Kvantna mehanika 1

Spin III

FMF
iztok pižorn, mafi

27. junij 2003

1 Problem

Delec brez naboja in s spinom $S = \frac{1}{2}$ se giblje v neskončni potencialni jami. V levi polovici jame je homogeno magnetno polje $B_0\mathbf{e}_z$, v desni polovici jame pa homogeno magnetno polje $B_0\mathbf{e}_x$. Poiskati enačbo, ki določa lastne energije delca in pokazati, da se rešitve za majhen B_0 ujemajo z rezultati perturbacijske teorije.

2 Določanje enačbe za lastne energije

Hamiltonka za delec v polju se glasi:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{g\mu_B}{\hbar}\mathbf{s}\cdot\mathbf{B}$$

Lastne funkcije za takšno enačbo so sestavljene iz koordinatnega in spinskega dela:

$$H\big|R\big\rangle\big|m\big\rangle = E\big|R\big\rangle\big|m\big\rangle,$$

kjer je $\big|m\big\rangle$ lastna funkcija operatorja $\mathbf{s}\cdot\mathbf{B}$. Ostane še enačba za radialni del

$$\frac{\partial^2 R(x)}{\partial x^2} + \frac{2m(E - g\mu_B B_0\alpha_m)}{\hbar^2}R(x) = 0 \quad ,$$

rešitev zanjo pa je vsem dobro poznana.

2.1 Določanje lastnih funkcij spinskega dela

Če je $\mathbf{B} = B_0\mathbf{e}_z$, potem sta lastni funkciji za spinski del kar $\big|\uparrow\big\rangle$ in $\big|\downarrow\big\rangle$. Velja še

$$s_z\big|\uparrow\big\rangle = \frac{\hbar}{2}\big|\uparrow\big\rangle \quad \text{in} \quad s_z\big|\downarrow\big\rangle = -\frac{\hbar}{2}\big|\downarrow\big\rangle$$

Če je $\mathbf{B} = B_0\mathbf{e}_x$, potem sta lastni funkciji za spinski del

$$\big|E\big\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\big(\big|\uparrow\big\rangle + \big|\downarrow\big\rangle\big) \quad \text{in}\big|O\big\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\big(\big|\uparrow\big\rangle - \big|\downarrow\big\rangle\big)$$

Velja še:

$$s_x\big|E\big\rangle = \frac{\hbar}{2}\big|E\big\rangle \quad \text{in} \quad s_x\big|O\big\rangle = -\frac{\hbar}{2}\big|O\big\rangle$$

2.2 Določanje skupne funkcije

Funkciji zapišemo posebej za levi (1) in desni (2) del jame:

$$\big|\Psi_1\big\rangle = \psi_+(x)\big|x\big\rangle\big|\uparrow\big\rangle + \psi_-(x)\big|x\big\rangle\big|\downarrow\big\rangle \qquad \big|\Psi_2\big\rangle = \psi_E(x)\big|x\big\rangle\big|E\big\rangle + \psi_O(x)\big|x\big\rangle\big|O\big\rangle$$

Izberemo raje vektorski zapis, ki je vezan na bazo:

$$\big|\Psi_1\big\rangle = \begin{pmatrix} \psi_+(x) \\ \psi_-(x) \end{pmatrix}$$

Za konsistenten zapis moramo obe strani pretvoriti na isti nabor spinskih funkcij. Ni težko ugotoviti, da velja

$$\begin{pmatrix} \big|E\big\rangle \\ \big|O\big\rangle \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \big|\uparrow\big\rangle \\ \big|\downarrow\big\rangle \end{pmatrix}$$

Rešitve so torej:

$$\Psi_1(x) = \begin{pmatrix} C_+ \sin k_+(x + \frac{x_0}{2}) \\ C_- \sin k_-(x + \frac{x_0}{2}) \end{pmatrix}$$

za levo in

$$\Psi_1(x) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} C_E \sin k_E(x - \frac{x_0}{2}) + C_O \sin k_O(x - \frac{x_0}{2}) \\ C_E \sin k_E(x - \frac{x_0}{2}) - C_O \sin k_O(x - \frac{x_0}{2}) \end{pmatrix}$$

za desno stran. Pri tem smo že zadovoljili pogojema, da mora valovna funkcija ob konceh ponikniti.

2.3 Lepljenje

Levo in desno stran zlepimo na sredini pri $x = 0$, tako da bo celotna funkcija zvezna in da bo imela zvezen prvi odvod. To mora veljati za obe spinski usmeritvi. Pridelamo enačbe:

$$\begin{aligned} \sqrt{2}C_+ \sin k_+ \frac{x_0}{2} &= -C_E \sin k_E \frac{x_0}{2} - C_O \sin k_O \frac{x_0}{2} && (1) \\ \sqrt{2}C_- \sin k_- \frac{x_0}{2} &= -C_E \sin k_E \frac{x_0}{2} + C_O \sin k_O \frac{x_0}{2} && (2) \\ \sqrt{2}k_+ C_+ \cos k_+ \frac{x_0}{2} &= k_E C_E \cos k_E \frac{x_0}{2} + k_O C_O \cos k_O \frac{x_0}{2} && (3) \\ \sqrt{2}k_- C_- \cos k_- \frac{x_0}{2} &= k_E C_E \cos k_E \frac{x_0}{2} - k_O C_O \cos k_O \frac{x_0}{2} && (4) \end{aligned}$$

Da bo sistem enačb za koeficiente C_μ rešljiv, mora obstajati netrivialna rešitev sistema homogenih enačb. Drugače rečeno, treba je izračunati determinanto in jo postaviti na 0. Za manjšo zmedo uvedimo nove spremenljivke: $a = \frac{k_+ x_0}{2}$, $b = \frac{k_- x_0}{2}$, $c = \frac{k_E x_0}{2}$, $d = \frac{k_O x_0}{2}$.

2.4 Pogoj za lastne energije

Ker hočemo najti lastne energije, mora veljati $E_\uparrow = E_\downarrow = E_E = E_O \equiv E$. Zato lahko zapišemo:

$$a = c = C - t \quad \text{in} \quad b = d = C + t \quad ; \quad t = \frac{w}{C}$$

S tem enačba $\det(\ldots) = 0$ preide v

$$-C^2 - t^2 + (2C^2 - t^2)\cos 4C - (C^2 - 2t^2)\cos 4t + 4Ct \sin 2C \sin 2t = 0$$

Razvijemo v vrsto po t in namesto t vstavimo w/C:

$$-4(C\sin 2C)^2 + 2(2C+\sin 2C)^2\left(\frac{w}{C}\right)^2 = 0$$

Ugotovimo, da če je $w \propto B_0 = 0$, je rešitev za enačbo kar $C = n\frac{\pi}{2}$. Sedaj pa jo malo pokvarimo:

$$C = n\frac{\pi}{2} + y$$

in dobimo enačbo:

$$-4n^2\pi^2y^2\left(\frac{n\pi+2y}{2w}\right)^2 + 2n^2\pi^2 + 8(1+(-1)^n)n\pi y + 8(1+(-1)^n)^2y^2 = 0$$

To razvijemo po y do kvadratnega člena:

$$\left(16 + 16(-1)^n - \frac{n^4\pi^4}{w^2}\right)y^2 + 16n\pi y + 2n^2\pi^2 = 0$$

To pa je navadna kvadratna enačba, za katero poznamo rešitvi:

$$y = \frac{8n\pi w^2 \mp \sqrt{2}n\pi w\sqrt{n^4\pi^4 + 24w^2 - 16(-1)^n w^2 - 8w^2}}{n^4\pi^4 - 8w^2 - 16(-1)^n w^2 - 8w^2}$$

Spomnimo se, kaj že je energija:

$$E = \frac{4\hbar^2}{2mx_0^2}\left(\frac{n\pi}{2} + y\right)^2$$

Vstavimo rešitev za y v zgornjo enačbo, razvijemo po w do linearnega člena:

$$E = \frac{\hbar^2}{2mx_0^2}\left(n^2\pi^2 \pm 4\sqrt{2}w\right)$$

še vstavimo za $w = \frac{1}{8\hbar^2}g\mu_B B_0 m x_0^2$ in dobimo:

$$E = \frac{\hbar^2 n^2\pi^2}{2mx_0^2} \pm \frac{\sqrt{2}}{4}g\mu_B B_0$$

Takšne so torej lastne energije za majhno polje. Degeneracija zaradi tega, ker sta na obeh področjih dve lastni funkciji za isto energijo (zaradi spina).

3 Rešitev s perturbacijo

Hamiltonko zapišemo kot

$$H = H_0 + \frac{g\mu_B B_0}{\hbar}\big(\Theta(x)s_x + \Theta(-x)s_z\big)$$

Lastne funkcije za delec s spinom $S = \frac{1}{2}$ v neskončni potencialni jami so

$$\psi_n(x)\big|\uparrow\big\rangle \quad \text{in} \quad \psi_n(x)\big|\downarrow\big\rangle$$

Zlahka izračunamo matrične elemente:

$$\big\langle\uparrow n\big|V\big|n\downarrow\big\rangle = \frac{g\mu_B B_0}{\hbar}\frac{\hbar}{2}\big\langle n\big|\Theta(x)\big|n\big\rangle = \frac{g\mu_B B_0}{4} \tag{5}$$

$$\big\langle\downarrow n\big|V\big|n\uparrow\big\rangle = \frac{g\mu_B B_0}{\hbar}\frac{\hbar}{2}\big\langle n\big|\Theta(x)\big|n\big\rangle = \frac{g\mu_B B_0}{4} \tag{6}$$

$$\big\langle\uparrow n\big|V\big|n\uparrow\big\rangle = \frac{g\mu_B B_0}{\hbar}\frac{\hbar}{2}\big\langle n\big|\Theta(-x)\big|n\big\rangle = \frac{g\mu_B B_0}{4} \tag{7}$$

$$\big\langle\downarrow n\big|V\big|n\downarrow\big\rangle = -\frac{g\mu_B B_0}{\hbar}\frac{\hbar}{2}\big\langle n\big|\Theta(-x)\big|n\big\rangle = -\frac{g\mu_B B_0}{4} \tag{8}$$

$$\tag{9}$$

Lastne vrednosti te matrike sta

$$W_n^{(1)} = \pm \frac{\sqrt{2}}{4} g \mu_B B_0$$

in voilà, to se natanko ujema z rezultatom prejšnjega poglavja.