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 $S_i^2 = \hbar^2 S_i\left(S_i + 1\right)$. 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

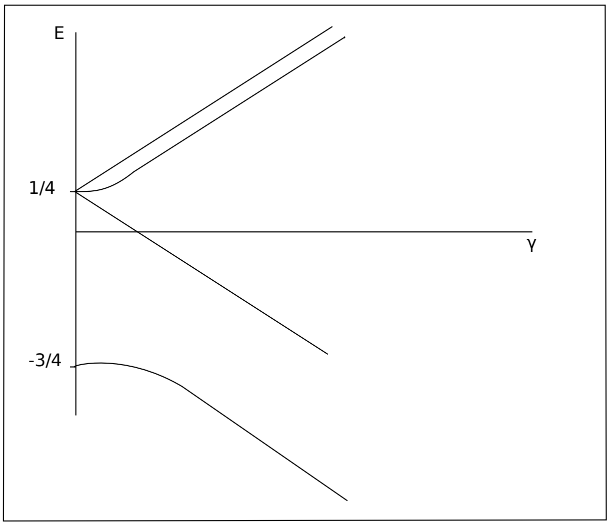
$$E^2 = \sum_{SS_z\neq 00} \frac{|\langle 00|\,\gamma S_{1z}\,|SS_z\rangle|^2}{E_{00} - E_{SS_z}}. \tag{15}$$

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.