KVANTNA MEHANIKA I

Poročilo naloge

Trispinska interakcija[1]

Alan Šuligoj

1 Naloga

Bite kvantnega računalnika lahko predstavimo s spinskimi stanji elektronov (s=1/2), ki so ujeti v posameznih kvantnih pikah. Zaradi efektov tuneliranja stanja elektrona v posamezni kvantni piki čutijo tudi potencial bližnjih pik. Imejmo tri takšne pike v ogljiščih enakostraničnega trikotnika, kjer se v vsaki piki nahaja en elektron. Čeprav med spini elektronov ni neposredne sklopitve, pa lahko krajevno interakcijo ob zahtevi po antisimetričnosti valovne funkcije za fermione prenesemov spinski del kot efektivni Hamiltonov operator

$$H = a(\mathbf{S_1} \cdot \mathbf{S_2} + \mathbf{S_2} \cdot \mathbf{S_3} + \mathbf{S_3} \cdot \mathbf{S_1}) \tag{1}$$

- Zapiši Hamiltonov operator z operatorjem kvadrata skupne vrtilne količine vseh treh spinov $\mathbf{J} = \mathbf{S_1} + \mathbf{S_2} + \mathbf{S_3}$ in kvadrati velikosti vrtilne količine posameznih spinov.
- Poišči lastne energije takšnega sistema in njihovo degeneracijo. *Namig: najprej poglej, kakšna stanja z dobro določenim kvadratom velikosti in komponento skupne vrtilne količine lahko sestavimo iz enega para spinov.*
- Kako se spremenijo lastne enegije sistema in kolikšne so njihove degeneracije, če ga postavimo v magnetno polje, tako da imamo nov Hamiltonov operator $H' = H + b(m_1 + m_2 + m_3)$?

2 Rešitev

2.1 Hamiltonov operator

Velikost skupne vrtilne količine zapišemo kot

$$\mathbf{J} = \mathbf{S_1} + \mathbf{S_2} + \mathbf{S_3} \tag{2}$$

Kvadriranje te enačbe nam da enakost

$$\mathbf{S_1} \cdot \mathbf{S_2} + \mathbf{S_2} \cdot \mathbf{S_3} + \mathbf{S_3} \cdot \mathbf{S_1} = \frac{1}{2}(\mathbf{J}^2 - \mathbf{S_1}^2 - \mathbf{S_2}^2 - \mathbf{S_3}^2) \tag{3}$$

tako da z vstavljanjem v en.1 dobimo zahtevano preoblikovan zapis Hamiltonovega operatorja

$$H = \frac{a}{2}(\mathbf{J}^2 - \mathbf{S_1}^2 - \mathbf{S_2}^2 - \mathbf{S_3}^2) \tag{4}$$

[1] naloga je del naloge iz drugega kolokvija študijskega leta 2004/05, pri vajah pa smo jo reševali 10.5.2006

2.2 Lastne energije in degeneracija

Lastne energije, lastne funkcije in Hamiltonov operator povezuje enačba

$$H|JM\rangle = E|JM\rangle \tag{5}$$

kjer M predstavlja velikost skupne vrtilne količine v z smeri. Če v zgornjo enačbo vstavimo Hamiltonov operator iz en.4 ter upoštevamo še zvezo

$$\mathbf{S^2}|SM\rangle = \hbar^2 S(S+1)|SM\rangle \tag{6}$$

in dejstvo, da so stanja $|JM\rangle$ lastna stanja operatorja H, dobimo

$$\begin{aligned} E|JM\rangle &= H|JM\rangle \\ &= \frac{a\hbar^2}{2}(J(J+1) - (S_1(S_1+1)) - (S_2(S_2+1)) - (S_3(S_3+1)))|JM\rangle \\ &= \frac{a\hbar^2}{2}(J(J+1) - \frac{9}{4})|JM\rangle \end{aligned} \tag{7}$$

Energijo tako podaja enačba

$$E = \frac{a\hbar^2}{2}(J(J+1) - \frac{9}{4}) \tag{8}$$

in s tem je energija enolično določena zgolj z velikostjo skupne vrtilne količine.

Splača se upoštevati namig iz naloge in najprej poiskati vsa stanja, ki jih lahko sestavimo iz enega para spinov. Upoštevamo, da je velikost vsakega spina 1/2, medtem ko lahko njegova projekcija na os z zavzame vrednosti $+1/2$ in $-1/2$. Pri seštevanju upoštevamo zveze

$$|S_1 - S_2| \leq S \leq S_1 + S_2 \tag{9}$$

$$|M| \leq S \tag{10}$$

$$M = m_1 + m_2 \tag{11}$$

kjer m označuje projekcijo spina na os z. Dobimo naslednje rezultate

J_{12}	M_{12}	lastna funkcija $\vert J_{12}, M_{12}\rangle$
1	1	$\vert 1,1\rangle = \vert m_1 = 1/2, m_2 = 1/2\rangle$
1	0	$\vert 1,0\rangle = \sqrt{\frac{1}{2}}\vert m_1 = 1/2, m_2 = -1/2\rangle + \sqrt{\frac{1}{2}}\vert m_1 = -1/2, m_2 = 1/2\rangle$
1	-1	$\vert 1,-1\rangle = \vert m_1 = -1/2, m_2 = -1/2\rangle$
0	0	$\vert 0,0\rangle = \sqrt{\frac{1}{2}}\vert m_1 = 1/2, m_2 = -1/2\rangle - \sqrt{\frac{1}{2}}\vert m_1 = -1/2, m_2 = 1/2\rangle$

Tabela 1: Lastne funkcije za vsoto dveh spinov

Do koeficientov nam pomaga Clebsch-Gordanova tabela, v tem primeru razdelek $1/2x1/2$ (na sl.1).

Dobljenim rezultatom moramo prišteti še tretji spin, tako da s pomočjo tabele na sl.1 dobimo končne lastne funkcije (tab.2).

Iz tabele je razvidno, da imamo dve možni vrednosti za velikost skupne vrtilne količine J. Po en.9 imamo tako dve vrednosti za energijo, in sicer $\frac{3a\hbar^2}{2}$ in $-\frac{3a\hbar^2}{2}$ z degeneracijama 4 in 2.

J	M	lastna funkcija $\|J,M\rangle$
3/2	3/2	$\|3/2,3/2\rangle = \|M_{12}=1, m_3=1/2\rangle$
3/2	1/2	$\|3/2,1/2\rangle = \sqrt{\frac{1}{3}}\|M_{12}=1, m_3=-1/2\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}}\|M_{12}=0, m_3=1/2\rangle$
1/2	1/2	$\|1/2,1/2\rangle = \sqrt{\frac{2}{3}}\|M_{12}=1, m_3=-1/2\rangle - \sqrt{\frac{1}{3}}\|M_{12}=0, m_3=1/2\rangle$
3/2	-1/2	$\|3/2,-1/2\rangle = \sqrt{\frac{2}{3}}\|M_{12}=0, m_3=-1/2\rangle + \sqrt{\frac{1}{3}}\|M_{12}=-1, m_3=1/2\rangle$
1/2	-1/2	$\|1/2,-1/2\rangle = \sqrt{\frac{1}{3}}\|M_{12}=0, m_3=-1/2\rangle - \sqrt{\frac{2}{3}}\|M_{12}=-1, m_3=1/2\rangle$
3/2	-3/2	$\|3/2,-3/2\rangle = \|M_{12}=-1, m_3=-1/2\rangle$

Tabela 2: Lastne funkcije za vsoto treh spinov

2.3 Magnetno polje

Ko damo sistem v magnetno polje, se nov Hamiltonov operator glasi

$$H' = H + b(S_1^z + S_2^z + S_3^z) \tag{12}$$

Ko z njim delujemo na lastne funkcije, dobimo energijo, ki jo lahko razdelimo na vsoto energije sistema ki ni v magnetnem polju in prispevek k energiji zaradi magnetnega polja

$$\begin{aligned} H'|J,M\rangle &= E'|J,M\rangle \\ (H + b\underbrace{(m_1+m_2+m_3)}_{M})|J,M\rangle &= (E+\Delta E)|J,M\rangle \\ bM|J,M\rangle &= \Delta E|J,M\rangle \end{aligned} \tag{13}$$

Dalje velja zveza

$$J^z|m_1,m_2\rangle = (m_1+m_2)\hbar|m_1,m_2\rangle \tag{14}$$

ki jo lahko uporabimo, če funkcijo $|J,M\rangle$ izpišemo kot v desnem stolpcu tab.2. Dobimo popravke k energiji (tab.3).

lastna funkcija $\|J,M\rangle$	ΔE
$\|3/2,3/2\rangle = \|M_{12}=1, m_3=1/2\rangle$	$\frac{3}{2}b\hbar$
$\|3/2,1/2\rangle = \sqrt{\frac{1}{3}}\|M_{12}=1, m_3=-1/2\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}}\|M_{12}=0, m_3=1/2\rangle$	$\frac{\sqrt{2}-1}{2\sqrt{3}}b\hbar$
$\|1/2,1/2\rangle = \sqrt{\frac{2}{3}}\|M_{12}=1, m_3=-1/2\rangle - \sqrt{\frac{1}{3}}\|M_{12}=0, m_3=1/2\rangle$	$\frac{-\sqrt{2}-1}{2\sqrt{3}}b\hbar$
$\|3/2,-1/2\rangle = \sqrt{\frac{2}{3}}\|M_{12}=0, m_3=-1/2\rangle + \sqrt{\frac{1}{3}}\|M_{12}=-1, m_3=1/2\rangle$	$\frac{-\sqrt{2}-1}{2\sqrt{3}}b\hbar$
$\|1/2,-1/2\rangle = \sqrt{\frac{1}{3}}\|M_{12}=0, m_3=-1/2\rangle - \sqrt{\frac{2}{3}}\|M_{12}=-1, m_3=1/2\rangle$	$\frac{\sqrt{2}-1}{2\sqrt{3}}b\hbar$
$\|3/2,-3/2\rangle = \|M_{12}=-1, m_3=-1/2\rangle$	$\frac{3}{2}b\hbar$

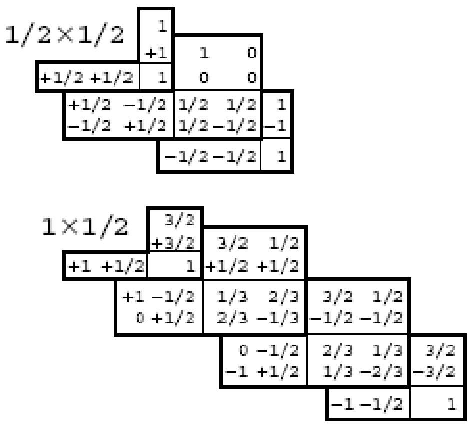
Tabela 3: Popravki energije zaradi magnetnega polja

Vsem stanjem lahko s pomočjo popravkov izračunamo celotno energijo, ter tako tudi določimo degeneracijo (tab.4).

Iz tab.4 se vidi, da imata samo 1. in 6. stanje enako energijo, torej je degeneracija za to energijo 2, vse preostale štiri (različne) energije pa so nedegenerirane.

št.	energija E'
1	$\frac{3a\hbar^2}{2} + \frac{3b\hbar}{2}$
2	$\frac{3a\hbar^2}{2} + \frac{\sqrt{2}-1}{2\sqrt{3}} b\hbar$
3	$-\frac{3a\hbar^2}{2} - \frac{\sqrt{2}+1}{2\sqrt{3}} b\hbar$
4	$\frac{3a\hbar^2}{2} - \frac{\sqrt{2}+1}{2\sqrt{3}} b\hbar$
5	$-\frac{3a\hbar^2}{2} + \frac{\sqrt{2}-1}{2\sqrt{3}} b\hbar$
6	$\frac{3a\hbar^2}{2} + \frac{3b\hbar}{2}$

Tabela 4: Energije vseh stanj.



Slika 1: *Za to nalogo relevantna razdelka Clebsch-Gordanovih koeficientov.*