

Cvičení 17. 3. 2021

Téma: Reprezentace, více dimenzí

Reprezentace

Obecný stav $|\psi\rangle$ si můžeme vyjádřit v x reprezentaci, t.j. jako funkci x , jako u gaussovek. Ale tentýž stav si také můžeme vyjádřit pomocí p reprezentace, tedy jako funkci hybnosti p . Bude nás zajímat, jak přejít mezi oběma reprezentacemi. K tomu použijeme vícero vztahů. Nejprve $\langle p|x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{-\frac{i}{\hbar}px}$, který můžeme chápat jako skalární součin mezi vlastním stavem hybnosti a polohy. Vlastní stavy hybnosti p jsou rovinné vlny (bez časové závislosti)

$$|p\rangle = \psi_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{\frac{i}{\hbar}px}.$$

a vlastní stavy polohy $|x\rangle = \psi_{x'}(x) = \delta(x - x')$. Dále víme, že operátor lze napsat jako $\hat{O} = \sum_i \lambda_i |i\rangle\langle i|$ pro diskrétní případy a analogicky píšeme

$$\hat{O} = \int di \lambda_i |i\rangle\langle i|.$$

V případě souřadnice tedy $\hat{x} = \int dx x |x\rangle\langle x|$ a obdobně u momentu. Pro identitu použijeme $1 = \int dx |x\rangle\langle x| = \int dp |p\rangle\langle p|$.

▷ Pro začátek vyjádříme obecné $|\psi\rangle$ v x reprezentaci pomocí

$$|\psi\rangle = 1|\psi\rangle = \dots$$

Výsledek by měl být obdobný $|\psi\rangle = \sum_i c_i |i\rangle$, tedy vyjádření stavu $|\psi\rangle$ v diskrétní bázi.

▷ Nyní provedme to samé, ale pro p reprezentaci, vložení $1 = \int dp |p\rangle\langle p|$. Následně do výrazu $\langle p|\psi\rangle$ vložíme identitu před $|\psi\rangle$ a vyjádříme ji v x . Porovnáním získáme vztah mezi $\psi(p)$ a $\psi(x)$, nazvěme jej X (abychom zachovali moment překvapení). Pro rychlíky: Na přednášce byl odvozen výraz pro operátor \hat{p} v x reprezentaci. Pomocí odvození z přednášky se zamyslete nad tím, jak asi vypadá operátor x v p reprezentaci (bude to za domácí úkol).

Je obvyklé a přirozené, že stavy kvantových systémů máme vyjádřené jako funkce v přímém prostoru, tedy jako funkce souřadnice x , \vec{r} a podobně, a pokud nepracujeme v maticové reprezentaci. Také operátory máme obvykle vyjádřené obdobně. Nic nám ale nebrání pracovat pomocí vyjádření v p reprezentaci, což ukážeme na příkladu gaussovských funkcí, které známe z domácích úkolů.

▷ Pomocí vztahu X vyjádřete stav $|0\rangle$ v p reprezentaci. Oproti domácím úkolům použijeme obecný tvar gaussovky

$$\psi_0(x) = \frac{1}{\sqrt{\alpha}\sqrt[4]{\pi}}e^{-\frac{x^2}{2\alpha^2}},$$

kde $\alpha = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$ odpovídá klasickému bodu obratu harmonického oscilátoru. (Jak se brzy dozvíme, pracovali jsme s vlastními stavy oscilátoru.)

▷ Ověřte, že $\psi_0(p)$ je normalizovaný.

Výpočty v p reprezentaci jsou výhodné hlavně při výpočtech kinetické energie $\frac{p^2}{2m}$. Tohoto se často využívá při kvantových výpočtech pevných látek nebo tekutin. My si

vypočteme střední hodnotu p a p^2 pro naši známou gaussovku, a to jak v x reprezentaci, tak v p reprezentaci. Přitom použijeme výraz $p = -i\hbar \frac{d}{dx}$ pro hybnost v x reprezentaci.

▷ Jaká je střední hodnota p pro stav $|0\rangle$? Proč?

▷ Vypočtete střední hodnotu p^2 v p reprezentaci, tedy $\int dp \psi_0^*(p) p^2 \psi_0^*(p)$ a obdobně v x reprezentaci. Výsledek by se měl shodovat. Pro rychlíky: Vypočtete střední hodnotu x a x^2 (také bude součástí domácího úkolu).

Více stupňů volnosti

Při aplikování kvantové mechaniky na reálné systémy musíme vzít v potaz to, že jsou vícedimenzionální. Stavový formalismus nám sice často umožní nahradit složité mnohodi-
menzionální funkce stavy, ale výpočtu v mnoha dimenzích se často nevyhneme. Například základní a excitovaný stav atomu nebo molekuly můžeme popsat jako dva stavy, různé parametry nutné např. pro popis jejich časového vývoje lze často získat z experimentu a nemusíme uvažovat mnoho dimenzí. Nicméně pokud chceme experimentální parametry ověřit kvantově mechanickými výpočty, tak pro popis mnoha elektronů nutně mnohodi-
menzionální potřebujeme.

Pro jednoduchost budeme uvažovat systém se dvěma částicemi se spinem 1/2, které budou různě interagovat. Budeme pracovat v bázi vlastních stavů s_z , tedy jako obvykle, spiny mohou být orientovány nahoru (stav $|\uparrow\rangle$), nebo dolů (stav $|\downarrow\rangle$). Částice označíme A a B. Operátory budeme mít buď takové, které působí na oba stavy, budeme je značit velkým písmenem, nebo takové, které působí jen na jeden stav, ty budeme značit odpovídajícím indexem (A nebo B).

▷ Jaké mohou nastat kombinace stavů spinů obou částic?

▷ Jaké jsou střední hodnoty operátoru $S_z = s_z^A \otimes 1 + 1 \otimes s_z^B$ pro dané kombinace?

Tyto kombinace tvoří bázi pro vyjádření operátorů. *Pozn.: U spinů se často se setkáme s elegantním řešením problémů, které nevyžaduje vyjádření v bázi. Ale maticovou reprezentaci můžeme použít vždy, i když problém nelze vyřešit elegantně.* Operátor s_z^A můžeme vyjádřit jako matici

$$s_z^A = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

▷ Vyjádřete nyní operátor S_z jako matici v bázi stavů spinů, prosím o použití pořadí $|\uparrow\uparrow\rangle, |\uparrow\downarrow\rangle, |\downarrow\uparrow\rangle, |\downarrow\downarrow\rangle$. Jelikož pracujeme v bázi vlastních stavů, bude matice diagonální.

▷ Matici operátoru S_z můžeme získat přímo z matic s_z^A a s_z^B následující konstrukcí:

$$\begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ \gamma & \delta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A\alpha & A\beta & B\alpha & B\beta \\ A\gamma & A\delta & B\gamma & B\delta \\ C\alpha & C\beta & D\alpha & D\beta \\ C\gamma & C\delta & D\gamma & D\delta \end{pmatrix}.$$

Proveďte.

▷ Použitím obou předcházejících způsobů zkonstruujte matici operátoru $D_z = s_z^A \otimes s_z^B$.

▷ Zkonstruujte matici $M_{ss} = s^A \cdot s^B = \sum_i s_i^A \otimes s_i^B$. Matici diagonalizujte. Pro výpočet použijte:

$$s_x = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad s_y = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad s_z = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Získat bychom měli tři stavy se stejnou vlastní hodnotou a jeden s jinou. *Pozn.: Jedná se o tzv. tripletní a singletní stavy, které jsou příkladem různých elektronových konfigurací v atomech, molekulách a pevných látkách.*