Príklady na domácu úlohu z kvantovej teórie 2

Sada č.1

riešenia, prosím, odovzdajte do začiatku prednášky 11.03.2025

Prosím, nezľaknite sa dlhého zadania, sú v ňom dlhé poznámky.

1. *pripomienka jednoduchých úprav*

(a) Klasická fyzika: Prúdová slučka s prúdom I vo všeobecnosti generuje magnetický dipólový moment $\mu = IS$, kde S je plocha slučky. Smer $\vec{\mu}$ je podľa pravidla pravej ruky. *(Otestujte.)* Elektrický náboj Q pohybujúci sa rovnomerne rýchlosťou v po kružnici s polomerom R v rovine xy možno považovať za kruhovú prúdovú slučku s prúdom $I = Q/T$, kde T je perióda kruhového pohybu. Dokážte, že v tomto prípade platí $\mu_z = \frac{QL_z}{2m}$, kde m je hmotnosť častice nesúcej náboj Q.

Prosím, venujte pozornosť dvojke v menovateli. Pre spin S_z elektrónu namiesto orbitálneho momentu hybnosti L_z faktor 2 v menovateli absentuje, čo vyplynie až z Diracovej rovnice - v 4.ročníku.

(b) Príspevok do hamiltoniánu $\hat{H}$ od spinového magnetického dipólového momentu $\vec{\mu}$ elektrónu vo vonkajšom magneticko poli $\vec{B} = B\vec{n}$ je vo všeobecnosti daný ako $\hat{H} = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}$. Ukážte, že tento všeobecný výraz možno teraz upraviť do tvaru $\hat{H} = +\mu_B B\, \vec{n} \cdot \vec{\sigma}$. **[2 body]**

2. *ďalšie užitočné jednoduché technické úpravy*

(a) Ukážte, že pre ľubovolný jendotkový vektor $\vec{n}$ (teda ľubovolný smer) a trojicu Pauliho matíc $\vec{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ platí, že matica $\vec{n} \cdot \vec{\sigma}$ má vlastné hodnoty ± 1.

(b) Ukážte, že pre Pauliho matice platí $\sigma_i \sigma_j = \delta_{ij} + i\varepsilon_{ijk}\sigma_k$. Toto je veľmi užitočný vzorec pre budúcnosť. Odvodzuje sa ako súčet komutátora a antikomutátora dvoch Pauliho matíc, a následnom delení dvomi.

(c) S pomocou *(b)* ukážte, že pre Pauliho matice a ľubovolný jednotkový vektor *(smer)* $\vec{n}$ platí $(\vec{n} \cdot \vec{\sigma})^2 = 1$, čo je - mimochodom - v súlade s časťou *(a)*. **[2 body]**

3. *poruchová teória pre nedegenerované spektrum*

(a) V triede sme prešli príkladom, v ktorom bol uvažovaný spinový stav

fixovaného elektrónu v silnom vonkajšom magnetickom poli $\vec{B}$ v smere osi z a poruchou bolo slabé magnetické pole $\vec{b}$ v smere osi y, $b \ll B$. Na základe povedaného v triede opíšte sem prvé tri korekcie ku každej z dvoch energetických hladín systému po zapnutí poruchy (dali sme ich v triede), a potom určte korekcie k hladinám v štvrtom a piatom ráde poruchovej teórie. *Odpoveď si vyžaduje minimálnu námahu, keďže poznáme presný výsledok.*

(b) Riešte samostatne rovnaký príklad ako v triede, len pre poruchu v smere osi x namiesto smeru y. Teda určte, ako sa zmenia dve hladiny systému do *toho* rádu poruchovej teórie, kde začíname dostávať nenulové korekcie. Ukážte, že výsledok vieme dostať presne a vieme z neho overiť výsledok poruchovej teórie. **[2 body]**

4. *poruchová teória pre nedegenerované spektrum*

(a) Rovnaký príklad ako **3.***(b)*, len namiesto spinu $\frac{1}{2}$ tu uvažujeme spin 1. Odpovedajúce "Pauliho"matice sú *hermitovské* 3x3 matice, pre ktoré tu udáme nezávislé nenulové elementy: $S_{x\,12}/\hbar = S_{x\,23}/\hbar = 1/\sqrt{2}$, $S_{y\,12}/\hbar = S_{y\,23}/\hbar = -i/\sqrt{2}$, a $S_{z\,11}/\hbar = -S_{z\,33}/\hbar = 1$.

(b) Ako kontrolu, že máme spinové matice, otestujte, že platí $[S_x,\, S_y] = i\hbar S_z$.

(c) Takisto ako kontrolu vypočítajte maticu $S_x^2 + S_y^2 + S_z^2$ a okomentujte, či Vám vyšlo, čo má výjsť. **[2 body]**

5. *poruchová teória pre nedegenerované spektrum*

Uvažujme systém s malou poruchou $V'(x) = \xi f(x)$, kde $0 < \xi \ll 1$ je bezrozmerný malý parameter *(predstavte si napr. $\xi = \alpha = 1/137$)* a $f(x)$ je nejaká slušná spojitá funkcia idúca do nuly pre $x \to \pm\infty$. Systém tu nešpecifikujeme: nech sú jeho hladiny bez poruchy nedegenerované a známe, označené ako ε_n.

Nech po zapnutí poruchy možno presne vypočíta, že $E_n = \varepsilon_n(1 + a\xi^2 + b\xi^4 + c\xi^5)$, kde a, b, c sú reálne čísla rádovo rovné 1. Čo možno predpovedať o výsledkoch poruchovej metódy? V ktorom ráde poruchového rozvoja budú výsledky nenulové? Čomu budú vtedy rovné? Možno získať z konečného počtu členov poruchového rozvoja presný výsledok? V ktorom ráde poruchového rozvoja sa to podarí? *Samozrejme, ak by sme naozaj poznali presný výsledok, tak by sme sa už netrápili s odvodzovaním poruchového výsledku, takže otázka je len o porozumení poruchovej teórii.* **[2 body]**

6. *poruchová teória pre nedegenerované spektrum*

Uvažujme dve rôzne trojhladinové sústavy s (nedegenerovanými) hladinami

(i) -60, 0 a 54,

(ii) -6, 0 a 5.

V každej z týchto sústav osobitne bol zapnutý dodatočný vonkajší potenciál, ktorý možno v oboch prípadoch vyjadriť v energetickej reprezentácii rovnakou dodatočnou maticou $H' = \begin{pmatrix} 10 & 16 & 0 \\ 16 & -5 & \sqrt{6} \\ 0 & \sqrt{6} & -4 \end{pmatrix}$. Uvedené údaje sú v nejakých jednotkách energie, napr. eV. Jednotky nie sú podstatné, takže ich budeme vynechávať.

Poznamenajme, že pre každú z dvoch sústav sme tu zaviedli jej príslušnú energetickú reprezentáciu. Elementy H'_{ij} sú výsledkami počítania integrálov $H'_{ij} = \int \varphi_i^*(x)\, \hat{H}'(x)\, \varphi_j(x)\, dx$, kde $\varphi_i(x)$ je vlnová funkcia stacionárneho stavu sústavy s energiou ε_i. Stacionárne stavy a aj dodatočný potenciál $\hat{H}'(x)$ (ktorý nešpecifikujeme ako funkciu "x") sú rozdielne v jednej a druhej sústave. Ak potom vyjde rovnaká matica H', považujme to za dielo náhody v tomto cvičnom príklade. K riešeniu úlohy si prípadne pripomeňte, ako vyzerajú stacionárne stavy v energetickej reprezentácii.

(a) Poruchová teória bude konvergovať (aj to nie super excelentne) iba v jednom prípade. Bez počítania rozhodnite, v ktorom z týchto dvoch prípadov možno s úspechom použiť poruchovú teóriu.

(b) Vypočítajte energetické hladiny do druhého rádu poruchovej teórie tej sústavy, o ktorej ste vyššie tvrdili, že poruchová teória bude pre ňu použiteľná. Okomentujte konvergenciu prvých členov poruchového radu a *odhadnite*, akej veľkosti je chyba, ktorej sa dopustíme, ak rad usekneme v 2. ráde. Svoje výsledky pre každú hladinu zapíšte ako súčet troch členov (nesčitujte ich) v tvare $E_1 = \varepsilon_1 + E_1^{(1)} + E_1^{(2)}$ a podobne pre E_2 a E_3. Ako skúšku správnosti overte, že stopa celkového H ostáva zachovaná bez ohľadu na to, do akého rádu poruchovej teórie máme výsledky pre E_1, E_2 a E_3. To vyplýva z toho, že tu diagonalizujeme H, a to sa formálne deje unitárnou transformáciou $H \to H^{diag} = UHU^\dagger$, a pri unitárnej transformácii sa stopa matice nemení. Samozrejme tu to vieme overiť len do druhého rádu, ale pamätajme, že to platí do každého rádu. **[2 body]**

7. *poruchová teória pre nedegenerované spektrum*

Tento príklad priamo nadväzuje na predchádzajúci príklad. Je dobré si vždy vyskúšať, koľko by asi vyšli energetické hladiny kompletnej sústavy, teda aj s dodatočným potenciálom, ak by sme sa ich rozhodli počítať priamo, bez použitia rozvoja do poruchového radu. Nemusí sa to vždy podariť, alebo náš odhad môže byť príliš hala-bala, ale skúsiť to treba. V tomto príklade je možné vypočítať všetky tri hladiny sústavy aj úplne presne.

Pre porovnanie s Vašimi výsledkami poruchovej teórie v riešení príkladu **6.** vypočítajte teraz hladiny presnou diagonalizáciou. **Okomentujte zhodu** medzi presným a poruchovým výsledkom pre E_1, E_2, E_3 a či chyba odhadnutá pred výpočtom súhlasí s realitou.

Môžte použiť aj softvérový balík, ktorý urobí diagonalizáciu za Vás na overenie Vami odvodeného výsledku. Urobte však aj vlastný výpočet: je tu príležitosť zopakovať si, ako sa diagonalizujú matice. **[2 body]**

8. *poruchová teória pre nedegenerované spektrum*
Aj tento príklad nadväzuje na príklad **6.**

(a) Ako ilustračný cvičný príklad uvažujte teraz tú sústavu, pre ktorú tvrdíte, že poruchovú teóriu nemožno spoľahlivo použiť. Dosadením do odvodených vzťahov pre $E_n^{(1)}$ a $E_n^{(2)}$ predveďte výpočet *základnej* hladiny do druhého rádu poruchovej teórie. Čo možno povedať o konvergencii poruchových príspevkov?

(b) Vypočítajte hodnotu energie základného stavu s presnosťou na celé čísla a porovnajte s výsledkami poruchovej teórie do druhého rádu z časti *(a)*.

[2 body]

9. *degenerované spektrum*
(a) Uvažujme sústavu s hamiltoniánom (v energetickej reprezentácii, v eV) $\begin{pmatrix} 100 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 100 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 100 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 200 \end{pmatrix}$, ktorá je v stave $\Phi = \frac{1}{4}\begin{pmatrix} 3 \\ 2 \\ \sqrt{3} \\ 0 \end{pmatrix}$. Určte, či je sústava v stacionárnom stave. Ak áno, s akou energiou? Ak nie, určte, v akej superpozícii stacionárnych stavov sa nachádza.

(b) Elektrón v atóme vodíka je v stave $\Psi(\vec{r}) = A\,\rho\,e^{-\rho/2}\sin\theta\,\cos\varphi$, kde A je normovacia konštanta a $\rho = r/a$. Určte, či je elektrón v stacionárnom stave.

Ak áno, s akou energiou? Ak nie, v akej superpozícii stacionárnych stavov sa nachádza.

(c) Elektrón v atóme vodíka je v stave $\tilde{\Psi}(\vec{r}) = \tilde{A}\,(\rho\,\cos^2\theta/2 - 1)\,e^{-\rho/2}$, kde $\tilde{A}$ je normovacia konštanta a $\rho = r/a$. Určte, či je elektrón v stacionárnom stave. Ak áno, s akou energiou? Ak nie, v akej superpozícii stacionárnych stavov sa nachádza. *Pomôcka: Upravte $\cos^2\theta/2$ pomocou štandardného vzorca na vzťah lineárny v sínusoch / cosínusoch a zamyslite sa, či $\tilde{\Psi}$ je alebo nie je superpozíciou vlnových funkcií $\Psi_{2\ell m}$, kde sme navrhli kvantové číslo $n = 2$ kvôli dvojke v $e^{-\rho/2}$. Pripomeňte si tieto vlnové funkcie prvého excitovaného stavu.* **[2 body]**

10. *degenerované spektrum*
Uvažujme kvantový systém, ktorého hladina ε_n je dvakrát degenerovaná, a sme práve vypočítali k nej odpovedajúce vlastné funkcie $\varphi_1(x)$ a $\varphi_2(x)$, ktoré sú na seba ortogonálne a každá je správne normovaná.

(a) Ukážte, že aj funkcia $\tilde{\varphi}(x) = c_1\varphi_1(x) + c_2\varphi_2(x)$, kde c_1 a c_2 sú ľubovolné nenulové komplexné čísla, je vlastnou funkciou $\hat{H}$ s rovnakou vlastnou hodnotou ε_n.

(b) Na základe časti *(a)* aj funkcie $\tilde{\varphi}_1(x) = c_1\varphi_1(x) + c_2\varphi_2(x)$ a $\tilde{\varphi}_2(x) = -c_2^*\varphi_1(x) + c_1^*\varphi_2(x)$, kde c_1 a c_2 sú komplexné čísla, sú vlastnými funkciami $\hat{H}$ s rovnakou vlastnou hodnotou ε_n. Ukážte, že $\tilde{\varphi}_1$ a $\tilde{\varphi}_2$ sú na seba ešte navyše aj ortogonálne a pre $|c_1|^2 + |c_2|^2 = 1$ aj správne normované.
Z uvedeného plynie, že tieto dve vlnovkové funkcie sú plne ekvivalentné pôvodnej dvojici funkcií $\varphi_1(x)$ a $\varphi_2(x)$. Pre uvažovaný hamiltonián je jedno, akú ortonormovanú dvojicu funkcii uvažujeme. Prestane to byť jedno, ak pribudne nový člen do hamiltoniánu (*porucha*) a my sa budeme snažiť nájsť korekcie k ε_n (vo všeobecnosti jej štiepenie pod vplyvom poruchy) poruchovou metódou. Vtedy musíme celkom na začiatku zvoliť takú dvojicu $\tilde{\varphi}_1$ a $\tilde{\varphi}_2$, ktorá diagonalizuje im odpovedajúci podblok poruchy. K tomu je ďalší príklad. **[2 body]**

11. *poruchová teória pre degenerované spektrum*
(a) Ako prípravu k nasledujúcim častiam tohto príkladu uvažujme najprv kvantovú sústavu, ktorej hamiltonián H je zadaný v tvare matice $\begin{pmatrix} 2 & 0 & 2 \\ 0 & 2 & 2 \\ 2 & 2 & -5 \end{pmatrix}$.

Vypočítajte (presnou diagonalizáciou, teda *nie* poruchovou teóriou) energetické hladiny sústavy a im odpovedajúce vlastné vektory. Overte, že vypočítané vlastné vektory sú na seba ortogonálne a normujte ich na 1.

(b) Uvažujme (2-hladinovú) sústavu s hamiltoniánom $H_0 = \begin{pmatrix} 100 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 100 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 100 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 200 \end{pmatrix}$, ktorá je v oblasti, kde pôsobí porucha v tvare $H' = \begin{pmatrix} 2 & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 2 & 2 & 1 \\ 2 & 2 & -5 & 2 \\ 0 & 1 & 2 & 2 \end{pmatrix}$. Do *prvého* rádu poruchovej teórie určte energie sústavy po zapnutí poruchy.

(c) Čo môžeme povedať o spektrálnych čiarach s presnosťou do prvého rádu poruch. teórie?
Koľko spektrálnych čiar možno pozorovať bez poruchy? K akému štiepeniu či posunutiu spektr. čiar dochádza po zapnutí poruchy? **[2 body]**

12. *Starkov jav*
Dopočítajte diagonálne elementy poruchy v degenerovanom 4x4 podbloku poruchy pre prvý excitovaný stav elektrónu v atóme vodíka. V triede sme ich nechali na dú. **[2 body]**

13. *bonus príklad: Starkov jav*
Odvoďte posunutie základnej hladiny e^- v atóme vodíka s presnosťou do 2. rádu poruchovej teórie. Pomôcka: trik podľa zelenej knihy. **[2 body]**