1. **Hamiltonian pozitronijevega atoma (e-e+) je ob zanemaritvi orbitalnega gibanja H** = J$\mathbf{S_1 S_2}$ + +gμ_B**($\mathbf{S_1}$-$\mathbf{S_2}$)B**/ħ. **Izračunaj lastne funkcije in energije. Obravnavaj limiti šibkega in močnega magnetnega polja.**

Možne so 2^2 = 4 različne ureditve dveh spinov: $\left|\uparrow\uparrow\right\rangle, \left|\downarrow\downarrow\right\rangle, \left|\uparrow\downarrow\right\rangle, \left|\downarrow\uparrow\right\rangle$. Matrične elemente $H_{mn} = \left\langle m\right|H\left|n\right\rangle$ rajši poiščemo v bazi z dobrima S^2 = $(\mathbf{S_1}+\mathbf{S_2})^2$ in $S_z = S_{1z} + S_{2z}$ (tripletno in singletno stanje), ker pričakujemo več ničelnih elementov :

$$\left|1\right\rangle = \left|\uparrow\uparrow\right\rangle, \qquad \left|2\right\rangle = \left|\downarrow\downarrow\right\rangle, \qquad \left|3\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left|\uparrow\downarrow - \downarrow\uparrow\right\rangle, \qquad \left|4\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left|\uparrow\downarrow - \downarrow\uparrow\right\rangle$$

Upoštevamo **S = σ**ħ/2 , usmerimo **B** = B$\hat{e}_z$ in razpišemo hamiltonijan po komponentah :

$$H = \hbar^2 J/4\,(\sigma_{1x}\sigma_{2x} + \sigma_{1y}\sigma_{2y} + \sigma_{1z}\sigma_{2z}) + g\mu_B B/2\,(\sigma_{1z} - \sigma_{2z}).$$

Indeks 1 (oziroma 2) pri Paulijevih matrikah pove, da matrika deluje samo na prvo (oziroma drugo) puščico(=spinor). Pri izračunu matričnih imamo potem zgolj člene oblike (njihovo število pa je lahko kar veliko):

$$\left\langle\uparrow\right|\sigma_x\left|\uparrow\right\rangle = 0 \qquad \left\langle\downarrow\right|\sigma_x\left|\downarrow\right\rangle = 0 \qquad \left\langle\uparrow\right|\sigma_x\left|\downarrow\right\rangle = 1 \qquad \left\langle\downarrow\right|\sigma_x\left|\uparrow\right\rangle = 1$$

$$\left\langle\uparrow\right|\sigma_y\left|\uparrow\right\rangle = 0 \qquad \left\langle\downarrow\right|\sigma_y\left|\downarrow\right\rangle = 0 \qquad \left\langle\uparrow\right|\sigma_y\left|\downarrow\right\rangle = -i \qquad \left\langle\downarrow\right|\sigma_y\left|\uparrow\right\rangle = i$$

$$\left\langle\uparrow\right|\sigma_z\left|\uparrow\right\rangle = 1 \qquad \left\langle\downarrow\right|\sigma_z\left|\downarrow\right\rangle = -1 \qquad \left\langle\uparrow\right|\sigma_z\left|\downarrow\right\rangle = 0 \qquad \left\langle\downarrow\right|\sigma_z\left|\uparrow\right\rangle = 0$$

ter

$$\left\langle\uparrow\middle|\uparrow\right\rangle = \left\langle\downarrow\middle|\downarrow\right\rangle = 1 \qquad \left\langle\uparrow\middle|\downarrow\right\rangle = \left\langle\downarrow\middle|\uparrow\right\rangle = 0.$$

Za zgled preverimo dve izmed zgornjih enakosti (ostale se na enak način) :

$$\left\langle\downarrow\right|\sigma_y\left|\uparrow\right\rangle = (0,1)\begin{pmatrix}0 & -i\\ i & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} = (i,0)\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} = i\,,$$

$$\left\langle\uparrow\right|\sigma_z\left|\downarrow\right\rangle = (1,0)\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix} = (1,0)\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix} = 0\,.$$

Pri izračunu izvendiagonalnih elementov upoštevamo, da je $S^2 = S_1^2 + S_2^2 + 2\mathbf{S_1 S_2}$ (torej tudi $S_1 S_2$) dober, kar pomeni $\overset{\omega}{S}_1\overset{\omega}{S}_2\left|m\right\rangle = konst\left|m\right\rangle$ in prvi člen v začetnem hamiltonijanu nič ne prispeva ($\left\langle m\right|\overset{\omega}{S}_1\overset{\omega}{S}_2\left|n\right\rangle = \left\langle m\right|konst\left|n\right\rangle = konst\left\langle m\middle|n\right\rangle = 0$). Zavedamo se tudi, da mora biti matrika simetrična (za realne matrične elemente). Z nekaj računanja dobimo :

$$H_{mn} = \begin{pmatrix} \frac{\eta^2 J}{4} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\eta^2 J}{4} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\eta^2 J}{4} & g\mu_B B \\ 0 & 0 & g\mu_B B & -3\frac{\eta^2 J}{4} \end{pmatrix}$$

Na primer $\left\langle 1\right|H\left|1\right\rangle = \frac{\eta^2 J}{4}\left(\left\langle\uparrow\right|\sigma_{1x}\left|\uparrow\right\rangle\left\langle\uparrow\right|\sigma_{2x}\left|\uparrow\right\rangle + 0 + \left\langle\uparrow\right|\sigma_{1z}\left|\uparrow\right\rangle\left\langle\uparrow\right|\sigma_{2z}\left|\uparrow\right\rangle\right) + \frac{g\eta_B B}{2}(1-1) = = \frac{\eta^2 J}{4}$. Rešujemo $H\Psi = E\Psi, (H_{mn} - E\mathrm{I})\Psi = 0$. Razvijemo $\left|\Psi\right\rangle = \sum_m c_m\left|m\right\rangle$, vpeljemo

$A = \dfrac{\eta^2 J}{4}$ ter $\alpha = g\mu_B B$ in dobimo problem lastnih vrednosti (E so lastne energije, c_m pa koeficienti v razvoju lastne funkcije po bazi) v obliki :

$$\begin{pmatrix} A-E & 0 & 0 & 0 \\ 0 & A-E & 0 & 0 \\ 0 & 0 & A-E & \alpha \\ 0 & 0 & \alpha & -3A-E \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \\ c_4 \end{pmatrix} = 0$$

Zaradi posebne oblike matrike ni potrebno zares iskati ničel karakterističnega polinoma četrte stopnje, temveč dve lastni vrednosti $E_1 = E_2 = A$ razberemo že iz začetne oblike, preostali pa poiščemo iz

$$\det\begin{pmatrix} A-E & \alpha \\ \alpha & -3A-E \end{pmatrix} = 0 . \qquad \Rightarrow E_{3,4} = -A \pm \sqrt{4A^2 + \alpha^2}$$

Za koeficiente lastnih funkcij dobimo :

$E = E_1$: $c_3 = c_4 = 0$ $\Rightarrow$ lahko izberemo dva neodvisna vektorja, n.p. (1,0,0,0) in (0,1,0,0) ,

$E = E_3$: na primer $\left(0{,}0, \dfrac{\alpha}{-2A + \sqrt{4A^2 + \alpha^2}}, 1\right)$,

$E = E_4$: na primer $\left(0{,}0{,}1, \dfrac{\alpha}{2A - \sqrt{4A^2 + \alpha^2}}\right)$.

Zadnja vektorja je potrebno še normirati z zahtevo $c_3^2 + c_4^2 = 1$.

Poglejmo še lastne energije v limiti šibkega in močnega polja :

a) B << 1, α << 1 : $E_1 = E_2 = A$,

$$E_3 = -A + 2A\sqrt{1 + \frac{\alpha^2}{4A^2}} \approx -A + 2A(1 + \frac{\alpha^2}{8A^2}) = A + \frac{\alpha^2}{4A}, \qquad E_4 \approx -3A - \frac{\alpha^2}{4A},$$

pri čemer smo upoštevali $\sqrt{1+x} \approx 1 + x/2$ za majhen x.

b) B >> 1, α >> 1 : $E_1 = E_2 = A$, $E_3 \approx \alpha$, $E_4 \approx -\alpha$

2. Poišči osnovno in prvo vzbujeno stanje za tri elektrone, sklopljene s feromagnetno sklopitvijo, H = -J($\mathbf{S_1 S_2} + \mathbf{S_2 S_3} + \mathbf{S_3 S_1}$).

Možnih je 2^3 = 8 različnih ureditev treh spinov ($|\uparrow\uparrow\uparrow\rangle, |\downarrow\downarrow\downarrow\rangle, |\uparrow\uparrow\downarrow\rangle, |\uparrow\downarrow\uparrow\rangle, |\downarrow\uparrow\uparrow\rangle, |\uparrow\downarrow\downarrow\rangle, |\downarrow\uparrow\downarrow\rangle, |\downarrow\downarrow\uparrow\rangle$), iz katerih poskušamo sestaviti bazo $|m\rangle$ (m = 1,2,...,8), v kateri bo imela matrika H_{mn}, čim bolj diagonalno obliko (diagonalizacija poljubne simetrične 8X8 matrike je pretrd oreh). Za bazo iz 1. naloge (triplet in singlet) vemo, da je ugodna pri podobnih hamiltonijanih za dva spina; uporabimo jo tudi v tem primeru za dva spina, tretjega pa sklopimo z njo s pomočjo Clebsch-Gordan-ovih koeficientov, za katere vemo, da ohranjajo celoten spin dober. Uporabimo jih lahko za kombiniranje s tripletnimi stanji (S = 1, M = +1,0,-1; n.p. $|\uparrow\uparrow\rangle = |1,+1\rangle = |S,M\rangle$ ali $1/2|\uparrow\downarrow - \downarrow\uparrow\rangle = |1,0\rangle$), medtem ko lahko singletno stanje $|0,0\rangle$ z dodanim spinom privede samo do končnega $\left|\frac{1}{2}, \pm\frac{1}{2}\right\rangle$ in nimamo izbire :

$$|7\rangle = \left|\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}\right\rangle = |0,0\rangle\left|\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|\uparrow\downarrow - \downarrow\uparrow\rangle|\uparrow\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|\uparrow\downarrow\uparrow\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}|\downarrow\uparrow\uparrow\rangle,$$

$$|8\rangle = \left|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle = |0,0\rangle\left|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|\uparrow\downarrow\downarrow\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}|\downarrow\uparrow\downarrow\rangle .$$

S pomočjo tabele dobimo torej še preostalih šest baznih vektorjev (gledamo okvirček $1 \times \frac{1}{2}$) :

$$|1\rangle=\left|\frac{3}{2},+\frac{3}{2}\right\rangle=1|1,+1\rangle\left|\frac{1}{2},+\frac{1}{2}\right\rangle,$$

$$|2\rangle=\left|\frac{3}{2},+\frac{1}{2}\right\rangle=\frac{1}{\sqrt{3}}|1,+1\rangle\left|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle+\sqrt{\frac{2}{3}}|1,0\rangle\left|\frac{1}{2},+\frac{1}{2}\right\rangle,$$

$$|3\rangle=\left|\frac{3}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle=\sqrt{\frac{2}{3}}|1,0\rangle\left|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle+\frac{1}{\sqrt{3}}|1,-1\rangle\left|\frac{1}{2},+\frac{1}{2}\right\rangle,$$

$$|4\rangle=\left|\frac{3}{2},-\frac{3}{2}\right\rangle=1|1,-1\rangle\left|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle,$$

$$|5\rangle=\left|\frac{1}{2},+\frac{1}{2}\right\rangle=\sqrt{\frac{2}{3}}|1,+1\rangle\left|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle-\frac{1}{\sqrt{3}}|1.0\rangle\left|\frac{1}{2},+\frac{1}{2}\right\rangle,$$

$$|6\rangle=\left|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle=\frac{1}{\sqrt{3}}|1,0\rangle\left|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle-\sqrt{\frac{2}{3}}|1,-1\rangle\left|\frac{1}{2},+\frac{1}{2}\right\rangle.$$

Matrične elemente računamo sedaj na enak način in z enakimi pravili kot pri 1.nalogi (uporabimo zapis baznih vektorjev s puščico, ki sem ga zaradi kratkosti izpuščal). So pa posamezni računi zaradi obilice členov dovolj neprijetni, zato se trudimo izračunati samo člene, ki jih zares potrebujemo. Tako se da (z tudi kar nekaj truda) pokazati, da hamiltonijan komutira z vsemi komponentami skupnega spina, $[H,S_i]=0$ (i = 1, 2, 3) (nepreverjeno) in torej tudi s kvadratom velikosti spina $[H,S^2]=0$.
Iz tega nekako sklepamo, da so $\langle m|H|n\rangle=0$, čim se skupna spin S in komponenta spina M pri obeh baznih vektorjih $|m\rangle$ in $|n\rangle$ ne ujemata. Potemtakem so lahko od nič različni diagonalni elementi in $\langle 5|H|7\rangle=\langle 7|H|5\rangle$ ter $\langle 6|H|8\rangle=\langle 8|H|6\rangle$. V takšni bločno-diagonalni matriki na zgornjih štirih diagonalnih mestih podobno kot pri 1.nalogi že stojijo lastne vrednosti (=energije lastnih stanj). Zopet se skličemo na $[H,S_i]=0$ in posledično $[H,S^{\pm}]=0$ ter pokažemo, da so vse štiri enake :

$$[H,S^-]\left|\frac{3}{2},\frac{3}{2}\right\rangle=0$$

$$HS^-\left|\frac{3}{2},\frac{3}{2}\right\rangle-S^-H\left|\frac{3}{2},\frac{3}{2}\right\rangle=0\Rightarrow Hkonst\left|\frac{3}{2},\frac{1}{2}\right\rangle-S^-E_{\frac{3}{2}\frac{3}{2}}\left|\frac{3}{2},\frac{3}{2}\right\rangle=0$$

$$konstH\left|\frac{3}{2},\frac{1}{2}\right\rangle-E_{\frac{3}{2}\frac{3}{2}}konst\left|\frac{3}{2},\frac{1}{2}\right\rangle=0\Rightarrow E_{\frac{3}{2}\frac{1}{2}}=E_{\frac{3}{2}\frac{3}{2}}$$

in enako $E_{\frac{3}{2}-\frac{1}{2}}=E_{\frac{3}{2}\frac{1}{2}}$ ter $E_{\frac{3}{2}-\frac{1}{2}}=E_{\frac{3}{2}-\frac{3}{2}}$. Upoštevali smo $S^-|S,M\rangle=konst|S,M-1\rangle$ in $H\Psi=E\Psi$, torej tudi, da so prvi štirje bazni vektorji obenem lastne funkcije hamiltoniana. Eksplicitno sem izračunal vse diagonalne elemente, (6H8), (5H7) in še nekaj drugih, pri čemer sem dobil :

$$H_{mn}=\begin{pmatrix}-3A&0&0&0&0&0&0&0\\0&-3A&0&0&0&0&0&0\\0&0&-3A&0&0&0&0&0\\0&0&0&-3A&0&0&0&0\\0&0&0&0&3A&0&0&0\\0&0&0&0&0&3A&0&0\\0&0&0&0&0&0&3A&0\\0&0&0&0&0&0&0&3A\end{pmatrix},\qquad\Rightarrow E_0=-3A=-3\frac{\eta^2J}{4},E_1=3\frac{\eta^2J}{4}$$

Matrika je v naši bazi očitno že diagonalna (če se nisem zmotil pri računanju).