Príklady na domácu úlohu z kvantovej teórie 2

Sada č.3

riešenia, prosím, odovzdajte do konca dňa 25.03.2024

1. *často používané elementárne vlastnosti unitárnej transformácie*
Nech H je hermitovská $n \times n$ matica, $n \in N$. Typicky to je hamiltomián, ale môže to byť vo všeobecnosti aj iná hermitovská matica. Nech U je unitárna $n \times n$ matica: $U^{-1} = U^\dagger$. Nech $x, y, z, \ldots$ sú stĺpcové n-komponentné vektory.

*(*a) Nech vektor x je vlastným vektorom H s vlastnou hodnotou λ. Dokážte, že matica $H_{new} = UHU^\dagger$ má vlastný vektor $x_{new} = Ux$ s rovnakou vlastnou hodnotou λ.

(b) Dokážte, že unitárna transformácia nemení amplitúdy pravdepodobnosti a stredné hodnoty, t.j. $y^\dagger z = y^\dagger_{new} z_{new}$ a $y^\dagger\, Hy = y^\dagger_{new}\, H_{new} y_{new}$. **[2 body]**

2. *ďalšie často používané technikality*
(a) Súčet diagonálnych členov matice A sa nazýva stopa matice (angl. *trace*) a značíme ju $Tr\, A$. *ZU používa* $Sp\, A$ *z nemeckého spur.*
Dokážte, že pre stopu zo súčinu dvoch matíc platí $Tr\, AB = Tr\, BA$. Pomôcka: napíšte $C_{ij} = A_{ik} B_{kj}$, kde sa predpokladá Einsteinova sumačná konvencia pre opakujúce sa indexy. Potom súčet diagonálnych elementov $Tr\, C = C_{ii}$.
Dajte veľký pozor, lebo pre tri matice (alebo väčší počet matíc) platí iba $Tr\, ABC = Tr\, BCA$ pre cyklickú zámenu v zmene poradia, ale vo všeobecnosti neplatí $Tr\, ABC = Tr\, BAC$, teda nemôžeme ľubovolne meniť poradie v súčine viacerých matíc.

(b) Dokážte, že stopa matice nezávisí od voľby bázy, v ktorej je matica vyjadrená, resp. unitárna transformácia definovaná v príklade **1.** zachováva stopu.

(c) Nech A je hermitovská $n \times n$ matica, $n \in N$. Dokážte, že matica $U = e^{iA}$ je unitárna.

(d) Nech A je hermitovská $n \times n$ matica s nulovou stopou. Dokážte, že matica $U = e^{iA}$ je unitárna s determinantom rovným 1.
Pomôcka: Vyjadrite A *v tvare* $VA^{diag}V^\dagger$ *a rozviňte* e^{iA} *do radu v mocninách* $(VA^{diag}V^\dagger)$. *Tento rad sa už dá sčítať.* **[4 body]**

3. *nadväzuje na prechádzajúci príklad*
(a) Bez počítania metódou "pozriem a vidím" určte vlastné hodnoty 3x3 hermitovskej matice A, ktorej nenulové elementy sú $A_{12} = A_{21} = 1$ a $A_{33} = 5$. Rovnakou metódou určte unitárnu maticu U, ktorá ju po obložení diagonalizuje na maticu A^{diag}. Napíšte, kde presne stoja v matici U, alebo v $U^\dagger$ normované vlastné vektory matice A a akým obložením matice A dostaneme A^{diag}. Napíšte explicitne maticu A^{diag} a overte priamym výpočtom, že súhlasí s výsledkom násobenia, pri ktorom obkladáme A maticami U, $U^\dagger$. *Pomôcka: pomôže spomienka na diagonalizáciu Pauliho matíc.*

(b) To isté, ako v časti *(a)*, ale nenulové elementy matice A sú teraz zadané takto: $A_{11} = A_{22} = 2$, $A_{12} = A_{21} = 1$ a $A_{33} = 5$. Čo sa zmení v porovnaní s odpoveďami na otázky v časti *(a)*? **[2 body]**

4. *poruchová teória pre degenerované stavy*
Uvažujme hamiltonián 2-hladinového systému s hladinami $100\tilde{\varepsilon}$ a $300\tilde{\varepsilon}$. Základná hladina je trikrát degenerovaná, excitovaná hladina je nedegenerovaná. Na systém pôsobí malá porucha, ktorá sníma degeneráciu základnej hladiny:

$$H' = \tilde{\varepsilon} \begin{pmatrix} 2 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 2 & 0 & 2 \\ 0 & 0 & 5 & 3 \\ 1 & 2 & 3 & 4 \end{pmatrix},$$

kde $\tilde{\epsilon}$ je konštanta, ktorú v ďalšom položme rovnú 1.
Určte energetické hladiny systému (a ich degeneráciu) po zapnutí poruchy do prvého rádu poruchovej teórie. **[2 body]**

5. *poruchová teória pre degenerované stavy - Zeemanov jav*
Dokončite diskusiu Zeemanovho javu pre prvý excitovaný stav atómu vodíka.
(a) Pri zapnutom magnetickom poli B_{ext} sme na prednáške určili 8x8 maticu poruchy H_2' až na 2x2 podblok pre 6. a 7. stĺpec/riadok. Tento podblok sme parametrizovali pomocou čísel x, y a z. Z prednášky opíšte vyjadrenie 6. a 7. bázového vektora pomocou superpozície vektorov bázy $|n\ell m s s_z >$ a dopočítajte čísla x, y a z.

(b) Ukážte, že pre maličké B_{ext} (voči efektom jemnej štruktúry) nedostávame degeneráciu s niektorou z hladín vypočítaných na prednáške.

(c) Ukážte, že pre veľmi veľké B_{ext} (voči efektom jemnej štruktúry, ale stále

s malým efektom voči rozdielu najnižších hladín atómu vodíka) dostávame degeneráciu. Teda tu už nemáme štiepenie ε_2 na osem rôznych hladín, ale len na 5 hladín, ktoré sa odštiepili od ε_2 o rozdiely v pomere $(-2):(-1):0:(+1):(+2)$. Aká je degenerácia týchto hladín?
Overte zhodu s použitím bázy $|n\ell m s s_z>$ na poruchu $\hat{L}_z+2\hat{S}_z$. *Pripomeňme, že porucha H_2' je rovná tomuto ooperátoru, až na konštantu.*

(d) Uvažujme magnetické pole B_{ext} takej intenzity, že jeho efekt je porovnateľný s jemnou štruktúrou. Akú bázu stavov treba použiť v tomto prípade v poruchovom rozvoji? Je to báza stavov $|n\ell m s s_z>$?
Je to báza stavov $|n j j_z \ell s>$?
Alebo je to nejaká iná báza? Ak áno, aká? **[4 body]**

6. *variačná metóda*
Variačnou metódou možno preskúmať, ktorá z nasledujúcich funkcií najlepšie minimalizuje energiu elektrónu v atóme vodíka. V triede sme okomentovali riešenie v časti *(a)*. Nakoniec tam dostávame základný stav: známu vlnovú funkciu i energiu, a to pre $\beta_{min}=1$. Na d.ú. to overte výpočtom. Ďalej preskúmajte jednu z možností *(b)*-*(d)* porovnajúc výsledky s výsledkami z časti *(a)*. Zhruba o koľko percent sa s nesprávnymi odhadmi *(b)*-*(d)* trafíme mimo hodnoty $-13.6\,\mathrm{eV}$?
(a) $\Psi(r)=A(\beta)\,e^{-\beta r/a}$,
(b) $\Psi(r)=A(\beta)\,r\,e^{-\beta r/a}$, *aká predstava atómu H motivuje tento odhad?*
(c) $\Psi(r)=A(\beta)\,e^{-\beta r^2/a^2}$, *aká predstava atómu H motivuje tento odhad?*
(d) $\Psi(r)=A(\beta)\,r\,\sin\theta\,e^{-\beta r/a}$. *Tu je motiváciou Bohrov model: výskyt elektrónu v rovine xy v oblasti pripomínajúcej kružnicu (záchranné koleso) o polomere rádovo a.*
$A(\beta)$ je normovacia konštanta a β je variačný parameter.

Pomocné vzorce: $\Delta\Phi(r)=\Phi''+\frac{2}{r}\Phi'$, $a=\hbar/(mc\,\alpha)$ je Bohrov polomer,
$$\hbar^2/(ma^2)=\alpha\hbar c/a=mc^2\alpha^2=2|E_1|=2\times 13.6\,\mathrm{eV}.$$

Pomocné integrály: $\int_0^\infty t^N e^{-t}dt=N!$ pre $N=0,1,2,\ldots$,
$\int_0^\infty t e^{-t^2}dt=\frac{1}{2}$, $\int_0^\infty e^{-t^2}dt=\frac{\sqrt{\pi}}{2}$, $\int_0^\infty t^2 e^{-t^2}dt=\frac{1}{2}\frac{\sqrt{\pi}}{2}$, $\int_0^\infty t^4 e^{-t^2}dt=\frac{3}{2}\frac{1}{2}\frac{\sqrt{\pi}}{2}$.
[4 body za časť *(a)* a za jedno z riešení *(b)*, *(c)* alebo *(d)*]
[+ 2 body ako bonus za každé ďalšie riešenie]

7. *variačná metóda*

(a) Variačnú metódu môžme aplikovať aj s viac ako len jedným parametrom. Bez počítania urobte predpoveď, aké hodnoty $\beta_{1\,min}$ a $\beta_{2\,min}$ by sme dostali, ak by sme si pre elektrón v atóme vodíka tipli namiesto odhadu *(a)* v príklade **6.** sofistikovanejšiu vlnovú funkciu $\Phi(r) = (\beta_2 r + \beta_3)e^{-\beta_1 r/a}$ s nezávislými variačnými parametrami β_1 a β_2. (β_3 by sa dala chápať ako závislá premenná, zaručujúca správne normovanie.) Čomu by vyšla rovná energia základného stavu?

(b) Akú energiu základného stavu dostaneme s rovnakým tipom funkciou $\Phi(r)$ z časti *(a)* pre elektrón v atóme vodíka, ktorý je vložený do vonkajšieho elektrického poľa? Do akej miery je Vaša odpoveď v súlade s odpoveďou poruchovej teórie pre Starkov jav? **[2 body]**

8. *variačná metóda*

Jeden z najdôležitejších a najužitočnejších príkladov minulého semestra je príklad s časticou na úsečke v stave popísanom vlnovou funkciou $\Psi(x) = Ax(L-x)$. Za úlohu bolo nájsť pravdepodobnosti namerať v tomto stave energie E_n. *(Zbierka, str. 46 v tlačenej verzii, časť (d).)* Ukáže sa, že na viac ako 99% nameriame energiu základného stavu.

Z hľadiska variačnej metódy ide o provokatívny výsledok. Stav $\Psi(x)$ sme navrhli z pohodlnosti, nakoľko zjavne spĺňa okrajové podmienky a umožňuje ľahké integrovanie. Ako to, že sa s ním trafíme tak blízko k skutočnému základnému stavu? Čo ak sa s trochou snahy jeho vhodnou parametrizáciou dopracujeme variačnou metódou k energii ešte nižšej ako je základná hladina vypočítaná zo SchR? V tomto príklade ukážeme, že pre jednu takúto parametrizáciu, nech sa čo ako snažíme, energiu nižšiu ako základnú nedostaneme.

(a) Vypočítajte strednú hodnotu energie v stave $\Psi(x)$. Vyjadrite ju v tvare $\overline{E}|_{\beta=1} = \frac{\hbar^2}{2mL^2}X$, kde X bude vami vypočítaná reálna hodnota.
Poznámka: Ináč povedané, energiu tu budeme udávať v jednotkách $\hbar^2/(2mL^2)$.

(b) Porovnajte X s vlastnou energiou odpovedajúcou vlastnému stavu hamiltoniánu $\Psi_1(x) = \sqrt{\frac{2}{L}}\sin(\pi x)$, ktorý sme našli riešením bezčasovej SchR pre časticu na úsečke. Ktorá ja nižšia? O koľko percent sa líšia?

(c) Variačnou metódou nájdite priblíženie pre energiu základného stavu vychádzajúc z parametrizovanej vlnovej funkcie $\Psi(x,\beta) = A(\beta)\,x^\beta(L-x)^\beta$, kde $\beta \geq \frac{1}{2}$ je variačný parameter a $A(\beta)$ je normovacia konštanta. Výsle-

dok porovnajte s vlastnou energiou stavu $\Psi_1(x)$.

Pomôcky: Namiesto prechodu od x k bezrozmernej integračnej premennej $t = x/L$ zvážte možnosť priamo položiť $L = 1$ pri všetkom počítaní. Kde potom treba vo výsledku dopísať L ?

Použite pomocný integrál $\int_0^1 t^a(1-t)^b\,dt = \Gamma(a+1)\Gamma(b+1)/\Gamma(a+b+2)$, kde $\Gamma(x+1) = x\Gamma(x)$ je gamma funkcia.

Pre vašu kontrolu: mne vyšlo, že $\overline{E}(\beta)$ je úmerná $(\beta + \frac{3}{8}\frac{1}{\beta-1/2} + C)$, kde C je konštanta nezávislá na β.

Nakoniec minimalizujte $\overline{E}(\beta)$ vzhľadom na variačný parameter a numericky vyčíslite X_{min} vo vzťahu $\overline{E}_{min} = \frac{\hbar^2}{2mL^2}X_{min}$.

Dostali ste výsledok menší ako energia stavu $\Psi_1(x)$?

O koľko percent sa líšia E_1 a $\overline{E}_{min}$?

O koľko percent sme sa zlepšili voči energii stavu $\Psi(x) = Ax(L-x)$ vďaka použitiu variačnej metódy? **[4 body]**