Cvičení 31. 3. 2021

Téma: Časový vývoj

Rotor jako volná částice

Na minulém cvičení jsme používali model volné částice v periodických okrajových podmínkách. Tento model lze také použít pro systém, který rotuje kolem jedné osy, tzv. kvantový rotor. Pro systém s momentem setrvačnosti I je Hamiltonián

$$H = -\frac{\hbar^2}{2I}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\phi^2}\,.$$

Tento výraz pochází z transformace do válcových souřadnic. Proměnná ϕ odpovídá rotaci a nabývá hodnot mezi 0 a 2π. Vlastní funkce problému získáme vyřešením rovnice

$$H\psi(\phi) = \lambda\psi(\phi)\,,$$

jsou to tedy funkce tvaru $\psi_n(\phi) = Ne^{in\phi}$, kde n je celé číslo, budeme je také značit jako stavy $|n\rangle$.

$\triangleright$ Ověřte, že funkce splňují podmínku periodicity $\psi_n(\phi) = \psi_n(\phi + 2\pi)$.

$\triangleright$ Vypočtěte normalizační konstantu N.

$\triangleright$ Ověřte, že funkce tvoří ortonormální bázi.

$\triangleright$ Vypočtěte energii částice ve stavu n.

Budeme nyní pracovat s částicí ve stavu $|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle)$.

$\triangleright$ Ověřte, že je vlnová funkce normalizovaná: i) dosazením funkcí za stavy a použitím explicitní integrace ii) bez dosazování, ale s využitím ortonormality báze.

Časový vývoj pro stacionární Hamiltonián je dán

$$\psi(t) = \sum_n c_n\phi_n e^{-\frac{i\epsilon_n t}{\hbar}}\,,$$

kde ϕ_n jsou vlastní stavy Hamiltoniánu, ϵ_n jejich energie a c_n jsou koeficienty rozvoje funkce ψ do báze stavů ϕ.

$\triangleright$ Napište výraz pro časovou závislost stavu $|\Psi\rangle$ jako funkci ϕ a času t.

$\triangleright$ Napište výraz pro časově závislou hustotu pravděpodobnosti výskytu částice. Funkci nakreslete, jak se bude měnit v čase?

Uvažujme nyní operátor $L = -i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\phi}$, který odpovídá momentu hybnosti částice.

$\triangleright$ Jsou funkce $\psi_n(\phi)$ vlastními stavy L? Jaká jsou případná vlastní čísla?

$\triangleright$ Vypočtěte časově závislou střední hodnotu operátoru L pro stav $|\Psi\rangle$ dvěma způsoby: i) pomocí dosazení za $|0\rangle$ a $|1\rangle$ a explicitní integrace přes ϕ a ii) využitím znalosti $L|n\rangle$.

Nyní uvažujme operátor $V = A(e^{i\phi} + e^{-i\phi})$. (Podobný operátor jsme měli minule.)

$\triangleright$ Vypočtěte všechny maticové elementy operátoru V pro stavy $|0\rangle$ a $|1\rangle$. Pro rychlíky: Maticové elementy obecně.

$\triangleright$ Vypočtěte časovou závislost střední hodnoty operátoru V pro stav $|\Psi\rangle$. Pro lepší pochopení výsledku vykreslete potenciál V, reálnou a imaginární číst $|\Psi\rangle$ (jako funkci ϕ) a jejich součin s potenciálem.

Zajímavosti

Zamysleme se ještě nad operátorem $V = A(e^{i\phi} + e^{-i\phi})$. Skládá se ze dvou částí, které jsou úměrné $e^{i\phi}$ a $e^{-i\phi}$.

▷ Jsou tyto operátory (jednotlivě) Hermitovské? Tedy platí $\langle n|\hat{O}m\rangle = \langle \hat{O}n|m\rangle$? Pozor, při působení na bra stav je třeba operátor komplexně sdružit.

▷ Pro porovnání zjistěte, zda je operátor L Hermitovský.

Operátory $e^{i\phi}$ a $e^{-i\phi}$ jsou zajímavé, s odkazem na budoucnost je můžeme označit jako operátory $a^\dagger$ a a. nyní nás bude zajímat, co ty operátory dělají. K tomu:

▷ Vypočtěte maticové elementy operátoru $a^\dagger$, tedy $\langle n|a^\dagger|m\rangle$.

▷ Vypočtěte $La^\dagger|n\rangle$.

Vidíme tedy, že aplikace operátoru $a^\dagger$ na stav $|n\rangle$ nám dá stav $|n+1\rangle$, proto mu můžeme říkat zvyšovací. Podobně operátor a můžeme nazvat snižovací. *Pozn.: Zvyšovací a snižovací operátory se moc pro rotor nepoužívají, není moc k čemu. Analogické operátory ale můžeme definovat pro harmonický oscilátor, kde umožňují elegantní řešení mnoha problémů. (Bude brzy na přednášce.) Podobné operátory nalezneme také při kvantovém popisu mnohoelektronových systémů.*

▷ Zamyslíme se nad tím, co dělá operátor $e^{2i\phi}$, a jak vypadá jeho maticová reprezentace.

Operátory $e^{i\phi}$ a $e^{-i\phi}$ a jejich mocniny se vyskytnou při vyjádření souřadnic (x nebo y) a jejich mocnin ve válcových a sférických souřadnicích. A tyto potřebujeme při studiu interakce záření, elektrického, nebo magnetického pole s atomy. Fakt, že tyto operátory spojují jen stavy s danými rozdíly vlastních čísel n pak vede na tzv. výběrová pravidla pro přechody vyvolané zářením a podobně.

Transformace báze

Uvažujme opět operátor $V = A(e^{i\phi} + e^{-i\phi})$.

▷ Jaká je jeho maticová reprezentace (bez počítání)?

Přejdeme nyní od báze stavů $e^{in\phi}$ do báze s funkcemi cos a sin. Bázová funkce $|0\rangle$ se zachová, pro cos obdržíme nové stavy jako symetrickou kombinaci $|cn'\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|n\rangle + |-n\rangle)$. Podobně pro sin uděláme anti-symetrickou kombinaci $|sn'\rangle = -\frac{i}{\sqrt{2}}(|n\rangle - |-n\rangle)$.

▷ Ověřte, že opravdu získáme reálné cos a sin funkce.

V následujícím budeme uvažovat jen stavy $|-1\rangle$, $|0\rangle$ a $|1\rangle$.

▷ Utvořte matici transformace pro přechod z původní do nové báze. Pro přehlednost zachovejte pořadí $|s1\rangle$, $|0\rangle$ a $|c1\rangle$.

▷ Jak vypadá transformovaná matice potenciálu V v nové bázi?

▷ Maticové elementy pro $|s1\rangle$ jsou nulové, dokážete to (například pomocí kresby) vysvětlit?

Pozn.: Přidáním potenciálu V došlo k tzv. narušení symetrie. Stavy $|-1\rangle$ a $|1\rangle$ měly původně stejnou energii a byly vlastními stavy, tomu označujeme jako degeneraci stavů. Tedy neměly mezi sebou žádný nenulový maticový element. Přidáním V se toto narušilo, neboť oba stavy mají nenulový element mezi sebou a stavem $|0\rangle$. Tím dojde k tzv. rozštěpení této hladiny a sejmutí degenerace. Nové stavy tak odpovídají lépe symetrii problému. Často bývá sejmutí degenerace jen částečné, obzvlášť ve více dimenzích. V budoucnu se s tím často setkáme v poruchové teorii. Pokud bychom provedli diagonalizaci v 3×3 podprostoru stavů $|-1\rangle$, $|0\rangle$ a $|1\rangle$, tak obdržíme právě $|s1\rangle$, $|0\rangle$ a $|c1\rangle$ jako nové vlastní stavy.