}{2}))\exp(-\frac{|z|^2}{2})\frac{z^n}{\sqrt{n!}}|n\rangle$$

Ker je $|\exp(-i\omega t)| = 1$ in je zato $|z| = |z||\exp(-i\omega t)| = |z\exp(-i\omega t)|$, bom v zgornjo enačbo za z vstavil $|z| = |z\exp(-i\omega t)|$:

$$|z,t\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \exp(\frac{i\delta E}{\hbar}t)\exp(-i\omega(n+\frac{1}{2}))\exp(-\frac{|z\exp(-i\omega t)|^2}{2})\frac{z^n}{\sqrt{n!}}|n\rangle =$$

$$= |z,t\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \exp(\frac{i\delta E}{\hbar}t)\exp(-\frac{i\omega}{2})\exp\left(-\frac{|z\exp(-i\omega t)|^2}{2}\right)\frac{(z\exp(-i\omega t))^n}{\sqrt{n!}}|n\rangle$$

Konstanto $\exp(\frac{i\delta E}{\hbar}t)\exp(-\frac{i\omega}{2})$ bom označil z A in $z\exp(-i\omega t)$ z u. Tako je: $|z,t\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} A\exp(-\frac{|u|^2}{2})\frac{u^n}{\sqrt{n!}}|n\rangle$

Vemo, da velja $\tilde{a}\sum_{n=0}^{\infty}\exp(-\frac{|u|^2}{2})\frac{u^n}{\sqrt{n!}}|n\rangle = u\sum_{n=0}^{\infty}\exp(-\frac{|u|^2}{2})\frac{u^n}{\sqrt{n!}}|n\rangle$, ker je $\sum_{n=0}^{\infty}\exp(-\frac{|u|^2}{2})\frac{u^n}{\sqrt{n!}}|n\rangle$ razvoj koherentnega stanja za $\tilde{a}$ po lastnih funkcijah hamiltonovega operatorja.

To upoštevam v našem primeru:

$|z,t\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} A\exp\left(-\frac{|u|^2}{2}\right)\frac{u^n}{\sqrt{n!}}|n\rangle$ in $\tilde{a}|z,t\rangle = \tilde{a}\sum_{n=0}^{\infty} A\exp\left(-\frac{|u|^2}{2}\right)\frac{u^n}{\sqrt{n!}}|n\rangle = u\sum_{n=0}^{\infty} A\exp\left(-\frac{|u|^2}{2}\right)\frac{u^n}{\sqrt{n!}}|n\rangle \Rightarrow u = z\exp(-i\omega t)$ je koherentna vrednost za $|z,t\rangle$, nazaj pogledam vrednost za z: $z = -\frac{1}{\sqrt{2}}\frac{\delta x}{x_0}$, potem je $u = -\frac{1}{\sqrt{2}}\frac{\delta x}{x_0}\exp(-i\omega t)$

Pričakovana vrednost položaja:

$< \tilde{x} >= \sqrt{2}x_0 Re(u) = \sqrt{2}x_0(-\frac{1}{\sqrt{2}}\frac{\delta x}{x_0}\cos(\omega t)) = -\delta x\cos(\omega t)$ in $< x >= \delta x(1-\cos(\omega t))$

Pričakovana vrednost gibalne količine:

Ehrenfestov teorem: $< p >= m < \dot{x} >$

$< p >= m < \dot{x} >= m\omega\delta x\sin(\omega t)$ -izračunana z ehrenfestovim teoremom.

Iz lastnosti koherentnih stanj: $< p >= \sqrt{2}p_0 Im(u) = \sqrt{2}p_0(\frac{\delta x}{\sqrt{2}x_0}\sin(\omega t)) = \frac{\sqrt{2}\hbar\delta x}{\sqrt{2}x_0^2}\sin(\omega t) = m\omega\delta x\sin(\omega t)$ -upošteval sem, da je $p_0 = \frac{\hbar}{x_0}$ in $x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$ torej je $< p >= m\omega\delta x\sin\omega t$, kar se ujema s klasičnim rezultatom in ehrenfestovim teoremom.

Del V

Vrtilna količina

Dvodimenzionalni harmonski oscilator

Denis Golež
Kvantna fizika 1

14. maj 2008

Povzetek

Obravnavaj lastna stanja dvodimenzionalnega harmonskega oscilatorja

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}a_x x^2 + \frac{1}{2}a_y y^2$$

V primeru, ko je $a_x = a_y$ poišči taka stanja, ki so hkrati tudi lastna stanja vrtilne količine okoli z osi

$$L = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}$$

1 Lastna stanja 2D harmoničnega oscilatorja

Hamiltonian za 2D oscilator v koordinatah zapišemo kot

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}a_x x^2 + \frac{1}{2}a_y y^2$$

Ta hamiltonian lahko razstavimo na vsoto dve neodvisnih hamiltonianov $H = H_x + H_y$, kjer sta $H_x = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{1}{2}a_x x^2$ in $H_y = \frac{p_y^2}{2m} + \frac{1}{2}a_y y^2$. V tem primeru lahko celotno lastno funkcijo zapišemo kot produkt lastnih funkcij za posamezen hamiltonian: $\Psi = \Psi_x\Psi_y$. Upoštevajoč, da je $H_x\Psi = E_x\Psi$ in podobno za y koordinato lahko napišemo:

$$(H_x + H_y)\Psi_x\Psi_y = E\Psi_x\Psi_y$$

$$(H_x\Psi_x)\Psi_y + (H_y\Psi y)\Psi x = E\Psi x\Psi y$$

$$(E_x + E_y)\Psi_x\Psi_y = E\Psi_x\Psi_y \Rightarrow E = E_x + E_y$$

Ker že poznamo energije enodimenzionalnega harmonskega oscilatorja lahko tako napišemo

$$H = \hbar(\omega_x(n_x + \frac{1}{2}) + \omega_y(n_y + \frac{1}{2}))$$

in lastna funkcija za 2D harminski oscilator je

$$|\Psi\rangle = |n_x\rangle|n_y\rangle = |n_x n_y\rangle$$

Ker imamo lastne funkcije lahko razvijemo Ψ po le-teh

$$|\Psi\rangle = \sum_{n_x, n_y=0}^{\infty} c_{n_x n_y}|n_x n_y\rangle$$

$$c_{n_x n_y} = \langle n_x n_y|\Psi\rangle$$

in časovni razvoj funkcije

$$|\Psi, t\rangle = \sum_{n_x, n_y=0}^{\infty} c_{n_x n_y} e^{-\frac{iE_{n_x n_y} t}{\hbar}}|n_x n_y\rangle$$

2 Posebni primeri

2.1 $a_x > 0, a_y = 0$

V smeri y nimamo potenciala in lastno funkcijo predstavlja ravni val, v smeri x pa imamo vezano n-to lastno stanje harmonskega oscilatorja. Tako je celotna lastna funkcija

$$\langle xy|\Psi\rangle = \Psi_n(x)e^{ik_y y}$$

kjer sta $|\Psi_n\rangle = \frac{a_x^{+n}}{\sqrt{n!}}|0\rangle$ in $k_y = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2mE_y}$ Energija je tako enaka

$$E = E_x + E_y = \frac{(\hbar k_y)^2}{2m} + \hbar\omega_x(n_x + \frac{1}{2})$$

kjer je $\omega_x = \sqrt{\frac{a_x}{m}}$.

2.2 $a_x = a_y$

Če sta konstanti $a_x = a_y = a$ lahko napišemo lastne energije kot

$$E = \hbar\omega(1 + n_x + n_y)$$

kjer je $\omega = \sqrt{\frac{a}{m}}$ in $n_{x,y} = 0, 1, \ldots$. Vidimo, da so stanja degenerirana in ugotovimo, da je n-to stanje n+1 krat degenerirano.

Energija	*Degeneracija*	n_x	n_y
$2\hbar\omega$	2	1	0
		0	1
$3\hbar\omega$	3	2	0
		0	2
		1	1

3 Lastna stanja operatorja vrtilne količine

Operator vrtilne količine v z smeri se glasi

$$L_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}$$

in če napišemo še hamiltonian za 2D harmonski oscilator v polarnih koordinatah:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}[\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}(r\frac{\partial}{\partial r}) + \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2}{\partial^2\varphi}] + \frac{1}{2}ar^2$$

vidimo, da nikjer ne nastopa φ eksplicitno, kar pomeni,da je komutator med hamiltonianom in vrtilno enak nič: $[H, L_z] = 0$. Lastna stanja vrtilne količine dobimo na sledeč način:

$$L_z|\Psi\rangle = \alpha|\Psi\rangle$$

$$-i\hbar\frac{\partial\ |\Psi\rangle}{\partial\varphi} = \alpha|\Psi\rangle$$

$$\frac{d\Psi}{\Psi} = -\frac{\alpha}{i\hbar}$$

$$\Psi = \Psi_0 e^{\frac{i\alpha\varphi}{\hbar}}$$

Upoštevajoč robni pogoj $\Psi(\varphi + 2\pi) = \Psi(\varphi)$, dobimo za vrednosti $\alpha = m\hbar$. Izvedimo še normalizacijo:

$$\int_0^{2\pi} 1 d\varphi \Psi_0\Psi_0^* = 1 \Rightarrow \Psi_0 = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}$$

Tako je lastna funkcija vrtilne količine enaka

$$|m\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im\varphi}$$

Ker hamiltonian in vrtilna količina komutirata so $n = n_1 + n_2$ in m dobra kvantna števila in lahko iz njih sestavimo bazo.

4 Prehod na novo bazo - poseben primer

Želimo bazne vektorje nove baze $|nm\rangle$ zapisati z baznimi vektorji stare baze n_1n_2. Poglejmo si prvi dve stanji harmonskega oscilatorja:

$$\Psi_0(x) = \frac{1}{\sqrt[4]{\pi x_0^2}} e^{-\frac{x^2}{x_0^2}}$$

$$\Psi_1 = \frac{\sqrt{2}x}{x_0} \langle x|0\rangle$$

Poglejmo si stanja $|10\rangle, |01\rangle$ v stari bazi v polarnem zapisu

$$\langle r\varphi|01\rangle = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{1}{x_0^2} r sin\varphi e^{-\frac{r^2}{2x_0^2}}$$

$$\langle r\varphi|10\rangle = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{1}{x_0^2} r cos\varphi e^{-\frac{r^2}{2x_0^2}}$$

Hitro opazimo,da lahko valovni funkciji sestavimo tako, da dobimo ravno člen $e^{im\varphi} = cos(\varphi) \pm isin(\varphi)$, kjer je $m = \pm 1$.

$$|1, \pm 1\rangle_{nm} = \frac{1}{\sqrt{2}} (|1, 0\rangle_{n_1n_2} \pm i|0, 1\rangle_{n_1n_2})$$

.

5 Prehod na novo bazo - splošno

Valovno funkcijo napišemo kot poljubno linearno kombinacijo v stari bazi:

$$\Psi = a|01\rangle + b|10\rangle$$

in upoštevamo, da za lastna stanja vrtilne količine velja

$$L_z\Psi = \hbar m\Psi$$

Če upoštevamo te dve enačbi dobimo

$$aL_z|01\rangle + bL_z|10\rangle = am\hbar|01\rangle + bm\hbar|10\rangle$$

Če sedaj enačbi posamezno množimo s $\langle 10|$ in $\langle 01|$ in enačbe zapišemo v matrični obliki dobimo

$$\begin{pmatrix} \langle 10|L_z|10\rangle & \langle 10|L_z|01\rangle \\ \langle 01|L_z|10\rangle & \langle 01|L_z|01\rangle \end{pmatrix}$$

Vidimo torej, da ima ta matrika lastni vrednosti, ki sta ravno lastni vrednosti operatorja vrtilne količine, in lastna vektorja, ki sta ravno koeficienta razvoja valovne funkcije po novi bazi. Lastni vrednosti matrike nam bosta torej definirali nova bazna vektorja, pripadajoča lastna vektorja pa bosta koeficienta razvoja teh novih baznih vektorjev po stari bazi. V našem primeru torej dobimo:

$$\langle 0,1|L_z|0,1\rangle = \int_0^{2\pi} \frac{2}{\pi}\frac{1}{x_0^2} r^2 \sin\phi(-i\hbar)\cos\phi e^{-\frac{r^2}{x_0^2}} r dr d\phi = 0.$$

Integral je nič, ker je kotni del očitno nič. Podoben integral, ki se ravno tako zaradi kotnega dela izniči imamo tudi pri:

$$\langle 1,0|L_z|1,0\rangle = 0.$$

Preostaneta še:

$$\langle 1,0|L_z|0,1\rangle = \int_0^{2\pi} \frac{2}{\pi}\frac{1}{x_0^4} r^2 \sin\phi(-i\hbar)(-\sin\phi) e^{-\frac{r^2}{x_0^2}} r dr d\phi = i\hbar\frac{2}{\pi}\int \frac{r^2}{x_0^4} e^{-\frac{r^2}{x_0^2}} r dr \int_0^{2\pi} sin^2(\phi) d\phi = i\hbar$$

$$\langle 1,0|L_z|0,1\rangle = -i\hbar$$

Izračunali smo vse elemente matrike, katere lastne vrednosti in vektorje iščemo.

$$\begin{pmatrix} 0 & i\hbar \\ -i\hbar & 0 \end{pmatrix}$$

Lastni vrednosti sta:

$$\lambda^2 - \hbar^2 = 0 \rightarrow \lambda_{1,2} = \pm\hbar$$

Uganemo lastna vektorja in ju normaliziramo:

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}$$

, ki mu pripada lastna vrednost $\hbar$ in

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix}$$

, ki mu pripada lastna vrednost $-\hbar$ Dobili smo:

$$|1,1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1,0\rangle + i|0,1\rangle)$$

$$|1,-1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1,0\rangle - i|0,1\rangle)$$

KVANTNA MEHANIKA 1
Vrtilna količina 3

Klemen Strniša 28030574
Fakulteta za matematiko in fiziko, Univerza v Ljubljani

12. maj 2008

Povzetek

Imamo delec v stanju

$$\psi(\mathbf{r}) = Ax^2 e^{-\lambda r}$$

in nas zanima naslednje

- s kolikšno verjetnostjo izmerimo delcu projekcijo vrtilne količine enako 0
- kakšne so možne vrednosti pri merjenju kvadrata vrtilne količine in s kakšno verjetnostjo izmerimo posamezno
- a kolikšno verjetnostjo izmerimo projekcijo vrtilne količine enako 0, če smo prej izmerili njen kvadrat

I. RAZVOJ

V kvantni mehaniki so fizikalne količine predstavljene z operatorji, in ko neko fizikalno količino izmerimo, kot rezultat meritve vedno dobimo eno od lastnih vrednosti operatorja. Če imamo delec v nekem poljubnem stanju, predstavlja kvadrat koeficient v razvoju po lastnih funkcijah verjetnost, da bomo delcu izmerili lastno vrednost tega stanja.

Zato, če nas zanima katere vrednosti vrtilne količine lahko izmerimo, in s kakšno verjetnostjo, moramo naše dano stanje razviti po lastnih funkcijah. Te so za vrtilno količino krogelne funkcije(spherical harmonics).

$$Y_{l,m} \qquad l = 0, 1, 2 \ldots \qquad -l \leq m \leq l$$

Za razvoj potence x^n(enako za y in z) so potrebne le funkcije z $l \leq n$, kar nam močno olajša računanje. To sledi iz dejstva, da so krogelne funkcije produkt l-tega Legendrovega polinoma in $e^{im\varphi}$. Polinom je l-te stopnje in tako v njem nastopajo vsaj l-te potence(ko je $m = 0$, sicer so že višje). Zato pridejo v poštev le $l \leq n$, saj v razvoju x^n ne bo polinomov z višjimi potencami kot n.

Prvih nekaj lastnih funkcij(tiste ki jih potrebujemo) v koordinatni reprezentaciji in krogelnih koordinatah

$$\begin{aligned}
Y_{00} &= \sqrt{\frac{1}{4\pi}} \\
Y_{10} &= \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos\theta \\
Y_{11} &= -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin\theta \, e^{i\varphi} \\
Y_{20} &= \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (3\cos^2\theta - 1) \\
Y_{21} &= -\sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin\theta \, \cos\theta \, e^{i\varphi} \\
Y_{22} &= \sqrt{\frac{5}{32\pi}} \sin^2\theta \, e^{2i\varphi}
\end{aligned}$$

lastne funkcije za negativne m dobimo tako da upoštevamo relacijo

$$Y_{l,-m} = (-1)^m Y^*_{l,m}$$

Vse kar ostane zdaj je, da valovno funkcijo za naše štartno stanje dobro pogledamo in razvijemo. V krogelnih koordinatah je valovna funkcija

$$\psi(r,\theta,\varphi) = Ar^2 \sin^2\theta \, \cos^2\varphi \, e^{-\lambda r}$$

in ker se lastne funkcije po katerih razvijamo tičejo le kotnega dela, moramo razviti le del

$$\sin^2\theta \, \cos^2\varphi$$

To naredimo tako da bolj ostro pogledamo funkciji Y_{22} in Y_{2-2}, ki sta si kompleksno konjugiran par, in ju seštejemo

$$\begin{aligned}
Y_{22} + Y_{2-2} = 2Re[Y_{22}] = \\
= \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin^2\theta \, \cos 2\varphi = \\
= \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin^2\theta \, (\cos^2\varphi \, - \sin^2\varphi) = \\
\sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin^2\theta \, (2\cos^2\varphi - 1) = \\
= \sqrt{\frac{15}{2\pi}} \sin^2\theta \, \cos^2\varphi - \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin^2\theta
\end{aligned}$$

To že zgleda skoraj v redu. Prvi člen je do konstante že natanko to kar hočemo, le še drugi člen bi morali znati razviti da bi ga lahko odšteli. Za tega hitro vidimo da se skriva v funkciji Y_{20}

$$\begin{aligned}
Y_{20} = \sqrt{\frac{5}{16\pi}}(3\cos^2\theta - 1) = \\
= \sqrt{\frac{5}{16\pi}}(2 - 3\sin^2\theta) = \\
= \sqrt{\frac{5}{4\pi}} - \sqrt{\frac{45}{16\pi}} \sin^2\theta
\end{aligned}$$

Drugi člen je že to kar potrebujemo, odšteti je treba le še konstanto, ki pa se skriva v funkciji Y_{00}.

Naš razvoj je tako

$$|\psi\rangle = C(|2\,2\rangle + |2\,-2\rangle - \sqrt{\frac{2}{3}}|2\,0\rangle + \sqrt{\frac{10}{3}}|0\,0\rangle)$$

kjer konstanto C hitro določimo iz normalizacije

$$C = \sqrt{\frac{3}{18}}$$

Tako je

$$|\psi\rangle = \sqrt{\frac{3}{18}}|2\,2\rangle + \sqrt{\frac{3}{18}}|2\,-2\rangle - \sqrt{\frac{2}{18}}|2\,0\rangle + \sqrt{\frac{10}{18}}|0\,0\rangle$$

II. REZULTATI MERITEV

Iz razvoja takoj vidimo odgovora na prvi dve vprašanji. Verjetnost da izmerimo projekcijo vrtilne količine 0 je vsota kvadratov koeficientov pred tistimi stanji v razvoju, ki imajo takšno projekcijo.

$$P(l_z = 0) = \frac{2}{18} + \frac{10}{18} = \frac{2}{3}$$

Za kvadrat vrtilne količine so možni izmerki $l^2 = 0,\, 6\hbar^2$ in ustrezne verjetnosti.

$$P(l^2 = 0) = \frac{5}{9}$$
$$P(l^2 = 6\hbar^2) = \frac{4}{9}$$

Če najprej za kvadrat vrtilne količine izmerimo neko vrednost, smo odstranili iz razvoja vse člene, ki nimajo takšnega kvadrata velikosti. Tistih, ki pa imajo ustrezno velikost, pa se operator ne dotakne in se ohrani njihovo razmerje, le normalizacija se popravi. Tako če smo izmerili kvadrat vrtilne količine 0 imamo stanje

$$|\psi\rangle = |0\,0\rangle$$

in z verjetnostjo $P = 1$ izmerimo projekcijo enako 0. Če pa izmerimo kvadrat $6\hbar^2$ pa imamo po meritvi stanje

$$|\psi\rangle = \sqrt{\frac{3}{8}}|2\,2\rangle + \sqrt{\frac{3}{8}}|2\ -2\rangle - \sqrt{\frac{2}{8}}|2\,0\rangle$$

in projekcijo 0 izmerimo z verjetnostjo $P = \frac{1}{4}$.

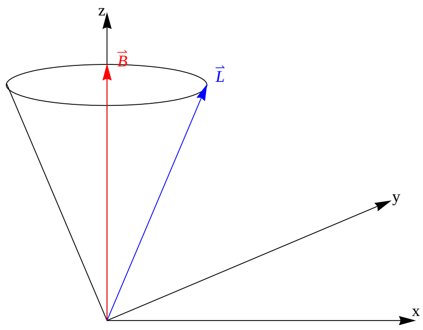
KVANTNA MEHANIKA I
2007/08
vaja: Larmorjeva precesija

Jure Klučar

15. maj 2008

1 Naloga

Delec z vrtilno količino $l = 1$, ki se giblje v krogelno simetričnem potencialu, je v stanju $m = 1$. Ob $t = 0$ vklopimo homogeno magnetno polje v ravnini xz pod kotom ϕ glede na os z. Kakšna je časovna odvisnost pričakovane vrednosti vrtilne količine?



Slika 1: **Precediranje vrtilne količine okoli mag. polja**

2 Lastne funkcije

Hamiltonov oeprator sistema (ob $t > 0$), zapišemo kot

$$\hat{H} = -\gamma \vec{B} \cdot \hat{\vec{L}}, \tag{1}$$

kjer je parameter γ moč sklopitve.
Zaradi enostavnešjega računanja, koordiantni sistem postavimo tako, da z os kaže v smeri magnetnega polja $\vec{B}$ in vektor vrtilne količine (ob $t < 0$) pod kotom ϕ glede na os z v ravnini xz (obratno kot v navodilih).
Mag. polje zapišemo

$$\vec{B} = B_0 \hat{e}_z \tag{2}$$

in hamiltonka v izbranem koordinatnem sistemu

$$\hat{H} = -\gamma B_0 \hat{L}_z. \tag{3}$$

Sedaj moramo poiskati lastne funckije hamiltoniana $\hat{H}$ oz. operatorja $\hat{L}_z$; te so tri, označimo jih

$$\begin{gathered}|\chi_-\rangle \\ |\chi_O\rangle \\ |\chi_+\rangle\end{gathered} \tag{4}$$

kjer ima $|\chi_-\rangle$ tretjo komponento vrtilne količine enako $m = -1$, $|\chi_0\rangle$ enako $m = 0$ in nazadnje $|\chi_+\rangle$ enako $m = 1$. Vse tri imajo velikost vrtilne količine $l = 1$.
Kot rečeno, so to hkrati lastne funkcije operatorja $\hat{H}$, torej imajo dobro definirano energijo. Izračunajmo jih

$$\begin{gathered}\langle\chi_-|\hat{H}|\chi_-\rangle = -\gamma B_0\langle\chi_-|\hat{L}_z|\chi_-\rangle = \gamma B_0\hbar \\ \langle\chi_O|\hat{H}|\chi_O\rangle = 0 \\ \langle\chi_+|\hat{H}|\chi_+\rangle = -\gamma B_0\hbar.\end{gathered} \tag{5}$$

3 Splošna rešitev in začetni pogoj

Splošna rešitev Schroedingerjeve enačbe je linearna kombinacija lastnih funkcij

$$|\chi(t)\rangle = c_-|\chi_-\rangle e^{-i\omega t} + c_0|\chi_0\rangle + c_+|\chi_+\rangle e^{i\omega t}, \tag{6}$$

kjer smo uvedli Larmorjevo frekvenco $\omega = \gamma B_0$.
Potrebujemo koeficiente c_-, c_0 in c_+. Te dobimo iz začetnega pogoja, kar pa ni čisto trivialno. Naloga pravi, da je ob času $t < 0$, vrtilna količina obrnjena v smeri pod kotom ϕ v ravnini xz (Slika1). Če začetno stanje označimo z $|\chi\rangle$ potem mora biti to lastna funckija operatorja $\hat{\vec{L}} \cdot \hat{e}_\phi$, kjer je $\hat{e}_\phi$ enotski vektor v smeri začetne vrtilne količine. Velja

$$\hat{\vec{L}} \cdot \hat{e}_\phi = (\hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z) \cdot (\sin\phi, 0, \cos\phi) = \sin\phi\hat{L}_x + \cos\phi\hat{L}_z. \tag{7}$$

Velja enačba

$$\hat{\vec{L}} \cdot \hat{e}_\phi|\chi\rangle = \sin\phi\hat{L}_x|\chi\rangle + \cos\phi\hat{L}_z|\chi\rangle = \hbar|\chi\rangle, \tag{8}$$

saj je $|\chi\rangle$ lastna funckija z lastno vrednostji $m = 1$. Uporabimo še zvezo $\hat{L}_x = \frac{1}{2}(\hat{L}_+ + \hat{L}_-)$, in začetno stanje zapišemo kot

$$|\chi\rangle = c_-|\chi_-\rangle + c_0|\chi_O\rangle + c_+|\chi_+\rangle, \tag{9}$$

ter uporabimo zveze za premikalne operatorje

$$\begin{gathered}\hat{L}_-|\chi_+\rangle = \hbar\sqrt{2}|\chi_0\rangle \\ \hat{L}_-|\chi_O\rangle = \hbar\sqrt{2}|\chi_-\rangle \\ \hat{L}_-|\chi_-\rangle = 0\end{gathered}$$

ter za $\hat{L}_+$ analogno, in vse skupja vstavimo v (8) dobimo sistem enačb

$$\begin{gathered}\frac{\sqrt{2}}{2}c_0\sin\phi + c_+\cos\phi = c_+ \\ \frac{\sqrt{2}}{2}(c_- + c_+)\sin\phi = c_0\end{gathered} \tag{10}$$

$$\frac{\sqrt{2}}{2}c_0 \sin\phi - c_+ \cos\phi = c_-.$$

Srednja enačba je odveč, uporabni sta le prva in zadnja, ki dasta

$$c_- = \frac{\sin\phi}{1-\cos\phi} = \frac{c_0}{\sqrt{2}} \tan\frac{\phi}{2}$$

$$c_+ = \frac{\sin\phi}{1+\cos\phi} = \frac{c_0}{\sqrt{2}} \tan^{-1}\frac{\phi}{2}$$

Koeficient c_0 dobimo iz normalizacije $|\chi\rangle$

$$c_0 = \sqrt{2}\cos\frac{\phi}{2}\sin\frac{\phi}{2}$$

iz česar sledi

$$c_- = \sin^2\frac{\phi}{2}$$

$$c_+ = \cos^2\frac{\phi}{2}. \tag{11}$$

Dobili smo časovni razvoj valovne funkcije, ki je rešitev našega Hamitoniana

$$|\chi(t)\rangle = \sin^2\frac{\phi}{2}|\chi_-\rangle e^{-i\omega t} + \sqrt{2}\cos\frac{\phi}{2}\sin\frac{\phi}{2}|\chi_0\rangle + \cos^2\frac{\phi}{2}|\chi_+\rangle e^{i\omega t}, \tag{12}$$

iz katere lahko izračunamo željene pričakovane vrednosti.

4 Pričakovane vrednosti komponent operatorja vrtilne količine

Zanima nas, kako se obnašajo vse tri komponente vrtilne količine v danem mag. polju. Nič lažjega, izračunati je potrebno naslednje pričakovane vrednosti

$$\langle \hat{L}_\alpha(t)\rangle = \langle\chi(t)|\hat{L}_\alpha|\chi(t)\rangle,$$

kjer je indeks $\alpha = x, y, z$.
Ob uporabi zvez

$$\langle \hat{L}_x\rangle = Re\langle \hat{L}_+\rangle$$

$$\langle \hat{L}_y\rangle = Im\langle \hat{L}_+\rangle,$$

naj bralec sam za vajo izračuna pričakovane vrednosti.
Rezultati so

$$\begin{aligned}\langle \hat{L}_x\rangle &= \hbar\sin\phi\cos\omega t\\ \langle \hat{L}_y\rangle &= -\hbar\sin\phi\sin\omega t\\ \langle \hat{L}_z\rangle &= \hbar\cos\phi.\end{aligned} \tag{13}$$

Iz (13) je razvidno, da vrtilna količina precedira okoli magnetnega polja z Larmorjevo frekvenco $\omega = \gamma B_0$.

Vrtilna količina II

Matej Podergajs, 28030214

6. maj 2008

1 Naloga:

- Zapiši operator, ki transformira valovno funkcijo v podprostoru $l = 1$ iz baze lastnih funkcij operatorja L_z v bazo lastnih funkcij operatorja L_z' kjer je kot med osema z in z' enak φ.
- Delec z vrtilno količino $l = 1$, ki se giblje v krogelno simetričnem potencialu, je v stanju $m = 1$. Ob $t = 0$ vklopimo homogeno magnetno polje v ravnini xz pod kotom φ glede na os z. Ob času π/ω_L (ω_L je Larmorjeva frekvenca) izmerimo projekcijo vrtilne količine delca na os z. Kolikšna je pričakovana vrednost meritve? S kolikšno verjetnostjo dobimo katerega od možnih rezultatov meritve?

2 Rešitev:

Imamo delec, ki ga ob $t = 0$ predstavimo z valovno funkcijo $|11\rangle$, kar je v vektorskem zapisu $\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$. Njegova vrtilna količina ob $t = 0$ kaže v z smeri (os z koordinatnega sistema, ki ga označimo brez črtice, smo usmerili tako, da kaže v smeri vrtilne količine delca ob $t = 0$). Definiramo koordinatni sistem s črtico, ki ga dobimo z vrtenjem koordinatnega sistema brez črtice za kot φ okrog osi y. Ob $t = 0$ vklopimo zunanje homogeno magnetno polje z gostoto B_0, ki kaže v smeri osi z'. Časovni razvoj valovne funkcije za $t > 0$ je

$$|11, t\rangle = -\sin^2(\varphi/2)|1-1\rangle' e^{-i\gamma B_0 t} + (1/\sqrt{2})\sin\varphi|10\rangle' - \cos^2(\varphi/2)|11\rangle' e^{i\gamma B_0 t}.$$

Za izpeljavo glej nalogo Vrtilna količina I.

Transformirajmo valovno funkcijo v podprostoru $l = 1$ iz baze lastnih funkcij operatorja L_z v bazo lastnih funkcij operatorja L_z' (transformacijo delamo, ker znamo $|11, t\rangle$ razviti po lastnih funkcijah operatorja L_z', po lastnih funkcijah operatorja L_z pa ne). Pri tem je kot med osema z in z' ter med x in x' enak φ, osi y in y' pa sovpadata. To transformacijo opravimo s tole funkcijo operatorja: $e^{i\frac{\mathbf{L}\cdot\boldsymbol{\varphi}}{\hbar}}$. Operatorja $\mathbf{L}$ in $\boldsymbol{\varphi}$ sta v koordinatnem zapisu:

$$\mathbf{L} = \begin{pmatrix} L_x & L_y & L_z \end{pmatrix},$$

$$\boldsymbol{\varphi} = \begin{pmatrix} 0 & \varphi & 0 \end{pmatrix}.$$

Transformacijo valovne funkcije torej opravimo z funkcijo operatorja $e^{i\frac{\varphi L_y}{\hbar}}$, ki jo moramo razviti v potenčno vrsto, da z njo lahko delujemo na valovno funkcijo:

$$e^{i\frac{\varphi L_y}{\hbar}} = 1 + \frac{i\varphi L_y}{\hbar} + \frac{1}{2!}\left(\frac{i\varphi L_y}{\hbar}\right)^2 + \frac{1}{3!}\left(\frac{i\varphi L_y}{\hbar}\right)^3 + \frac{1}{4!}\left(\frac{i\varphi L_y}{\hbar}\right)^4 + \frac{1}{5!}\left(\frac{i\varphi L_y}{\hbar}\right)^5 + \dots$$

L_y zapišemo z L_+ in L_-, za katera vemo kaj naredita z lastnimi funkcijami operatorja L_z:

$$L_+ = L_x + iL_y,$$

$$L_- = L_x - iL_y,$$

torej

$$L_y = \frac{L_+ - L_-}{2i}.$$

Delujmo z operatorjema L_+ in L_- na lastne funkcije operatorja L_z v podprostoru $l = 1$:

$$L_+|11\rangle = 0,$$

$$L_+|10\rangle = \sqrt{2}\hbar|11\rangle,$$

$$L_+|1-1\rangle = \sqrt{2}\hbar|10\rangle,$$

$$L_-|11\rangle = \sqrt{2}\hbar|10\rangle,$$

$$L_-|10\rangle = \sqrt{2}\hbar|1-1\rangle,$$

$$L_-|1-1\rangle = 0.$$

Operator lahko zapišemo kot matriko, valovno funkcijo kot vektor, delovanje operatorja na valovno funkcijo pa potem zapišemo kot množenje matrike in vektorja. Matriko, ki predstavlja operator $iL_y/\hbar$ v podprostoru $l = 1$ zapišemo takole:

$$\begin{bmatrix} \langle 11|\frac{iL_y}{\hbar}|11\rangle & \langle 11|\frac{iL_y}{\hbar}|10\rangle & \langle 11|\frac{iL_y}{\hbar}|1-1\rangle \\ \langle 10|\frac{iL_y}{\hbar}|11\rangle & \langle 10|\frac{iL_y}{\hbar}|10\rangle & \langle 10|\frac{iL_y}{\hbar}|1-1\rangle \\ \langle 1-1|\frac{iL_y}{\hbar}|11\rangle & \langle 1-1|\frac{iL_y}{\hbar}|10\rangle & \langle 1-1|\frac{iL_y}{\hbar}|1-1\rangle \end{bmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \end{bmatrix}.$$

Delovanje operatorja $\left(\frac{iL_y}{\hbar}\right)^2$ predstavimo s tole matriko:

$$\frac{1}{2} \begin{bmatrix} -1 & 0 & 1 \\ 0 & -2 & 0 \\ 1 & 0 & -1 \end{bmatrix}.$$

Operator $\left(\frac{iL_y}{\hbar}\right)^3$ predstavimo z matriko

$$-\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \end{bmatrix},$$

ki se le za predznak razlikuje od matrike za $iL_y/\hbar$. Lahko zapišemo:

$$
\begin{aligned}
e^{i\frac{\varphi L_y}{\hbar}} &= 1+\varphi\frac{iL_y}{\hbar}+\frac{\varphi^2}{2!}\left(\frac{iL_y}{\hbar}\right)^2-\frac{\varphi^3}{3!}\left(\frac{iL_y}{\hbar}\right)-\frac{\varphi^4}{4!}\left(\frac{iL_y}{\hbar}\right)^2+\frac{\varphi^5}{5!}\left(\frac{iL_y}{\hbar}\right)+\ldots= \\
&= 1+\frac{iL_y}{\hbar}\left[\varphi-\frac{\varphi^3}{3!}+\frac{\varphi^5}{5!}-\ldots\right]+\left(\frac{iL_y}{\hbar}\right)^2\left[\frac{\varphi^2}{2!}-\frac{\varphi^4}{4!}+\ldots\right]= \\
&= 1+\frac{iL_y}{\hbar}\sin\varphi+\left(\frac{iL_y}{\hbar}\right)^2[1-\cos\varphi]= \\
&= 1+\frac{1}{\sqrt{2}}\sin\varphi\begin{bmatrix}0&1&0\\-1&0&1\\0&-1&0\end{bmatrix}+\frac{1}{2}(1-\cos\varphi)\begin{bmatrix}-1&0&1\\0&-2&0\\1&0&-1\end{bmatrix}= \\
&= \begin{bmatrix}\cos^2(\frac{\varphi}{2})&\frac{1}{\sqrt{2}}\sin\varphi&\sin^2(\frac{\varphi}{2})\\-\frac{1}{\sqrt{2}}\sin\varphi&\cos\varphi&\frac{1}{\sqrt{2}}\sin\varphi\\\sin^2(\frac{\varphi}{2})&-\frac{1}{\sqrt{2}}\sin\varphi&\cos^2(\frac{\varphi}{2})\end{bmatrix}.
\end{aligned}
$$

Sedaj lahko zapišemo začetno stanje valovne funkcije v sistemu s črtico:

$$
\begin{bmatrix}\cos^2(\frac{\varphi}{2})&\frac{1}{\sqrt{2}}\sin\varphi&\sin^2(\frac{\varphi}{2})\\-\frac{1}{\sqrt{2}}\sin\varphi&\cos\varphi&\frac{1}{\sqrt{2}}\sin\varphi\\\sin^2(\frac{\varphi}{2})&-\frac{1}{\sqrt{2}}\sin\varphi&\cos^2(\frac{\varphi}{2})\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1\\0\\0\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\cos^2(\frac{\varphi}{2})\\-\frac{1}{\sqrt{2}}\sin\varphi\\\sin^2(\frac{\varphi}{2})\end{bmatrix}.
$$

Naredimo časovni razvoj začetnega stanja valovne funkcije v sistemu s črtico:

$$
\begin{bmatrix}\cos^2(\frac{\varphi}{2})e^{i\omega_L t}\\-\frac{1}{\sqrt{2}}\sin\varphi\\\sin^2(\frac{\varphi}{2})e^{-i\omega_L t}\end{bmatrix},\omega_L=\gamma B_0.
$$

Ob času π/ω_L je valovna funkcija v sistemu s črtico enaka

$$
\begin{bmatrix}-\cos^2(\frac{\varphi}{2})\\-\frac{1}{\sqrt{2}}\sin\varphi\\-\sin^2(\frac{\varphi}{2})\end{bmatrix}.
$$

Sedaj gremo nazaj v sistem brez črtice, saj ob času π/ω_L izmerimo projekcijo vrtilne količine na os z. To storimo tako, da na valovno funkcijo delujemo z funkcijo operatorja $e^{i\frac{(-\varphi)L_y}{\hbar}}$, ki ga v matrični obliki zapišemo kot

$$
\begin{bmatrix}\cos^2(\frac{\varphi}{2})&-\frac{1}{\sqrt{2}}\sin\varphi&\sin^2(\frac{\varphi}{2})\\\frac{1}{\sqrt{2}}\sin\varphi&\cos\varphi&-\frac{1}{\sqrt{2}}\sin\varphi\\\sin^2(\frac{\varphi}{2})&\frac{1}{\sqrt{2}}\sin\varphi&\cos^2(\frac{\varphi}{2})\end{bmatrix}.
$$

Pretransformirajmo torej valovno funkcijo v sistem brez črtice:

$$
\begin{bmatrix}\cos^2(\frac{\varphi}{2})&-\frac{1}{\sqrt{2}}\sin\varphi&\sin^2(\frac{\varphi}{2})\\\frac{1}{\sqrt{2}}\sin\varphi&\cos\varphi&-\frac{1}{\sqrt{2}}\sin\varphi\\\sin^2(\frac{\varphi}{2})&\frac{1}{\sqrt{2}}\sin\varphi&\cos^2(\frac{\varphi}{2})\end{bmatrix}\begin{bmatrix}-\cos^2\left(\frac{\varphi}{2}\right)\\-\frac{1}{\sqrt{2}}\sin\varphi\\-\sin^2\left(\frac{\varphi}{2}\right)\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}-\cos^2\varphi\\-\frac{1}{\sqrt{2}}\sin 2\varphi\\-\sin^2\varphi\end{bmatrix},
$$

vmes smo uporabili zveze med kotnimi funkcijami dvojnih kotov. Operator L_z v podprostoru $l=1$ zapišimo kot matriko:

$$
\begin{bmatrix}\langle 11|L_z|11\rangle&\langle 11|L_z|10\rangle&\langle 11|L_z|1-1\rangle\\\langle 10|L_z|11\rangle&\langle 10|L_z|10\rangle&\langle 10|L_z|1-1\rangle\\\langle 1-1|L_z|11\rangle&\langle 1-1|L_z|10\rangle&\langle 1-1|L_z|1-1\rangle\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\hbar&0&0\\0&0&0\\0&0&-\hbar\end{bmatrix}.
$$

Izračunajmo pričakovano vrednost projekcije vrtilne količine na z os:

$$\begin{bmatrix} -\cos^2\varphi \\ -\frac{1}{\sqrt{2}}\sin 2\varphi \\ -\sin^2\varphi \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hbar & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\hbar \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -\cos^2\varphi \\ -\frac{1}{\sqrt{2}}\sin 2\varphi \\ -\sin^2\varphi \end{bmatrix} = \hbar\cos^4\varphi - \hbar\sin^4\varphi = \hbar\cos 2\varphi.$$

To bi tudi klasično pričakovali. Vendar meritev ne da pričakovane vrednosti, ampak eno od lastnih vrednosti operatorja L_z. Verjetnost, da pri posamezni meritvi izmerimo eno od lastnih vrednosti operatorja L_z so:

$$P(L_z = \hbar) = \cos^4\varphi,$$

$$P(L_z = 0) = \frac{1}{2}\sin^2(2\varphi),$$

$$P(L_z = -\hbar) = \sin^4\varphi.$$

Dobimo jih, če kvadriramo absolutno vrednost koeficientov (pri nas so ti koeficienti realni in jih le kvadriramo) v razvoju naše valovne funkcije ob času $t = \pi/\omega_L$, v sistemu brez črtice. Pri tem $P(L_z = \hbar)$ pomeni verjetnost, da pri meritvi projekcije vrtilne količine delca na os z izmerimo vrednost $\hbar$.

Del VI

Spin

Delec s spinom

Eva Grum

6. maj 2008

Naloga Imamo delec s spinom 1/2 ($S_z = \pm 1/2$) in iščemo funkcijo, ki je lastna funkcija spina ne glede na smer v prostoru ($\vec{n}$) oz. v Diracovem zapisu $\vec{S}\cdot\vec{n} \mid \psi\rangle = \frac{h}{2} \mid \psi\rangle$. Se pravi iščemo funkcijo ψ.

Opomba: zaradi enostavnosti sem pisala vse h prečne kar s h.

Najprej si poglejmo kako na vektorje naše 2D baze Hilbertovega prostora, ki jih označmo z $\mid \frac{1}{2}\frac{1}{2}\rangle = \mid\uparrow\rangle$ in $\mid \frac{1}{2}\frac{-1}{2}\rangle = \mid\downarrow\rangle$ delujejo določeni operatorji:

$$S^2 \left|\uparrow\right\rangle = h^2 S\left(S+1\right)\left|\uparrow\right\rangle = \frac{3}{4}h^2\left|\uparrow\right\rangle \qquad S_z\left|\uparrow\right\rangle = \frac{h}{2}\left|\uparrow\right\rangle \qquad S_z\left|\downarrow\right\rangle = \frac{-h}{2}\left|\downarrow\right\rangle$$

$$S^+\left|\uparrow\right\rangle = 0 \qquad S^+\left|\downarrow\right\rangle = h\left|\uparrow\right\rangle S^-\left|\downarrow\right\rangle = 0 \qquad S^-\left|\uparrow\right\rangle = h\left|\downarrow\right\rangle$$

Najprej rešimo problem v Diracovem zapisu in tukaj lahko zapišemo funkcijo ψ kot $\mid\psi\rangle = A\left|\uparrow\right\rangle + B\left|\downarrow\right\rangle$ oz. $\psi = \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix}$. Ker nam lahko vektor $\vec{n}$ kaže v vse smeri v prostoru, ga zapišimo v sferičnih koordinatah in vektor$\vec{S}$ zapišimo po komponentah: $\vec{n} = \begin{pmatrix} \cos\varphi\sin\vartheta \\ \sin\varphi\sin\vartheta \\ \cos\vartheta \end{pmatrix}$ in $\vec{S} = \begin{pmatrix} S_x \\ S_y \\ S_z \end{pmatrix}$.

Zapišemo

$$\vec{S} * \vec{n} = S_x\cos\varphi\sin\vartheta + S_y\sin\varphi\sin\vartheta + S_z\cos\vartheta$$

Ne poznamo delovanja operatorjev S_x in S_y, zato ju poskusimo nadomestiti z operatorjema S^+ in S^-. Izrazimo ju iz zvez $S^+ = S_x + iS_y$ in $S^- = S_x - iS_y$. Dobimo $S_x = \frac{1}{2}\left(S^+ + S^-\right)$ in $S_y = -\frac{i}{2}\left(S^+ - S^-\right)$. Izraza uporabimo v zgornji enačbi in dobimo

$$\vec{S} * \vec{n} = \frac{1}{2}\left(S^+ + S^-\right)\cos\varphi\sin\vartheta + \frac{i}{2}\left(S^+ - S^-\right)\sin\varphi\sin\vartheta + S_z\cos\vartheta =$$

$$\frac{1}{2}S^+\sin\vartheta\underbrace{\left(\cos\varphi - i\sin\varphi\right)}_{e^{-i\varphi}} + \frac{1}{2}S^-\sin\vartheta\underbrace{\left(\cos\varphi + i\sin\varphi\right)}_{e^{i\varphi}} + S_z\cos\vartheta =$$

$$\frac{\sin\vartheta}{2}\left(S^+e^{-i\varphi} + S^-e^{\varphi}\right) + S_z\cos\vartheta$$

Rešujemo osnovno enačbo

$$\left(\frac{\sin\vartheta}{2}\left(S^+e^{-i\varphi} + S^-e^{\varphi}\right) + S_z\cos\vartheta\right)\left(A\left|\uparrow\right\rangle + B\left|\downarrow\right\rangle\right) = \frac{h}{2}\left(A\left|\uparrow\right\rangle + B\left|\downarrow\right\rangle\right)$$

Zdaj uporabimo povezave o delovanju operatorjev zbranih na začetku in ven dobimo

$$\left(A\cos\vartheta + Be^{-i\varphi}\sin\vartheta\right)|\uparrow\rangle + \left(Ae^{i\varphi}\sin\vartheta - B\cos\vartheta\right)|\downarrow\rangle = A|\uparrow\rangle + B|\downarrow\rangle$$

Ker sta spina neodvisna imamo sistem dveh enačb

$$A\cos\vartheta + Be^{-i\varphi}\sin\vartheta - A = 0$$

$$Ae^{i\varphi}\sin\vartheta - B\cos\vartheta - B = 0$$

Zapišemo z dvojnimi koti

$$-2A\left(\sin^2\frac{\vartheta}{2}\right) + 2Be^{-i\varphi}\sin\frac{\vartheta}{2}\cos\frac{\vartheta}{2} = 0$$

$$-2B\left(\cos^2\frac{\vartheta}{2}\right) + 2Ae^{-i\varphi}\sin\frac{\vartheta}{2}\cos\frac{\vartheta}{2} = 0$$

Enačbi, ki smo ju ustrezno pokrajšali razpišemo v sistem matrik

$$\begin{pmatrix} -\sin\frac{\vartheta}{2} & \cos\frac{\vartheta}{2}e^{-i\varphi} \\ \sin\frac{\vartheta}{2}e^{i\varphi} & -\cos\frac{\vartheta}{2} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Iz sistema vidimo, da sta $\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\frac{\vartheta}{2}e^{-i\varphi} \\ \sin\frac{\vartheta}{2} \end{pmatrix}$ oz. naša rešitev je $|\,\psi\rangle = \cos\frac{\vartheta}{2}|\uparrow\rangle + \sin\frac{\vartheta}{2}e^{i\varphi}|\downarrow\rangle$.

Zdaj pa rešimo ta problem še s Paulijevimi matrikami, ki so povezane s opertorjem S na sledeč način: $\vec{S} = \frac{h}{2}\vec{\sigma}$, kjer je $\vec{\sigma} = \begin{pmatrix} \sigma_x \\ \sigma_y \\ \sigma_z \end{pmatrix}$. Posamezne komponente pa so sledeče $\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$, $\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$, $\sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$. ZZapišemo našo začetno enačbo zdaj s temi matrikami:

$$\frac{h}{2}\begin{pmatrix} \sigma_x \\ \sigma_y \\ \sigma_z \end{pmatrix}\cdot\vec{n}\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \frac{h}{2}\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix}$$

$$\left(\begin{array}{c} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \\ \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \\ \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \end{array}\right)\begin{pmatrix} \cos\varphi\sin\vartheta \\ \sin\varphi\sin\vartheta \\ \cos\vartheta \end{pmatrix}\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} \cos\vartheta & \cos\varphi\sin\vartheta - i\sin\varphi\sin\vartheta \\ \cos\varphi\sin\vartheta + i\sin\varphi\sin\vartheta & -\cos\vartheta \end{pmatrix}\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} \cos\vartheta & \sin\vartheta e^{-i\varphi} \\ \sin\vartheta e^{i\varphi} & -\cos\vartheta \end{pmatrix}\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix}$$

Pridemo do iste enačbe, kot pri prvem postopku. Nadaljujemo z razpisom na dvojne kote in reševanjem sistema. Rešitve so enake, kot smo jih našli že zgoraj.

$$\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\frac{\vartheta}{2}e^{-i\varphi} \\ \sin\frac{\vartheta}{2} \end{pmatrix}$$

oz.

$$|\,\psi\rangle = \cos\frac{\vartheta}{2}|\uparrow\rangle + \sin\frac{\vartheta}{2}e^{i\varphi}|\downarrow\rangle.$$

Kvantna mehanika
Domaca naloga
april 2008
Matic Ocepek

Spin II

NALOGA:

Gibanje elektrona v dvodimenzionalnem elektronskem plinu opisuje Hamiltonjan
$H_0 = \frac{\vec{p}^2}{2m}$
kjer je $\vec{p} = (p_x, p_y)$ **s** $p_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial_x}$ **in** $p_y = -i\hbar \frac{\partial}{\partial_y}$ **operator gibalne količine delca.**
Določi lastne energije in zapiši lastne funkcije elektrona v dvodimenzionalnem elektronskem plinu!

V nekaterih sistemih igra pomembno vlogo tudi sklopitev med tirno in spinsko vrtilno količino elektrona. Take sisteme opišemo z Rashbinim Hamiltonijanom
$H = \frac{\vec{p}^2}{2m} + \lambda (\sigma_x p_y - \sigma_y p_x)$.
kjer sta σ_x **in** σ_y **Paulijevi matriki.**
Kakšne so lastne energije in lastne funkcije elektrona, katerega gibanje opisuje Rashbin Hamiltonjan? Namig: Kot nastavek uporabi spinor
$\psi(\vec{r}) = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$, **kjer je** $\vec{r} = (x, y)$ **položaj delca.**
V katero smer je obrnjen spin elektrona v lastnih stanjih, ki jih opisuje zgornji nastavek?

REŠITEV:

Pri nalogi bomo potrebovali nekatere že znane količine

- **odvoda gibalne količine**

$$p_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial_x}$$
$$p_y = -i\hbar \frac{\partial}{\partial_y}$$

- **Paulijeve matrike**

$$\sigma = \begin{pmatrix} \sigma_x \\ \sigma_y \\ \sigma_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \\ \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \\ \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \end{pmatrix}$$

Ker je problem dvodimenzionalni mora veljati tudi

$$p^2 = p_x^2 + p_y^2 = -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} - \hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial y^2}$$

Zapišem Hamiltonko in vstavim zgornje količine

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2\,m} + \lambda \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \cdot \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial y}\right) - \lambda \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \cdot \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\right)$$

Ker seštevam skalar in matriko,
moram prvi del enačbe pomnožiti še z identiteto, da dobim matriko

$$H = -\frac{\hbar^2}{2\,m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}\right) \cdot I + -i\hbar\lambda\left[\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \cdot \left(\frac{\partial}{\partial y}\right) - \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \cdot \left(\frac{\partial}{\partial x}\right)\right]$$

Enačbo pomnožim z identiteto in zapišem po komponentah in upoštevam zvezo

$$H \mid \psi > \; = E \mid \psi >$$

in ψ je oblike

$$\psi = \begin{pmatrix} A\,(\vec{r}) \\ B\,(\vec{r}) \end{pmatrix}$$

Kot rezultat dobim

$$\begin{pmatrix} -\frac{\hbar^2}{2\,m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}\right) & -i\hbar\lambda \frac{\partial}{\partial y} + \hbar\lambda \frac{\partial}{\partial x} \\ -i\hbar\lambda \frac{\partial}{\partial y} - \hbar\lambda \frac{\partial}{\partial x} & -\frac{\hbar^2}{2\,m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}\right) \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} A\,(\vec{r}) \\ B\,(\vec{r}) \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} A\,(\vec{r}) \\ B\,(\vec{r}) \end{pmatrix}$$

2 D matriki na obeh straneh pomnožim in dobim 2 parcialni diferencialni enačbi II. reda

$$-\frac{\hbar^2}{2\,m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}\right) A\,(\vec{r}) + \lambda \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial y} + \hbar \frac{\partial}{\partial x}\right) B\,(\vec{r}) = E \cdot A\,(\vec{r}) \quad (1)$$

$$-\lambda \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial y} + \hbar \frac{\partial}{\partial x}\right) A\,(\vec{r}) - \frac{\hbar^2}{2\,m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}\right) B\,(\vec{r}) = E \cdot B\,(\vec{r}) \quad (2)$$

Za reševanje uporabim spinor nastavek

$A\,(\vec{r}) = A e^{i\,\vec{k}\cdot\vec{r}}$

$B\,(\vec{r}) = B e^{i\,\vec{k}\cdot\vec{r}}$

Če odvajam nastavka po x in y

$\frac{\partial}{\partial x} A\,(\vec{r}) = i k_x\, A\,(\vec{r})$

$\frac{\partial}{\partial y} B\,(\vec{r}) = i k_y\, B\,(\vec{r})$

in druga odvoda

$\frac{\partial^2}{\partial x^2} A\,(\vec{r}) = -k_x^2\, A\,(\vec{r})$

$\frac{\partial^2}{\partial y^2} B\,(\vec{r}) = -k_y^2\, B\,(\vec{r})$

ker je problem 2 D velja tudi $k_x^2 + k_y^2 = k^2$

Nastavka nesem v enačbi (1) in (2) in sproti pokrajšam
še ekponente na obeh straneh rezultat sta navadni enačbi

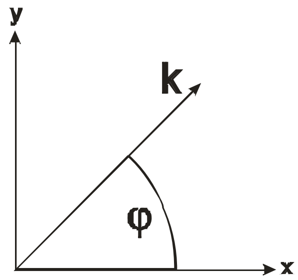
$$+\frac{\hbar^2}{2\,m}\,k^2\,A+\lambda\hbar k_y\,B+i\lambda\hbar k_x\,B=E\cdot A$$

$$\lambda\hbar k_y\,A-\lambda i\hbar k_x\,A+\frac{\hbar^2}{2\,m}\,k^2\,B=E\cdot B$$

Spet sestavim matriko

$$\begin{pmatrix}\frac{\hbar^2}{2\,m}\,(k_x^2+k_y^2) & i\hbar\lambda\,(-ik_y+k_x)\\ i\hbar\lambda\,(-ik_y-k_x) & \frac{\hbar^2}{2\,m}\,(k_x^2+k_y^2)\end{pmatrix}\cdot\begin{pmatrix}A\\B\end{pmatrix}=E\cdot\begin{pmatrix}A\\B\end{pmatrix}$$

Uvedem polarne koordinate :



$$k_x=k\cdot\cos\varphi$$
$$k_y=k\cdot\sin\varphi$$

$$\begin{pmatrix}\frac{\hbar^2\,k^2}{2\,m} & ik\hbar\lambda e^{-i\varphi}\\ -ik\hbar\lambda e^{i\varphi} & \frac{\hbar^2\,k^2}{2\,m}\end{pmatrix}\cdot\begin{pmatrix}A\\B\end{pmatrix}=E\cdot\begin{pmatrix}A\\B\end{pmatrix}$$

Poiščem determinanto tega izraza

$$H\begin{pmatrix}A\\B\end{pmatrix}=E\begin{pmatrix}A\\B\end{pmatrix}\Longrightarrow(H-E\cdot I)\cdot\begin{pmatrix}A\\B\end{pmatrix}=0 \qquad (3)$$

$$\frac{\hbar^2\,k^2}{2\,m}-E=\pm\lambda\hbar k$$

Izrazim energijo elektrona

$$E=\frac{\hbar^2\,k^2}{2\,m}\mp\lambda\hbar k$$

To energijo sedaj uporabim v enačbi (3) da dobim še lastne funckije elektrona
Ker sta za energijo elektrona dve možnosti (plus in minus), rešujem vsako posebej

ENERGIJA S PLUSOM

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \lambda\hbar k$$

$$\begin{pmatrix} -\lambda\hbar k & i k\hbar\lambda e^{-i\varphi} \\ -i k\hbar\lambda e^{i\varphi} & -\lambda\hbar k \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = 0$$

Lastna vektorja tega izraza sta

$$\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -i e^{i\varphi} \end{pmatrix}$$

iz česar lahko zapišem prvo valovno funkcijo ψ_+ za elektron

$$\psi_+ = \cos\frac{\vartheta}{2} \; |\uparrow\rangle - \sin\frac{\vartheta}{2} e^{i\phi} \; |\downarrow\rangle$$

ENERGIJA Z MINUSOM

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \lambda\hbar k$$

$$\begin{pmatrix} \lambda\hbar k & i k\hbar\lambda e^{-i\varphi} \\ -i k\hbar\lambda e^{i\varphi} & \lambda\hbar k \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = 0$$

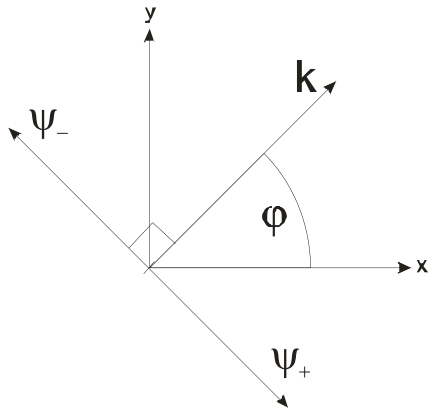
Lastna vektorja tega izraza sta

$$\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i e^{i\varphi} \end{pmatrix}$$

iz česar lahko zapišem drugo valovno funkcijo ψ_- za elektron

$$\psi_- = \cos\frac{\vartheta}{2} \; |\uparrow\rangle + \sin\frac{\vartheta}{2} e^{i\phi} \; |\downarrow\rangle$$

Spin elektrona v lastnih stanjih je po zgornjih nastavkih pravokoten na valovni vektor $\vec{k}$, kar je razvidno s slike



Za kota sem uporabil $\vartheta = \frac{\pi}{2}$ in $\phi = \varphi + \frac{\pi}{2}$.

DOMAČA NALOGA IZ KVANTNE MEHANIKE
Vladimir Radulovič
vp. št. 28030220

1 Naloga

Za sistem dveh delcev s spinom 1/2 velja:

$$\begin{aligned} S_{1x}|\Psi\rangle &= \frac{\hbar}{2}|\Psi\rangle \\ S_{2y}|\Psi\rangle &= \frac{\hbar}{2}|\Psi\rangle \end{aligned}$$

Kolikšna je verjetnost, da ob meritvi velikosti celotnega spina sistema delcev izmerimo vrednost 0?

2 Rešitev

Gornja pogoja lahko povemo bolj preprosto. En spin kaže v smer x, drugi pa v smer y. Glavna os kartezičnega koordinatnega sistema bo kot ponavadi os z. Stanja bomo ločevali glede na velikost skupnega spina in njegovo komponento v smer z.

2.1 Baza

Vsak izmed spinov je lahko glede na os z obrnjen gor ali dol. Za sistem dveh spinov so torej možna štiri produktna stanja:

$$|\uparrow\uparrow\rangle \qquad |\uparrow\downarrow\rangle \qquad |\downarrow\uparrow\rangle \qquad |\downarrow\downarrow\rangle \tag{1}$$

Za ta stanja velja, da je njihova skupna z-komponenta spina kar vsota z-komponent spina za posamezna stanja:

$$\begin{aligned} &S_z|\chi_1\chi_2\rangle = [S_{1z}+S_{2z}]|\chi_1\chi_2\rangle = [S_{1z}|\chi_1\rangle]|\chi_2\rangle + |\chi_1\rangle[S_{2z}|\chi_2\rangle] = \\ &[\hbar m_1|\chi_1\rangle]|\chi_2\rangle + |\chi_1\rangle[\hbar m_2|\chi_2\rangle] = \hbar[m_1+m_2]|\chi_1\chi_2\rangle \end{aligned} \tag{2}$$

V gornji enačbi sta χ_1 in χ_2 lahko $\uparrow$ ali $\downarrow$, operator S_{1z} deluje le na spinski del valovne funkcije prvega delca, operator S_{2z} pa le na spinski del valovne funkcije drugega delca. Stanja, ki sestavljajo gornjo bazo imajo dobro določeno z-komponento spina. Da lahko problem rešimo, bomo potrebovali tudi bazo z dobro določeno velikostjo spina. Stanja, ki to bazo stestavljajo smo vajeni pisati kot $|sm\rangle$, kjer s nam poda velikost skupnega spina in m njegovo projekcijo v smer z. Za to bazo velja naslednje:

$$\begin{aligned} m &= m_1 + m_2 \\ s &= |s_1 - s_2|, |s_1 - s_2| + 1, \ldots, |s_1 + s_2| \\ S_z|sm\rangle &= \hbar m|sm\rangle \\ S^2|sm\rangle &= \hbar^2 s(s+1)|sm\rangle \end{aligned} \tag{3}$$

Povezava med produktnimi stanji in stanji v notaciji $|sm\rangle$ je sledeča:

$$\begin{aligned}
|1,1\rangle &\leftrightarrow |\uparrow\uparrow\rangle \\
|1,0\rangle &\leftrightarrow \frac{1}{\sqrt{2}}\left[|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle\right] \\
|1,-1\rangle &\leftrightarrow |\downarrow\downarrow\rangle \\
|0,0\rangle &\leftrightarrow \frac{1}{\sqrt{2}}\left[|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle\right]
\end{aligned} \tag{4}$$

K temu se bomo vrnili kasneje.

2.2 Začetna valovna funkcija sistema

Iščemo splošno valovno funkcijo sistema dveh spinov $|\psi\rangle$. Določili jo bomo tako, da bomo zapisali njeno najbolj splošno obliko, oz. linearno kombinacijo baznih funkcij, nato pa upoštevali začetna pogoja za projekciji spinov. Nastavek za $|\psi\rangle$ je:

$$|\psi\rangle = a|\uparrow\uparrow\rangle + b|\uparrow\downarrow\rangle + c|\downarrow\uparrow\rangle + d|\downarrow\downarrow\rangle \tag{5}$$

Operatorja S_{1x} in S_{2x} bomo izrazili z zniževalnim in zviševalnim operatorjem za spin. Zapišeta se takole:

$$S_\pm = \left[S_x \pm iS_y\right], \tag{6}$$

kjer + označuje zviševalni operator, - pa zniževalnega. Izražava S_x in S_y se torej glasi:

$$\begin{aligned}
S_x &= \frac{1}{2}\left[S_+ + S_-\right] \\
S_y &= \frac{1}{2i}\left[S_+ - S_-\right]
\end{aligned} \tag{7}$$

Delovanje zniževalnega in zviševalnega operatorja podaja formula:

$$S_\pm|sm\rangle = \hbar\sqrt{l(l+1) - m(m\pm 1)} \quad |s, m\pm 1\rangle \tag{8}$$

Najprej izračunamo stanja, ki jih dobimo, če z operatorjem S_{1x} delujemo na spinski del valovne funkcije za prvi delec, torej na stanja $|\uparrow_1\rangle$ in $|\downarrow_1\rangle$, ter z operatorjem S_{2y} na spinski del valovne funkcije za drugi delec, torej na stanja $|\uparrow_2\rangle$ in $|\downarrow_2\rangle$ (številka v indeksih se nanaša na delec). Imamo:

$$\begin{aligned}
S_{1x}|\uparrow_1\rangle &= \frac{1}{2}\left[S_+ + S_-\right]|\uparrow_1\rangle = \frac{1}{2}S_-|\uparrow_1\rangle = \frac{1}{2}S_-\left|\frac{1}{2},\quad \frac{1}{2}\right\rangle_1 = \\
&= \frac{\hbar}{2}\sqrt{\frac{1}{2}\left(\frac{1}{2}+1\right) - \frac{1}{2}\left(\frac{1}{2}-1\right)} \quad \left|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle_1 = \\
&= \frac{\hbar}{2}\sqrt{\frac{3}{4}+\frac{1}{4}} \quad \left|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle_1 = \frac{\hbar}{2}\left|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle_1 = \frac{\hbar}{2}|\downarrow_1\rangle
\end{aligned} \tag{9}$$

$$\begin{aligned}
S_{1x}|\downarrow_1\rangle &= \frac{1}{2}\left[S_+ + S_-\right]|\downarrow_1\rangle = \frac{1}{2}S_+|\downarrow_1\rangle = \frac{1}{2}S_+\left|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle_1 = \\
&= \frac{\hbar}{2}\sqrt{\frac{3}{4}+\frac{1}{4}} \quad \left|\frac{1}{2},\quad \frac{1}{2}\right\rangle_1 = \frac{\hbar}{2}\left|\frac{1}{2},\quad \frac{1}{2}\right\rangle_1 = \frac{\hbar}{2}|\uparrow_1\rangle
\end{aligned} \tag{10}$$

$$\begin{aligned}
S_{2y}|\uparrow_2\rangle &= \frac{1}{2i}\left[S_+ - S_-\right]|\uparrow_2\rangle = -\frac{1}{2i}S_-|\uparrow_2\rangle = \frac{i}{2}S_-\left|\frac{1}{2},\quad \frac{1}{2}\right\rangle_2 = \\
&= \frac{i\hbar}{2}\sqrt{\frac{3}{4} - \frac{1}{2}\left(-\frac{1}{2}\right)} \quad \left|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle_2 = \frac{i\hbar}{2}\left|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle_2 = \frac{i\hbar}{2}|\downarrow_2\rangle
\end{aligned} \tag{11}$$

$$
\begin{aligned}
S_{2y}|\downarrow_2\rangle &= \frac{1}{2i}[S_+ - S_-]|\downarrow_2\rangle = \frac{1}{2i}S_+|\downarrow_2\rangle = \frac{1}{2i}S_+\left|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle_2 = \\
&= \frac{\hbar}{2i}\sqrt{\frac{3}{4}-\left(-\frac{1}{2}\right)\frac{1}{2}}\left|\frac{1}{2},\quad\frac{1}{2}\right\rangle_2 = \frac{\hbar}{2i}\left|\frac{1}{2},\quad\frac{1}{2}\right\rangle_2 = -\frac{i\hbar}{2}|\uparrow_2\rangle \qquad (12)
\end{aligned}
$$

Sedaj lahko uporabimo začetne pogoje in dobimo začetno valovno funkcijo:

$$
\begin{aligned}
S_{1x}|\psi\rangle &= \frac{\hbar}{2}[a|\downarrow\uparrow\rangle + b|\downarrow\downarrow\rangle + c|\uparrow\uparrow\rangle + d|\uparrow\downarrow\rangle] = \frac{\hbar}{2}|\psi\rangle \qquad (13)\\
S_{2y}|\psi\rangle &= \frac{\hbar}{2}[ia|\uparrow\downarrow\rangle - ib|\uparrow\uparrow\rangle + ic|\downarrow\downarrow\rangle - id|\downarrow\uparrow\rangle] = \frac{\hbar}{2}|\psi\rangle \qquad (14)
\end{aligned}
$$

Iz prve enačbe zgoraj sledi:

$$a = c; \qquad b = d, \qquad (15)$$

iz druge pa:

$$ia = b \qquad (16)$$

Sedaj lahko zapišemo valovno funkcijo $|\psi\rangle$:

$$|\psi\rangle = a[|\uparrow\uparrow\rangle + i|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle + i|\downarrow\downarrow\rangle] \qquad (17)$$

Določiti je treba še konstanto a. To bomo naredili s pomočjo normalizacijskega pogoja $\langle\psi|\psi\rangle = 1$:

$$
\begin{aligned}
\langle\psi|\psi\rangle &= a^2[|\uparrow\uparrow\rangle - i|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle - i|\downarrow\downarrow\rangle]\times\\
&\times [|\uparrow\uparrow\rangle + i|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle + i|\downarrow\downarrow\rangle] = a^2[1+1+1+1] = 4a^2 = 1\\
&\Rightarrow a = \frac{1}{2} \qquad (18)
\end{aligned}
$$

Sledi, da je iskana valovna funkcija ψ enaka:

$$\frac{1}{2}[|\uparrow\uparrow\rangle + i|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle + i|\downarrow\downarrow\rangle] \qquad (19)$$

2.3 Verjetnost, da je ob meritvi skupni spin enak 0

Da ugotovimo, kolikšna je ta verjetnost moramo ravnokar dobljeno valovno funkcijo izraziti s stanji $|lm\rangle$. V predprejšnjem odseku sta zapisani obe bazi in zveze med njima. Stanji $|\uparrow\uparrow\rangle$ in $|\downarrow\downarrow\rangle$ sta ekvivalentni stanjima $|1,1\rangle$ in $|1,-1\rangle$, stanji $|\uparrow\downarrow\rangle$ in $|\downarrow\uparrow\rangle$ pa izrazimo s stanji $|1,0\rangle$ in $|0,0\rangle$ na sledeč način:

$$
\begin{aligned}
|\uparrow\downarrow\rangle &= \frac{\sqrt{2}}{2}[|1,0\rangle + |0,0\rangle]\\
|\downarrow\uparrow\rangle &= \frac{\sqrt{2}}{2}[|1,0\rangle - |0,0\rangle] \qquad (20)
\end{aligned}
$$

$|\psi\rangle$ se v bazi $|sm\rangle$ zapiše takole:

$$
\begin{aligned}
|\psi\rangle &= \frac{1}{2}\left[|1,1\rangle + \frac{i}{\sqrt{2}}[|1,0\rangle + |0,0\rangle] + \frac{1}{\sqrt{2}}[|1,0\rangle - |0,0\rangle] - i|1,-1\rangle\right]\\
&= \frac{1}{2}\left[|1,1\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}(i+1)|1,0\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}(i-1)|0,0\rangle - i|1,-1\rangle\right] \qquad (21)
\end{aligned}
$$

Edino stanje za katerega velja, da je skupni spin enak 0, je stanje $|0,0\rangle$. Valovno funkcijo $|\psi\rangle$ imamo izraženo s stanji, ki imajo dobro določeno velikost skupnega spina; verjetnost, da bomo izmerili ravno stanje s skupnim spinom 0 je absolutni kvadrat koeficienta v razvoju $|\psi\rangle$ pred stanjem $|0,0\rangle$:

$$P(\text{skupni spin} = 0) = \left|\frac{1}{2\sqrt{2}}(i-1)\right|^2 = \frac{1}{8}|i-1|^2 = \frac{1}{4} \tag{22}$$

Domača naloga iz kvantne mehanike: Spin III

Luka Šantelj

1 Naloga

Za delca s spinoma 1 in 3 / 2

1. zapiši produktno bazo in
2. izračunaj Clebsch-Gordanove koeficiente za razvoj baznih funkcij z dobrim celotnim spinom in celotno z-komponento spina po produktni bazi.

Delec s spinom $S_1 = 1$ se giblje v potencialu delca s spinom $S_2 = 3/2$. Potencial, ki ga čuti, je odvisen od medsebojne orientacije spinov obeh delcev: $V(x) = -\lambda\delta(x)\vec{S_1}\cdot\vec{S_2}$. Določi energije in degeneracije vezanih stanj takega sistema.

2 Rešitev

2.1 Produktna baza

Zapišimo najprej bazne funkcije dveh ločenih delcev, enega s spinom $S_1 = 1$ in enega s spinom $S_2 = 3/2$.

S	bazne funkcije
1	$\lvert 1\rangle, \lvert 0\rangle, \lvert -1\rangle$
3/2	$\lvert 3/2\rangle, \lvert 1/2\rangle, \lvert -1/2\rangle, \lvert -3/2\rangle$

Kjer smo v ket pisali le projekcije spina m_s. Za sistem obeh delcev sestavimo produktno bazo, kjer so bazne funkcije vsi produkti omenjenih stanj. Tako imamo 12 baznih funkcij:

$$\begin{array}{cccc} \lvert 1,3/2\rangle & \lvert 1,1/2\rangle & \lvert 1,-1/2\rangle & \lvert 1,-3/2\rangle \\ \lvert 0,3/2\rangle & \lvert 0,1/2\rangle & \lvert 0,-1/2\rangle & \lvert 0,-3/2\rangle \\ \lvert -1,3/2\rangle & \lvert -1,1/2\rangle & \lvert -1,-1/2\rangle & \lvert -1,-3/2\rangle \end{array}$$

2.2 Clebsch-Gordanovi koeficienti

Sedaj bi radi zapisali razvoj baznih funkcij z dobrim celotnim spinom in celotno z-komponento spina po omenjenih produktnih baznih funkcijah.
Kot vemo so za sistem dveh delcev dovoljene velikosti spina (ekvivalentno vrtilnim količinam) enake $S = |S_1 - S_2|, \ldots, (S_1 + S_2)$. Tako imamo v našem primeru s spinoma 1 in 3/2 naslednje možnosti $S = 1/2, 3/2, 5/2$. Za celotno z-komponento spina velja očitno $m = m_1 + m_2$ in tako imamo spet 12 baznih funkcij, kar je tudi prav.

Bazne funkcije:

$$\begin{array}{llllll} |\,1/2,1/2\,\rangle & |\,1/2,-1/2\,\rangle & & & & \\ |\,5/2,-5/2\,\rangle & |\,5/2,-3/2\,\rangle & |\,5/2,-1/2\,\rangle & |\,5/2,1/2\,\rangle & |\,5/2,3/2\,\rangle & |\,5/2,5/2\,\rangle \\ |\,3/2,-3/2\,\rangle & |\,3/2,-1/2\,\rangle & |\,3/2,1/2\,\rangle & |\,3/2,3/2\,\rangle & & \end{array}$$

Kjer v ketu prvo število predstavlja velikost celotnega spina S in drugo velikost celotne projekcije m.
Dve zgornji bazni funkciji lahko na mah zapišemo v produktni bazi. To sta funkciji, katerih celotni spin 5/2 kaže v z smeri in kontra. Takrat sta seveda tudi oba spina obrnjena v z smer:

$$|\,\underbrace{5/2}_{S},\underbrace{5/2}_{m}\,\rangle = |\,\underbrace{1}_{m_1},\underbrace{3/2}_{m_2}\,\rangle \text{ in } |\,5/2,-5/2\,\rangle = |\,-1,-3/2\,\rangle$$

Sedaj ko poznamo razvoj dveh baznih funkcij si lahko pomagamo z operatorjem S_-, ki nam zmanjša velikost projekcije spina za 1. Delujmo z njim na funkcijo $|\,5/2,5/2\,\rangle$:

$$S_-|\,5/2,5/2\,\rangle = \hbar\sqrt{S(S+1)-m(m-1)}\,|\,5/2,3/2\,\rangle = \sqrt{5}\,\hbar\,|\,5/2,3/2\,\rangle$$

Seveda velja $S_- = S_{1-} + S_{2-}$, ker $\vec{S} = \vec{S_1} + \vec{S_2}$. Funkcijo $|\,5/2,3/2\,\rangle$ v produktni bazi dobimo torej tako, da z operatorjem S_- delujemo na funkcijo $|\,5/2,5/2\,\rangle$ zapisano v produktni bazi, $|\,1,3/2\,\rangle$. Upoštevamo, da operator S_{1-} deluje le na projekcijo spina prvega delca in S_{2-} le na drugega, pa dobimo:

$$S_-|\,1,3/2\,\rangle = (S_{1-}+S_{2-})|\,1,3/2\,\rangle = \hbar\,\sqrt{2}|\,0,3/2\,\rangle + \hbar\,\sqrt{3}|\,1,1/2\,\rangle$$

Kot vidimo iz prejšnje enačbe, moramo dobljeni rezultat še deliti z $\hbar\sqrt{5}$ in imamo iskano funkcijo v produktni bazi:

$$|\,5/2,3/2\,\rangle = \sqrt{2/5}|\,0,3/2\,\rangle + \sqrt{3/5}|\,1,1/2\,\rangle$$

Ostale tri funkcije z $S = 5/2$ bi izračunali po enakem postopku, za $|\,5/2,1/2\,\rangle$ bi delovali z S_- na pravkar dobljeni rezulat.
Nadalje lahko izračunamo razvoj funkcije $|\,3/2,3/2\,\rangle$. Vemo, da mora biti linearna kombinacija funkcij $|\,1,1/2\,\rangle$ in $|\,0,3/2\,\rangle$, saj imata le ti dve funkciji vsoto projekcij enako 3/2. Ob upoštevanju pogoja, da mora biti rezulat ortogonalen na razvoj $|\,5/2,3/2\,\rangle$ zlahka pridemo do:

$$|\,3/2,3/2\,\rangle = \sqrt{3/5}|\,0,3/2\,\rangle - \sqrt{2/5}|\,1,1/2\,\rangle$$

Ponovno bi lahko ostale 3 funkcije poiskali s pomočjo operatorja S_-.
Na podoben način bi poiskali še razvoj dveh funkcij z velikostjo spina $S = 1/2$. V praksi se seveda zgornjega zamudnega postopka ne uporablja in se razvoj dobi iz tabel Clebsch-Gordanovih koeficientov.

2.3 Gibanje v potencialu

Poglejmo si energije in degenericjo vezanih stanj sistema dveh delcev z omenjenima spinoma. Hamiltonjan sistema zapišemo kot:

$$H = \frac{p^2}{2m} - \lambda\delta(x)\,\vec{S_1}\cdot\vec{S_2}\,,\quad \lambda > 0$$

Skalarni produkt v hamiltonjanu lahko izrazimo s pomočjo operatorjev velikosti spinov kot:

$$S^2 = (\vec{S_1}+\vec{S_2})^2 = S_1^2 + S_2^2 + 2\,\vec{S_1}\cdot\vec{S_2} \;\Rightarrow\; \vec{S_1}\cdot\vec{S_2} = \tfrac{1}{2}(S^2 - S_1^2 - S_2^2)$$

Valovno funkcijo sestavljata produkt krajevnega $|\,\psi\,\rangle$ in spinskega dela $|\,S\,m\,S_1\,S_2\,\rangle$. Spinski del zapišemo v bazi katere dobri števili sta celotni spin in njegova projekcija, saj so to hkrati tudi dobre funkcije operatorjev velikosti posameznega spina. Delujmo zdaj na valovno funkcijo z H. Upoštevamo še, da kinetični del H-ja in delta potenciala delujeta le na $|\,\psi\,\rangle$, spinski del potenciala pa le na $|\,S\,m\,S_1\,S_2\,\rangle$. Dobimo:

$$H|\,\psi\,\rangle|\,S\,m\,S_1\,S_2\,\rangle = \tfrac{p^2}{2m}|\,\psi\,\rangle|\,S\,m\,S_1\,S_2\,\rangle + (-\lambda\delta(x)\tfrac{1}{2})|\,\psi\,\rangle(S^2 - S_1^2 - S_2^2)|\,S\,m\,S_1\,S_2\,\rangle$$

$$(\hat{S}^2 - \hat{S}_1^2 - \hat{S}_2^2)|\,S\,m\,S_1\,S_2\,\rangle \;=\; \underbrace{(S(S+1)\hbar^2 - S_1(S_1+1)\hbar^2 - S_2(S_2+1)\hbar^2)}_{2\tilde{\lambda}/\lambda}|\,S\,m\,S_1\,S_2\,\rangle$$

S strešicami smo dodatno poudarili, da gre za operatorje, v drugem delu pa za števila. Zapišemo torej:

$$H|\,\psi\,\rangle|\,S\,m\,S_1\,S_2\,\rangle = (\tfrac{p^2}{2m} - \tilde{\lambda}\delta(x))|\,\psi\,\rangle|\,S\,m\,S_1\,S_2\,\rangle$$

Operatorja v oklepaju delujeta le na $|\,\psi\,\rangle$ in od sedaj naprej je reševanje problema povsem ekvivalentno problemu, ki smo ga reševali že v nalogi Delta potencial. Vemo torej, da imamo vezana stanja v primeru ko je $\tilde{\lambda} > 0$. Vstavimo naše podatke, $S_1 = 1$ in $S_2 = 3/2$, v izraz za $\tilde{\lambda}$:

$$\begin{aligned} S = 1/2 \;&\Rightarrow\; \tilde{\lambda} = -\tfrac{5}{2}\lambda\hbar^2 \\ S = 3/2 \;&\Rightarrow\; \tilde{\lambda} = -\lambda\hbar^2 \\ S = 5/2 \;&\Rightarrow\; \tilde{\lambda} = \tfrac{3}{2}\lambda\hbar^2 \end{aligned}$$

Vezana stanja imamo le v primeru,ko je $S = 5/2$. To stanje 6x degenerirano, ker imamo 6 različnih projekcij spina, ki v enačbah ne nastopajo. Energija teh stanj je:

$$E_0 = -\frac{\hbar^2 k_0^2}{2m} \quad \text{kjer je} \;,\quad k_0 = \frac{\tilde{\lambda}m}{\hbar^2}$$

Izpeljavo si lahko pogledate v omenjeni nalogi.

Del VII

Perturbacija

Perturbacija I.

Naloga

Anharmonski oscilator v prvem približku opišemo s potencialom

$$V(x) = \frac{1}{2}kx^2 + cx^4$$

a) Izračunaj popravke energij lastnih stanj v prvem redu perturbacije.
b) Izračunaj popravke energij v drugem redu perturbacije za anharmonski oscilator s potencialom

$$V(x) = \frac{1}{2}kx^2 + cx^3$$

a) Izračun 1. reda perturbacije za simetrični popravek harmonskega potenciala

$$V(x) = \frac{1}{2}kx^2 + cx^4 = \frac{1}{2}kx^2(1 + \frac{2c}{k}x^2)$$

[opomba] Za c morajo veljati naslednje trditve, da je uporaba perturbacijske teorije upravičena:

$$\frac{2c}{k}x^2 << 1 \qquad c << \frac{k}{2}x_0^{-2} \qquad c > 0$$

Hamiltonijan za naš problem je enak vsoti navadnega hamiltonijana za harmonski oscilator in dodatnega prispevka *H'*, ki vsebuje popravek potenciala *V'*.

$$H = H_0 + H' \qquad V' = cx^4$$

Kjer je x0 tipična dolžinska skala v osnovnem stanju harmonskega oscilatorja.
Energije *n*-tega lastnega stanja novega Hamiltonijana zapišemo kot neskončno vsoto perturbacijskih popravkov.

$$E_n = E_{n0} + E_{n1} + ... = E_{n0} + \left\langle n_0 \middle| V' \middle| n_0 \right\rangle + ...$$

$$\mathrm{E_{n0}} = \hbar\omega(\mathrm{n} + \frac{1}{2})$$

Nas bo zanimal samo prvi red perturbacije, zato bomo izračunali matrični element V'_{nn}:

$$E_{n1} = \left\langle n_0 \middle| V' \middle| n_0 \right\rangle = c\left\langle n_0 \middle| x^4 \middle| n_0 \right\rangle = c\left\langle x^2 n_0 \middle| x^2 n_0 \right\rangle$$

Pri tem smo operator x^4 razdelili na dva operatorja x^2 zaradi lažjega računanja.
Za lažje računanje operator x^2 zapišemo s pomočjo kreacijskih in anihilacijskih operatorjev:

$$a^+ = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\frac{x}{x_0} + i\frac{p}{p_0}\right]$$

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\frac{x}{x_0} - i\frac{p}{p_0}\right]$$

Če ju seštejemo, dobimo:

$$a^{+} + a = \sqrt{2}\,\frac{x}{x_0}$$

Ali če izrazimo x:

$$x = \frac{x_0}{\sqrt{2}}\left[a + a^{+}\right]$$

$$x^2 = \frac{x_0^2}{2}\left[a^2 + a^{+}a + aa^{+} + a^{+2}\right]$$

Spomnimo se samo še, kaj predstvaljajo x0 in ω:

$$x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \;\text{ in }\; \omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$$

V nadalnjih računih upoštevamo pravila za delovanje kreacijskega in anihilacijskega operatorja na lastna stanja harmonskega oscilatorja:

$$a^{+}|n\rangle = \sqrt{n+1}\,|n+1\rangle$$

$$a|n\rangle = \sqrt{n}\,|n-1\rangle$$

$$a^2|n\rangle = a\sqrt{n}\,|n-1\rangle = \sqrt{n(n-1)}\,|n-2\rangle$$

$$a^{+2}|n\rangle = a^{+}\sqrt{n+1}\,|n+1\rangle = \sqrt{(n+2)(n+1)}\,|n+2\rangle$$

$$a^{+}a|n\rangle = a^{+}\sqrt{n}\,|n-1\rangle = n|n\rangle$$

$$aa^{+}|n\rangle = a\sqrt{n+1}\,|n+1\rangle = (n+1)|n\rangle$$

S temi pravili lahko izračunamo najprej vrednost izraza:

$$x^2|n\rangle_0 = \frac{x_0^2}{2}\left[a^2 + a^{+}a + aa^{+} + a^{+2}\right]|n\rangle_0 = \frac{x_0^2}{2}\left[\sqrt{n(n-1)}\,|n-2\rangle + n|n\rangle + (n+1)|n\rangle + \sqrt{(n+2)(n+1)}\,|n+2\rangle\right]$$

$$x^2|n\rangle_0 = \frac{x_0^2}{2}\left[\sqrt{n(n-1)}\,|n-2\rangle + (2n+1)|n\rangle + \sqrt{(n+2)(n+1)}\,|n+2\rangle\right]$$

Ko ta rezultat množimo s samim seboj, nam zaradi ortonormiranosti baznih funkcij ostanejo le tisti členi, kjer dobimo produkte enakih stanj:

$$c\langle x^2 n_0 | x^2 n_0\rangle = c\frac{x_0^4}{4}\left[n(n-1) + (2n+1)^2 + (n+2)(n+1)\right] =$$

$$c\frac{x_0^4}{4}\left[n^2 - n + 4n^2 + 4n + 1 + n^2 + 3n + 2\right] = c\frac{x_0^4}{4}\left[6n^2 + 6n + 3\right]$$

Energija stanja našega anharmonskega oscilatorja je torej v prvem redu perturbacije enaka:

$$\mathrm{E}'_{\mathrm{n}} = \hbar\omega(\mathrm{n} + \frac{1}{2}) + c\frac{x_0^4}{4}\left[6n^2 + 6n + 3\right]$$

b) Izračun 1. in 2. reda perturbacije za kubični popravek harmonskega potenciala

$$V(x) = \frac{1}{2}kx^2 + cx^3$$

Ker je potencial lih in ker vemo, da so kvadrati valovnih funkcij sode funkcije, bo popravek k energiji prvega reda perturbacije enak nič. Izračunajmo torej popravek drugega reda.

Popravek energije v drugem redu perturbacije izračunamo takole:

$$E_{n2} = \sum_m \frac{\left|\left\langle n_0 \middle| V' \middle| m_0 \right\rangle\right|^2}{E_{n0} - E_{m0}}$$

Matrične elemente v števcu vsote izračunamo splošno s pomočjo kreacijskega in anihilacijskega operatorja:

$$\langle n|V'|m\rangle = c\langle xn|x^2 m\rangle$$

Rešitev drugega dela (x^2m) poznamo že od prej, rešimo še nov, levi del:

$$|xn\rangle = \frac{x_0}{\sqrt{2}}\left[\sqrt{n+1}|n+1\rangle + \sqrt{n}|n-1\rangle\right]$$

Zdaj lahko zapišemo produkt, ki vsebuje 6 različnih členov (3x2):

$$\langle n|V'|m\rangle = c\langle xn|x^2 m\rangle = c\frac{x_0^3}{2\sqrt{2}}\begin{bmatrix} \sqrt{m(m-1)(n+1)}\langle n+1|m-2\rangle + (2m+1)\sqrt{n+1}\langle n+1|m\rangle + \\ +\sqrt{(m+2)(m+1)(n+1)}\langle n+1|m+2\rangle + \sqrt{m(m-1)n}\langle n-1|m-2\rangle + \\ +(2m+1)\sqrt{n}\langle n-1|m\rangle + \sqrt{(m+2)(m+1)n}\langle n-1|m+2\rangle \end{bmatrix} =$$

Sedaj upoštevamo še ortogonalnost funkcij:

$$\langle n|m\rangle = \delta_{m,n}$$

in tako dobimo:

$$\langle n|V'|m\rangle = c\frac{x_0^3}{2\sqrt{2}}\begin{bmatrix} \sqrt{(n+3)(n+2)(n+1)}\delta_{m,n+3} + (2n+3)\sqrt{n+1}\delta_{m,n+1} + \\ +\sqrt{(n+1)n(n+1)}\delta_{m,n-1} + \sqrt{(n+1)nn}\delta_{m,n+1} + \\ +(2n-1)\sqrt{n}\delta_{m,n-1} + \sqrt{(n-1)(n-2)n}\delta_{m,n-3} \end{bmatrix} =$$

$$= c\frac{x_0^3}{2\sqrt{2}}\begin{bmatrix} \sqrt{(n+3)(n+2)(n+1)}\delta_{m,n+3} + (3n+3)\sqrt{n+1}\delta_{m,n+1} + \\ +3n\sqrt{n}\delta_{m,n-1} + \sqrt{(n-1)(n-2)n}\delta_{m,n-3} \end{bmatrix}$$

Za končni izračun vsote moramo vnesti še lastne energije nezmotenega harmonskega oscilatorja, ter nato zapišemo končni popravek energije v drugem redu perturbacije:

$$E_{n2} = \sum_m \frac{\left|\langle n_0|V'|m_0\rangle\right|^2}{E_{n0}-E_{m0}} = c^2\,\frac{x_0^6}{8}\left[\begin{array}{l}\dfrac{(n+3)(n+2)(n+1)}{\hbar\omega\frac{1}{2}-\hbar\omega(3+\frac{1}{2})}+\dfrac{(3n+3)^2(n+1)}{\hbar\omega\frac{1}{2}-\hbar\omega(1+\frac{1}{2})}+\\ +\dfrac{9n^3}{\hbar\omega\frac{1}{2}-\hbar\omega(-1+\frac{1}{2})}+\dfrac{(n-1)(n-2)n}{\hbar\omega\frac{1}{2}-\hbar\omega(-3+\frac{1}{2})}\end{array}\right]=$$

$$=-c^2\,\frac{x_0^6}{8\hbar\omega}\left[30n^2+30n+11\right]$$

Celotna energija je tako:

$$\mathrm{E}'_{\mathrm{n}} = \hbar\omega(\mathrm{n}+\frac{1}{2})-c^2\,\frac{x_0^6}{8\hbar\omega}\left[30n^2+30n+11\right]$$

Zanima nas, kako se spremeni energija osnovnega stanja vodikovega atoma, če ga postavimo v električno polje $\vec{E}$, ki kaže v smeri osi $\hat{e}_z$. V polju je hamiltonian za atom oblike

$$H = \frac{p^2}{2m} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} - eEz = H_0 + H'.$$

Za nezmoteni atom imamo 2 degenerirani stanji:

$$n = 1 \qquad l = 0 \qquad m_l = 0 \qquad m_s = \pm\frac{1}{2}$$

V prvem redu perturbacije dobimo 2x2 matriko

$$\begin{pmatrix} A & 0 \\ 0 & A \end{pmatrix},$$

kjer sta izvendiagonalna elementa 0, saj je dodatni potencial H neodvisen od spina (to pomeni, da je spinski del valovne funkcije še vedno dober; ker pa zanj velja ortogonalnost, so integrali delta funkcije, ki dajo 0 za funkciji z različnim spinom). Isti argument velja za enakost obeh diagonalnih elementov, ki ju razpišemo v sfernih koordinatah;

$$\begin{array}{rccccc} A = \int & R_{10}^*(r)Y_{00}^*(\theta,\phi) & z & R_{10}(r)Y_{00}(\theta,\phi) & = & 0 \\ parnost: & 1 & -1 & 1 & = & -1 \end{array}$$

Gornji integral je integral po lihi funkciji, saj ima parnost -1 - parnost lastnih funkcij nezmotenega sistema je $(-1)^l$, parnost z pa očitno -1[1]. Torej so vsi členi v prvem redu perturbacije enaki 0, kar pomeni, da gledamo drugi red.

Za drugi red perturbacije računamo energije stanj po formuli

$$E_q^{(2)} = \sum_{p\neq q} \frac{|\langle p|H'|q\rangle|^2}{E_q^{(0)} - E_p^{(0)}} \qquad E_n^{(0)} = \frac{E_0}{n^2}$$

$$E_1^{(2)} = \sum_{n>1,l,m} \frac{|\langle nlm|eEz|100\rangle|^2}{E_0\left(1-\frac{1}{n^2}\right)} \qquad E_0 = -13,6eV$$

Z enakim argumentom kot pri prvem redu smo se znebili spinskega dela (delta funkcija v integralu). Podobno ugotovimo tudi za $m = m_l$ (dokaz pri prejšnji vaji); vsa stanja, ki dajo neničeln integral, imajo $m = 0$. Ko upoštevamo še parnost (kot pri prvem redu), pa dobimo pogoj za lih l; $(-1)^l(-1)(-1)^0$ mora biti enako 1, da funkcija ni liha (in njen integral potemtakem ni 0). Torej

$$E_1^{(2)} = \sum_{n>1,l\text{lih}} \frac{|\langle nl0|eEz|100\rangle|^2}{E_0\left(1-\frac{1}{n^2}\right)}.$$

Za to vsoto sicer obstaja analitična rešitev, vendar bomo mi raje naredili le njeno oceno, kar je lažje, da pa še vedno dovolj dober rezultat. Hitro vidimo,

[1] Liha funkcija ima parnost -1, soda pa 1.

da seštevamo negativne člene - števec je pozitiven zaradi absolutne vrednosti, imenovalec pa je negativen, ker je E_0 negativen. Če torej vzamemo samo prvi člen vsote, dobimo zgornjo mejo (naprej prištevamo samo negativne vrednosti);

$$eE\int R_{21}^*(r)Y_{10}^*(\theta,\phi)zR_{10}(r)Y_{00}(\theta,\phi) = \sqrt{\frac{2^{15}}{3^{10}}}eEr_B$$
$$(E_1^{(2)})_{\text{zgornja}} = \underline{\underline{\frac{2^{17}e^2E^2r_B^2}{3^{11}E_0}}}$$

Za oceno spodnje meje, pa najprej ugotovimo, da imenovalec v vsoti z naraščajočim n raste ($\frac{1}{n^2}$ pada proti 0, $(1-\frac{1}{n^2})$ pa raste proti 1). Ker člene delimo z vedno večjim številom, so le-ti po absolutni vrednosti vedno manjši. Če torej vse člene namesto z njihovim imenovalcem delimo z imenovalcem drugega člena (ki je v absolutnem manjši od ostalih), bomo dobili v absolutnem večje člene v vsoti, ki pa so negativno predznačeni in torej predstavljajo spodnjo mejo. Matematično:

$$\begin{aligned}
E_1^{(2)} &= \sum_{n>1,l\text{lih}} \frac{|\langle nl0|eEz|100\rangle|^2}{E_0\left(1-\frac{1}{n^2}\right)} \geq \\
&\geq \sum_{n>1,l\text{lih}} \frac{|\langle nl0|eEz|100\rangle|^2}{E_0\left(1-\frac{1}{2^2}\right)} = \frac{4e^2E^2}{3E_0}\sum_{n>1,l\text{lih}} |\langle nl0|z|100\rangle|^2
\end{aligned}$$

V tej vsoti pa nas nič ne moti če štejemo zraven tudi člene, ki so enaki 0, tj. člene s poljubnim l in m. Za spodnjo mejo dobimo:

$$\begin{aligned}
(E_1^{(2)})_{\text{spodnja}} &= \frac{4e^2E^2}{3E_0}\sum_{n,l,m} |\langle nlm|z|100\rangle|^2 \\
&= \frac{4e^2E^2}{3E_0}\sum_{n,l,m} \langle nlm|z|100\rangle(\langle nlm|z|100\rangle)^* \\
&= \frac{4e^2E^2}{3E_0}\sum_{n,l,m} \langle nlm|z|100\rangle\langle z|100|nlm\rangle \\
&= \frac{4e^2E^2}{3E_0}\sum_{n,l,m} \langle nlm|z|100\rangle\langle 100|z^\dagger|nlm\rangle \\
&= \frac{4e^2E^2}{3E_0}\sum_{n,l,m} \langle nlm|z|100\rangle\langle 100|z|nlm\rangle \\
&= \frac{4e^2E^2}{3E_0}\sum_{n,l,m} \langle 100|z|nlm\rangle\langle nlm|z|100\rangle \\
&= \frac{4e^2E^2}{3E_0}\langle 100|z^2|100\rangle = \underline{\underline{\frac{(2eEr_B)^2}{3E_0}}}
\end{aligned}$$

Naloga

Izračunaj popravke energij in lastne funkcije prvega vzbujenega stanja vodikovega atoma v homogenem zunanjem električnem polju. Uporabi najnižji red teorije motnje, ki da netrivialne rezultate.

Izračun

Zunanje električno polje orientirajmo tako, da kaže v smeri z osi: $E = E\,\vec{e}_z$. Tedaj lahko zapišemo celoten Hamiltonjan elektrona kot:

$$H = \frac{p^2}{2m} - \frac{e^2}{4pe_0 r} - eEz = H_0 + V$$

kjer smo s H_0 označili Hamiltonjan nemotenega vodikovega atoma, z $V = -eEz$ pa motnjo. Rešitve nezmotenega sistema H_0 poznamo (glej prejšnjo nalogo) – lastne funkcije so

$$\langle r|nlm\rangle = y_{nlm}(r) = R_{nl}(r)Y_{lm}(J, j)$$

kjer so R_{nl} rešitve radialnega dela stacionarne Schrödingerjeve enačbe, Y_{lm} pa krogelne funkcije.
V tej nalogi iščemo popravke prvega vzbujenega stanja – torej so možna kvantna števila:

$$n = 2, \qquad l = \begin{matrix}0\\1\end{matrix}, \qquad m = \begin{matrix}0\\-1,0,1\end{matrix}, \qquad s = 1/2, \qquad m_s = \begin{matrix}1/2\\-1/2\end{matrix},$$

To stanje je osemkrat degenerirano – uporabimo prvi red degenerirane perturbacije. Teh osem stanj se razlikuje po kvantnih številih l, m in m_s, zato bomo označevali stanja z $|lmm_s\rangle$. Matrični elementi motnje

$$\langle lmm_s|-eEz|l'm'm_s'\rangle$$

tvorijo matriko dimenzije 8 × 8, katere lastne vrednosti predstavljajo popravke k lastnim energijam nezmotenega sistema, lastni vektorji pa so popravljene lastne funkcije prvega vzbujenega stanja. Matriko shematično razdelimo na štiri bloke:

	$\|00\uparrow\rangle$	$\|11\uparrow\rangle$	$\|10\uparrow\rangle$	$\|1{-1}\uparrow\rangle$	$\|00\downarrow\rangle$	$\|11\downarrow\rangle$	$\|10\downarrow\rangle$	$\|1{-1}\downarrow\rangle$
$\|00\uparrow\rangle$								
$\|11\uparrow\rangle$								
$\|10\uparrow\rangle$								
$\|1{-1}\uparrow\rangle$				1.	2.			
$\|00\downarrow\rangle$				3.	4.			
$\|11\downarrow\rangle$								
$\|10\downarrow\rangle$								
$\|1{-1}\downarrow\rangle$								

Izračunati torej moramo 64 elementov! A ker je operator H_0 hermitski (tudi matrika motnje je tako hermitska), so elementi pod diagonalo kompleksno konjugirani svojim ustreznikom nad njo – tako moramo izračunati le 36 elementov. Simetrija Hamiltonjana nam pove, da z dodatkom motnje postane problem valjno simetričen okrog izbrane osi z. Klasično: z komponenta vrtilne količine je konstanta gibanja, kvantno pa to izrazimo s komutatorjem:

$$[V, L_z] = 0$$

Za L_z smo namreč že pokazali, da komutira s H_0, za komutator $[L_z, z]$pa se je trivialno prepričati, da je tudi enak nič $(L_z \propto (xd_y - yd_x))$. Torej smo prišli domzaključka, da je tudi slednji izraz enak nič:

$$\langle lmm_s | [V, L_z] | l'm'm'_s \rangle =$$
$$= \langle lmm_s | [VL_z - L_z V] l'm'm'_s \rangle =$$
$$= \langle lmm_s | V | L_z l'm'm'_s \rangle - \langle L_z^+ lmm_s | V | l'm'm'_s \rangle =$$
$$= m'\mathbf{h} \langle lmm_s | V | l'm'm'_s \rangle - m\mathbf{h} \langle lmm_s | V | l'm'm'_s \rangle =$$
$$= \mathbf{h}(m' - m) \langle lmm_s | V | l'm'm'_s \rangle = 0$$

kjer smo upoštevali $L_z^+ = L_z$. Koristna informacija za našo 8 x 8 matriko: od nič različni so le tisti matrični elementi, za katere velja $m = m'$! Podobno naredimo za komutator $[V, \check{S}]$, ki je prav tako enak nič. Dobimo ven $\langle lmm_s | V | l'm'm'_s \rangle = 0$ za $m_s \neq m_s$.

Ne smemo pozabiti, da Hamiltonjan ne deluje na spinski del valovnih funkcij. Tako bodo matrični elementi, kjer imata funkciji različna spinska dela (kvadrant 2 in 3), enaki nič, saj velja $\langle \uparrow | \downarrow \rangle = \langle \downarrow | \uparrow \rangle = 0$. Prav tako ugotovimo, da bosta bloka 1 in 4 enaka, saj je $\langle \uparrow | \uparrow \rangle = \langle \downarrow | \downarrow \rangle = 1$.

Za krogelno simetričen potencial V = V(r) imajo lastne funkcije dobro definirano parnost (t.j. sprememba predznaka pri transformaciji $r \to -r$). Integrand oblike:

$$\int y^*_{nlm} z y_{n'l'm'} d^3 r$$

ima tedaj parnost očitno $p = (-1)^l (-1)(-1)^{l'} = (-1)^{l+l'+1}$. Upoštevajmo še dejstvo, da je integral funkcije z liho parnostjo po celotnem območju enak nič, in vidimo, da so tudi vsi diagonalni matrični elementi enaki nič.

Če si ponovno ogledamo matriko motnje

$$\left(\begin{array}{cccc|ccc}
0 & 0 & \times & 0 & 0 & \cdots & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & \vdots & \ddots & \\
\times & 0 & 0 & 0 & & & \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & & 0 \\
\hline
0 & \cdots & & 0 & & & \\
\vdots & \ddots & & & & & \\
0 & & & 0 & & &
\end{array}\right)$$

vidimo, da je tako od nič različen le matrični element

$$\langle 00|V|10\rangle = \langle 10|V|00\rangle = -eE\int y^{*}_{nlm}\, z\, y_{n'l'm'}\, d^3r$$

Če raje zapišemo v krogelnih koordinatah:

$$\langle 00|V|10\rangle = -eE\int R_{20}(r)Y_{00}(J,j)\,r\cos J R_{21}(r)Y_{10}(J,j)\,r^2 \sin J dr dJ dj$$

V računu nastopajo sledeče funkcije

$$R_{20}(r) = \frac{2}{(2r_b)^{3/2}}\left(1-\frac{r}{2r_b}\right)\exp\left(-\frac{r}{2r_b}\right)$$
$$R_{21}(r) = \frac{1}{\sqrt{3}}\frac{1}{(2r_b)^{3/2}}\frac{r}{r_b}\exp\left(-\frac{r}{2r_b}\right)$$
$$Y_{00}(J,j) = \frac{1}{\sqrt{4p}}$$
$$Y_{10}(J,j) = \sqrt{\frac{3}{4p}}\cos J$$

kjer je r_b Bohrov radij. Integrala ne bomo računali, povedali bomo samo rešitev. Končni rezultat je tako $\langle 00|V|10\rangle = -3eEr_b$. Če še enkrat zapišem sedaj našo pomembno 4 x 4 podmatriko:

	$\|00\uparrow\rangle$	$\|11\uparrow\rangle$	$\|10\uparrow\rangle$	$\|1{-1}\uparrow\rangle$
$\|00\uparrow\rangle$	0	0	$-3eEr_B$	0
$\|11\uparrow\rangle$	0	0	0	0
$\|10\uparrow\rangle$	$-3eEr_B$	0	0	0
$\|1{-1}\uparrow\rangle$	0	0	0	0

Vidimo, da lastni stanji $|11\rangle$ *in* $|1{-1}\rangle$ ostaneta nespremenjeni, drugi dve pa se mešata. Za nas pomembna matrika je torej:

$$\begin{pmatrix} 0 & -3eEr_b \\ -3eEr_b & 0 \end{pmatrix}$$

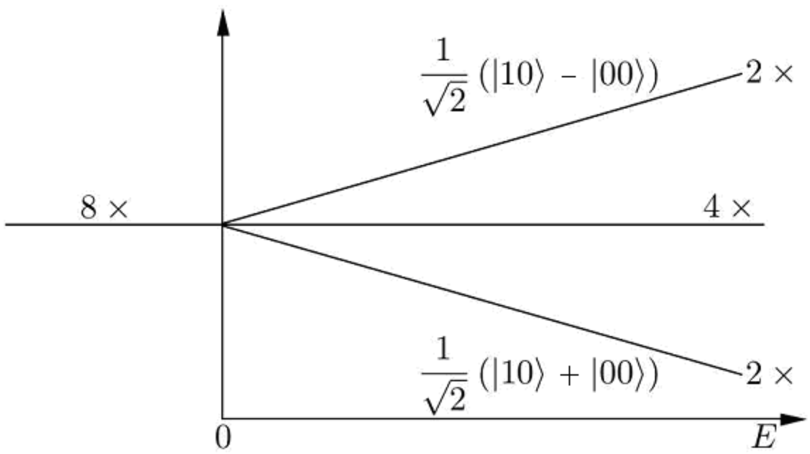
Za lastni vrednosti razberemo

$$l_{1,2} = \pm 3eEr_b$$

s pripadajočima lastnima vektorjema

$$v_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \text{ in } v_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Energijski nivo se nam torej razcepi na tri nivoje. Eden ohrani isto energijo in je štirikrat degeneriran, eden linearno narašča, drugi pa pada z večanjem jakosti zunanjega polja in sta dvakrat degenerirana.



Slika: Degeneracija prvega vzbujenega stanja vodikovega atoma pred in po vklopitvi zunanjega električnega polja. Razlika med nivoji se spreminja linearno z večanjem jakosti polja.

Perturbacije 4

Jure Japelj

9. maj 2008

V tej nalogi si bomo ogledali, kakšne so lastne energije dveh delcev, od katerih ima vsak spin $\frac{1}{2}$, obenem pa poznamo tudi Hamiltonian

$$H = J\vec{S}_1\vec{S}_2 + \frac{g\mu_B}{\hbar}\vec{S}_1\vec{B}. \tag{1}$$

Primer je zanimiv, saj ga lahko rešimo točno in prek teorije perturbacij. Najprej bomo obravnavali prvo možnost.

1 Točen račun

Torej, vemo da sta velikosti posameznih spinov $S_1 = \frac{1}{2}$ in $S_2 = \frac{1}{2}$. Magnetno polje naj bo majhno (da lahko obravnavamo problem prek perturbacijske teorije) in naj kaže v smeri osi z. Sedaj lahko Hamiltonian zapišemo kot

$$H = J\vec{S}_1\vec{S}_2 + \gamma S_{1z}, \tag{2}$$

kjer za vepljemo konstanto $\gamma = \frac{g\mu_B}{\hbar}B$. Iz vrednosti spinov vidimo, da obravnavamo problem dimenzije 4 (vsak delec vsebuje dve, celotno pa dobimo s produktom), možni vrednosti celotnega spina pa sta 0 in 1. Vrednosti vrednosti spinske vrtilne količine v z smeri so glede na vrednosti celotnega spina 0, 1, 0 in -1.

Najprej obravnavamo prvi člen Hamiltoniana. Celotni spin lahko zapišemo kot $\vec{S} = \vec{S}_1 + \vec{S}_2$ in prek kvadriranja tega izraza dobimo produkt spinov

$$\vec{S}_1\vec{S}_2 = \frac{1}{2}\left(S^2 - \frac{3}{2}\hbar^2\right), \tag{3}$$

kjer smo že upoštevali vrednosti spinov in relacijo $S_i^2 = \hbar^2 S_i\,(S_i+1)$. Imamo štiri bazne funkcije, ki jih hočemo zapisati v produktni bazi. Z uporabo Clebsch-Gordanovih koeficientov dobimo naslednje relacije:

$$|00\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\,|\uparrow\downarrow\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}\,|\downarrow\uparrow\rangle\,, \tag{4}$$

$$|11\rangle = |\uparrow\uparrow\rangle\,, \tag{5}$$

$$|10\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\,|\uparrow\downarrow\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}\,|\downarrow\uparrow\rangle\,, \tag{6}$$

$$|1-1\rangle = |\downarrow\downarrow\rangle\,. \tag{7}$$

Prvo stanje predtavlja singletno, ostala tri pa tripletno (torej degenerirano stanje). Sedaj lahko delujemo na posamezno bazno funkcijo s Hamiltonianom. Najlažji primer bo enačba (6), kjer z upoštevanjem enačbe (2) izračunamo

$$H\,|11\rangle = \left(J\vec{S}_1\vec{S}_2 + \gamma S_{1z}\right)|11\rangle = \left(\frac{1}{4}J\hbar^2 + \gamma\frac{\hbar}{2}\right)|11\rangle\,. \tag{8}$$

Na podoben način za ostale tri primere dobimo

$$H|1-1\rangle = \left(\frac{J\hbar^2}{4} - \frac{\gamma\hbar}{2}\right)|1-1\rangle\,, \tag{9}$$

$$H|00\rangle = -\frac{3}{4}J\hbar^2|00\rangle + \frac{\gamma\hbar}{2}|10\rangle\,, \tag{10}$$

$$H|10\rangle = \frac{1}{4}J\hbar^2|10\rangle + \gamma\frac{\hbar}{2}|00\rangle\,. \tag{11}$$

Na tem mestu opazimo, da v enačbah (10) in (11) še ne nastopajo lastne vrednosti, saj je bazna funkcija sestavljena iz linearne kombinacije dveh. Lastne vrednosti za ta dva primera bomo dobili prek izračuna determinante

$$\begin{vmatrix} -\frac{3}{4}J\hbar^2 - E & \gamma\frac{\hbar}{2} \\ \gamma\frac{\hbar}{2} & \frac{1}{4}J\hbar^2 - E \end{vmatrix} = 0.$$

Rešitev, torej preostali lastni vrednosti sta

$$E = -\frac{J\hbar^2}{4} \pm \sqrt{4\left(\frac{J\hbar^2}{4}\right)^2 + \gamma^2\frac{\hbar^2}{4}}. \tag{12}$$

Sedaj se spomnimo, da obravnavamo problem za majhna magnetna polja, torej lahko rečemo, da je γ majhen in lahko enačbo (12) prek Taylorjevega razvoja prepišemo v

$$E = -\frac{J\hbar^2}{4} \pm \left(\frac{J\hbar^2}{2} + \frac{\gamma^2}{4J}\right). \tag{13}$$

Sedaj si poglejmo še račun prek perturbacijske teorije.

2 Reševanje s perturbacijo

Najprej si poglejmo prvi red perturbacije na primeru singletnega stanja. Ker z delovanjem S_z na bazno funkcijo dobim nazaj ortogonalne funkcije, sledi

$$E^{(1)} = \langle 00|\,\gamma S_{1z}\,|00\rangle = 0. \tag{14}$$

Torej si moramo pogledati drugi red približka

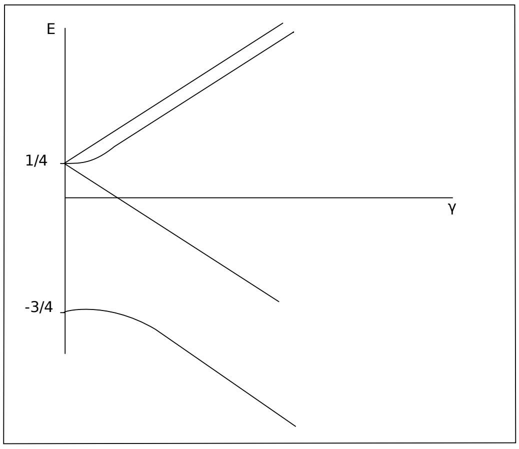
$$E^2 = \sum_{SS_z \neq 00} \frac{|\langle 00|\,\gamma S_{1z}\,|SS_z\rangle|^2}{E_{00} - E_{SS_z}}. \tag{15}$$

Sedaj opazimo, da bo od nič različen matrični element le $\langle 00|\,\gamma S_{1z}\,|10\rangle = \gamma\frac{\hbar}{2}$. Torej lahko popravek zapišemo kot

$$E^2 = \frac{\left(\gamma\frac{\hbar}{2}\right)^2}{-\frac{3}{4}J\hbar^2 - \frac{1}{4}J\hbar^2} = -\frac{\gamma^2}{4J}. \tag{16}$$

Sedaj moramo izračunati še popravek za tri degenerirana stanja. Torej moramo izračunati determinanto matrike devetih elementov. Najprej napišimo matriko matričnih elementov

$$\begin{pmatrix} \langle 11|\,\gamma S_{1z}\,|11\rangle & \langle 11|\,\gamma S_{1z}\,|10\rangle & \langle 11|\,\gamma S_{1z}\,|1-1\rangle \\ \langle 10|\,\gamma S_{1z}\,|11\rangle & \langle 10|\,\gamma S_{1z}\,|10\rangle & \langle 10|\,\gamma S_{1z}\,|1-1\rangle \\ \langle 1-1|\,\gamma S_{1z}\,|11\rangle & \langle 1-1|\,\gamma S_{1z}\,|10\rangle & \langle 1-1|\,\gamma S_{1z}\,|1-1\rangle \end{pmatrix}$$



Slika 1: Spreminjanja lastnih energij dveh delcev s spinom $\frac{1}{2}$ kot posledica spreminjanja polja.

.

Če sedaj pogledamo, kaj naredi S_{1z} na posamezen 'ket' in upoštevamo ortogonalnost funkcij, vidimo da od nič različna ostaneta le $\langle 11|\,\gamma S_{1z}\,|11\rangle = \gamma\frac{\hbar}{2}$ in $\langle 1-1|\,\gamma S_{1z}\,|1-1\rangle = -\gamma\frac{\hbar}{2}$. Torej nam matrike ni niti potrebno diagonalizirati. Sedaj primerjamo točne izračunane vrednosti in pravkar izračunane in vidimo da se ujemajo. Seveda smo tu degenerirana stanja izračunali le v prvem približku.

Na koncu lahko shematično prikažemo spreminjanje lastne energije z naraščanjem polja (na y osi je pravzaprav narisana $\frac{E}{J\hbar^2}$). Začetne energije preberemo iz enačb (8) do (10). Nato dve stanji linearno naraščata ali padata s poljem, dve pa se spreminjata najprej parabolično, nato pa pri velikih poljih prav tako linearno.

Del VIII

Časovno odvisna perturbacija

Časovno odvisna perturbacija

31. maj 2007

Naloga

Vodikov atom je v homogenem električnem polju

$E(t) = E_0 \frac{1}{1+(\frac{t}{\tau})^2}$.

Kolikšna je verjetnost, da je atom ob $t = \infty$ v prvem vzbujenem stanju, če je bil ob $t = -\infty$ v osnovnem stanju? Pri katerem τ je ta verjetnost največja? Predpostavi, da je električno polje dovolj šibko, da lahko uporabiš perturbacijsko teorijo.

Rešitev

Hamiltonjan zapišemo kot vsoto Hamiltonjana nezmotenega sistema in časovno odvisne motnje v smeri osi z:

$$H = \frac{p^2}{2m} - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r} - eE(t)z = H_0 + H'(t), \tag{1}$$

kjer je

$$H'(t) = -eE(t)z. \tag{2}$$

Časovno odvisno funkcijo prvotnega stanja lahko zapišemo kot vsoto stanj

$$|\psi, t >= \sum_n c_n(t)|n, t > . \tag{3}$$

Časovni odvod koeficientov novih stanj se glasi

$$\dot{c}_m(t) = -\frac{i}{\hbar} \sum_n c_n(t) < m, t|H'(t)|n, t > . \tag{4}$$

Zgornjo enačbo integriramo po času od $-\infty$ do poljubnega časa t in dobimo

$$c_m(t) = c_m(-\infty) - \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{t} \sum_n c_n(t) < m, t|H'(t)|n, t > dt. \tag{5}$$

Naša motnja je dovolj šibka, da se s časom koeficient $c_n(t)$ ne spreminja veliko, zato ga zamenjamo kar s $c_n(-\infty)$.

Ob času $t = -\infty$ je vodikov atom le v osnovnem stanju $n = 1$; $l = 0$; $m_l = 0$; m_s. Projekcijo spina na os z ($m_s = \pm\frac{1}{2}$) si lahko izberemo, saj potencial ne vpliva na njegovo smer. Recimo da je atom na začetku v stanju $c_{n,l,m_l,m_s} = c_{1,0,0,\frac{1}{2}}$. Pod integralom torej nimamo več vsote, temveč le en člen.

Ob času $t = \infty$ nas zanima prvo vzbujeno stanje $n = 2$; $l = 0, 1$; m_l; m_s. Projekcija spina se ne spremeni, torej ostane $m_s = \frac{1}{2}$.

$$c_{2,l,m_l,\frac{1}{2}}(\infty) = c_{2,l,m_l,\frac{1}{2}}(-\infty) - \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} c_{1,0,0,\frac{1}{2}}(-\infty) < 2, l, m_l, \frac{1}{2}, t|-eE(t)z|1, 0, 0, \frac{1}{2}, t > dt. \tag{6}$$

Na začetku je bil atom le v osnovnem stanju, zato je prvi člen na desni $c_{2,l,m_l,\frac{1}{2}}(-\infty) = 0$ in $c_{1,0,0,\frac{1}{2}}(-\infty) = 1$.

$$c_{2,l,m_l,\frac{1}{2}}(\infty) = -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} < 2, l, m_l, \frac{1}{2}, t| - eE(t)z|1, 0, 0, \frac{1}{2}, t > dt. \tag{7}$$

Poiščimo še velikost tirne vrtilne količine l vzbujenega stanja. Če hočemo, da je integral različen od nič, mora biti parnost izraza pod integralom enaka 1.

$< 2, l, m_l, \frac{1}{2}, t| \to (-1)^l$; $z \to -1$; $|1, 0, 0, \frac{1}{2}, t > \to (-1)^0$

$\Rightarrow (-1)^l(-1)(-1)^0 = (-1)^{l+1} \Rightarrow l = lih$

Ker lahko v našem primeru izbiramo velikosti tirne vrtilne količine le med 0 in 1, je torej $l = 1$.

Zaradi valjne simetrije velja $[H', L_z] = 0 \Rightarrow \hbar(m_l' - m_l) < l', m_l'|H'(t)|l, m_l >= 0$ (izpeljano že pri vaji Perturbacija II).

Torej morata biti projekciji vrtilne količine obeh stanj enaki. Upoštevamo še časovni razvoj in zapišemo izraz pod integralom iz enačbe (7):

$$< 2, 1, 0, \frac{1}{2}, t|-eE(t)z|1, 0, 0, \frac{1}{2}, t >= -eE(t) < 2, 1, 0, \frac{1}{2}|e^{i\frac{E_2}{\hbar}t} z e^{-i\frac{E_1}{\hbar}t}|1, 0, 0, \frac{1}{2} >, \tag{8}$$

kjer sta $E_1 = -13,6eV$ in $E_2 = \frac{E_1}{n^2} = -\frac{1}{4}13,6eV$ energiji osnovnega in prvega vzbujenega stanja vodikovega atoma.

Enačbo (7) sedaj zapišemo kot

$$c_{2,1,0,\frac{1}{2}}(\infty) = \frac{i}{\hbar} e < 2,1,0,\frac{1}{2}|z|1,0,0,\frac{1}{2} > \int_{-\infty}^{\infty} E(t) e^{i\frac{E_2-E_1}{\hbar}t} dt. \tag{9}$$

Označimo $\omega = \frac{E_2-E_1}{\hbar}$. Izračunati moramo integral kompleksne funkcije, ki ima singularnosti v točkah $\pm i\tau$:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{E_0 e^{i\omega t}}{1+(\frac{t}{\tau})^2} dt \tag{10}$$

Integral kompleksne funkcije po sklenjeni poti je enak vsoti residuumov v polih znotraj zanke. Integriramo torej po celotni realni osi časa. Da pot sklenemo, imamo za integracijo dve možnosti, in sicer polkrožno po zgornji ali po spodnji kompleksni polravnini. Če izberemo spodnjo ($e^{i\omega(-it)} = e^{\omega t}$) in pošljemo $t \to \infty$ eksponent divergira. Na zgornji polravnini pa gre eksponent ($e^{i\omega(it)} = e^{-\omega t}$) proti nič, če $t \to \infty$. Za zaključitev integracije po sklenjeni poti izberemo torej polkrog po zgornji polravnini.

$$\oint \frac{E_0 e^{i\omega t}}{1+(\frac{t}{\tau})^2} dt = E_0 2\pi i Res(\frac{e^{i\omega t}}{(1+\frac{it}{\tau})(1-\frac{it}{\tau})})|_{i\tau} = E_0 2\pi i Res(\frac{\tau^2 e^{i\omega t}}{(t-i\tau)(t+i\tau)})|_{i\tau} =$$

$$= E_0 2\pi i (\frac{\tau^2 e^{i\omega t}}{(t+i\tau)})|_{i\tau} = E_0 \pi\tau e^{-\omega\tau}$$

Braket izračunamo tako, da integriramo po sferičnih harmonikih, ki jih sedaj poznamo, operator z pa nadomestimo z $r\cos\vartheta$.

$$< 2,1,0,\frac{1}{2}|z|1,0,0,\frac{1}{2} >= \int R_{21}^* Y_{10}^* r\cos\vartheta R_{10} Y_{00} r^2 dr d\varphi d(\cos\vartheta) = \frac{128}{243}\sqrt{2} r_B \tag{11}$$

Koeficient vzbujenega stanja po času $t = \infty$ se torej glasi:

$$c_{2,1,0,\frac{1}{2}}(\infty) = \frac{i}{\hbar} e E_0 \pi \frac{128}{243}\sqrt{2} r_B \tau e^{-\omega\tau} \tag{12}$$

Verjetnost, da se atom po času $t = \infty$ nahaja v prvem vzbujenem stanju pa je:

$$P(t=\infty, n=2) = |c_{2,1,0,\frac{1}{2}}(\infty)|^2 = (\frac{eE_0\pi}{\hbar}\frac{128}{243}\sqrt{2} r_B \tau e^{-\omega\tau})^2 \tag{13}$$

Izračunajmo še, pri katerem τ je ta verjetnost največja. Odvajamo verjetnost P po τ in poiščemo ničlo (ekstrem od P):

$$\frac{dP}{d\tau} = (\frac{eE_0\pi}{\hbar}\frac{128}{243}\sqrt{2} r_B)^2 (2\tau e^{-2\omega\tau} - 2\tau\omega e^{-2\omega\tau}) = 0 \tag{14}$$

Verjetnost doseže maksimum v točki:

$$\tau_{max} = \frac{1}{\omega} = \frac{\hbar}{E_2 - E_1} \tag{15}$$

Časovno odvisna perturbacija VI

Luka Jeromel

14. maj 2008

1 Naloga

Imamo delec s spinom 1/2, ki je ob času $t = 0$ v stanju $|\uparrow\rangle$. Je v homogenem magnetnem polju B_z v smeri osi z. Ob času $t = 0$ vklopimo šibko magnetno polje v smeri osi x z velikostjo: $B_x(t) = B_x \frac{t}{\tau}$. Zanima nas kakšna je valovna funkcija ob času $t = \tau$.

2 Rešitev

Hamiltonova funkcija takšnega delca je

$$H = \frac{g\mu_B}{\hbar}(\vec{S} \cdot \vec{B})$$

Ker vemo da je $\vec{B} = (B_x \frac{t}{\tau}, 0, B_z)$ in $\vec{S} = (S_x, S_y, S_z)$ lahko izvedemo skalarni produkt in dobimo:

$$H = \frac{g\mu_B}{\hbar}(B_x \frac{t}{\tau} S_x + B_z S_z) \tag{1}$$

Ker je polje v x smeri mnogo manjše od polja v z smeri bomo za določitev valovne funkcije našega delca $| \psi, t\rangle$ uporabili perturbacijsko teorijo. Najprej označimo:

$$H_0 = \frac{g\mu_B}{\hbar} B_z S_z$$

Sedaj je hamiltonova funkcija v obliki:

$$H = H_0 + V(t)$$

Poglejmo najprej kaj naredi operator H_0 na valovni funkciji lastnih stanj delca.

$$H_0 |\uparrow\rangle = \frac{g\mu_B}{\hbar} B_z \frac{\hbar}{2} |\uparrow\rangle = \hbar\omega_z |\uparrow\rangle$$

$$H_0 \left|\downarrow\right\rangle = -\frac{g\mu_B}{\hbar} B_z \frac{\hbar}{2} \left|\downarrow\right\rangle = -\hbar\omega_z \left|\downarrow\right\rangle$$

Označili smo $\omega_z \hbar = \frac{g\mu_B B_z}{2}$.
Časovni razvoj funkcij lastnih stanj je torej:

$$\begin{aligned} \left|\uparrow, t\right\rangle &= \left|\uparrow\right\rangle \exp\left(-i\frac{E_\uparrow}{\hbar} t\right) = \left|\uparrow\right\rangle \exp\left(-i\omega_z t\right) \\ \left|\uparrow, t\right\rangle &= \left|\downarrow\right\rangle \exp\left(-i\frac{E_\downarrow}{\hbar} t\right) = \left|\downarrow\right\rangle \exp\left(i\omega_z t\right) \end{aligned}$$

Lastna stanja tvorijo ortogonalno bazo z dimenzijo dve. Zato lahko poljubno valovno funkcijo delca s spinom ena polovica razvijemo pa lastnih stanjih. Torej je:

$$\left| \psi, t\right\rangle = C_\uparrow(t) \left|\uparrow, t\right\rangle + C_\downarrow(t) \left|\uparrow, t\right\rangle$$

Iz teorije perturbacij dobimo enačbe za koeficiente v razvoju:

$$C_\uparrow(t) = C_\uparrow(0) - \frac{i}{\hbar} \int_0^t \left\langle \uparrow, t \mid V(t) \left|\uparrow, t\right\rangle \right. dt \tag{2}$$

$$C_\downarrow(t) = C_\downarrow(0) - \frac{i}{\hbar} \int_0^t \left\langle \downarrow, t \mid V(t) \left|\uparrow, t\right\rangle \right. dt \tag{3}$$

Če hočemo izračunati koeficienta v razvoju moramo najprej izračunati matrična elementa. Zato bomo sedaj pogledali kaj naredi operator $V(t)$ na vsaki lastni funkciji posebej. Izrazimo S_x z operatorjema S_+ in S_-.

$$S_x = \frac{1}{2}(S_+ + S_-)$$

Izračunajmo sedaj tole:

$$\begin{aligned} V(t) \left|\uparrow, t\right\rangle &= \frac{g\mu_B}{\hbar 2} \frac{t}{\tau} B_x (S_+ + S_-) \left|\uparrow, t\right\rangle \\ &= \frac{g\mu_B}{\hbar 2} \frac{t}{\tau} B_x \hbar \left|\downarrow\right\rangle \exp\left(-i\omega_z t\right) \end{aligned}$$

Pomnožimo najprej to z brajem $\langle \uparrow, t \mid$, da dobimo matrični element za izračun prvega koeficienta v razvoju. Ker sta funkciji $\left|\uparrow\right\rangle$ in $\left|\downarrow\right\rangle$ ortogonalni, je ta matrični element enak nič. Če upoštevamo še začetni pogoj $C_\uparrow(0) = 1$, dobimo za prvi koeficint enko.

Sedaj pomnožimo to še z drugim brajem $\langle \downarrow, t \mid$, upoštevamo še začetni pogoj $C_\downarrow(0) = 0$ in dobimo:

$$\left\langle \downarrow, t \mid V(t) \left|\uparrow, t\right\rangle \right. = \frac{g\mu_B}{2} B_x \frac{t}{\tau} \exp\left(-2i\omega_z t\right) = \hbar\omega_x \frac{t}{\tau} \exp\left(-2i\omega_z t\right) \tag{4}$$

Vpeljali smo novo konstanto ω_x.

Izračunajmo sedaj koeficient $C_\downarrow$ ob času τ:

$$C_\downarrow(\tau) = 0 - i\omega_x \int_0^\tau \frac{t}{\tau} \exp\left(-i2\omega_z t\right) dt$$

To preoblikujemo v brezdimenzijsko obliko ,tako da vpeljemo novo spremenljivko $u = -i2\omega_z t$. Upoštevamo tole zvezo $\int e^u u du = (u-1)e^u$ in dobimo:

$$C_\downarrow(\tau) = \frac{i\omega_x}{4\omega_z^2 \tau}(1 - (1 + 2i\omega_z\tau)\exp\left(-i2\omega_z\tau\right))$$

Sedaj lahko zapišemo valovno funkcijo našega delca v magnetnem polju:

$$\mid \psi, t\rangle = \mid\uparrow\rangle \exp\left(-i\omega_z\tau\right) + \frac{i\omega_x}{4\omega_z^2\tau}(1 - (1 + 2i\omega_z\tau)\exp\left(-i2\omega_z\tau\right)) \mid\downarrow\rangle \exp\left(i\omega_z\tau\right)$$

Valovno funkcijo lahko zmeraj pomnožimo z nekim kompleksnim številom, ki ima absolutno vrednost ena, in s tem ne spremenimo njene vloge. Še zmeraj predstavlja enak delec v istem potencialu. Zato bomo našo funkcijo pomnožili z faktorjem $\exp\left(-i\omega_z\tau\right)$ in jo s tem vsaj malce polepšali:

$$\begin{aligned} \mid \psi, \tau\rangle &= \mid\uparrow\rangle + \frac{i\omega_x}{4\omega_z^2\tau}(1 - (1 + 2i\omega_z\tau)\exp\left(-i2\omega_z\tau\right)) \mid\downarrow\rangle \exp\left(2i\omega_z\tau\right) \\ &= \mid\uparrow\rangle + \frac{i\omega_x}{4\omega_z^2\tau}(\exp\left(2i\omega_z\tau\right) - (1 + 2i\omega_z\tau)) \mid\downarrow\rangle \end{aligned}$$

To funkcijo bi radi primerjali z funkcijo:

$$\mid \psi\rangle = cos(\frac{\vartheta}{2}) \mid\uparrow\rangle + sin(\frac{\vartheta}{2})e^{i\varphi} \mid\downarrow\rangle$$

Tako bomo ugotovili, v katero smer je usmerjen spin delca v našem potencialu. Ker je to nekoliko pretežka naloga si jo bomo poenostavili in bomo pogledali samo dva limitna primera.

2.1 $\omega_z\tau \ll 1$

Ta primer predstavlja situacijo, ko magnetno polje v x smeri vklopimo v zelo kratekem času. V tem primeru je v eksponentu zelo majhno število, zato ga lahko razvijemo $\exp\left(2i\omega_z\tau\right) = 1 + 2i\omega_z\tau$ in dobimo:

$$\mid \psi, \tau\rangle = \mid\uparrow\rangle + \frac{i\omega_x}{4\omega_z^2\tau}(1 + 2i\omega_z\tau - (1 + 2i\omega_z\tau) + ost.(\omega_z\tau)^2) \mid\downarrow\rangle$$

$$\mid \psi, \tau\rangle = \mid\uparrow\rangle$$

Vidimo, da če je sprememba zelo kratka se s spinom nič ne zgodi.

2.2 $\omega_z \tau \gg 1$

$$| \psi, \tau\rangle = |\uparrow\rangle + \frac{i\omega_x}{4\omega_z^2 \tau}(\exp(2i\omega_z \tau) - (1 + 2i\omega_z \tau))\,|\downarrow\rangle \tag{5}$$

V drugem koeficientu sedaj zanemarimo vse člene, razen člena $-i2\omega_z\tau$.

$$| \psi, \tau\rangle = |\uparrow\rangle + \frac{\omega_x}{2\omega_z}\,|\downarrow\rangle$$

Sedaj izračunamo kota

$$e^{i\varphi} = 1 \qquad \Longrightarrow \qquad \varphi = 0$$

$$sin(\frac{\vartheta}{2}) = \frac{\omega_x}{2\omega_z} \qquad \Longrightarrow \qquad \vartheta \simeq \frac{\omega_x}{\omega_z}$$

Kot ϑ je ravno kot med vsoto z osjo in skupnim magnetnim poljem $\vec{B}$, torej je smer spina enaka smeri magnetnega polja.

Del IX

"Path" integrali

Aharonov-Bohmov pojav

Simon Jesenko

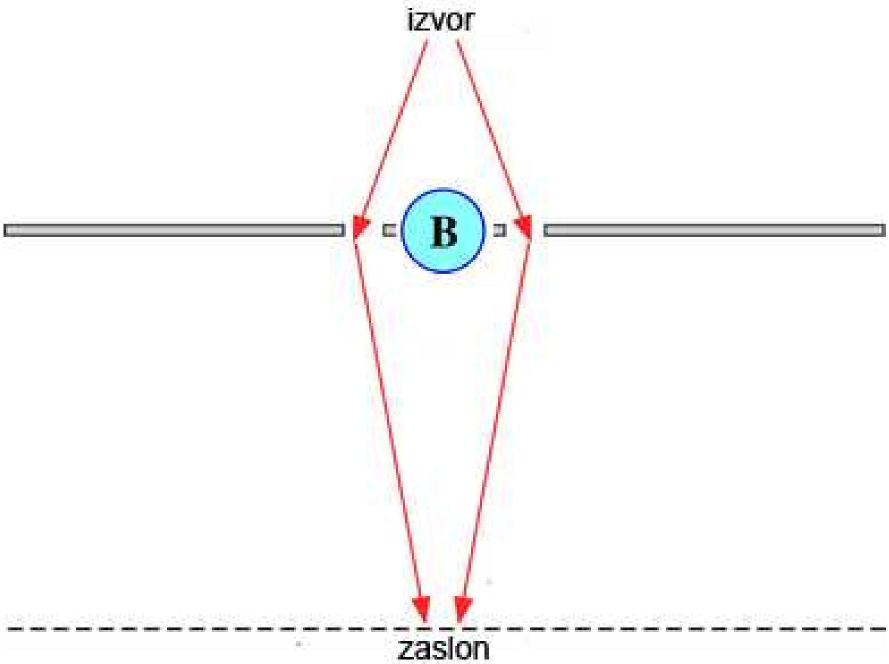
17.6.2007

1 Naloga

Obravnavaj Aharonov-Bohmov pojav pri interferenčnem poskusu z elektroni na dveh režah.

2 Uvod

Do Aharon-Bohmovega pojava pride pod vplivom vektorskega potenciala $\vec{A}$ na elektrone, ki potujejo skozi prostor. Pojav jasno kaže, da so v kvantni mehaniki relevantni vektorski potenciali, $\vec{A}$ in ϕ, ne pa jakosti polj $\vec{E}$ in $\vec{B}$, kot je to veljalo v klasični elektrodinamiki.



Slika 1: Skica eksperimentalne postavitve

Eksperimentalna postavitev je enaka kot za interferenčni pojav vpada snopa elektronov na dve reži, s tem da je med dvema režama postavljena "neskončno"dolga tuljava. Elektroni do notranjosti reže nimajo dostopa, zato niso izpostavljeni magnetnemu polju. Raziskujemo vpliv jakosti magnetnega polja v tuljavi na interferenčni vzorec na zaslonu.

Pojav obravnavamo s pomočjo "path integrala".

3 Rešitev

Verjetnost, da se delec, ki je bil ob času t_1 na mestu x_1 ob času t_2 nahaja na mestu x_2 je določena z integracijo po vseh poteh,

$$K(x_1, x_2, t_1, t_2) = \int \mathcal{D}x e^{\frac{i}{\hbar} S[x(t)]},$$

kjer je $S[x(t)]$ akcija za posamezno pot v času od t_1 do t_2,

$$S[x(t)] = \int_{t_1}^{t_2} L\, dt.$$

Lagranžijan L je definiran tako kot v klasični mehaniki, in se s Hamiltonijanom izraža kot

$$L(\vec{r}, \vec{v}) = \vec{p} \cdot \vec{v} - H.$$

Zveza med hitrostjo in impulzom za delec v magnetnem polju se glasi

$$m\vec{v} = \vec{p} - e\vec{A},$$

Hamiltonijan pa

$$H = \frac{(\vec{p} - e\vec{A})^2}{2m} + \overbrace{e\phi}^{V(x)}.$$

Če upoštevamo izraz za Lagranžijan ter zgornji zvezi, dobimo

$$\begin{aligned} L = \quad & (m\vec{v} + e\vec{A})\vec{v} - \tfrac{mv^2}{2} - V = \\ & mv^2 + e\vec{A} \cdot \vec{v} - \tfrac{mv^2}{2} - V = \quad \frac{mv^2}{2} + e\vec{A} \cdot \vec{v} - V \end{aligned}$$

Uvedemo novo spremenljivko L', zanima nas namreč samo odvisnost Lagranžijana od vektorskega potenciala - le ta je odvisen tega, skozi katero izmed rež se elektron giblje,

$$L' = L + e\vec{A} \cdot \vec{v}$$

Analogno postopamo tudi z akcijo,

$$S'[x(t)] = S + \int_{t_1}^{t_2} e\vec{A} \cdot v dt = S + \int_{x_1}^{x_2} e\vec{A} \cdot d\vec{s},$$

kjer smo integral po času pretvorili na integral od začetne do končne točke.

Propagator sedaj razdelimo na propagator po vseh poteh skozi eno režo in po vseh poteh skozi drugo režo,

$$K'(x_1, x_2, t_1, t_2) = K_1' + K_2' = \int_1 \left[\mathcal{D}x e^{\frac{i}{\hbar}(S[x(t)] + \int_{x_1}^{x_2} e\vec{A} \cdot d\vec{s})} \right] + \int_2 \left[\mathcal{D}x e^{\frac{i}{\hbar}(S[x(t)] + \int_{x_1}^{x_2} e\vec{A} \cdot d\vec{s})} \right].$$

Del path integalov, ki niso odvisni od A, pointegriramo v konstanti K_1 in K_2,

$$K'(x_1,x_2,t_1,t_2) = \qquad e^{\int_{x_1}^{x_2} \frac{ie}{\hbar}\vec{A}\cdot d\vec{s_1}} K_1 + e^{\int_{x_1}^{x_2} \frac{ie}{\hbar}\vec{A}\cdot d\vec{s_2}} K_2 =$$
$$e^{\int_{x_1}^{x_2} \frac{ie}{\hbar}\vec{A}\cdot d\vec{s_1}} \left(K_1 + e^{(\int_{x_1}^{x_2} \vec{A}\cdot d\vec{s_2} - \int_{x_1}^{x_2} \vec{A}\cdot d\vec{s_2})\frac{ie}{\hbar}} K_2 \right)$$

V zgornjem integralu prepoznamo ravno integral vektorskega potenciala po zaključeni zanki, za kar pa po Stokesovem teoremu velja

$$\int_{x_1}^{x_2} \vec{A}\cdot d\vec{s_2} - \int_{x_1}^{x_2} \vec{A}\cdot d\vec{s_2} = \int \vec{B}\cdot d\vec{S} = \phi_m,$$

torej pretok magnetnega polja skozi tuljavo. Konstanta $e^{\int_{x_1}^{x_2} \frac{ie}{\hbar}\vec{A}\cdot d\vec{s_1}}$ je po absolutni vrednosti enaka 1, zato na verjetnost prehoda ne vpljiva.

Verjetnost za prehod se izraža kot

$$P = |K|^2 = |K_1 + e^{\frac{ie}{\hbar}\phi_m} K_2|^2.$$

Če pišemo K_1 in K_2 v polarni obliki, $K_1 = |K_1|e^{i\varphi_1}$ in $K_2 = |K_2|e^{i\varphi_2}$, dobimo izraz

$$P = |K_1^2 + |K_2|^2 + 2|K_1||K_2|\cos(\frac{\phi_m e}{\hbar} + \phi_2 - \phi_1)$$

Faktorja φ_1 in φ_2 določata fazno razliko posameznih poti, in privedeta do interference, kot jo poznamu pri vpadu na reži brez tuljave. Zaradi vektorskega potenciala pa dobimo še dodatni člen, ki je odvisen od magnetnega pretoka skozi tuljavo. V odvisnosti od magnetnega pretoka se interferenčne proge premikajo po zaslonu. Interferenčna slika se ponovi za vsako spremembo magnetnega pretoke, ki je enaka

$$\Delta\phi_m = \frac{2\pi\hbar}{e}.$$

Morda velja še enkrat pripomniti, da sami elektroni ne interagirajo z magnetnim poljem v tuljavi, ampak pride do pojava izključno zaradi vektorskega potenciala zunaj tuljave.

Path integral za Harmonski oscilator

Simon Čopar

16. junij 2007

1 Propagator

Propagator definiramo kot

$$K(q_1,t_1;q_0,t_0) = \langle q_1,t_1|q_0,t_0\rangle$$

kar je ravno verjetnostna amplituda, da delec, ki je bil ob času t_0 na položaju q_0, najdemo na položaju q_1. Izpišimo operator časovnega razvoja.

$$K(q',T;q,0) = \left\langle q'|e^{-\frac{\mathrm{i}HT}{\hbar}}|q\right\rangle$$

Propagator lahko izračunamo z običajnimi prijemi. Alternativna možnost pa je preko integracije po vseh poteh, ki jih delec lahko opiše. Po tej poti dobimo

$$K(q',T;q,0) = \int \mathcal{D}q(t)e^{\frac{\mathrm{i}S(q(t))}{\hbar}}$$

Kjer je $S(q(t))$ akcija za posamezno pot od q do q' v času T.

2 Klasična akcija HO

Klasično se delec v harmonskem potencialu giblje takole:

$$q(t) = A\sin\omega t + B\cos\omega t$$

$$p(t) = m\omega(A\cos\omega t - B\sin\omega t)$$

z začetnim in končnim pogojem določimo koeficienta

$$A = \frac{q - q'\cos\omega T}{\sin\omega T}$$

$$B = q$$

Lagrangeovo funkcijo harmonskega oscilatorja poznamo:

$$\mathcal{L}(q,p) = T - V = \frac{p^2}{2m} - \frac{m\omega^2 q^2}{2}$$

Izračunajmo akcijo (izvedbe osnovnih trigonometričnih integralov ne bom pisal):

$$S = \int_0^T \mathcal{L}(q(t))\,\mathrm{d}t$$

$$S = \int_0^T \frac{m\omega^2}{2}\left((A\cos\omega t - B\sin\omega t)^2 - (A\sin\omega t + B\cos\omega t)^2\right)\,\mathrm{d}t$$

$$S = \frac{m\omega}{2\sin\omega T}\left((q^2 + q'^2)\cos\omega T - 2qq'\right)$$

3 Gaussov integral

Potrebovali bomo integral

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{ax^2}\,\mathrm{d}x = \sqrt{\frac{\pi}{a}}$$

4 Izpeljava

Operator časovnega razvoja lahko razpišemo v produkt manjših delov.

$$e^{-\frac{\mathrm{i}HT}{\hbar}} = e^{-\frac{\mathrm{i}HN\delta}{\hbar}} = \left(e^{-\frac{\mathrm{i}H\delta}{\hbar}}\right)^N$$

Propagator lahko na ta način razbijemo na majhne dele in med posamezne člene vrinemo operator identitete $\int \mathrm{d}q|q\rangle\langle q|$.

$$K(q', T; q, 0) = \left\langle q'|e^{-\frac{\mathrm{i}H\delta}{\hbar}} \cdots e^{-\frac{\mathrm{i}H\delta}{\hbar}} e^{-\frac{\mathrm{i}H\delta}{\hbar}}|q\right\rangle =$$

$$\left\langle q'|e^{-\frac{\mathrm{i}H\delta}{\hbar}} \cdots \int \mathrm{d}q_2|q_2\rangle\langle q_2|e^{-\frac{\mathrm{i}H\delta}{\hbar}} \int \mathrm{d}q_1|q_1\rangle\langle q_1|e^{-\frac{\mathrm{i}H\delta}{\hbar}}|q\right\rangle$$

Integrale preselimo na začetek, v vmesnih členih pa prepoznamo propagatorje na posameznih časovnih odsekih.

$$K(q', T; q, 0) = \int \mathrm{d}q_1\,\mathrm{d}q_2\,\mathrm{d}q_3 \cdots \mathrm{d}q_{N-1} K(q', T; q_{N-1}, T-\delta) \cdots K(q_2, 2\delta; q_1, \delta) K(q_1, \delta; q, 0)$$

Integral pomeni vsoto verjetnostnih amplitud po vseh poteh, ki vodijo med danima točkama.

Posamezen propagator deluje za majhen čas, zato ga smemo razviti po Taylorju in zintegrirati del z gibalno količino[1].

$$K(q_{i+1}, t+\delta; q_i, t) = \langle q_{i+1}|1 - \frac{\mathrm{i}\delta}{\hbar}\frac{p^2}{2m} - \frac{\mathrm{i}\delta}{\hbar}V(q)|q_i\rangle$$

Razpišimo člen z gibalno količino po ravnih valovih

$$\langle q_{i+1}|p^2|q_i\rangle = \int \frac{\mathrm{d}p_i}{2\pi\hbar}\langle q_i + 1|p^2|p_i\rangle\,\langle p_i|q_i\rangle = \int \frac{\mathrm{d}p_i}{2\pi\hbar} p_i^2\,\langle q_{i+1}|p_i\rangle\,\langle p_i|q_i\rangle$$

vemo da je $\langle p|q\rangle = e^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}pq}$

$$\langle q_{i+1}|p^2|q_i\rangle = \int \frac{\mathrm{d}p_i}{2\pi\hbar} p_i^2 e^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}p_i(q_{i+1}-q_i)}$$

ostali deli propagatorja vsebujejo:

$$\langle q_{i+1}|q_i\rangle = \int \frac{\mathrm{d}p_i}{2\pi\hbar} e^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}p_i(q_{i+1}-q_i)}$$

$$\langle q_{i+1}|V(q)|q_i\rangle = \int \frac{\mathrm{d}p_i}{2\pi\hbar} V(q_i) e^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}p_i(q_{i+1}-q_i)}$$

Tako lahko propagator zapišemo v prostoru ravnih valov in pretvorimo nazaj v eksponentno obliko.

$$K(q_{i+1}, t+\delta; q_i, t) = \int \frac{\mathrm{d}p_i}{2\pi\hbar} \left(1 - \frac{\mathrm{i}\delta}{\hbar}\frac{p_i^2}{2m} - \frac{\mathrm{i}\delta}{\hbar}V(q_i)\right) e^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}p_i(q_{i+1}-q_i)} = \int \frac{\mathrm{d}p_i}{2\pi\hbar} e^{\frac{\mathrm{i}\delta}{\hbar}(p_i\frac{q_{i+1}-q_i}{\delta} - \frac{1}{2m}p_i^2 - V(q_i))}$$

To je pa gaussov integral ki ga lahko rešimo (opazimo še prvo diferenco koordinate v eksponentu).

$$K(q_{i+1}, t+\delta; q_i, t) = \sqrt{\frac{m\hbar}{2\pi\mathrm{i}\delta}} e^{\frac{\mathrm{i}\delta}{\hbar}(\frac{m\dot{q_i}^2}{2} - V(q_i))}$$

Propagator za celoten čas je torej

$$K(q', T; q, 0) = \left(\frac{m}{2\pi\mathrm{i}\hbar\delta}\right)^{N/2} \int \prod_{i=1}^{N-1} \mathrm{d}q_i e^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}S(q(t))}$$

5 Prehod na homogene robne pogoje

Poti harmonskega oscilatorja zapišimo kot vsoto klasične poti in popravkov s homogenimi robnimi pogoji.

$$q(t) = q_c(t) + y(t)$$

$$S(q) = S(q_c + y) = \int_0^T \mathrm{d}t \left(\frac{m\dot{q}^2}{2} - \frac{m\omega^2 q^2}{2}\right) = S(q_c) + S(y) + \int_0^T \mathrm{d}t \left(m\dot{q}_c\dot{y} - m\omega^2 q_c y\right)$$

Ker za q_c velja Euler-Lagrangeova enačba $\ddot{q_c} = -\omega^2 q_c$, zadnji člen izgine.

$$\int_0^T \mathrm{d}t \, (\dot{q_c}\dot{y} + \ddot{q_c}y) = \int_{(0)}^{(1)} \mathrm{d}(y\dot{q_c}) \equiv 0$$

Od integrala ostane torej le

$$K = e^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}S(q_c)} \int \mathcal{D}y e^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}S(y)}$$

6 Izračun integrala s pomočjo Fourierove vrste

Če razpišemo diskretni približek akcije zgoraj, vidimo da so prisotni mešani členi oblike $q_i q_j$.

$$S \approx \frac{\delta m}{2} \sum_{i=1}^{N-1} \left(\left(\frac{x_n - x_{n-1}}{\delta} \right)^2 - \omega^2 x_n^2 \right)$$

Po drugi strani v Fourierovi reprezentaciji za zvezno akcijo lahko zapišemo enostavno

$$S = \frac{m}{2} \sum_{k=1}^{N-1} a_k^2 \left(\left(\frac{k\pi}{T} \right)^2 - \omega^2 \right)$$

kjer očitno ni mešanih členov. Ker imamo izpeljan propagator za diskretizirano akcijo, bi integracija takega nastavka izgubila vse normalizacijske konstante, ostala bi samo odvistnost $K \propto (\sin \omega T)^{-1/2}$. Kako z mahanjem rok odčarati divergentne predfaktorje je med drugim opisano v [3].

Zato želimo dobiti Fourierovo reprezentacijo direktno iz diskretnega nastavka (v prispevku [2] avtor uporabi Wickovo rotacijo in kompleksno FT). Uporabimo diskretno sinusno transformacijo v unitarni obliki, zato da ne reskaliramo integralov.

$$x_n = \sqrt{\frac{2}{N}} \sum_k a_k \sin \frac{k\pi n}{N}$$

$$x_n - x_{n-1} = \sqrt{\frac{2}{N}} \sum_k a_k \left(\sin \frac{k\pi n}{N} - \sin \frac{k\pi (n-1)}{N} \right) = \sqrt{\frac{2}{N}} \sum_k a_k \left(2 \cos \frac{k\pi (n+1/2)}{N} \sin \frac{k\pi}{2N} \right)$$

Ker gledamo primer $N \gg 1$ lahko polovičko takoj pozabimo.

$$S = \frac{m\delta}{N} \sum_n \sum_k a_k^2 \left(\frac{4 \cos^2 \frac{k\pi n}{N} \sin^2 \frac{k\pi}{2N}}{\delta^2} - \omega^2 \sin^2 \frac{k\pi n}{N} \right)$$

Vsoto po n prevedemo nazaj na integral: $\sum_n \delta \cos^2 \frac{k\pi n}{N} = \frac{T}{2}$

$$S = \frac{mT}{2N} \sum_k a_k^2 \left(\frac{4 \sin^2 \frac{k\pi}{2N}}{\delta^2} - \omega^2 \right) = \frac{m}{2N^2\delta} \sum_k a_k^2 \left(\left(2N \sin \frac{k\pi}{2N} \right)^2 - (\omega T)^2 \right)$$

Izračunajmo sedaj $U = \int \prod_k \mathrm{d}a_k e^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar} S}$ z uporabo Gaussovega integrala.

$$U = \left(\frac{2N^2 \delta \pi \hbar}{m\mathrm{i}} \right)^{(N-1)/2} \prod_k \left(\left(2N \sin \frac{k\pi}{2N} \right)^2 - (\omega T)^2 \right)^{-1/2}$$

Z uporabo matematične relacije $\prod_{k=1}^{N-1} \left(2 \sin \frac{k\pi}{N} \right) = N$ ([2]) vidimo, da za velike N zaradi dvojke v imenovalcu argumenta zmnožimo ravno polovico med seboj enakih členov, zato velja $\prod_{k=1}^{N-1} \left(2 \sin \frac{k\pi}{2N} \right) =$

$\sqrt{N}$ (relacijo sem zaradi matematično sumljivega sklepa numerično preveril). Tako lahko izpostavimo sinusni člen.

$$U = \left(\frac{2N^2\delta\pi\hbar}{m\mathrm{i}}\right)^{(N-1)/2} \left(\frac{1}{N^{N-1}\sqrt{N}}\right) \prod_k \left(1 - \left(\frac{\omega T}{2N \sin\frac{k\pi}{2N}}\right)^2\right)^{-1/2}$$

V limiti $N \to \infty$ so edini členi produkta, ki se bistveno razlikujejo od 1 tisti, za katere je argument sinusa majhen. Uporabimo približek majhnih kotov.

$$U = \left(\frac{2N^2\delta\pi\hbar}{m\mathrm{i}}\right)^{(N-1)/2} \left(\frac{1}{N^{N-1}\sqrt{N}}\right) \prod_k \left(1 - \left(\frac{\omega T}{k\pi}\right)^2\right)^{-1/2}$$

Iz kompleksne analize vemo, da funkcijo do faktorja natančno določajo njene ničle in poli.

$$\prod_{k\neq 0}\left(1 - \frac{x}{k\pi}\right) = \frac{\sin x}{x}$$

$$U = \left(\frac{2\pi\delta\hbar}{m\mathrm{i}}\right)^{(N-1)/2} \sqrt{\left(\frac{\omega T}{N \sin\omega T}\right)}$$

Dodamo še normalizacijsko konstanto in klasični del akcije in dobimo rešitev

$$K = \left(\frac{m}{2\pi\mathrm{i}\hbar\delta}\right)^{N/2} U e^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}S_c}$$

$$\boxed{K = \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi\mathrm{i}\hbar\sin\omega T}}\, e^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\frac{m\omega}{2\sin\omega T}\left((q^2+q'^2)\cos\omega T - 2qq'\right)}}$$

Literatura

[1] http://arxiv.org/PS_cache/quant-ph/pdf/0004/0004090v1.pdf

[2] http://bolvan.ph.utexas.edu/~vadim/Classes/2004f.homeworks/osc.pdf

[3] http://galileo.phys.virginia.edu/classes/752.mf1i.spring03/StatPhaseSHO.htm

Del X

Kvantno računalništvo

Kvantna logična vrata

Simon Kaučič

22. maj 2008

V kvantnem računalništvu naletimo na naslednja kvantna vrata, ki jih opišemo z operatorji:

$$\begin{aligned}
X &= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \text{(deluje v Hilbertovem prostoru s spinom 1/2)} \\
Ha &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \text{(Hadamardova vrata)} \\
Z &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \text{(deluje v Hilbertovem prostoru s spinom 1/2)} \\
CNOT &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \text{(deluje v Hilbertovem prostoru s spinom 1/2)}
\end{aligned}$$

1. Pokaži, kako lahko s temi operatorji tvorimo Bellova stanja.
2. Pokaži, da lahko te operatorje konstruiramo z vklapljanjem magnetnega polja, interakcije med spini in konstantnega potenciala v primerno dolgih časovnih intervalih.

1 Bellova stanja

1.1 Baza

Ker smo v prostiru s spinom 1/2, sta v bazi vektorja gor in dol. Označim:

$$\begin{aligned}
|\uparrow\rangle &\rightarrow |0\rangle \text{ temu stanju pripada spinor: } \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \\
|\downarrow\rangle &\rightarrow |1\rangle \text{ temu stanju pripada spinor: } \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}
\end{aligned}$$

1.2 Opratorji

Če delujemo z operatorjem X na stanje $|1\rangle$ dobimo$|0\rangle$ in obratno. Hademardov operator naredi mešanico obeh stanj,

$$\begin{aligned} H\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} &= \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix} \\ H\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix} &= \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\-1\end{pmatrix} \end{aligned}$$

Operator Z pusti stanje $|0\rangle$ pri miru, stanju $|1\rangle$ pa spremeni predznak. Ostane le še operator $CNOT$, ki deluje na dve stanji hkrati;

$$\begin{aligned} CNOT\,|00\rangle &= |00\rangle \\ CNOT\,|01\rangle &= |01\rangle \\ CNOT\,|10\rangle &= |11\rangle \\ CNOT\,|11\rangle &= |10\rangle \end{aligned}$$

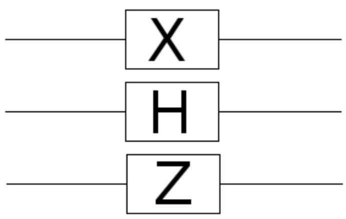
Poljubno stnanje lahko opišemo z linearno kombinacijo teh štirih stanj.

$$|\Psi\rangle = a\,|00\rangle + b\,|01\rangle + c\,|10\rangle + d\,|11\rangle$$

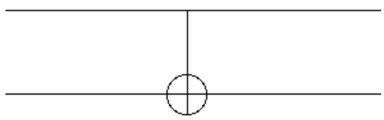
Npr. stanje $|00\rangle$ zapisano z vektorjem, izgleda takole $\begin{pmatrix}1\\0\\0\\0\end{pmatrix}$.

1.3 Vezja

Ker ti operatorji predstavljajo kvantna logična vrata, jih, kot pri običajnih logičnih vrati, lahko prikažemo z grafično shemo in jih tako razporedimo v vezja.

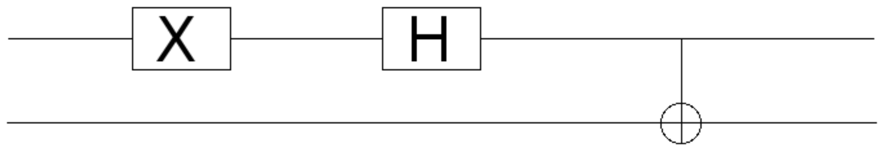


Sheme operatorjev X,H in Z



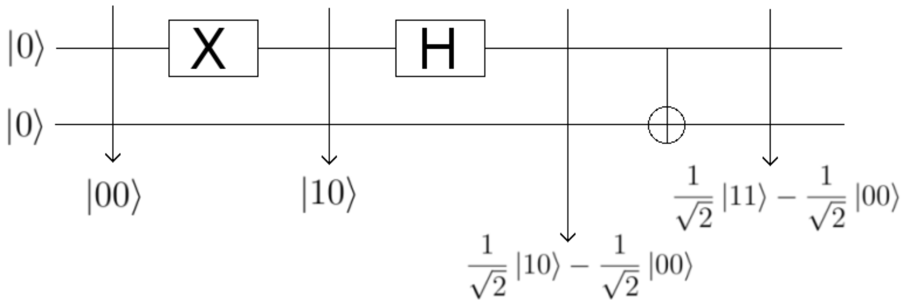
Shema operatorja $CNOT$.

Pa poglejmo kaj naredi naslenje vezje.



Na sliki je vezje sestavljeno iz kvantnih vrat.

Vstavimo v vezje stanje $|00\rangle$.



Na sliki je prikazano kaj se v vezju dogaja s posameznim spinom in kako izgledajo stanja na posameznih predelih vezja

Z malo premetavanja ugotovimo da je to vezje generator Bellovih stanj. Posamezna začetno stanje spremeni v eno od Bellovih stanj.

$$
\begin{aligned}
|00\rangle &\rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}}(|11\rangle - |00\rangle) \\
|11\rangle &\rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}}(|01\rangle + |10\rangle) \\
|10\rangle &\rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle + |11\rangle) \\
|01\rangle &\rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}}(|01\rangle - |10\rangle)
\end{aligned}
$$

2 Fizikalno ozadje

Zanima nas kako sestaviti te operatorje z vklapljanjem magnetnega polja, interakcije med spini in konstantnega potenciala v primerno dolgih časovnih intervalih. Za začetek si poglejmo kako izgledajo operatorji za vsakega od teh manevrov. Operator za spin v magnetnem polju izgleda takole:

$$H = \frac{g\mu_B}{\hbar}\vec{S}_1\vec{B} \text{ in } H = \frac{g\mu_B}{\hbar}\vec{S}_2\vec{B} \tag{1}$$

Manjkata le še operator ki sklaplja spina,

$$H = \lambda \vec{S}_1 \vec{S}_2 \tag{2}$$

in operator, ki nam doda konstantni potencial

$$H = \lambda, \tag{3}$$

slednjega se uporablja za spreminjanje faze.

Valovno funkcijo $|\Psi, t\rangle$ dobim tako, da $|\Psi, 0\rangle$ razvijem po lastnih fukcijah in jih propagiram v času. Velja pa tudi

$$|\Psi, t\rangle = e^{-i\frac{H}{\hbar}t} |\Psi, 0\rangle$$

Poglejmo si kako lahko razvijemo izraz $e^{i\varphi A}$, če je operator$A^2 = I$.

$$\begin{aligned} e^{i\varphi A} &= 1 + i\varphi A - \frac{(\varphi A)^2}{2!} - i\frac{(\varphi A)^3}{3!} + \frac{(\varphi A)^4}{4!} + \cdots \\ &= \left(I - \frac{1}{2}\varphi^2 I + \frac{1}{4!}\varphi^4 I + \cdots\right) + iA\left(\varphi I - \frac{1}{3!}\varphi^3 I + \cdots\right) \\ e^{i\varphi A} &= I\cos\varphi + iA\sin\varphi \end{aligned} \tag{4}$$

2.1 Operator X

Operator X sestavimo tako, da najprej postavimo spin 1 za nekaj časa v magnetno polje, operator (1) in potlej še v konstanten potencial (3).

$$\begin{aligned} X &= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \\ \vec{B} &= (B, 0, 0) \\ H &= \frac{g\mu_B}{\hbar} S_x B = \frac{g\mu_B}{2}\sigma_x B \end{aligned}$$

$$e^{-i\frac{H}{\hbar}t} = e^{-i\frac{g\mu_B}{2\hbar}\sigma_x Bt} = I\cos\nu - i\sigma_x \sin\nu, \tag{5}$$

kjer je $\nu = \frac{g\mu_B}{2\hbar}Bt$. če želim imeti operator X mora biti:

$$\begin{aligned} \sin\nu &= 1 \\ \cos\nu &= 0 \end{aligned}$$

Torej $\nu = \frac{\pi}{2}$. To vstavimo v (5) in dobimo

$$e^{-i\frac{H}{\hbar}t} = -i\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ -i & 0 \end{pmatrix}.$$

Na koncu postavimo delec za nekaj čsa v konstanten potencial$H = \lambda$. Veljati mora:

$$e^{-i\frac{H}{\hbar}t} = e^{-i\frac{\lambda}{\hbar}t} = i,$$

torej

$$\frac{\lambda t}{\hbar} = \frac{\pi}{2}$$

2.2 Hademard

Za začetek postavimo spin v magnetnopolje v smeri y.

$$\begin{aligned} Ha &= \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \\ \vec{B}_y &= (0, B_y, 0) \\ H &= \frac{g\mu_B}{2}\sigma_y B_y \\ \nu &= \frac{g\mu_B}{2\hbar}B_y \end{aligned}$$

Kot prej

$$\begin{aligned} e^{-i\frac{H}{\hbar}t} &= I\cos\nu - i\sigma_y \sin\nu, \\ & \quad \text{če za vrednost } \nu \text{ vzamemo } \frac{\pi}{4} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}(I - i\sigma_y) = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Sedaj pa na dobljeno le še delujemo z operatorjem X.

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

3 Vrata $CNOT$

Vrata $CNOT$ delujejo na dva spina. Očitno je da bomo morali delovati z operatorjem, ki sklaplja spina (2), zato je najbolje, da si kar pogledamo kaj ta operator naredi, če deluje na stanje $|\uparrow\uparrow\rangle$ ali $|\uparrow\downarrow\rangle$.

$$\begin{aligned} H &= \lambda S_{1z}S_{2z} \\ H|\uparrow\uparrow\rangle &= \frac{\lambda\hbar^2}{4}|\uparrow\uparrow\rangle \\ H|\uparrow\downarrow\rangle &= -\frac{\lambda\hbar^2}{4}|\uparrow\downarrow\rangle \end{aligned}$$

Če ga zapišem v matrični obliki

$$H = \lambda\frac{\hbar^2}{4}\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Velja $H^2 = I$, zato lahko uporabimo enačbo (4).

Postopek kako zgenerirati $CNOT$ vrata:

1. Hademard na drugem spinu
2. drugi spin v magnetno polje v smeri z za $\frac{g\mu_B}{2\hbar}Bt = \frac{\pi}{4}$
3. prvi spin v magnetno polje v smeri z za $\frac{g\mu_B}{2\hbar}Bt = \frac{\pi}{4}$
4. sklopitev za $\frac{\pi}{4}$
5. Hademard na 2. spin
6. popravek faze

ALGORITEM DEUTSCH - JOZSA

Dejan Arzenšek

20. maj 2008

Povzetek

Kvantni algoritem, ki sta ga predlagala David Deutsch in Richard Jozsa leta 1992, se imenuje Deutsch-Jozsa algoritem. Je eden prvih primerov kvantnih algoritmov, ki so bolj učinkoviti od vseh možnih klasičnih algoritmov.

1 ALGORITEM

V Deutsch-Jozsa problemu, imamo kvantno računalniško črno skrinjico (orakelj), ki realizira funkcijo $f : \{0,1\}^n \longrightarrow \{0,1\}$.

Obetamo si, da je funkcija ali *KONSTANTA* (0 na vseh vhodih ali 1 na vseh vhodih), ali *URAVNOTEŽENA* (vrne 1 za polovico vhodov ter 0 za drugo polovico). Torej z uporabo orakelja določimo, ali je f konstanta ali uravnotežena.

V konvencionalnem algoritmu potrebujemo $2^{n-1} + 1$ ovrednotenj za f, kjer je n število bitov. To je število odgovorov, ki da pravilno vrednost. Pri Deutsch-Josza kvantnemu algoritmu dobimo odgovor, ki je vedno pravilen le z enim samim ovrednotenjem f.

Definiramo funkcijo s številoma (kubitoma) $|0\rangle$ in $|1\rangle$). Z spodnjo tabelo so prikazani možni rezultati te funkcije.

	f_1	f_2	f_3	f_4
0	0	1	0	1
1	0	1	1	0
	$\underbrace{\quad}_{konstanta}$	$\underbrace{\quad}_{konst.}$	$\underbrace{\quad}_{nekonst.}$	$\underbrace{\quad}_{nekonst.}$

Nekdo si je zamislil eno izmed teh štirih funkcij. Kolikokrat je treba poskušati, da vidimo, če je konstantna ali nekonstantna funkcija? Iz zgornjega primera vidimo, da je potrebno dvakrat ugibati.

Sedaj vzamemo za vhodno vrednost dve števili. Dobimo takšno tabelo:

	f_1	f_2	f_3	f_4	f_5	f_6	f_7	f_8	....
00	0	1	1	1	0	0	1	0	
01	0	1	1	0	0	1	0	1	
10	0	1	0	1	1	0	0	1	.....
11	0	1	0	0	1	1	1	0	

V zgornjem primeru imamo zopet dve kontantni funkciji, 14 nekonstantnih, 6 uravnoteženih ter še 8, katere pa nas ne zanimajo. Tukaj se da s tremi poskusi ugotoviti ali je konstanta ali uravnotežena funkcija. Tako lahko nadaljujemo naprej z dodajanjem števil. Veljata te dve enačbi za število poskušanj, če je funkcija konstanta ali ne.

$$\frac{\text{št. kombinacij}}{2} + 1, \qquad \text{ali} \qquad 2^{n-1} + 1,$$

kjer je n število kubitov.

Poglejmo si sedaj kaj dobimo, če pošljemo v črno škatlo en vhod z vrednostjo $|x\rangle$, na drug vhod pa $|y\rangle$. Iz črne škatle pa imamo dva izhoda. Na zgornjem (nasproti vhodnemu $|x\rangle$), imamo zopet $|x\rangle$. Na spodnjem (nasproti vhodnemu $|y\rangle$), pa dobimo vrednost $|y \oplus f(x)\rangle$. $f(x)$ je ena izmed vrednosti $f_1, f_2, f_3, \ldots$. Operacija $\oplus$ pomeni seštevanje po modulu 2. To operacijo prikazujejo spodnje štiri vrstice:

$$\begin{array}{ccccc} 0 & \oplus & 0 & = & 0 \\ 0 & \oplus & 1 & = & 1 \\ 1 & \oplus & 0 & = & 1 \\ 1 & \oplus & 1 & = & 0 \end{array}$$

Torej ta operacija deluje tako, da ko seštejemo vrednosti in ta seštevek delimo z dva, pogledamo ostanek tega deljenja. Ta ostanek je potem izhodna vrednost te operacije.

Naredimo sedaj korak prehoda skozi črno škatlo za en kubit na vhodih. Torej je na vhodu $|x, y\rangle$, na izhodu pa $|x, y \oplus f(x)\rangle$. To naredim za vse štiri funkcije $f(x)$.

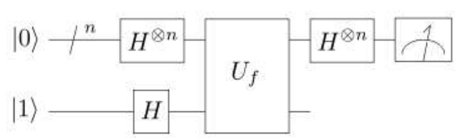
$\lvert x,y\rangle$	$\lvert x, y \oplus f_1(x)\rangle$	$\lvert x,y\rangle$	$\lvert x, y \oplus f_2(x)\rangle$	$\lvert x,y\rangle$	$\lvert x, y \oplus f_3(x)\rangle$	$\lvert x,y\rangle$	$\lvert x, y \oplus f_4(x)\rangle$
00	00	00	01	00	00	00	01
10	10	10	11	10	11	10	10
01	01	01	00	01	01	01	00
11	11	11	10	11	10	11	11

Za vsako od teh štirih vhodnih in izhodnih vrednosti lahko naredimo transformacijske matrike med vhodnimi in izhodnimi vrednostmi. Dobimo te štiri matrike:

$$\text{za } f_1: \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \text{ za } f_2: \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \text{ za } f_3: \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \text{ za } f_4: \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Iz zgornjih matrik lahko opazim, da za f_1 ima obliko identične matrike, za f_2 nima kakšne posebne oblike. Za f_3 ima obliko operatorja CNOT, ki deluje na dva spina hkrati, za f_4 pa je operator CNOT, ki deluje na en spin.

V črni škatli je ena izmed štirih matrik. Mi bi radi z enim samim poskusom ugotovili za katero gre. Shematično lahko algoritem prikažemo z spodnjo sliko. Na zgornji sliki lahko vidimo,



Slika 1: Shematska slika algoritma.

da na dveh vhodih najprej delujemo z Hadamardovim operatorjem. Ta se zapiše kot:

$$H = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}$$

Tako pretransformirana kubita vodimo naprej do črne škatle. Izhoda iz te črne škatle sta zopet dva. Zgornji vhod zopet pretransformiramo z Hadamardovo matriko. To pretransformirano vrednost pa na koncu izmerimo.

Torej, poglejmo kaj dobimo, če na zgornji vhod pošljemo $|0\rangle$, na spodnjega pa $|1\rangle$. $|0\rangle$ lahko zapišem vektorsko kot $[1,0]$ ter $|1\rangle$ kot $[0,1]$. Torej, če na ta dva kubita delujemo z operatorjem H, dobim na zgornjem vhodu vrednost $\frac{1}{\sqrt{2}}[1,1]$ ter na spodnjem $\frac{1}{\sqrt{2}}[1,-1]$. Skupno funkcijo lahko tako zapišemo kot:

$$\frac{1}{2}\left(|0\rangle|0\rangle - |0\rangle|1\rangle + |0\rangle|1\rangle - |1\rangle|1\rangle\right)$$

V vektorski obliki lahko to zapišem kot

$$\frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix}$$

To funkcijo sedaj pošljem v črno škatlo in tako za vsako od štirih prej izračunanih matrik dobim ven te štiri vrednosti:

$$\text{za } f_1: \quad \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix} \quad \text{za } f_2: \quad \frac{1}{2}\begin{pmatrix} -1 \\ 1 \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad \text{za } f_3: \quad \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad \text{za } f_4: \quad \frac{1}{2}\begin{pmatrix} -1 \\ 1 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix}$$

Na koncu naredim še Hadamarda na prvi spin.
Hočem naredit Hadamardovo matriko na prvi spin. Napišem tele enačbe:

$$\begin{array}{lcl} H_1|00\rangle & \longrightarrow & \frac{1}{\sqrt{2}}|00\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|10\rangle \\ H_1|01\rangle & \longrightarrow & \frac{1}{\sqrt{2}}|01\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|11\rangle \\ H_1|10\rangle & \longrightarrow & \frac{1}{\sqrt{2}}|00\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}|10\rangle \\ H_1|11\rangle & \longrightarrow & \frac{1}{\sqrt{2}}|01\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}|11\rangle \end{array}$$

Iz teh enačb sledi operator H_1 kot matrika:

$$H_1 = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}$$

Delujmo sedaj z operatorjem H_1 na vrednost, ki jo dobimo ven iz črne škatlice za f_1:

$$H_1 \cdot \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix} \quad = \quad \frac{1}{2\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Če poračunam še na preostalih treh funkcijah dobim spodnje vrednosti:

$$\text{za } f_2\text{:} \quad \frac{1}{2\sqrt{2}}\begin{pmatrix} -1 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \qquad \text{za } f_3\text{:} \quad \frac{1}{2\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix} \qquad \text{za } f_4\text{:} \quad \frac{1}{2\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Tako pogledamo kakšne so vrednosti na samo prvem spinu!

Iz rezultatov se vidi, da pri meritvi prvega spina dobimo z gotovostjo $|0\rangle$ za obe konstantni funkciji in z gotovostjo $|1\rangle$ za obe uravnoteženi funkciji.

Algoritem torej loči konstantni funkciji od uravnoteženih z enim samim izračunom funkcije.