Časovno odvisna perturbacija II
Domača naloga iz predmeta Kvantna Mehanika I
2006/2007

Žiga Lenarčič
Fakulteta za matematiko in fiziko, Univerza v Ljubljani

21. september 2007

1 Naloga

Obravnavaj sistem dveh delcev s spinom 1/2 s hamiltonianom

$$H = \begin{cases} 0, & t \leq 0 \\ \frac{4\Delta}{\hbar^2}\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 & t > 0 \end{cases}$$

Sistem je za $t \leq 0$ v stanju $|\uparrow\downarrow>$. Poišči verjetnost, da se sistem ob času $t > 0$ nahaja v stanju $|\uparrow\uparrow>$, $|\uparrow\downarrow>$, $|\downarrow\uparrow>$ ali $|\downarrow\downarrow>$

1. če problem rešiš točno.
2. v prvem redu perturbacije.

Pod katerimi pogoji da perturbacijska teorija pravilen rezultat?

2 Točna rešitev

Za sistem dveh delcev s spinom 1/2 so možna štiri produktna stanja: $|\uparrow\uparrow>$, $|\uparrow\downarrow>$, $|\downarrow\uparrow>$ in $|\downarrow\downarrow>$. Zanima nas verjetnost, da se sistem ob času $t > 0$ nahaja v $|\uparrow\uparrow>$, $|\uparrow\downarrow>$, $|\downarrow\uparrow>$ ali $|\downarrow\downarrow>$. Če bi zapisali razvoj valovne funkcije v obliki

$$|\psi, t> = C_1(t)|\uparrow\uparrow> + C_2(t)|\uparrow\downarrow> + C_3(t)|\downarrow\uparrow> + C_4(t)|\downarrow\downarrow>,$$

bi bila verjetnost za posamezno stanje pri času t kar $|C_n(t)|^2$.
Vemo, da je ob času $t = 0$ sistem v stanju

$$|\psi, 0> = |\uparrow\downarrow>,$$

ki je lastno stanje hamiltonijana $H = 0$, ni pa lastno stanje hamiltonijana, ki nastopi ob $t > 0$, $H = \frac{4\Delta}{\hbar^2}\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2$. Začetno stanje sistema $|\uparrow\downarrow>$ lahko zapišemo v bazi $|s, m>$, kjer je s skupna velikost spina, m pa skupna projekcija spina, tako:

$$|\uparrow\downarrow> = \frac{1}{\sqrt{2}}(|10> + |00>).$$

Funkcije $|11>$, $|10>$, $|1-1>$ in $|00>$ so lastne funkcije hamiltoniana, ki nastopi ob $t>0$. Med njimi in našo prejšno bazo veljajo naslednje zveze:

$$|11>=|\uparrow\uparrow>$$

$$|10>=\frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow>+|\downarrow\uparrow>)$$

$$|1-1>=|\downarrow\downarrow>$$

$$|00>=\frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow>-|\downarrow\uparrow>)$$

Ker sta $|10>$ in $|00>$ lastni funkciji našega hamiltoniana, znamo zapisati časovni razvoj zanju, če izračunamo njuni pripadajoči lastni energiji. Da bomo znali izračunati lastne energije po enačbi $H|s,m>=E_{s,m}|s,m>$ bomo najprej preoblikovali hamiltonian, ki nastopi ob $t>0$. Velja, da je skupni spin vsota posameznih spinov delcev ($\mathbf{S}=\mathbf{S}_1+\mathbf{S}_2$). Kaj pa je kvadrat skupnega spina?

$$S^2=(\mathbf{S}_1+\mathbf{S}_2)^2=S_1^2+S_2^2+2\mathbf{S}_1\cdot\mathbf{S}_2$$

Zadnji člen ($\mathbf{S}_1\cdot\mathbf{S}_2$) nastopa v našem hamiltonianu, zato ga izrazimo s pomočjo ostalih in vstavimo v hamiltonian. Dobimo

$$H_{t>0}=\frac{2\Delta}{\hbar^2}(S^2-S_1^2-S_2^2).$$

S tem hamiltonianom delujmo na lastni stanji $|10>$ in $|00>$, da bomo izračunali lastni energiji in v končni fazi zapisali časovni razvoj. Poglejmo si delovanje posameznih operatorjev, ki nastopajo v hamiltonianu:

$$S^2|s,m>=\hbar^2 s(s+1)|s,m>$$

$$S_1^2|s,m>=\hbar^2 s_1(s_1+1)|s,m>$$

$$S_2^2|s,m>=\hbar^2 s_2(s_2+1)|s,m>$$

($s_1=s_2=1/2$) Energija stanj $|10>$ in $|00>$ je potemtakem:

$$H|10>=\frac{2\Delta}{\hbar^2}(S^2-S_1^2-S_2^2)|10>=\frac{2\Delta}{\hbar^2}(2\hbar^2-\frac{3}{4}\hbar^2-\frac{3}{4}\hbar^2)|10>=\Delta|10>$$

$$H|00>=\frac{2\Delta}{\hbar^2}(S^2-S_1^2-S_2^2)|00>=\frac{2\Delta}{\hbar^2}(0-\frac{3}{4}\hbar^2-\frac{3}{4}\hbar^2)|00>=-3\Delta|00>$$

Časovni razvoj lastnega stanja lahko zapišemo kot $|s,m,t>=|s,m,0>$ $e^{-i\frac{E_{s,m}}{\hbar}t}$, kjer je $E_{s,m}$ lastna energija, ki pripada k $|s,m>$. Sedaj pa zapišimo časovni razvoj naše valovne funkcije, ki smo jo že prej zapisali v $|s,m>$ bazi:

$$|\psi,t>=\frac{1}{\sqrt{2}}|10>e^{-i\frac{\Delta}{\hbar}t}+\frac{1}{\sqrt{2}}|00>e^{i\frac{3\Delta}{\hbar}t}$$

Vstavimo $|10>$ in $|00>$ zapisana v prvotni bazi in dobimo obliko zapisa $|\psi,t>$, kot smo ga iskali in iz katerega znamo izračunati verjetnosti.

$$|\psi,t>=\frac{1}{\sqrt{2}}\frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow>+|\downarrow\uparrow>)e^{-i\frac{\Delta}{\hbar}t}+\frac{1}{\sqrt{2}}\frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow>-|\downarrow\uparrow>)e^{i\frac{3\Delta}{\hbar}t}=$$

$$= \frac{1}{2}(e^{-i\frac{\Delta}{\hbar}t} + e^{i\frac{3\Delta}{\hbar}t})|\uparrow\downarrow> + \frac{1}{2}(e^{-i\frac{\Delta}{\hbar}t} - e^{i\frac{3\Delta}{\hbar}t})|\downarrow\uparrow>$$

Verjetnosti za različna stanja dobimo iz koeficientov razvoja:

$$P_{\uparrow\uparrow} = |C_{\uparrow\uparrow}|^2 = |0|^2 = 0$$

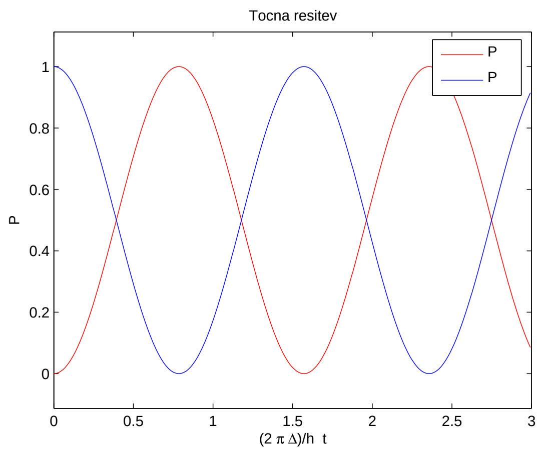
$$P_{\downarrow\downarrow} = |C_{\downarrow\downarrow}|^2 = |0|^2 = 0$$

$$P_{\uparrow\downarrow} = |C_{\uparrow\downarrow}|^2 = |\frac{1}{2}(e^{-i\frac{\Delta}{\hbar}t} + e^{i\frac{3\Delta}{\hbar}t})|^2 = \frac{1}{2} + \frac{1}{2}\cos(\frac{4\Delta}{\hbar}t)$$

$$P_{\downarrow\uparrow} = |C_{\downarrow\uparrow}|^2 = |\frac{1}{2}(e^{-i\frac{\Delta}{\hbar}t} - e^{i\frac{3\Delta}{\hbar}t})|^2 = \frac{1}{2} - \frac{1}{2}\cos(\frac{4\Delta}{\hbar}t)$$

Izpolnjen je pogoj, da je vsak trenutek vsota vseh verjetnosti enaka 1:

$$\sum_i P_i = 0 + 0 + \frac{1}{2} + \frac{1}{2}\cos(\frac{4\Delta}{\hbar}t) + \frac{1}{2} - \frac{1}{2}\cos(\frac{4\Delta}{\hbar}t) = 1$$



Slika 1: Točna rešitev, časovni potek verjetnosti. Modra je $P_{\uparrow\downarrow}$, rdeča pa $P_{\downarrow\uparrow}$.

3 Rešitev s perturbacijo

Zapišimo hamiltonian, kot smo ga navajeni zapisati pri perturbaciji - kot vsoto nezmotenega hamiltoniana in motnje. Prvi je pri nas enak 0.

$$H = H_0 + H' = 0 + \frac{2\Delta}{\hbar^2}(S^2 - S_1^2 - S_2^2) = H'$$

Schroedingerjeva enačbo lahko zapišemo v naslednji obliki:

$$C_m(t) = C_m(t=0) - \frac{i}{\hbar}\sum_n \int_0^t <_0 m, t'|H'(t')|n, t'>_0 C_n(t')dt'$$

Perturbacijski približek naredimo tako, da nadomestimo časovno odvisne koeficiente $C_n(t')$ (ki jih ne poznamo) kar z njihovimi vrednostmi ob času 0 $C_n(0)$. Ker niso več odvisni od časa jih nesimo iz integrala.

$$C_m(t) = C_m(0) - \frac{i}{\hbar}\sum_n C_n(0)\int_0^t <_0 m, t'|H'(t')|n, t'>_0 \, dt'$$

$|n, t'>_0$ so lastne funkcije nezmotenega hamiltoniana z ustreznim časovnim razvojem: $|n, t>_0 = |n>_0 \; e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t}$. Zapišimo sedaj zgornjo enačbo za naš specifičen primer. Lastne funkcije nezmotenega hamiltonijana H_0 so v našem primeru $|\uparrow\uparrow>$, $|\uparrow\downarrow>$, $|\downarrow\uparrow>$ in $|\downarrow\downarrow>$, oziroma zapisano na drug način $|m_1, m_2>; m_1 = \pm 1/2; m_2 = \pm 1/2$. Njihove pripadajoče lastne energije so 0 (saj velja $H_0|m_1, m_2> = 0|m_1, m_2>$), zato so v času konstantne. Tudi naša motnja $H' \neq H'(t)$ ni odvisna od časa, zato lahko cel skalarni produkt $<_0 m, t'|H'(t')|n, t'>_0$ nesemo iz integrala $\int_0^t dt'$. V našem primeru velja tudi, da je le en od koeficientov $C_n(0)$ različen od nič, in sicer

$$C_{\uparrow\downarrow}(0) = 1; \qquad C_{\uparrow\uparrow}(0) = C_{\downarrow\downarrow}(0) = C_{\downarrow\uparrow}(0) = 0,$$

ker smo pri $t = 0$ v stanju $|\uparrow\downarrow>$. Tako od vsote $\sum_n$ ostane le en člen in ostanemo z enačbo

$$C_{m_1 m_2}(t) = C_{m_1 m_2}(0) - \frac{i}{\hbar} <_0 m_1, m_2|H'|\uparrow\downarrow>_0 \int_0^t dt'.$$

Izračunajmo sedaj konkretne koeficiente:

$$C_{\uparrow\uparrow}(t) = C_{\uparrow\uparrow}(0) - \frac{i}{\hbar} <\uparrow\uparrow|\frac{2\Delta}{\hbar^2}(S^2 - S_1^2 - S_2^2)|\uparrow\downarrow> t$$

Prvi člen v enačbi je 0, da bi izračunali drugega, pa moramo lastne funkcije nemotenega hamiltoniana $|m_1, m_2>$ zapisati v obliki $|s, m>$. Dobimo

$$C_{\uparrow\uparrow}(t) = 0 - \frac{i2\Delta}{\hbar^3\sqrt{2}}(< 11|S^2 - S_1^2 - S_2^2|10 > + < 11|S^2 - S_1^2 - S_2^2|00 >)t = 0$$

Zaradi ortogonalnosti lastnih funkcij so skalarni produkti nič: $< 11|10 > = < 11|00 > = 0$. Zelo podobno je tudi $C_{\downarrow\downarrow}(t) = 0$ (saj je $<\downarrow\downarrow| = < 1 - 1|$). Poglejmo si še $C_{\downarrow\uparrow}(t)$ in $C_{\uparrow\downarrow}(t)$ (upoštevamo $|\downarrow\uparrow> = \frac{1}{\sqrt{2}}(|10> - |00>)$ ter $|\uparrow\downarrow> = \frac{1}{\sqrt{2}}(|10> + |00>)$):

$$C_{\downarrow\uparrow}(t) = 0 - \frac{i}{\hbar}\frac{1}{2}(< 10|H'|10 > - < 00|H'|10 > + < 10|H'|00 > - < 00|H'|00 >)t$$

Preživita le dva člena in dobimo

$$C_{\downarrow\uparrow}(t) = -\frac{i}{\hbar}\frac{1}{2}(\Delta < 10|10 > + 3\Delta < 00|00 >)t = -\frac{i2\Delta t}{\hbar}$$

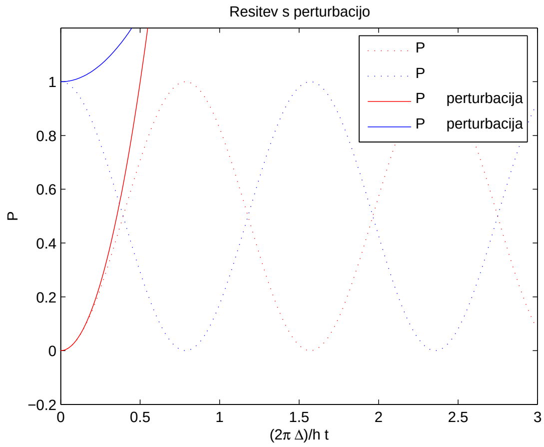
$$C_{\uparrow\downarrow}(t) = 1 - \frac{i}{2\hbar}(\Delta - 3\Delta)t = 1 + \frac{i\Delta}{\hbar}t$$

Verjetnosti pa so $P_n(t) = |C_n(t)|^2$:

$$P_{\uparrow\uparrow} = P_{\downarrow\downarrow} = 0$$

$$P_{\downarrow\uparrow}(t) = \frac{4\Delta^2}{\hbar^2}t^2$$

$$P_{\uparrow\downarrow}(t) = 1 + \frac{\Delta^2}{\hbar^2}t^2$$



Slika 2: Primerjava točne in perturbirane rešitve. Točna rešitev je črtkana. Modra je $P_{\uparrow\downarrow}$, rdeča pa $P_{\downarrow\uparrow}$.

Pod katerimi pogoji da perturbacijska teorija pravilen rezultat?

Perturbacijska teorija da pravilen rezultat za $P_{\downarrow\uparrow}(t)$ le za zgodnje čase - $t << \frac{\hbar}{\Delta}$.