

Vzorová písemka

1. Částice se spinem $\frac{1}{2}$ a vlastním magnetickým momentem μ_0 je v homogenním magnetickém poli $\vec{B} = (0, 0, B)$. V čase $t = 0$ je ve smíšeném stavu popsaném maticí hustoty

$$\rho(0) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & -\frac{i}{2} \\ \frac{i}{2} & 1 \end{pmatrix}.$$

Určete $\rho(t)$. Jaká je střední hodnota projekce spinu částice do osy x v čase t ?

Nápověda: Stav v čase t hledejte ve tvaru $\rho(t) = \frac{1}{2}(\mathbb{I} + \vec{p}(t) \cdot \vec{\sigma})$

2. Uvažujte částici v potenciálu $V(r) = -\frac{q}{r}$. Najděte přibližnou hodnotu energie základního stavu použitím variační metody se zkušební funkcí

$$\psi_\alpha(r, \theta, \varphi) = C(\alpha)e^{-\frac{r}{\alpha}}.$$

3. Izotropní harmonický oscilátor s hmotností $M = \frac{\hbar}{\omega}$ je v čase $T_0 \rightarrow -\infty$ ve stavu $|\psi_i\rangle = |n, l, m\rangle = |1, 0, 0\rangle$. Určete, do kterých stavů $|\psi_f\rangle = |1, 1, m\rangle$ může přejít v 1. řádu nestacionární poruchové teorie vlivem poruchy

$$\hat{V}(t) = V_0 \hat{X}_3 \frac{1}{2\sqrt{\pi\eta}} e^{-\frac{t^2}{4\eta}}, \eta > 0.$$

Spočítejte příslušné pravděpodobnosti přechodu v limitě $T \rightarrow \infty$.

Řešení

1. Obecnou matici hustoty pro spin- $\frac{1}{2}$ lze zapsat ve tvaru

$$\rho = \frac{1}{2}(\mathbb{I} + \vec{p} \cdot \vec{\sigma}) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + p_3 & p_1 - ip_2 \\ p_1 + ip_2 & 1 - p_3 \end{pmatrix},$$

kde $\vec{p}$ je vektor polarizace, pro který platí

$$p_j = \langle \sigma_j \rangle_\rho.$$

Počáteční stav odpovídá $\vec{p}(0) = (0, \frac{1}{2}, 0)$. Hamiltonián spinu v magnetickém poli je

$$\hat{H} = -\hat{\vec{\mu}} \cdot \vec{B} = -\frac{\mu_0 B}{\hbar} \hat{S}_3,$$

tj. matice hamiltoniánu ve standardní bázi je rovna $H = -\frac{\mu_0 B}{2} \sigma_3$. Pohybová rovnice pro matici hustoty má tvar

$$i\hbar \frac{d\hat{\rho}}{dt} = [\hat{H}, \hat{\rho}].$$

Pravou stranu upravíme s použitím komutátoru Pauliho matic

$$[H, \rho] = -\frac{\mu_0 B}{4} p_j [\sigma_3, \sigma_j] = -\frac{\mu_0 B}{4} p_j 2i\varepsilon_{3jk} \sigma_k = i\frac{\mu_0 B}{2} (p_2 \sigma_1 - p_1 \sigma_2).$$

Pohybová rovnice tak přejde do tvaru

$$i\hbar \frac{d\rho}{dt} = i\hbar \dot{p}_j \sigma_j = \frac{i\hbar}{2} \begin{pmatrix} \dot{p}_3 & \dot{p}_1 - i\dot{p}_2 \\ \dot{p}_1 + i\dot{p}_2 & \dot{p}_3 \end{pmatrix} = i\frac{\mu_0 B}{2} (p_2 \sigma_1 - p_1 \sigma_2) = \frac{\mu_0 B}{2} \begin{pmatrix} 0 & -p_1 + ip_2 \\ p_1 + ip_2 & 0 \end{pmatrix}.$$

To vede na rovnice

$$\begin{aligned} \dot{p}_3 &= 0 \Rightarrow p_3(t) = p_3(0) = 0, \\ \dot{p}_1 + i\dot{p}_2 &= -i\frac{\mu_0 B}{\hbar} (p_1 + ip_2) \end{aligned}$$

Substitucí $z = p_1 + ip_2$ dostaneme $z(t) = z(0)e^{-\frac{i}{\hbar}\mu_0 B t} = \frac{i}{2}e^{-\frac{i}{\hbar}\mu_0 B t}$, a tedy

$$\begin{aligned} p_1(t) &= \frac{z + \bar{z}}{2} = \frac{1}{2} \sin\left(\frac{\mu_0 B}{\hbar} t\right), \\ p_2(t) &= \frac{z - \bar{z}}{2i} = \frac{1}{2} \cos\left(\frac{\mu_0 B}{\hbar} t\right). \end{aligned}$$

Střední hodnota projekce spinu do osy x je rovna $\frac{\hbar}{2} p_1(t)$.

2. Musíme nejprve určit střední hodnotu energie ve stavech ψ_α

$$E(\alpha) = \langle \hat{H} \rangle_{\psi_\alpha} = \langle \hat{T} \rangle_{\psi_\alpha} + \langle \hat{V} \rangle_{\psi_\alpha}, \quad \hat{T} = \frac{\hat{P}^2}{2M}.$$

K výpočtu je vhodné funkci normalizovat k jedné

$$1 \stackrel{!}{=} \|\psi_\alpha\|^2 = C(\alpha)^2 \int_0^\infty r^2 dr \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \sin \theta d\theta e^{-\frac{2r}{\alpha}} = C(\alpha)^2 4\pi \left(\frac{\alpha}{2}\right)^3 \int_0^\infty t^2 e^{-t} dt = C(\alpha)^2 \pi \alpha^3,$$

tj. normalizace vlnové funkce je

$$C(\alpha) = \frac{1}{\sqrt{\pi \alpha^3}}.$$

Střední hodnota potenciální energie je rovna

$$\langle \hat{V} \rangle = -\frac{4q}{\alpha^3} \int_0^\infty r e^{-\frac{2r}{\alpha}} dr = -\frac{q}{\alpha}.$$

Pro určení střední hodnota kinetické energie využijeme fakt, že vlnová funkce je s-
stav, takže platí

$$\hat{T}\psi_\alpha = -\frac{\hbar^2}{2M}\Delta\psi_\alpha = -\frac{\hbar^2}{2M}\left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{d}{dr}\right)\psi_\alpha = -\frac{\hbar^2}{2M\alpha}\left(\frac{1}{\alpha} - \frac{2}{r}\right)\psi_\alpha.$$

Odsud dostaneme

$$\langle \hat{T} \rangle_{\psi_\alpha} = -\frac{\hbar^2}{2M\alpha} \left[\frac{1}{\alpha}(\psi_\alpha, \psi_\alpha) - (\psi_\alpha, \frac{2}{r}\psi_\alpha) \right] = -\frac{\hbar^2}{2M\alpha} \left[\frac{1}{\alpha} - \frac{2}{\alpha} \right] = \frac{\hbar^2}{2M\alpha^2}.$$

Střední hodnota energie je tedy

$$E(\alpha) = \frac{\hbar^2}{2M\alpha^2} - \frac{q}{\alpha}.$$

Najdeme bod, kde má funkce minimum

$$\frac{dE(\alpha)}{d\alpha} = -\frac{\hbar^2}{M\alpha^3} + \frac{q}{\alpha^2} = 0 \Rightarrow \alpha_0 = \frac{\hbar^2}{Mq}$$

Odhad energie základního stavu variační metodou

$$E_0^{VM} = E_0(\alpha_0) = -\frac{Mq^2}{2\hbar^2},$$

souhlasí s přesnou hodnotou (jedná se o částici v Coloumbickém potenciálu, kterou umíme přesně vyřešit).

3. V 1. řádu poruchové teorie jsou pravděpodobnosti přechodu dány vztahem

$$W_{(1,0,0) \rightarrow (1,1,m)}^{(1)} = \frac{V_0^2}{\hbar^2} \left| \langle 1, 1, m | \hat{X}_3 | 1, 0, 0 \rangle \right|^2 \left| \frac{1}{2\sqrt{\pi\eta}} \int_{\mathbb{R}} e^{-\frac{t^2}{4\eta}} e^{i\omega t} dt \right|^2$$

Vlnové funkce vlastních stavů volného hamiltoniánu mají tvar

$$\psi_{n,l,m}(r, \theta, \varphi) = \langle r, \theta, \varphi | n, l, m \rangle = R_{n,l}(r) Y_{l,m}(\theta, \varphi).$$

Maticový element rozdělíme na radiální a úhlovou část ($x_3 = r \cos \theta = \sqrt{\frac{4\pi}{3}} r Y_{1,0}$)

$$\langle 1, 1, m | \hat{X}_3 | 1, 0, 0 \rangle = \langle 1, 1 | r | 1, 0 \rangle \sqrt{\frac{4\pi}{3}} \langle 1, m | Y_{1,0} | 0, 0 \rangle.$$

Úhlovou část můžeme spočítat buď vztahem pro integrál součinu tří kulových funkcí

$$\langle 1, m | Y_{1,0} | 0, 0 \rangle = \sqrt{\frac{1}{4\pi}} \underbrace{(1, 0, 0, 0 | 1, 0)}_1 \underbrace{(1, 0, 0, 0 | 1, m)}_{\delta_{m,0}} = \sqrt{\frac{1}{4\pi}} \delta_{m,0},$$

resp. přímým výpočtem (využijeme $Y_{00}(\theta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$)

$$\langle 1, m | Y_{1,0} | 0, 0 \rangle = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \sin \theta d\theta Y_{1,m}(\theta, \varphi) Y_{1,0}(\theta, \varphi) Y_{0,0}(\theta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} (Y_{1,m}, Y_{1,0}) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \delta_{m,0},$$

každopádně je nenulový jen pro $m = 0$. K vyčíslení radiální části maticového elementu

$$\langle 1, 1 | r | 1, 0 \rangle = \int_0^\infty r^2 dr R_{1,1}(r) r R_{1,0}(r),$$

potřebujeme radiální část vlnové funkce izotropního oscilátoru. Obecně mají tvar ($L_n^\beta(z)$ jsou zobecněné Lagguerovy polynomy)

$$R_{n,l}(\xi) = K_{nl} \xi^l e^{-\frac{\xi^2}{2}} L_n^{l+\frac{1}{2}}(\xi^2), \quad \xi = r \sqrt{\frac{M\omega}{\hbar}}, \quad K_{nl} = \frac{2}{\pi^{\frac{1}{4}}} \left(\frac{M\omega}{\hbar} \right)^{\frac{3}{4}} \left(\frac{2^{n+l} n!}{(2n+2l+1)!!} \right)^{\frac{1}{2}}.$$

V našem případě platí $\xi = r$ a relevantní radiální funkce jsou

$$R_{1,0}(r) = \frac{2}{\pi^{\frac{1}{4}}} \sqrt{\frac{2}{3}} \left(\frac{3}{2} - r^2 \right) e^{-\frac{r^2}{2}}, \quad R_{1,1}(r) = \frac{4}{\pi^{\frac{1}{4}} \sqrt{15}} \left(\frac{5}{2} - r^2 \right) r e^{-\frac{r^2}{2}}.$$

Radiální maticový element je potom roven (využijeme $\int_0^{\infty} r^{2n} e^{-\alpha r^2} dr = (-1)^n \frac{\sqrt{\pi}}{2} \frac{d^n}{d\alpha^n} \alpha^{-\frac{1}{2}}$)

$$\begin{aligned}\langle 1, 1 | r | 1, 0 \rangle &= \frac{2}{3} \sqrt{\frac{2}{5\pi}} \int_0^{\infty} r^4 (15 - 16r^2 + 4r^4) e^{-r^2} dr \\ &= \frac{1}{3} \sqrt{\frac{2}{5}} \left(15 \left. \frac{d^2}{d\alpha^2} \alpha^{-\frac{1}{2}} \right|_{\alpha=1} + 16 \left. \frac{d^3}{d\alpha^3} \alpha^{-\frac{1}{2}} \right|_{\alpha=1} + 4 \left. \frac{d^4}{d\alpha^4} \alpha^{-\frac{1}{2}} \right|_{\alpha=1} \right) \\ &= \frac{1}{3} \sqrt{\frac{2}{5}} \left(15 \frac{1 \cdot 3}{4} - 16 \frac{1 \cdot 3 \cdot 5}{8} + 4 \frac{1 \cdot 3 \cdot 5 \cdot 7}{16} \right) = \sqrt{\frac{5}{2}}.\end{aligned}$$

Zbývá určit časový integrál

$$\frac{1}{2\sqrt{\pi\eta}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{t^2}{4\eta} + i\omega t} dt = e^{-\eta\omega^2}.$$

Celkem pro pravděpodobnost přechodu do stavu s $m = 0$ v 1. řádu NPT dostaneme

$$W_{(1,0,0) \rightarrow (1,1,0)}^{(1)} = \frac{5V_0^2}{6\hbar^2} e^{-2\eta\omega^2},$$

přechody do stavů s $m = \pm 1$ jsou zakázané.