

Sbírka úloh pro cvičení k přednášce Kvantová teorie

Pavel Stránský

30. dubna 2024

Obsah

1	Operátory	1.1
1.1	Komutátor součinu	1.2
1.2	Komutátor inverzního operátoru	1.2
1.3	Komutátory souřadnice a hybnosti	1.2
1.4	Baker-Campbell-Hausdorffova formule	1.3
1.5	Posunutí souřadnice	1.7
1.6	Rotace operátoru momentu hybnosti	1.8
2	Spin	2.1
2.1	Spin mířící do obecného směru	2.2
2.2	Exponenciála Pauliho vektoru	2.4
2.3	Funkce Pauliho vektoru	2.4
2.4	Nekřížení hladin — dvouhladinový systém	2.5
2.5	Kvantový oblak	2.7
2.6	Kvantový řetízek	2.7
3	Vícečásticové systémy	3.1
3.1	Dvě částice se spinem $\frac{1}{2}$	3.1
3.2	Trojhladinový systém	3.4
4	Harmonický oscilátor	4.1
4.1	Vlastnosti posunovacích operátorů	4.1
4.2	Jednorozměrný harmonický oscilátor	4.3
4.3	Stav s nenulovou výchylkou	4.7
4.4	Posunutí harmonického oscilátoru	4.9
4.5	Nabitý harmonický oscilátor v elektrickém poli	4.11
4.6	Spektrum kvartického oscilátoru	4.11
5	Variační metoda	5.1
5.1	Nekonečně hluboká jáma	5.1
6	Skládání momentu hybnosti	6.1
6.1	Explicitní výpočet C-G koeficientů	6.1
6.2	Maticová realizace operátoru momentu hybnosti	6.5
6.3	Moment hybnosti atomu vodíku	6.6

7	Potenciály s δ-funkcemi	7.1
7.1	Jednoduchá δ jáma nebo bariéra	7.1
7.2	Dvě δ jámy nebo bariéry	7.4
7.3	Maticový formalismus	7.10
7.4	Periodická δ funkce (Diracův hřeben)	7.12
8	Koherentní stavy harmonického oscilátoru	8.1
8.1	Poissonovo rozdělení	8.1
8.2	Základní vlastnosti koherentních stavů	8.2
8.3	Vlastní stav operátoru \hat{a}	8.3
8.4	Střední hodnoty operátorů	8.4
8.5	Časový vývoj	8.6
9	Časový vývoj	9.1
9.1	Breit-Wignerovo rozdělení	9.1
9.2	Ramseyův přístroj	9.4
9.3	Ramseyův přístroj pro spin 1	9.8
9.4	Volné mionium	9.10
9.5	Mionium v křemíku	9.15
10	Stacionární poruchová metoda	10.1
10.1	Porucha harmonického oscilátoru	10.2
10.2	Van der Waalsova interakce	10.4
11	Měření	11.1
11.1	Ramseyův přístroj s měřením	11.1
12	Nestacionární poruchová metoda	12.1
12.1	Nabitý harmonický oscilátor	12.5
12.2	Vodík v elektrickém poli	12.6
12.3	Fotoelektrický jev — plné řešení	12.8
12.4	Fotoelektrický jev v dipólové aproximaci	12.13
13	Rozptyl	13.1
13.1	Gaussovský potenciál	13.5
13.2	Wronskián sférické Besselovy rovnice	13.6
13.3	Sférická dutina obalená δ -slupkou	13.8
13.4	Rozptyl na $\frac{1}{r^2}$ potenciálu	13.11
14	Tenzorové operátory	14.1
14.1	Vektorový operátor jako ireducibilní tenzor	14.3
14.2	Skalární součin vektorových operátorů	14.3
14.3	Využití symetrií 3j symbolů	14.4
14.4	Redukovaný maticový element skalárního operátoru	14.4
14.5	Redukovaný maticový element skalárního součinu	14.5
14.6	Redukovaný maticový element impulsmomentu	14.6
14.7	Projekce vektoru na impulsmoment	14.7
14.8	Projekční teorém	14.7
14.9	Magnetický moment	14.8
14.10	Sférické komponenty tenzoru	14.9

15 Nerozlišitelné částice	15.1
15.1 Gaussovská porucha bosonového systému	15.1
15.2 Gaussovská porucha fermionového systému	15.2
15.3 Kondenzátová střední hodnota	15.4
15.4 Evoluce bosonového kondenzátu	15.5
15.5 Atom helia	15.6
15.6 Rozptyl dvou částic se spinem	15.7
15.7 Bogoljubovova transformace	15.8
16 Hartree-Fokova metoda	16.1
16.1 Základní stavy lehkých prvků	16.3
A WKB aproximace	1.1
A.1 Nekonečně hluboká pravoúhlá jáma se schodem	1.4
A.2 Harmonický oscilátor	1.5
A.3 α rozpad	1.8
A.4 Dvojitá symetrická jáma	1.12
A.5 Coulombické pole	1.17
A.6 Homogenní pole	1.18
B Hustota kvantových hladin	2.1
B.1 Hustota hladin 1D oscilátoru	2.2
B.2 Obrácený oscilátor v jámě	2.4
B.3 Hustota hladin f -rozměrného oscilátoru	2.4
C Hypergeometrické funkce	3.1
C.1 Pöschl-Tellerův potenciál	3.3
C.2 Nekonečně hluboká nepravoúhlá jáma	3.7
D Křivočaré souřadnice	4.1
D.1 Determinant a stopa	4.5
D.2 Sférické souřadnice	4.6
D.3 Volná rotace axiálně symetrického tělesa	4.8
D.4 Hypersférické souřadnice	4.12
E Grupy a symetrie	5.1
E.1 Vlastnosti grupy $U(n)$	5.1
E.2 Vlastnosti grupy $SU(n)$	5.2
E.3 Vlastnosti grupy $O(n)$	5.2
E.4 Algebraické řešení atomu vodíku	5.4
E.5 Schwingerova realizace grupy $SU(2)$	5.6
F Dekohherence	6.1
F.1 Spin a prostředí	6.1
G Dráhový integrál	7.1
G.1 Gaussovský integrál	7.1
G.2 Dráhový integrál pro volnou částici	7.1
G.3 Dráhový integrál částice v homogenním poli	7.2
G.4 Propagátor harmonického oscilátoru	7.2
H Kvantové počítání	8.1
H.1 Kvantová hradla	8.1

Úvod

Tato sbírka vznikla na základě cvičení k přednášce Kvantová mechanika I (NJSF094) a Kvantová mechanika II (NJSF095), které se později přetvořily do přednášek Kvantová teorie I (NOFY076), Kvantová teorie II (NOFY079) a Kvantová teorie - vybraná témata (NJSF179) vyučované prof. Pavlem Cejnarem [1]. Sbíрка je členěna do tematických kapitol, přičemž každá kapitola přibližně odpovídá příkladům propočítaným na jednom cvičení. Důsledkem snahy o systematickост a samoobsažnost tohoto textu je to, že jsou často uvedeny i příklady, které lze najít v jiných sbírkách. Vždy jsou však doplněné o co nejdetailnější postup výpočtu včetně diskuze všech netriviálních kroků, zanedbání a triků. Kromě příkladů „standardního rázu“ jsem se snažil začlenit i příklady netradiční, často techničtěji náročnější, nebo uvádím pečlivě propočítané problémy, které se objevují v učebnicích a během přednášek, ale na jejichž podrobné řešení se nenachází čas ani prostor. Většina příkladů klade spíše důraz na technickou stránku věci, což odpovídá zaměření této přednášky kvantové mechaniky pro studenty teoretických oborů.

Příklady byly převzaty či adaptovány z různých sbírek či zdrojů na webu. Zmínil bych zde zejména publikace Antona Capriho [2], Jeana-Luise Basdevanta a Jeana Dalibarda [3], Kyriakose Tamvakise [4] a cvičení k alternující přednášce Martina Čížka [5, 6].

Chtěl bych zde poděkovat všem studentům, kteří mi byli během cvičení kolegy a partnery a bez nichž by tato sbírka nevznikla. Speciální poděkování patří pak těm, kteří mi pomohli vyladit řešení jednotlivých příkladů a odstranit množství chyb a překlepů.

Sbíрка včetně všech doprovodných materiálů je dostupná ve veřejném repozitáři na adrese <https://github.com/PavelStransky/Sbirka>.

1 Operátory a jejich funkce, komutátory

Funkce operátoru

Funkci operátoru \hat{A} na základě funkce reálného argumentu $f(\xi)$ lze zavést dvěma způsoby:

1. *Rozvojem do řady.* Za předpokladu, že existuje *Maclaurinova řada* konvergující k zadané funkci, tj. rozvoj funkce $f(\xi)$ do mocninné řady v okolí bodu $\xi = 0$,

$$f(\xi) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \xi^n, \quad a_n = \frac{1}{n!} \left. \frac{d^n f(\xi)}{d\xi^n} \right|_{\xi=0}, \quad (1.0.1)$$

pak se pod funkcí $f(\hat{A})$ rozumí operátor

$$f(\hat{A}) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \hat{A}^n. \quad (1.0.2)$$

Příklad:

$$e^{\hat{A}} \equiv \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\hat{A}^n}{n!} \quad (1.0.3)$$

2. *Sylvestrova formule.* Je-li operátor \hat{A} samosdružený se spektrálním rozkladem

$$\hat{A} = \sum_k A_k \hat{P}_k, \quad (1.0.4)$$

kde $\hat{P}_k = |A_k\rangle\langle A_k|$ je projektor na podprostor příslušející reálné nedegenerované vlastní hodnotě A_k , a je-li funkce $f(\xi)$ definovaná na množině, která zahrnuje všechny body $\xi = A_k$, funkci operátoru \hat{A} lze vyjádřit jako součet

$$f(\hat{A}) = \sum_k f(A_k) \hat{P}_k. \quad (1.0.5)$$

Komutátor

Komutátor dvou operátorů \hat{A} a \hat{B} se zavádí jako bilineární zobrazení

$$[\hat{A}, \hat{B}] \equiv \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} \quad (1.0.6)$$

a splňuje následující dvě vlastnosti:

1. *Antisymetrie*

$$[\hat{A}, \hat{B}] = -[\hat{B}, \hat{A}], \quad (1.0.7a)$$

2. *Jacobiho identita*

$$[\hat{A}, [\hat{B}, \hat{C}]] + [\hat{B}, [\hat{C}, \hat{A}]] + [\hat{C}, [\hat{A}, \hat{B}]] = 0. \quad (1.0.7b)$$

Poznámka: Skládání lineárních operátorů nad Hilbertovými prostory je z definice asociativní, tj. platí, že

$$(\hat{A}\hat{B})\hat{C} = \hat{A}(\hat{B}\hat{C}). \quad (1.0.8)$$

Existují však *neassociativní algebry*, kde míru neassociativity udává *asociátor*

$$[x, y, z] \equiv (xy)z - x(yz). \quad (1.0.9)$$

Příkladem je algebra oktonionů nebo algebry používající se v teoriích superstrun (například pro popis částice pohybující se v okolí magnetického monopólu).

1.1 Komutátor součinu

Pomocí jednoduchých komutátorů vyjádřete komutátor $[\hat{A}\hat{B}, \hat{C}]$.

Řešení:

Komutátor se rozepíše podle své definice (1.0.6). Poté se k němu přičte a odečte vhodně zvolený člen a získaný výraz se sdruží do dvou nových jednodušších komutátorů:

$$\begin{aligned} [\hat{A}\hat{B}, \hat{C}] &= \hat{A}\hat{B}\hat{C} - \hat{C}\hat{A}\hat{B} + \underbrace{\hat{A}\hat{C}\hat{B} - \hat{A}\hat{C}\hat{B}}_{=0} \\ &= \hat{A}(\hat{B}\hat{C} - \hat{C}\hat{B}) + (\hat{A}\hat{C} - \hat{C}\hat{A})\hat{B} \\ &= \hat{A}[\hat{B}, \hat{C}] + [\hat{A}, \hat{C}]\hat{B}. \end{aligned} \quad (1.1.1a)$$

Stejným způsobem se ukáže, že

$$[\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] = [\hat{A}, \hat{B}]\hat{C} + \hat{B}[\hat{A}, \hat{C}], \quad (1.1.1b)$$

a nakonec pro čtyři operátory

$$\begin{aligned} [\hat{A}\hat{B}, \hat{C}\hat{D}] &= \hat{A}[\hat{B}, \hat{C}]\hat{D} + \hat{A}\hat{C}[\hat{B}, \hat{D}] + [\hat{A}, \hat{C}]\hat{D}\hat{B} + \hat{C}[\hat{A}, \hat{D}]\hat{B} \\ &= \hat{A}[\hat{B}, \hat{C}]\hat{D} + \hat{C}\hat{A}[\hat{B}, \hat{D}] + [\hat{A}, \hat{C}]\hat{B}\hat{D} + \hat{C}[\hat{A}, \hat{D}]\hat{B}. \end{aligned} \quad (1.1.1c)$$

1.2 Komutátor inverzního operátoru

Vyjádřete komutátor $[\hat{A}, \hat{B}^{-1}]$ pomocí komutátoru $[\hat{A}, \hat{B}]$.

Řešení:

Každý operátor komutuje s operátorem identity, tj.

$$[\hat{A}, \hat{B}\hat{B}^{-1}] = [\hat{A}, \hat{1}] = 0. \quad (1.2.1)$$

Levá strana rovnice se rozepíše podle vztahu (1.1.1b) z předchozího příkladu,

$$[\hat{A}, \hat{B}\hat{B}^{-1}] = [\hat{A}, \hat{B}]\hat{B}^{-1} + \hat{B}[\hat{A}, \hat{B}^{-1}], \quad (1.2.2)$$

což vede k výsledku

$$[\hat{A}, \hat{B}^{-1}] = -\hat{B}^{-1}[\hat{A}, \hat{B}]\hat{B}^{-1}. \quad (1.2.3)$$

Dalším přirozeným krokem je ukázat, že

$$[\hat{A}^{-1}, \hat{B}^{-1}] = \hat{A}^{-1}\hat{B}^{-1}[\hat{A}, \hat{B}]\hat{B}^{-1}\hat{A}^{-1} \quad (1.2.4)$$

(o platnosti tohoto vztahu se lze též přesvědčit prostým roznásobením).

1.3 Komutátory souřadnice a hybnosti

Jsou dány dva samosdružené operátory \hat{x} , \hat{p} (souřadnice a hybnost), které splňují komutační relaci $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$.

1. Určete $[\hat{x}^2, \hat{p}]$.
2. Určete $[\hat{x}^n, \hat{p}]$.
3. Určete $[f(\hat{x}), \hat{p}]$ a $[\hat{x}, g(\hat{p})]$.

Řešení:

1. Dosazení do vzorce pro komutátor součinu operátorů (1.1.1a) vede na

$$[\hat{x}^2, \hat{p}] = [\hat{x}\hat{x}, \hat{p}] = \hat{x} [\hat{x}, \hat{p}] + [\hat{x}, \hat{p}] \hat{x} = 2i\hbar\hat{x}. \quad (1.3.1)$$

2. Zopakuje se n -krát postup z předchozího bodu:

$$[\hat{x}^n, \hat{p}] = [\hat{x}^{n-1}\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar\hat{x}^{n-1} + [\hat{x}^{n-1}, \hat{p}] \hat{x} = \dots = ni\hbar\hat{x}^{n-1}. \quad (1.3.2)$$

3. Využije se definice funkce operátoru (1.0.2). Za předpokladu záměnnosti sčítání řady a komutování postupně vychází

$$\begin{aligned} [f(\hat{x}), \hat{p}] &= \left[\sum_{n=0}^{\infty} \frac{f^{(n)}(0)}{n!} \hat{x}^n, \hat{p} \right] = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{f^{(n)}(0)}{n!} [\hat{x}^n, \hat{p}] \\ &= i\hbar \sum_{n=0}^{\infty} \frac{f^{(n)}(0)}{n!} n \hat{x}^{n-1} \quad |m = n-1| \\ &= i\hbar \sum_{m=0}^{\infty} \frac{f^{(m+1)}(0)}{m!} \hat{x}^m = \boxed{i\hbar f'(\hat{x})}, \end{aligned} \quad (1.3.2) \quad (1.3.3)$$

přičemž pod n -tou derivací funkce operátoru rozumíme

$$f^{(n)}(\hat{x}) = \left. \frac{d^n f(\xi)}{d\xi^n} \right|_{\xi=\hat{x}}. \quad (1.3.4)$$

Analogický postup pro operátor hybnosti dá

$$\boxed{[\hat{x}, f(\hat{p})] = i\hbar f'(\hat{p})}. \quad (1.3.5)$$

1.4 Baker-Campbell-Hausdorffova formule

1. Jsou-li \hat{A}, \hat{B} dva komutující operátory, $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$, dokažte, že

$$e^{\hat{A}+\hat{B}} = e^{\hat{A}} e^{\hat{B}} = e^{\hat{B}} e^{\hat{A}}. \quad (1.4.1)$$

2. Pro obecné nekomutující operátory \hat{A}, \hat{B} ověřte, že

$$e^{\hat{A}} \hat{B} e^{-\hat{A}} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\hat{K}_n}{n!}, \quad (1.4.2)$$

kde $\hat{K}_0 = \hat{B}$ a $\hat{K}_{n+1} = [\hat{A}, \hat{K}_n]$.

3. Dokažte, že pro libovolné nekomutující operátory \hat{B}, \hat{C} platí

$$e^{\hat{C}\hat{B}\hat{C}^{-1}} = \hat{C} e^{\hat{B}} \hat{C}^{-1}, \quad (1.4.3)$$

a vhodnou volbou operátoru \hat{C} přepište formuli (1.4.2) do jiného často užívaného tvaru

$$e^{\hat{A}} e^{\hat{B}} e^{-\hat{A}} = e^{\sum_{n=0}^{\infty} \frac{\hat{K}_n}{n!}}. \quad (1.4.4)$$

4. Pokud \hat{A}, \hat{B} navzájem nekomutují, avšak komutují se svým komutátorem,

$$[\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]] = [\hat{B}, [\hat{A}, \hat{B}]] = 0, \quad (1.4.5)$$

ukážete, že platí

$$e^{\hat{A}} e^{\hat{B}} = e^{\hat{A}+\hat{B}} e^{\hat{D}} = e^{\hat{D}} e^{\hat{A}+\hat{B}} = e^{\hat{A}+\hat{B}+\hat{D}}, \quad (1.4.6)$$

a nalezněte operátor \hat{D} .

5. Pro zcela obecné operátory \hat{A} a \hat{B} nalezněte operátor \hat{F} tak, aby platilo

$$e^{\hat{A}} e^{\hat{B}} = e^{\hat{F}}. \quad (1.4.7)$$

Řešení:

1. Exponenciála operátoru se **rozvine do řady** podle vzorce (1.0.3):

$$\begin{aligned}
 e^{\hat{A}+\hat{B}} &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} (\hat{A} + \hat{B})^n && \left| \begin{array}{l} \text{binomický} \\ \text{rozvoj} \end{array} \right| \\
 &= \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^n \frac{1}{n!} \underbrace{\binom{n}{m}}_{\frac{n!}{m!(n-m)!}} \hat{A}^m \hat{B}^{n-m} = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^n \frac{\hat{A}^m}{m!} \frac{\hat{B}^{n-m}}{(n-m)!} \\
 &= \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{\hat{A}^k}{k!} \frac{\hat{B}^l}{l!} = \left(\sum_{k=0}^{\infty} \frac{\hat{A}^k}{k!} \right) \left(\sum_{l=0}^{\infty} \frac{\hat{B}^l}{l!} \right) = e^{\hat{A}} e^{\hat{B}}.
 \end{aligned} \tag{1.4.8}$$

Komutativita operátorů \hat{A} a \hat{B} se využila pro přeskládání operátorů v binomickém rozvoji.

2. **Zavede se pomocná funkce $\hat{f}(\xi) = e^{\xi\hat{A}} \hat{B} e^{-\xi\hat{A}}$.**¹ Levá strana dokazované formule (1.4.2) je pak rovna $\hat{f}(1)$. Funkce $\hat{f}(\xi)$ se do rozvine do mocninné řady, jejíž jednotlivé členy se označí v souladu s pravou stranou dokazované formule

$$\hat{f}(\xi) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\xi^n}{n!} \hat{K}_n. \tag{1.4.9}$$

Operátorové výrazy \hat{K}_n se postupně vyjádří pomocí derivací funkce $\hat{f}(\xi)$:

$$\hat{K}_0 = \hat{f}(0) = \hat{B}, \tag{1.4.10a}$$

$$\begin{aligned}
 \hat{K}_1 = \hat{f}'(0) &= \left\{ \left(e^{\xi\hat{A}} \hat{A} \right) \hat{B} e^{-\xi\hat{A}} + e^{\xi\hat{A}} \hat{B} \left(-\hat{A} e^{-\xi\hat{A}} \right) \right\}_{\xi=0} \\
 &= \left\{ e^{\xi\hat{A}} [\hat{A}, \hat{B}] e^{-\xi\hat{A}} \right\}_{\xi=0} \\
 &= [\hat{A}, \hat{B}] = [\hat{A}, \hat{K}_0],
 \end{aligned} \tag{1.4.10b}$$

$$\begin{aligned}
 \hat{K}_2 = \hat{f}''(0) &= \left\{ \frac{d}{d\xi} e^{\xi\hat{A}} [\hat{A}, \hat{B}] e^{-\xi\hat{A}} \right\}_{\xi=0} \\
 &= \left\{ \left(e^{\xi\hat{A}} \hat{A} \right) [\hat{A}, \hat{B}] e^{-\xi\hat{A}} + e^{\xi\hat{A}} [\hat{A}, \hat{B}] \left(-\hat{A} e^{-\xi\hat{A}} \right) \right\}_{\xi=0} \\
 &= [\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]] = [\hat{A}, \hat{K}_1],
 \end{aligned} \tag{1.4.10c}$$

$$\begin{aligned}
 &\vdots \\
 \hat{K}_n = \hat{f}^{(n)}(0) &= [\hat{A}, \hat{K}_{n-1}] = [\hat{A}, [\hat{A}, \dots [\hat{A}, \hat{B}] \dots]].
 \end{aligned} \tag{1.4.10d}$$

3. Analogicky s předchozím bodem se levá strana dokazovaného výrazu (1.4.3) rozvine do řady podle vztahu pro exponenciálu operátoru (1.0.3):

$$e^{\hat{C}\hat{B}\hat{C}^{-1}} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} (\hat{C}\hat{B}\hat{C}^{-1})^n = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \hat{C}\hat{B}^n\hat{C}^{-1} = \hat{C} \left(\sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \hat{B}^n \right) \hat{C}^{-1} = \hat{C} e^{\hat{B}} \hat{C}^{-1}. \tag{1.4.11}$$

Substituce $\hat{C} \equiv e^{\hat{A}}$ převede rovnici (1.4.2) do hledaného tvaru (1.4.4).

4. Pro tuto část úlohy se zavede operátorová funkce

$$\hat{g}(\xi) \equiv e^{\xi\hat{A}} e^{\xi\hat{B}}. \tag{1.4.12}$$

¹Jedná se o funkci reálného parametru ξ , avšak funkční hodnota je operátor z Hilbertova prostoru \mathcal{H} : $\hat{f}: \mathbb{R} \mapsto \mathcal{H}$.

Její derivace je

$$\begin{aligned}
 \hat{g}'(\xi) &= \hat{A} e^{\xi \hat{A}} e^{\xi \hat{B}} + e^{\xi \hat{A}} \hat{B} e^{\xi \hat{B}} \\
 &= \hat{A} e^{\xi \hat{A}} e^{\xi \hat{B}} + e^{\xi \hat{A}} \hat{B} \underbrace{e^{-\xi \hat{A}} e^{\xi \hat{A}}}_{\hat{1}} e^{\xi \hat{B}} \\
 &= (\hat{A} + e^{\xi \hat{A}} \hat{B} e^{-\xi \hat{A}}) \hat{g}(\xi) \\
 &= (\hat{A} + \hat{B} + \xi [\hat{A}, \hat{B}]) \hat{g}(\xi),
 \end{aligned} \tag{1.4.13}$$

přičemž poslední rovnost vyplývá z již dokázané formule (1.4.2), z jejíž nekonečné sumy díky zadanému předpokladu $[\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]] = 0$ zbudou jen první dva členy $\hat{K}_0 \equiv \hat{B}$ a $\hat{K}_1 \equiv [\hat{A}, \hat{B}]$. Levá a pravá strana výrazu vede na [diferenciální rovnici pro funkci \$\hat{g}\(\xi\)\$](#)

$$\frac{d}{d\xi} \ln \hat{g}(\xi) = \hat{A} + \hat{B} + \xi [\hat{A}, \hat{B}] \tag{1.4.14}$$

s řešením

$$\hat{g}(\xi) = e^{\xi(\hat{A} + \hat{B}) + \frac{\xi^2}{2} [\hat{A}, \hat{B}]} \tag{1.4.15}$$

[integrační konstantu fixuje požadavek $\hat{g}(0) = \hat{1}$ vyplývající z definičního vztahu (1.4.12)]. Dosazení $\xi = 1$ dá hledaný výraz

$$e^{\hat{A}} e^{\hat{B}} = e^{\hat{A} + \hat{B} + \frac{1}{2} [\hat{A}, \hat{B}]} = e^{\hat{A} + \hat{B}} e^{\frac{1}{2} [\hat{A}, \hat{B}]}, \tag{1.4.16}$$

kde poslední rovnost platí díky předpokladu $[\hat{A} + \hat{B}, [\hat{A}, \hat{B}]] = 0$. Hledaný operátor je tedy

$$\hat{D} \equiv \frac{1}{2} [\hat{A}, \hat{B}]. \tag{1.4.17}$$

5. Nejprve se dokáže platnost [pomocné formule](#)

$$\frac{d}{d\xi} e^{\hat{h}(\xi)} = \int_0^1 e^{(1-y)\hat{h}(\xi)} \hat{h}'(\xi) e^{y\hat{h}(\xi)} dy, \tag{1.4.18}$$

kde $\hat{h}(\xi)$ je libovolná operátorová funkce a $\hat{h}'(\xi)$ její derivace.² Levá strana rozvinutá v řadu (1.0.3) dá

$$\begin{aligned}
 \frac{d}{d\xi} e^{\hat{h}} &= \frac{d}{d\xi} \left(\hat{1} + \hat{h} + \frac{\hat{h}^2}{2!} + \frac{\hat{h}^3}{3!} + \dots \right) \\
 &= \hat{h}' + \frac{\hat{h}'\hat{h} + \hat{h}\hat{h}'}{2!} + \frac{\hat{h}'\hat{h}^2 + \hat{h}\hat{h}'\hat{h} + \hat{h}^2\hat{h}'}{3!} + \dots \\
 &= \sum_{n,m=0}^{\infty} \frac{\hat{h}^n \hat{h}' \hat{h}^m}{(n+m+1)!}
 \end{aligned} \tag{1.4.19}$$

a pravá strana vede po rozvinutí obou exponenciál na

$$\int_0^1 e^{(1-y)\hat{h}} \hat{h}' e^{y\hat{h}} dy = \sum_{n,m=0}^{\infty} \frac{\hat{h}^n \hat{h}' \hat{h}^m}{n!m!} \underbrace{\int_0^1 (1-y)^n y^m dy}_{\frac{n!m!}{(n+m+1)!}} = \sum_{n,m=0}^{\infty} \frac{\hat{h}^n \hat{h}' \hat{h}^m}{(n+m+1)!}. \tag{1.4.20}$$

Pomocná formule (1.4.18) je tedy splněna.

V následujícím kroku se pomocná formule (1.4.18) zleva obloží operátorem $e^{-\hat{h}}$ a následně se použije dříve dokázaný vzorec (1.4.2),

$$\begin{aligned}
 e^{-\hat{h}} \frac{d}{d\xi} e^{\hat{h}} &= \int_0^1 \underbrace{e^{-y\hat{h}} \hat{h}' e^{y\hat{h}}}_{\hat{h}' + y[\hat{h}', \hat{h}] + \frac{y^2}{2!} [[\hat{h}', \hat{h}], \hat{h}] + \dots} dy \\
 &= \hat{h}' + \frac{1}{2!} [\hat{h}', \hat{h}] + \frac{1}{3!} [[\hat{h}', \hat{h}], \hat{h}] + \dots
 \end{aligned} \tag{1.4.21}$$

²Funkce \hat{h} a její derivace \hat{h}' nemusejí komutovat, $[\hat{h}(\xi), \hat{h}'(\xi)] \neq 0$. Jako jednoduchý příklad poslouží $\hat{h}(\xi) = \hat{U} + \xi \hat{V}$, pokud $[\hat{U}, \hat{V}] \neq 0$.

Operátor \hat{F} se bude hledat ve tvaru

$$\hat{F}(\xi) = \xi \hat{F}_1 + \xi^2 \hat{F}_2 + \xi^3 \hat{F}_3 + \xi^4 \hat{F}_4 + \dots \quad (1.4.22)$$

Jednotlivé členy rozvoje se naleznou **porovnáním příspěvků stejného řádu v ξ** u obou stran rovnice

$$e^{-\xi \hat{B}} e^{-\xi \hat{A}} \frac{d}{d\xi} e^{\xi \hat{A}} e^{\xi \hat{B}} = e^{-\hat{F}(\xi)} \frac{d}{d\xi} e^{\hat{F}(\xi)}. \quad (1.4.23)$$

Levá strana dá díky vzorci (1.4.2)

$$\begin{aligned} e^{-\xi \hat{B}} e^{-\xi \hat{A}} \frac{d}{d\xi} e^{\xi \hat{A}} e^{\xi \hat{B}} &= e^{-\xi \hat{B}} \hat{B} e^{\xi \hat{B}} + e^{-\xi \hat{B}} e^{-\xi \hat{A}} \hat{A} e^{\xi \hat{A}} e^{\xi \hat{B}} \\ &= \hat{B} + e^{-\xi \hat{B}} \hat{A} e^{\xi \hat{B}} \\ &= \hat{B} + \hat{A} + \xi [\hat{A}, \hat{B}] + \frac{\xi^2}{2} [[\hat{A}, \hat{B}], \hat{B}] + \frac{\xi^3}{6} [[[\hat{A}, \hat{B}], \hat{B}], \hat{B}] + \dots \end{aligned} \quad (1.4.24)$$

Pravá strana při použití pomocné formule (1.4.21) vede na

$$\begin{aligned} e^{-\hat{F}(\xi)} \frac{d}{d\xi} e^{\hat{F}(\xi)} &= \hat{F}' + \frac{1}{2!} [\hat{F}', \hat{F}] + \frac{1}{3!} [[\hat{F}', \hat{F}], \hat{F}] + \dots \\ &= \hat{F}_1 + 2\xi \hat{F}_2 + \xi^2 \left(3\hat{F}_3 - \frac{1}{2} [\hat{F}_1, \hat{F}_2] \right) \\ &\quad + \xi^3 \left(4\hat{F}_4 - [\hat{F}_1, \hat{F}_3] + \frac{1}{6} [\hat{F}_1, [\hat{F}_1, \hat{F}_2]] \right) + O(\xi^4), \end{aligned} \quad (1.4.25)$$

neboť

$$\hat{F}' = \hat{F}_1 + 2\xi \hat{F}_2 + 3\xi^2 \hat{F}_3 + 4\xi^3 \hat{F}_4 + O(\xi^4), \quad (1.4.26a)$$

$$[\hat{F}', \hat{F}] = -\xi^2 [\hat{F}_1, \hat{F}_2] - 2\xi^3 [\hat{F}_1, \hat{F}_3] + O(\xi^4), \quad (1.4.26b)$$

$$[[\hat{F}', \hat{F}], \hat{F}] = \xi^3 [\hat{F}_1, [\hat{F}_1, \hat{F}_2]] + O(\xi^4). \quad (1.4.26c)$$

Příspěvky stejných řádů v ξ dají

$$\hat{F}_1 = \hat{A} + \hat{B}, \quad (1.4.27a)$$

$$\hat{F}_2 = \frac{1}{2} [\hat{A}, \hat{B}], \quad (1.4.27b)$$

$$\hat{F}_3 = \frac{1}{12} ([\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]] + [\hat{B}, [\hat{B}, \hat{A}]]), \quad (1.4.27c)$$

$$\hat{F}_4 = -\frac{1}{24} [\hat{A}, [\hat{B}, [\hat{A}, \hat{B}]]], \quad (1.4.27d)$$

takže do 4. řádu v operátorech \hat{A}, \hat{B} platí

$$e^{\hat{A}} e^{\hat{B}} = e^{\hat{A} + \hat{B} + \frac{1}{2} [\hat{A}, \hat{B}] + \frac{1}{12} ([\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]] + [\hat{B}, [\hat{B}, \hat{A}]]) - \frac{1}{24} [\hat{A}, [\hat{B}, [\hat{A}, \hat{B}]]] + \dots}. \quad (1.4.28)$$

Poznámka: Poslední vztah (1.4.28), a někdy i dílčí vztahy (1.4.2) se nazývají v různých zdrojích *Baker-Campbell-Hausdorffova (BCH) formule* nebo *Glauberova formule* a hrají důležitou roli v teorii grup a v kvantové mechanice v teorii koherentních stavů (koherentním stavům se věnuje kapitola 8). Metoda efektivního výpočtu koeficientů rozvoje BCH formule je popsána například v práci [7].

Poznámka: Duální vztah k BCH formuli je tzv. *Zassenhausova formule*

$$e^{\hat{A} + \hat{B}} = e^{\hat{A}} e^{\hat{B}} e^{-\frac{1}{2} [\hat{A}, \hat{B}]} e^{\frac{1}{6} ([\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]] + 2[\hat{B}, [\hat{A}, \hat{B}]])} e^{-\frac{1}{24} ([\hat{A}, [\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]]] + 3[\hat{A}, [\hat{B}, [\hat{A}, \hat{B}]]] + 3[\hat{B}, [\hat{B}, [\hat{A}, \hat{B}]]])} \dots \quad (1.4.29)$$

1.5 Posunutí souřadnice

Jsou dány dva samosdružené operátory \hat{x} , \hat{p} (souřadnice a hybnost), které splňují komutační relaci $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$, a operátor

$$\hat{T}(a) = e^{-\frac{i}{\hbar} a \hat{p}}, \quad (1.5.1)$$

kde a je libovolné reálné číslo.

1. Ukažte, že operátor $\hat{T}(a)$ je unitární.
2. Nalezněte, čemu se rovná $\hat{T}^{-1}(a) \hat{x} \hat{T}(a)$.
3. Spočítejte $\hat{T}(a)\psi(x)$, kde $\psi(x) \equiv \langle x|\psi \rangle$ je vlnová funkce v x reprezentaci.

Řešení:

1. Unitární operátor musí splňovat rovnost

$$\hat{T}^\dagger(a) \hat{T}(a) = \hat{T}(a) \hat{T}^\dagger(a) = \hat{1}. \quad (1.5.2)$$

Pro zadaný operátor (1.5.1)

$$\left(e^{-\frac{i}{\hbar} a \hat{p}}\right)^\dagger e^{-\frac{i}{\hbar} a \hat{p}} = e^{+\frac{i}{\hbar} a \hat{p}^\dagger} e^{-\frac{i}{\hbar} a \hat{p}} = e^{-\frac{i}{\hbar} a (\hat{p} - \hat{p})} = e^0 = \hat{1}, \quad (1.5.3)$$

kde se postupně využilo samosdruženosti operátoru \hat{p} a vztahu pro exponenciálu komutujících operátorů (1.4.1).

Stejným způsobem by se ukázalo, že

$$\boxed{\begin{aligned} \hat{T}^{-1}(a) &= \hat{T}^\dagger(a) = \hat{T}(-a) \\ \hat{T}(a) \hat{T}(b) &= \hat{T}(a+b) \end{aligned}}. \quad (1.5.4)$$

2. K výpočtu hledaného výrazu se vyjde z **BCH formule** (1.4.2) s operátory

$$\hat{A} \equiv \frac{i}{\hbar} a \hat{p}, \quad \hat{B} \equiv \hat{x}. \quad (1.5.5)$$

Díky tomu, že \hat{A} a \hat{B} komutují na násobek jednotkového operátoru, přispějí do BCH řady jen první dva členy

$$\hat{K}_0 = \hat{x} \quad (1.5.6a)$$

$$\hat{K}_1 = \left[\frac{i}{\hbar} a \hat{p}, \hat{x} \right] = \frac{i}{\hbar} a [\hat{p}, \hat{x}] = \frac{i}{\hbar} a (-i\hbar) = a \quad (1.5.6b)$$

$$\hat{K}_2 = \hat{K}_3 = \dots = 0, \quad (1.5.6c)$$

takže

$$\boxed{\hat{T}^{-1}(a) \hat{x} \hat{T}(a) = \hat{x} + a}. \quad (1.5.7)$$

3. Spektrum operátoru souřadnice je dáno rovnicí $\hat{x}|x\rangle = x|x\rangle$. Z výsledku předchozího bodu vyplývá

$$\hat{x} \hat{T}(a)|x\rangle = \hat{T}(a)(\hat{x} + a)|x\rangle = \hat{T}(a)(x + a)|x\rangle = (x + a) \hat{T}(a)|x\rangle. \quad (1.5.8)$$

Stav $\hat{T}(a)|x\rangle$ tedy přísluší vlastní hodnotě $x + a$ operátoru \hat{x} , je vhodné ho označit

$$\boxed{|x + a\rangle \equiv \hat{T}(a)|x\rangle}. \quad (1.5.9)$$

Obdobně

$$\langle x - a| = \langle x| \hat{T}^\dagger(-a) = \langle x| \hat{T}(a). \quad (1.5.10)$$

Z posledních dvou vztahů pak plyne

$$\hat{T}(a)\psi(x) = \langle x| \hat{T}(a) | \psi \rangle = \langle x - a | \psi \rangle = \psi(x - a). \quad (1.5.11)$$

Poznámka: Operátor $\hat{T}(a)$ se nazývá *operátor posunutí*.

1.6 Rotace operátoru momentu hybnosti

Jsou zadány samosdružené operátory $\hat{S}_1, \hat{S}_2, \hat{S}_3$, které splňují komutační relace pro moment hybnosti,

$$[\hat{S}_j, \hat{S}_k] = i\hbar\epsilon_{jkl}\hat{S}_l, \quad (1.6.1)$$

a operátor

$$\hat{R}_3(\gamma) = e^{-\frac{i}{\hbar}\gamma\hat{S}_3}, \quad (1.6.2)$$

s reálným parametrem γ . Nalezněte, čemu se rovnají výrazy

$$\hat{R}_3^{-1}(\gamma)\hat{S}_1\hat{R}_3(\gamma), \quad (1.6.3a)$$

$$\hat{R}_3^{-1}(\gamma)\hat{S}_2\hat{R}_3(\gamma). \quad (1.6.3b)$$

Řešení:

Stejně jako v předchozím příkladu 1.5 se použije **BCH formule (1.4.2)**, v níž se za operátory \hat{A}, \hat{B} dosadí

$$\hat{A} \equiv \frac{i}{\hbar}\gamma\hat{S}_3, \quad \hat{B} \equiv \hat{S}_1. \quad (1.6.4)$$

Využití komutačních relací pro složky momentu hybnosti (1.6.1) pak dá členy BCH rozvoje v následujícím tvaru:

$$\hat{K}_0 = \hat{S}_1, \quad (1.6.5a)$$

$$\hat{K}_1 = \left[\frac{i}{\hbar}\gamma\hat{S}_3, \hat{S}_1 \right] = \frac{i}{\hbar}\gamma [\hat{S}_3, \hat{S}_1] = -\gamma\hat{S}_2, \quad (1.6.5b)$$

$$\hat{K}_2 = \left[\frac{i}{\hbar}\gamma\hat{S}_3, -\gamma\hat{S}_2 \right] = -\frac{i}{\hbar}\gamma^2 [\hat{S}_3, \hat{S}_2] = -\gamma^2\hat{S}_1, \quad (1.6.5c)$$

$$\hat{K}_3 = \left[\frac{i}{\hbar}\gamma\hat{S}_3, -\gamma^2\hat{S}_1 \right] = -\frac{i}{\hbar}\gamma^3 [\hat{S}_3, \hat{S}_1] = \gamma^3\hat{S}_2, \quad (1.6.5d)$$

\vdots

$$\hat{K}_{2k} = (-1)^k \gamma^{2k} \hat{S}_1, \quad (1.6.5e)$$

$$\hat{K}_{2k+1} = -(-1)^k \gamma^{2k+1} \hat{S}_2, \quad (1.6.5f)$$

kde $n \in \mathbb{N}_0$. BCH řada má v tomto případě nekonečně mnoho členů, lze ji však rozdělit na řadu sudých a na řadu lichých příspěvků, které se dají **sečíst na goniometrické funkce**:

$$\begin{aligned} \hat{R}_3^{-1}(\gamma)\hat{S}_1\hat{R}_3(\gamma) &= \frac{1}{0!}\hat{S}_1 - \frac{1}{1!}\gamma\hat{S}_2 - \frac{1}{2!}\gamma^2\hat{S}_1 + \frac{1}{3!}\gamma^3\hat{S}_2 + \dots \\ &= \underbrace{\left[\sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{(2k)!} \gamma^{2k} \right]}_{\cos \gamma} \hat{S}_1 - \underbrace{\left[\sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{(2k+1)!} \gamma^{2k+1} \right]}_{\sin \gamma} \hat{S}_2 \\ &= \boxed{\hat{S}_1 \cos \gamma - \hat{S}_2 \sin \gamma}. \end{aligned} \quad (1.6.6)$$

Stejný postup vede v případě druhého vztahu ze zadání na

$$\boxed{\hat{R}_3^{-1}(\gamma)\hat{S}_2\hat{R}_3(\gamma) = \hat{S}_1 \sin \gamma + \hat{S}_2 \cos \gamma}. \quad (1.6.7)$$

Poznámka: Operátor $\hat{R}_3(\gamma)$ se nazývá *operátor natočení (rotace)* o úhel γ okolo osy z . Obdobným způsobem se definují operátory \hat{R}_1 a \hat{R}_2 , které popisují rotace okolo souřadných os x a y .

2 Spektrum operátorů, Pauliho matice, spin

Pauliho matice

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (2.0.1)$$

jsou unitární, hermitovské a unimodulární matice s nulovou stopou,

$$\sigma_j = \sigma_j^\dagger = \sigma_j^{-1}, \quad (2.0.2a)$$

$$\det \sigma_j = -1, \quad (2.0.2b)$$

$$\text{Tr } \sigma_j = 0, \quad (2.0.2c)$$

které splňují komutační relace

$$[\sigma_j, \sigma_k] = 2i\epsilon_{jkl}\sigma_l. \quad (2.0.3)$$

Z rovností (2.0.2) vyplývá, že všechny Pauliho matice mají dvě vlastní hodnoty $\lambda_\pm = \pm 1$. Příslušné vlastní vektory se běžně značí

$$|x-\rangle \equiv |\leftarrow\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}, \quad |x+\rangle \equiv |\rightarrow\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (2.0.4a)$$

$$|y-\rangle \equiv |\odot\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix}, \quad |y+\rangle \equiv |\otimes\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}, \quad (2.0.4b)$$

$$|z-\rangle \equiv |\downarrow\rangle \equiv |-\rangle \equiv \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad |z+\rangle \equiv |\uparrow\rangle \equiv |+\rangle \equiv \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (2.0.4c)$$

(první sloupec odpovídá záporným vlastním hodnotám $\lambda_- = -1$, druhý sloupec záporným vlastním hodnotám $\lambda_+ = +1$; j -tý řádek odpovídá matici σ_j).

Operátor spinu $\frac{1}{2}$

Operátor spinu $\frac{1}{2}$ (qbitu) se vyjadřuje pomocí Pauliho matic

$$\hat{\mathbf{s}}_j = \frac{\hbar}{2}\sigma_j. \quad (2.0.5)$$

Tento operátor splňuje díky vztahu (2.0.3) komutační relace pro moment hybnosti

$$[\hat{\mathbf{s}}_j, \hat{\mathbf{s}}_k] = i\hbar\epsilon_{jkl}\hat{\mathbf{s}}_l. \quad (2.0.6)$$

Jeho vlastní hodnoty jsou $s_\pm = \pm\hbar/2$. Vlastní vektory operátorů $\hat{\mathbf{s}}_1$, $\hat{\mathbf{s}}_2$ či $\hat{\mathbf{s}}_3$ odpovídají spinovému (dvouhladinovému) systému polarizovanému podél osy x , y či z (více v příkladu 2.3).

Kvaterniony

Pauliho matice úzce souvisejí s kvaterniony $q = ai + bj + ck + d \in \mathbb{H}$: imaginární jednotky i, j, k kvaternionů splňující

$$i^2 = j^2 = k^2 = ijk = -1, \quad (2.0.7a)$$

$$ij = k, \quad jk = i, \quad ki = j \quad (2.0.7b)$$

lze namapovat na Pauliho matice vztahy

$$i \leftrightarrow -i\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ -i & 0 \end{pmatrix}, \quad j \leftrightarrow -i\sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad k \leftrightarrow -i\sigma_3 = \begin{pmatrix} -i & 0 \\ 0 & i \end{pmatrix}. \quad (2.0.8)$$

Kvaternion se pak dá zapsat jako komplexní matice

$$q = \begin{pmatrix} d - ic & -b - ia \\ b - ia & d + ic \end{pmatrix}. \quad (2.0.9)$$

Algebru kvaternionů lze tedy převést na algebru komplexních matic 2×2 , což souvisí s isomorfismem Lieových algeber $u(1, \mathbb{H}) \simeq su(2, \mathbb{C})$.

2.1 Spin mřící do obecného směru

Na jednotkové kouli (tzv. *Blochově sfěře*) je zadán jednotkový vektor

$$\mathbf{n} = (n_1, n_2, n_3) = (\sin \theta \cos \phi, \sin \theta \sin \phi, \cos \theta), \quad |\mathbf{n}| = 1, \theta \in [0, \pi], \phi \in [0, 2\pi) \quad (2.1.1)$$

mřící do obecného směru daného sférickými úhly (θ, ϕ) .

1. V souřadnicích (n_1, n_2, n_3) a (θ, ϕ) vyjádřete matici $\sigma_{\mathbf{n}} \equiv \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}$, kde $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3)$ je tzv. *Pauliho vektor*.
2. Určete vlastní hodnoty a vlastní vektory matice $\sigma_{\mathbf{n}}$.
3. Napište maticové vyjádření projektorů $\hat{P}_{\mathbf{n}\pm}$ na podprostory odpovídající vlastním hodnotám $\sigma_{\mathbf{n}\pm}$ matice $\sigma_{\mathbf{n}}$ a ověřte, že se skutečně jedná o projektory.
4. Dokažte, že platí

$$\boxed{P_{\mathbf{n}\pm} = \frac{1}{2} (1 \pm \sigma_{\mathbf{n}})}. \quad (2.1.2)$$

Řešení:

1. Spinová matice vyjádřená v kartézských souřadnicích:

$$\sigma_{\mathbf{n}} = n_1 \sigma_1 + n_2 \sigma_2 + n_3 \sigma_3 = \begin{pmatrix} n_3 & n_1 - in_2 \\ n_1 + in_2 & -n_3 \end{pmatrix} \quad (2.1.3)$$

a ve sférických souřadnicích:

$$\sigma_{\mathbf{n}} = \begin{pmatrix} \cos \theta & e^{-i\phi} \sin \theta \\ e^{i\phi} \sin \theta & -\cos \theta \end{pmatrix}. \quad (2.1.4)$$

2. Vlastní hodnoty spinové matice získané diagonalizací:

$$\begin{aligned} \sigma_{\mathbf{n}} |\mathbf{n}\pm\rangle &= \sigma_{\mathbf{n}\pm} |\mathbf{n}\pm\rangle \\ \det \begin{pmatrix} \cos \theta - \sigma_{\mathbf{n}\pm} & e^{-i\phi} \sin \theta \\ e^{i\phi} \sin \theta & -\cos \theta - \sigma_{\mathbf{n}\pm} \end{pmatrix} &= 0 \\ -(\cos \theta - \sigma_{\mathbf{n}\pm})(\cos \theta + \sigma_{\mathbf{n}\pm}) - \sin^2 \theta &= 0 \\ \sigma_{\mathbf{n}\pm}^2 - \cos^2 \theta - \sin^2 \theta &= 0 \\ \sigma_{\mathbf{n}\pm} &= \pm 1. \end{aligned} \quad (2.1.5)$$

Vlastní vektor příslušející $\lambda = 1$:

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} \cos \theta & e^{-i\phi} \sin \theta \\ e^{i\phi} \sin \theta & -\cos \theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} &= + \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} \\ x e^{i\phi} \sin \theta &= y (\cos \theta + 1) \\ x &= y \frac{\cos \theta + 1}{\sin \theta} e^{-i\phi} \end{aligned} \quad (2.1.6)$$

a jeho normalizace

$$\begin{aligned}
 1 &= xx^* + yy^* \\
 &= |y|^2 \left[\frac{\cos^2 \theta + 2 \cos \theta + 1}{\sin^2 \theta} + 1 \right] \\
 &= |y|^2 \frac{2 \cos \theta + 2}{(1 - \cos^2 \theta)} \\
 &= |y|^2 \frac{2}{1 - \cos \theta} = \\
 &= |y|^2 \frac{1}{\sin^2 \frac{\theta}{2}}.
 \end{aligned} \tag{2.1.7}$$

Fázi lze volit libovolně. Konkrétní volba s reálnou y -ovou složkou odpovídá

$$y = \sin \frac{\theta}{2}, \tag{2.1.8a}$$

$$x = \sin \frac{\theta}{2} \cotg \frac{\theta}{2} e^{-i\phi} = e^{-i\phi} \cos \frac{\theta}{2}, \tag{2.1.8b}$$

takže vlastní vektor odpovídající vlastní hodnotě $\lambda = 1$ je

$$|n+\rangle = \begin{pmatrix} e^{-i\phi} \cos \frac{\theta}{2} \\ \sin \frac{\theta}{2} \end{pmatrix}. \tag{2.1.9}$$

Obdobně se získá i vlastní vektor k vlastní hodnotě $\lambda = -1$:

$$|n-\rangle = \begin{pmatrix} -e^{-i\phi} \sin \frac{\theta}{2} \\ \cos \frac{\theta}{2} \end{pmatrix}. \tag{2.1.10}$$

3. Z definice projektoru plyne po dosazení vlastních vektorů

$$\begin{aligned}
 \hat{P}_{n+} &\equiv |n+\rangle \langle n+| \\
 &= \begin{pmatrix} e^{-i\phi} \cos \frac{\theta}{2} \\ \sin \frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{i\phi} \cos \frac{\theta}{2} & \sin \frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \\
 &= \begin{pmatrix} \cos^2 \frac{\theta}{2} & e^{-i\phi} \sin \frac{\theta}{2} \cos \frac{\theta}{2} \\ e^{i\phi} \sin \frac{\theta}{2} \cos \frac{\theta}{2} & \sin^2 \frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \\
 &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + \cos \theta & e^{-i\phi} \sin \theta \\ e^{i\phi} \sin \theta & 1 - \cos \theta \end{pmatrix}
 \end{aligned} \tag{2.1.11}$$

$$\hat{P}_{n-} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 - \cos \theta & -e^{-i\phi} \sin \theta \\ -e^{i\phi} \sin \theta & 1 + \cos \theta \end{pmatrix} \tag{2.1.12}$$

Skutečnost, že se jedná o projektory, se dokáže ze [vztahu úplnosti](#)

$$\hat{P}_{n+} + \hat{P}_{n-} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix} = 1 \tag{2.1.13}$$

a z vlastnosti [kvadrátu projektoru](#)

$$\hat{P}_{n+}^2 = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1 + \cos \theta & e^{-i\phi} \sin \theta \\ e^{i\phi} \sin \theta & 1 - \cos \theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 + \cos \theta & e^{-i\phi} \sin \theta \\ e^{i\phi} \sin \theta & 1 - \cos \theta \end{pmatrix} = \hat{P}_{n+}, \tag{2.1.14a}$$

$$\hat{P}_{n-}^2 = \hat{P}_{n-}. \tag{2.1.14b}$$

4. Vztah (2.1.2) mezi projektory a spinovou maticí vyplývá z porovnání projektorů (2.1.11) a (2.1.12) s explicitním vyjádřením matice (2.1.4).

2.2 Exponenciála Pauliho vektoru

Dokažte, že

$$e^{i\alpha(\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma})} = 1 \cos \alpha + i (\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}) \sin \alpha, \quad (2.2.1)$$

kde α je reálný parametr.

Řešení:

Dokazovaný vztah (2.2.1) nabízí rozvést exponenciálu na levé straně do řady (1.0.3). V řadě se budou kromě číselných koeficientů vyskytovat celočíselné mocniny spinové matice $\sigma_{\mathbf{n}}^k = (\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma})^k$, $k \in \mathbb{N}_0$. Druhá mocnina $k = 2$ je rovna jednotkové matici,

$$\begin{aligned} (\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma})^2 &= \begin{pmatrix} \cos \theta & e^{-i\phi} \sin \theta \\ e^{i\phi} \sin \theta & -\cos \theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \theta & e^{-i\phi} \sin \theta \\ e^{i\phi} \sin \theta & -\cos \theta \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \cos^2 \theta + \sin^2 \theta & 0 \\ 0 & \cos^2 \theta + \sin^2 \theta \end{pmatrix} \\ &= 1, \end{aligned} \quad (2.2.2)$$

z čehož indukci vyplývá, že

$$(\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma})^{2n} = 1, \quad (\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma})^{2n+1} = \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}. \quad (2.2.3)$$

Rozvoj exponenciály se rozpadne na sudé a liché členy (podobně jako v příkladu 1.6), které se vysčítají na goniometrické funkce cosinus a sinus,

$$\begin{aligned} e^{i\alpha(\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma})} &= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{i^k}{k!} \alpha^k (\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma})^k \\ &= 1 \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{(2k)!} \alpha^{2k} + i (\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}) \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{(2k+1)!} \alpha^{2k+1} \\ &= 1 \cos \alpha + i (\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}) \sin \alpha. \end{aligned} \quad (2.2.4)$$

Vztah (2.2.1) je tímto dokázán.

Poznámka: Důkaz lze provést i na základě vyjádření funkce operátoru pomocí spektrálního rozkladu (1.0.5). To je v obecnosti provedeno v následujícím příkladu 2.3.

2.3 Funkce Pauliho vektoru

Dokažte, že pro funkci definovanou v bodech $\pm\alpha$ platí

$$f(\alpha \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}) = \frac{f(\alpha) + f(-\alpha)}{2} + \frac{f(\alpha) - f(-\alpha)}{2} \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}. \quad (2.3.1)$$

Poznámka: Pro $f \equiv \exp$ dostaneme výsledek z předchozího příkladu.

Řešení:

V příkladu 2.1 bylo ukázáno, že vlastní hodnoty operátoru $\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}$ jsou ± 1 , z čehož vyplývá, že spektrální rozklad operátoru v argumentu funkce je

$$\alpha \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma} = \alpha \hat{P}_{n+} - \alpha \hat{P}_{n-}, \quad (2.3.2)$$

kde $\hat{P}_{n\pm}$ jsou projekční operátory na charakteristické podprostory příslušných vlastních hodnot $\sigma_{n\pm} = \pm 1$. Podle definice funkce operátoru pomocí spektrálního rozkladu (1.0.5) platí

$$f(\alpha \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}) = f(\alpha) \hat{P}_{n+} + f(-\alpha) \hat{P}_{n-}. \quad (2.3.3)$$

Dosazení vyjádření projekčních operátorů pomocí spinové matice $\sigma_n = \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}$ dané vztahem (2.1.2) vede na

$$\begin{aligned} f(\alpha \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}) &= f(\alpha) \left(\frac{1}{2} + \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma} \right) + f(-\alpha) \left(\frac{1}{2} - \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma} \right) \\ &= \frac{f(\alpha) + f(-\alpha)}{2} + \frac{f(\alpha) - f(-\alpha)}{2} \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}. \end{aligned} \quad (2.3.4)$$

Tím je důkaz hotov.

2.4 Nekřížení hladin — dvouhladinový systém

Hamiltonián popisující dvouhladinový systém je zadán reálnou maticí

$$H_0 = \begin{pmatrix} e & 0 \\ 0 & -e \end{pmatrix} = e\sigma_3, \quad (2.4.1)$$

jejíž vlastní čísla jsou $\pm e \in \mathbb{R}$ a odpovídající normalizované vlastní vektory

$$|e_+\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |e_-\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (2.4.2)$$

K matici H_0 je přidána interakce ve tvaru

$$H_I = \begin{pmatrix} 0 & v \\ v & 0 \end{pmatrix} = v\sigma_1, \quad (2.4.3)$$

kde $v, w \in \mathbb{R}$.

1. Spočítejte vlastní hodnoty E_+, E_- ($E_- \leq E_+$) a odpovídající *normalizované* vlastní vektory $|E_+\rangle, |E_-\rangle$ systému popsaného maticí $H = H_0 + H_I$.
2. Zakreslete závislost energetických hladin E_\pm na parametru v a určete vlastní vektory $|E_\pm(v)\rangle$ pro (a) $v = 0$, (b) $v \rightarrow \pm\infty$.
3. Zakreslete závislost energetických hladin E_\pm na parametru e a určete vlastní vektory $|E_\pm(e)\rangle$ pro (a) $e = 0$, (b) $e \rightarrow \pm\infty$. Uvažujte dva podpřípady: (a) $v = 0$ (křížení hladin) a (b) $v \neq 0$ (hladiny se nekříží).

Poznámka: Vzhledem ke tvaru Hamiltoniánu by závislosti $|E_\pm(v)\rangle$ a $|E_\pm(e)\rangle$ měly být hladké funkce.

Řešení:

1. Spektrum matice H se spočítá z charakteristické rovnice

$$\det \begin{pmatrix} e - E & v \\ v & -e - E \end{pmatrix} = (E - e)(E + e) - v^2 = 0, \quad (2.4.4)$$

jejíž řešení jsou

$$E_\pm = \pm \sqrt{e^2 + v^2}. \quad (2.4.5)$$

Odpovídající normalizované vlastní vektory lze vyjádřit ve tvaru

$$|E_-\rangle = \alpha \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \beta \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}, \quad (2.4.6a)$$

$$|E_+\rangle = \beta \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} - \alpha \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \beta \\ -\alpha \end{pmatrix}, \quad (2.4.6b)$$

$$|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1, \quad (2.4.6c)$$

kde

$$\alpha = \frac{\xi}{\sqrt{\xi^2 + \left(1 + \sqrt{\xi^2 + 1}\right)^2}}, \quad \beta = \frac{1 + \sqrt{\xi^2 + 1}}{\sqrt{\xi^2 + \left(1 + \sqrt{\xi^2 + 1}\right)^2}}, \quad \xi = \frac{v}{e}, \quad (2.4.7a)$$

$$\alpha = \frac{1}{\sqrt{1 + \left(\eta + \sqrt{1 + \eta^2}\right)^2}}, \quad \beta = \frac{\eta + \sqrt{1 + \eta^2}}{\sqrt{1 + \left(\eta + \sqrt{1 + \eta^2}\right)^2}}, \quad \eta = \frac{e}{v} \quad (2.4.7b)$$

(ξ a η jsou bezrozměrné parametry definované na základě zadaných parametrů v a e).³

2. Funkční závislost energetických hladin E_{\pm} je zcela identická jak pro parametr e (η), tak pro parametr v (ξ). Limitní hodnoty komponent vlastních vektorů jsou podle vztahu (2.4.7b)

$$\alpha(\xi \rightarrow \pm\infty) = \pm \frac{1}{\sqrt{2}}, \quad \alpha(\xi = 0) = 0, \quad (2.4.10a)$$

$$\beta(\xi \rightarrow \pm\infty) = \pm \frac{1}{\sqrt{2}}, \quad \beta(\xi = 0) = 1 \quad (2.4.10b)$$

a jsou znázorněny na obrázku 1(a). Dynamika hladin a limitní tvar vlastních vektorů jsou znázorněny na obrázku 2(a). Vlastní vektory $|E_{-}\rangle$ a $|E_{+}\rangle$ se prohodí při přechodu ξ od $-\infty$ k $+\infty$, zatímco energetické hladiny se nepřekříží. Jeden z vektorů navíc získá dodatečnou fázi -1 .

3. Pro proměnnou vzdálenost počátečních hladin e a konstantní v platí podle vztahu (2.4.7a) za předpokladu $v \neq 0$

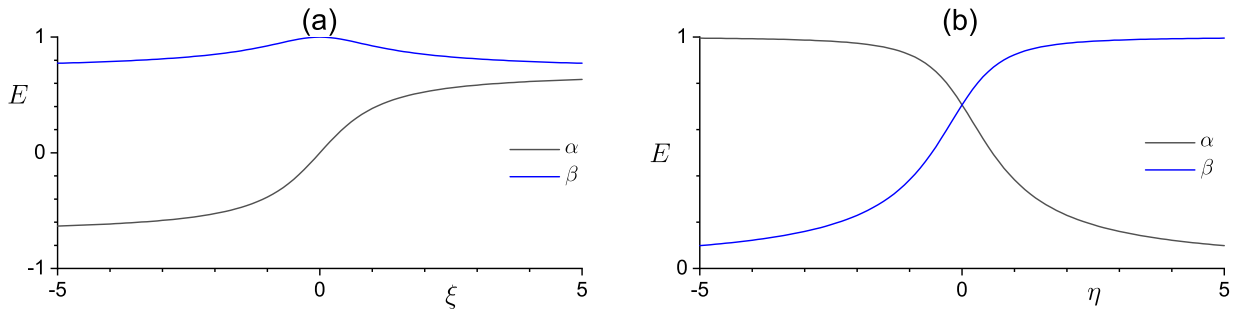
$$\alpha(\eta \rightarrow -\infty) = \beta(\eta \rightarrow +\infty) = 1, \quad (2.4.11a)$$

$$\alpha(\eta \rightarrow +\infty) = \beta(\eta \rightarrow -\infty) = -1, \quad (2.4.11b)$$

$$\alpha(\eta = 0) = \beta(\eta = 0) = \frac{1}{\sqrt{2}} \quad (2.4.11c)$$

[zakresleno v obrázku 1(b)]. Opět tedy dojde k výměně vlastních vektorů při přechodu od jedné limitní hodnoty k druhé a k objevení se dodatečné fáze -1 při nekřížení energetických hladin.

Pokud je naopak $v = 0$, hladiny se v bodě $e = \eta = 0$ protnou. Vše je znázorněno na obrázku 2(b).



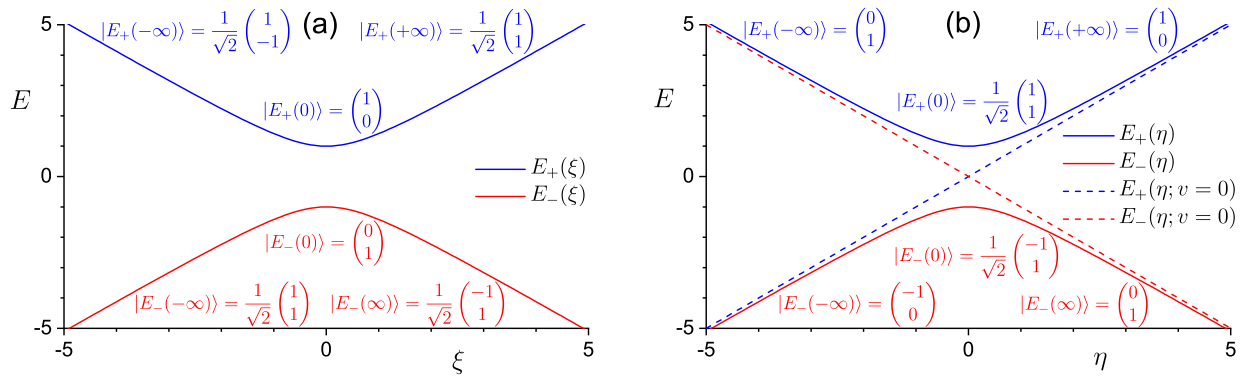
Obrázek 1: Dynamika komponent vlastních vektorů pro dvouhladinový systém (a) s proměnnou mimo-diagonální interakcí [rovnice (2.4.7a)], (b) s proměnnou vzdáleností neporušených hladin na diagonále [rovnice (2.4.7b)].

³Vlastní vektory lze také vyjádřit ve tvaru

$$|E_{-}\rangle = \begin{pmatrix} \cos \phi \\ \sin \phi \end{pmatrix}, \quad |E_{+}\rangle = \begin{pmatrix} \sin \phi \\ -\cos \phi \end{pmatrix}, \quad (2.4.8)$$

kde

$$\phi = \frac{1}{2} \arctan \frac{v}{e}. \quad (2.4.9)$$



Obrázek 2: Dynamika hladin pro dvouhladinový systém (a) s proměnnou mimodiagonální interakcí, (b) s proměnnou vzdáleností neporušených hladin na diagonále.

2.5 Kvantový oblak

1. Spočítejte vlastní hodnoty $E_{1,2,3}$ a vlastní vektory $|E_{1,2,3}\rangle$ systému popsaného Hamiltoniánem

$$H = H_0 + V, \quad \text{kde} \quad H_0 = \begin{pmatrix} e & 0 & 0 \\ 0 & e & 0 \\ 0 & 0 & e \end{pmatrix}, \quad V = \begin{pmatrix} 0 & v & v \\ v & 0 & v \\ v & v & 0 \end{pmatrix} \quad (2.5.1)$$

a načrtněte graf $E_{1,2,3}(v)$.

2. *Zobecnění předchozího případu:* Určete vlastní hodnoty a normalizované ortogonální vlastní vektory Hamiltoniánu H' obecné dimenze N ,

$$H = \begin{pmatrix} e & v & v & v & & \\ v & e & v & v & & \\ v & v & e & v & \dots & \\ v & v & v & e & & \\ & \vdots & & & \ddots & \end{pmatrix}. \quad (2.5.2)$$

Tento Hamiltonián popisuje například částici na mřížce o N pozicích, přičemž částice může přeskočit na libovolnou pozici mřížky a žádná pozice není upřednostněna.

2.6 Kvantový řetízek

Určete vlastní hodnoty a normalizované vlastní vektory Hamiltoniánu dimenze N ve tvaru tridiagonální matice

$$H = \begin{pmatrix} e & v & 0 & 0 & & \\ v & e & v & 0 & & \\ 0 & v & e & v & \dots & \\ 0 & 0 & v & e & & \\ & \vdots & & & \ddots & \end{pmatrix}. \quad (2.6.1)$$

Jak se bude měnit energetické spektrum s rostoucím N ?

Nápověda: V charakteristické rovnici identifikujte diferenční rovnici pro složky $c_k, k = 1, \dots, n$ vlastních vektorů a řešte ji pomocí násady $c_k = u^k$.

Poznámka: Tento Hamiltonián popisuje například částici na řetízku délky N , která smí „přeskočit“ jen na sousední pozice:

$$\hat{H} = e \sum_{k=1}^N |k\rangle \langle k| + v \sum_{n=1}^{N-1} (|k\rangle \langle k+1| + |k+1\rangle \langle k|), \quad (2.6.2)$$

kde $\{|k\rangle, k = 1, \dots, N\}$ je ortonormální báze. V případě, kdy N je velké, se jedná o jednoduchý model jednorozměrného krystalu.

3 Vícečásticové systémy

3.1 Dvě částice se spinem $\frac{1}{2}$

Studovaný systém se skládá ze dvou rozlišitelných částic se spinem $\frac{1}{2}$. Měřitelné veličině A odpovídá operátor

$$\hat{A} = \frac{\omega}{\hbar} (\hat{S}_1^2 - \hat{S}_2^2), \quad (3.1.1)$$

kde \hat{S}_j je j -tá složka operátoru celkového spinu⁴

$$\hat{S}_j = \frac{\hbar}{2} \left[\sigma_j^{(1)} \otimes \mathbf{1}^{(2)} + \mathbf{1}^{(1)} \otimes \sigma_j^{(2)} \right] \quad (3.1.3)$$

a σ_j jsou Pauliho matice. Horní index v závorce značí, zda operátor působí na Hilbertově prostoru $\mathcal{H}^{(1)}$ první, resp. $\mathcal{H}^{(2)}$ druhé částice, dolní index udává složku v kartézském prostoru.

1. Nalezněte všechny hodnoty, které lze pozorovat při měření veličiny A .
2. Jaká je pravděpodobnost nalezení jednotlivých hodnot a jaký bude stav systému po měření, pokud byl před měřením připraven ve stavu

$$|\psi\rangle = |x+\rangle^{(1)} \otimes |x+\rangle^{(2)} ? \quad (3.1.4)$$

3. Ukažte, že stav

$$|\psi'\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[|x+\rangle^{(1)} \otimes |x-\rangle^{(2)} - |x-\rangle^{(1)} \otimes |x+\rangle^{(2)} \right] \quad (3.1.5)$$

je provázaný (nelze ho faktorizovat) a nalezněte pravděpodobnost naměření vlastních hodnot operátoru \hat{A} , je-li systém před měřením připraven v tomto stavu.

⁴Obvykle se používá jednodušší zápis

$$\hat{S}_j = \frac{\hbar}{2} (\sigma_j^{(1)} + \sigma_j^{(2)}), \quad (3.1.2)$$

kterému je však vždy potřeba rozumět ve smyslu rovnice (3.1.3). Viz též kapitola 6.

Řešení:

1. První část úlohy vede na hledání spektra operátoru \hat{A} . V první řadě je potřeba vyjádřit si operátor celkového spinu $\hat{\mathbf{S}}$. Jednotlivé jeho složky jsou dány maticemi

$$\begin{aligned} S_1 &= \frac{\hbar}{2} \left[\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \right] \\ &= \frac{\hbar}{2} \left[\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \right] \\ &= \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \end{pmatrix} \\ &= \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (3.1.6a)$$

$$S_2 = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i & -i & 0 \\ i & 0 & 0 & -i \\ i & 0 & 0 & -i \\ 0 & i & i & 0 \end{pmatrix}, \quad (3.1.6b)$$

$$S_3 = \hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (3.1.6c)$$

jejich kvadráty jsou

$$S_1^2 = \frac{\hbar^2}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad S_2^2 = \frac{\hbar^2}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad S_3^2 = \hbar^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (3.1.7)$$

a maticové vyjádření operátoru \hat{A} má tudíž tvar

$$A = \hbar\omega \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.1.8)$$

Vlastní čísla a této matice se určí diagonalizací

$$\det(A - a1) = \det \begin{pmatrix} -a & 0 & 0 & \hbar\omega \\ 0 & -a & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -a & 0 \\ \hbar\omega & 0 & 0 & -a \end{pmatrix} = a^2 [a^2 - (\hbar\omega)^2] = 0. \quad (3.1.9)$$

Operátor \hat{A} má tedy tři různé vlastní hodnoty, přičemž jedna je dvojnásobně degenerovaná:

$$a_{1,2} = 0, \quad a_3 = \hbar\omega, \quad a_4 = -\hbar\omega. \quad (3.1.10)$$

Odpovídající vlastní vektory příslušející degenerované vlastní hodnotě $a_{1,2} = 0$ musejí ležet v dvourozměrném charakteristickém podprostoru a musejí být ortonormální, jinak je lze zvolit

libovolně, například⁵

$$|a_1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |a_2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (3.1.12)$$

Normalizované vlastní vektory příslušející zbývajícím dvěma vlastním hodnotám jsou určeny (až na komplexní fázi) jednoznačně:

$$|a_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad |a_4\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}. \quad (3.1.13)$$

2. Dvourozměrné Hilbertovy prostory jednotlivých spinů $\mathcal{H}^{(1)}$ a $\mathcal{H}^{(2)}$ jsou realizovány pomocí báze dané vlastními vektory třetí Pauliho matice, viz (2.0.4). Hilbertův prostor celého systému $\mathcal{H} = \mathcal{H}^{(1)} \otimes \mathcal{H}^{(2)}$ je čtyřrozměrný a za jeho bázi lze volit $\mathcal{B} = \{|\uparrow\uparrow\rangle, |\uparrow\downarrow\rangle, |\downarrow\uparrow\rangle, |\downarrow\downarrow\rangle\}$.⁶ V ní se vektor $|\psi\rangle$ vyjádří jako

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \otimes \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (3.1.15)$$

Pravděpodobnosti naměření jednotlivých hodnot pozorovatelné veličiny A pak vycházejí

$$p_{a_{1,2}} = |\langle\phi_1|\psi\rangle|^2 + |\langle\phi_2|\psi\rangle|^2 = \frac{1}{4} + \frac{1}{4} = \frac{1}{2}, \quad (3.1.16a)$$

$$p_{a_3} = |\langle\phi_3|\psi\rangle|^2 = \frac{1}{2}, \quad (3.1.16b)$$

$$p_{a_4} = |\langle\phi_4|\psi\rangle|^2 = 0. \quad (3.1.16c)$$

Kontrolou je, že celková pravděpodobnost se sečte na 1, což znamená, že s jistotou naměříme aspoň jednu z uvedených vlastních hodnot.

Stav systému po naměření hodnot a_3 , resp. a_4 bude dán vlastními vektory $|a_3\rangle$, resp. $|a_4\rangle$. Po naměření dvojnásobně degenerované vlastní hodnoty $a_{1,2}$ bude systém ve stavu daném libovolnou lineární kombinací vektorů $|a_1\rangle$ a $|a_2\rangle$.

3. Vektor $|\psi'\rangle$ vyjádřený v bázi \mathcal{B} (3.1.14) je

$$\begin{aligned} |\psi'\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \otimes \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} - \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \otimes \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \right] \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix} - \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ -1 \\ -1 \end{pmatrix} \right] = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ -1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (3.1.17)$$

⁵Jiná rovnocenná volba může být

$$|a'_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |a'_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (3.1.11)$$

⁶Jedná se o zjednodušený zápis $|\uparrow\uparrow\rangle \equiv |\uparrow\rangle^{(1)} \otimes |\uparrow\rangle^{(2)}$ a analogicky u zbylých tří vektorů. Vektory báze mají sloupcové vyjádření

$$|\uparrow\uparrow\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |\uparrow\downarrow\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |\downarrow\uparrow\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |\downarrow\downarrow\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (3.1.14)$$

To znamená, že vektor $|\uparrow\uparrow\rangle$ odpovídá situaci, kdy oba spiny míří ve směru osy z , vektor $|\uparrow\downarrow\rangle$ popisuje stav, kdy první spin míří ve směru osy z , zatímco druhý proti, atd.

Faktorizovatelný vektor systému složeného ze dvou dvourozměrných podsystémů musí být obecně možné zapsat jako

$$\begin{aligned}
 |\psi'\rangle &= |\phi_1\rangle^{(1)} \otimes |\phi_2\rangle^{(2)} \\
 &= \left(\alpha |\uparrow\rangle^{(1)} + \beta |\downarrow\rangle^{(1)} \right) \otimes \left(\gamma |\uparrow\rangle^{(2)} + \delta |\downarrow\rangle^{(2)} \right) \\
 &= \alpha\gamma |\uparrow\uparrow\rangle + \alpha\delta |\uparrow\downarrow\rangle + \beta\gamma |\downarrow\uparrow\rangle + \beta\delta |\downarrow\downarrow\rangle \\
 &= a |\uparrow\uparrow\rangle + b |\uparrow\downarrow\rangle + c |\downarrow\uparrow\rangle + d |\downarrow\downarrow\rangle,
 \end{aligned} \tag{3.1.18}$$

kde $\alpha, \beta, \gamma, \delta$, resp. a, b, c, d jsou komplexní čísla. Z posledních dvou řádků vyplývá podmínka faktorizovatelnosti stavu:

$$ad - bc = 0. \tag{3.1.19}$$

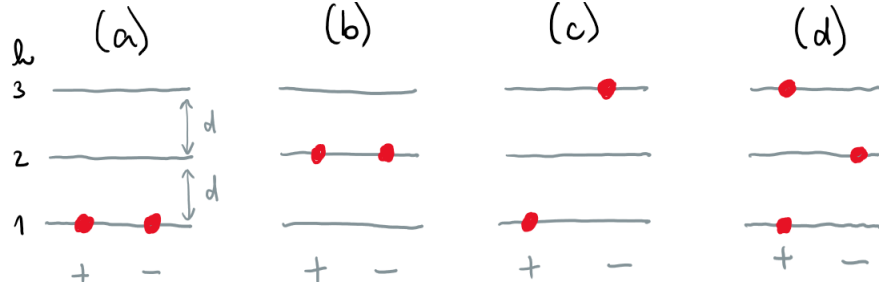
V případě stavu $|\psi'\rangle$ je $a = 0, b = -1/\sqrt{2}, c = 1/\sqrt{2}, d = 0$ a podmínka (3.1.19) splněna není. Stav je tedy provázaný (entanglovaný).

Pravděpodobnosti naměření jednotlivých vlastních hodnot operátoru \hat{A} , je-li systém ve stavu $|\psi'\rangle$, jsou

$$p_{a_{1,2}} = 1, \quad p_{a_3} = p_{a_4} = 0. \tag{3.1.20}$$

3.2 Trojhladinový systém

Uvažujte jednoduchý trojhladinový systém, kde index hladiny je $h = 1, 2, 3$, první hladina má energii d a vzdálenost mezi sousedními hladinami je také d (jednočásticové spektrum je ekvidistantní). Na každé hladině se můžou nacházet nanejvýš dvě částice (každá hladina je dvojnásobně degenerovaná). Jednočásticové stavové vektory jsou $|h\sigma\rangle$, kde $\sigma = \pm$.



Obrázek 3: Příklady několika možných vícečásticových konfigurací v trojhladinovém systému.

1. Kolik odlišných dvoučásticových stavových vektorů (Slaterových determinantů) lze zkonstruovat?
2. Předpokládejte, že v systému jsou pouze dvě částice, které se mohou nacházet výhradně v páru na jedné z nejnižších dvou hladin $h = 1$ a $h = 2$ [obrázek 3 (a)–(b)] a že jeho Hamiltonián má tvar

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_I, \tag{3.2.1}$$

přičemž jednočásticová část Hamiltoniánu splňuje

$$\hat{h}_0 |h\sigma\rangle = hd |h\sigma\rangle. \tag{3.2.2}$$

Dvoučásticové maticové elementy Hamiltoniánu \hat{H}_I mají všechny stejnou hodnotu g . Jak vypadá matice Hamiltoniánu \hat{H} ?

3. Jaké jsou vlastní hodnoty a vlastní vektory matice H ?
4. Jaký je překryv stavu odpovídajícího nižšímu vlastnímu stavu Hamiltoniánu \hat{H} s dvoučásticovým stavem popisujícím dvě částice na hladině $p = 2$?⁷

⁷Někdy se také říká, že se jedná o *příměs* stavu $|\psi_2\rangle$ k základnímu stavu.

5. Přidejte nyní třetí hladinu, přičemž předpokládejte stále, že se částice mohou nacházet pouze v párech.

Řešení:

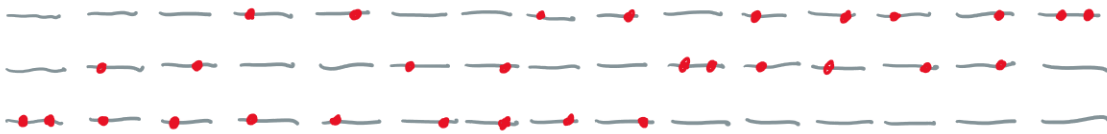
1. Počty vícečásticových stavů lze určit obecně pro systém n částic s H hladinami. Celkový počet pozic, na které můžeme částice umístit, je $P = 2H$ (počet hladin krát počet částic, které lze umístit na jednu hladinu). Počet n -částicových funkcí je pak dán počtem všech možných kombinací n částic na P pozicích, tj.

$$N = \binom{2H}{n}. \quad (3.2.3)$$

Konkrétně pro $H = 3$ a $n = 2$ vychází

$$N = 15. \quad (3.2.4)$$

Všechny 15 možných konfigurací je znázorněno na obrázku 4.



Obrázek 4: Všechny možné dvoučásticové konfigurace v tříhladinovém systému.

2. Podprostor uvažovaných dvoučásticových stavů ($n = 2$) je dvourozměrný a stavy jsou dány Slaterovými determinanty⁸

$$|\psi_j\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} \det \begin{pmatrix} |j+\rangle & |j+\rangle \\ |j-\rangle & |j-\rangle \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{cases} |\psi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|1+\rangle |1-\rangle - |1-\rangle |1+\rangle), \\ |\psi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|2+\rangle |2-\rangle - |2-\rangle |2+\rangle). \end{cases} \quad (3.2.6)$$

Tyto stavy jsou normalizované a na sebe kolmé.

Dvoučásticový volný Hamiltonián je

$$\hat{H}_0 = \hat{h}_0^{(1)} + \hat{h}_0^{(2)} = \hat{h}_0 \otimes \hat{1} + \hat{1} \otimes \hat{h}_0 \quad (3.2.7)$$

a pro jeho maticové elementy v bázi dané vektory (3.2.6) platí

$$\begin{aligned} \langle \psi_j | \hat{H}_0 | \psi_k \rangle &= \frac{1}{2} (\langle j+ | \langle j- | - \langle j- | \langle j+ |) \hat{H}_0 (|k+ \rangle |k- \rangle - |k- \rangle |k+ \rangle) \\ &= \frac{1}{2} \left(\underbrace{\langle j+ | \hat{h}_0 | k+ \rangle}_{jd \delta_{jk}} \underbrace{\langle j- | k- \rangle}_{\delta_{jk}} + \underbrace{\langle j+ | k+ \rangle}_{\delta_{jk}} \underbrace{\langle j- | \hat{h}_0 | k- \rangle}_{jd \delta_{jk}} \right. \\ &\quad \left. - \underbrace{\langle j+ | \hat{h}_0 | k- \rangle}_0 \underbrace{\langle j- | k+ \rangle}_0 - \underbrace{\langle j+ | k- \rangle}_{0 \dots} \underbrace{\langle j- | \hat{h}_0 | k+ \rangle}_0 \right. \\ &\quad \left. - \langle j- | \hat{h}_0 | k+ \rangle \langle j+ | k- \rangle - \langle j- | k+ \rangle \langle j+ | \hat{h}_0 | k- \rangle \right. \\ &\quad \left. + \langle j- | \hat{h}_0 | k- \rangle \langle j+ | k+ \rangle + \langle j- | k- \rangle \langle j+ | \hat{h}_0 | k+ \rangle \right) \\ &= \frac{1}{2} (jd + jd + jd + jd) \delta_{jk} = 2jd \delta_{jk}, \end{aligned} \quad (3.2.8)$$

což v maticové realizaci dá

$$H_0 = \begin{pmatrix} 2d & 0 \\ 0 & 4d \end{pmatrix}. \quad (3.2.9)$$

⁸Zkrácený zápis je nutné číst jako

$$|1+\rangle |1-\rangle \equiv |1+\rangle^{(1)} \otimes |1-\rangle^{(2)}, \quad (3.2.5)$$

tj. první ket odpovídá první částici, druhý ket druhé částici.

Matice interakčního Hamiltoniánu má tvar

$$H_I = \begin{pmatrix} g & g \\ g & g \end{pmatrix}, \quad (3.2.10)$$

takže celkový Hamiltonián je

$$H = \begin{pmatrix} 2d + g & g \\ g & 4d + g \end{pmatrix}. \quad (3.2.11)$$

3. Matici (3.2.11) lze přepsat na tvar

$$H = (3d + g) 1 - d\sigma_3 + g\sigma_1, \quad (3.2.12)$$

čož odpovídá Hamiltoniánu detailně propočteném v příkladu 2.4, kde se přiřadí $d \leftrightarrow e$, $g \leftrightarrow v$, výsledné spektrum se posune v energii o $3d + g$ a prohodí se vlastní vektory. Vlastní hodnoty jsou tedy

$$E_{\pm} = 3d + g \pm \sqrt{d^2 + g^2} \quad (3.2.13)$$

a odpovídající vlastní vektory

$$|\phi_{-}\rangle = \alpha |\psi_2\rangle + \beta |\psi_1\rangle, \quad (3.2.14a)$$

$$|\phi_{+}\rangle = \beta |\psi_2\rangle - \alpha |\psi_1\rangle, \quad (3.2.14b)$$

kde koeficienty α a β jsou dány vztahy (2.4.7). Vektory $|\phi_{\pm}\rangle$ jsou jen lineární kombinací vektorů antisymetrických vůči záměně částic, samy jsou tedy antisymetrické při záměně $|j\sigma\rangle^{(1)} \leftrightarrow |j\sigma\rangle^{(2)}$.

4. Překryv je dán amplitudou pravděpodobnosti

$$\langle\psi_2|\phi_{-}\rangle = \alpha = \frac{g}{\sqrt{g^2 + (d + \sqrt{g^2 + d^2})}} \sim \frac{1}{2} \frac{g}{e}, \quad (3.2.15)$$

kde poslední rovnost platí pro $g \ll e$.

5. Rozšíření systému o třetí hladinu vede na matici Hamiltoniánu

$$H' = \begin{pmatrix} 2d + g & g & g \\ g & 4d + g & g \\ g & g & 6d + g \end{pmatrix}, \quad (3.2.16)$$

kterou je nutné řešit numericky pro konkrétní hodnoty parametrů d, g .

Poznámka: Dodatečné kvantové číslo jednočásticových stavů označené σ lze identifikovat s projekcí spinu částice. Pak je možné rozdělit Hilbertův prostor jednočásticových stavů jako $\mathcal{H}_1 = \mathcal{H}_{1h} \otimes \mathcal{H}_{1p}$, kde první odpovídá umístění částice na jednu z hladin a druhý pak jejímu spinu.

Dvoučásticový Hilbertův prostor lze pak rozdělit na

$$\mathcal{H}_2 = (\mathcal{H}_{2h}^S \otimes \mathcal{H}_{2s}^S) \oplus (\mathcal{H}_{2h}^A \otimes \mathcal{H}_{2s}^T), \quad (3.2.17)$$

kde $\mathcal{H}_{2h}^{S,A}$ je symetrická, resp. antisymetrická kombinace hladinových stavů a $\mathcal{H}_{2s}^{S,T}$ je singletní, resp. tripletní spinový stav. Stav (3.2.6) pak mají symetrickou hladinovou a singletní (antisymetrickou) spinovou část,

$$|\psi_j\rangle = |jj\rangle \otimes |00\rangle, \quad (3.2.18)$$

kde

$$|jj\rangle = |j\rangle^{(1)} \otimes |j\rangle^{(2)} \quad (3.2.19a)$$

je hladinová část a

$$|00\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+\rangle^{(1)} \otimes |-\rangle^{(2)} - |-\rangle^{(1)} \otimes |+\rangle^{(2)}) \quad (3.2.19b)$$

je singletní spinový stav.

Poznámka: Se singletními a tripletními spinovými stavy se také počítá v příkladech 9.4, 10.2 a 15.2.

4 Harmonický oscilátor

4.1 Spektrum operátoru $\hat{n} = \hat{a}^\dagger \hat{a}$

Je zadán operátor \hat{a} a operátor \hat{a}^\dagger k němu sdružený, které mezi sebou splňují komutační relace⁹¹⁰

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1. \quad (4.1.2)$$

Definujme operátor

$$\hat{n} \equiv \hat{a}^\dagger \hat{a}. \quad (4.1.3)$$

1. Ukažte, že operátor \hat{n} je samosdružený a pozitivně definitní.
2. Nalezněte, čemu se rovnají komutátory $[\hat{n}, \hat{a}^k]$ a $[\hat{n}, (\hat{a}^\dagger)^k]$ pro $k \in \mathbb{N}$.
3. Ukažte, čemu se rovná $\hat{a}^\dagger |n\rangle$, $\hat{a} |n\rangle$, kde $|n\rangle$ je vlastní vektor operátoru \hat{n} příslušející vlastní hodnotě n .
4. Nalezněte všechny vlastní hodnoty n operátoru \hat{n} .
5. Nalezněte normalizované vlastní vektory operátoru \hat{n} .
6. Nalezněte tvar operátorů \hat{a} a \hat{a}^\dagger v maticové realizaci.

Řešení:

1. Samosdruženost plyne z identit

$$\hat{n}^\dagger = (\hat{a}^\dagger \hat{a})^\dagger = \hat{a}^\dagger (\hat{a}^\dagger)^\dagger = \hat{a}^\dagger \hat{a} = \hat{n}. \quad (4.1.4)$$

Díky samosdruženosti existuje spektrální rozklad operátoru \hat{n} ,

$$\hat{n} |n\rangle = n |n\rangle, \quad (4.1.5)$$

kde n je reálné číslo a $|n\rangle$ odpovídající normalizovaný vlastní vektor, $\langle n|n\rangle = 1$.

Pozitivita operátoru \hat{n} znamená, že všechny jeho vlastní hodnoty jsou nezáporné. Platí

$$\langle n|\hat{n}|n\rangle = n \langle n|n\rangle = n \quad (4.1.6)$$

a zároveň

$$\langle n|\hat{n}|n\rangle = \langle n|\hat{a}^\dagger \hat{a}|n\rangle = |\hat{a}|n\rangle|^2 \geq 0, \quad (4.1.7)$$

takže opravdu

$$n \geq 0. \quad (4.1.8)$$

2. Pro $k = 1$ je

$$[\hat{n}, \hat{a}] = [\hat{a}^\dagger \hat{a}, \hat{a}] = \underbrace{\hat{a}^\dagger [\hat{a}, \hat{a}]}_0 + \underbrace{[\hat{a}^\dagger, \hat{a}] \hat{a}}_{-1} = -\hat{a}, \quad (4.1.9)$$

⁹Vztahu (4.1.2) je třeba rozumět ve smyslu $[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = \hat{1}$, kde $\hat{1}$ je operátor identity, podobně jako je tomu například u komutačních relací samosdružených operátorů souřadnice a hybnosti $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar \hat{1}$, které se běžně zkráceně zapisují $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$.

¹⁰Obecněji lze uvažovat komutační relace

$$[\hat{A}, \hat{A}^\dagger] = m, \quad m \in \mathbb{R}^+. \quad (4.1.1)$$

Ty přejdou na (4.1.2) přeskálováním $\hat{a} = \hat{A}/\sqrt{m}$.

kde druhá rovnost platí díky rozvoji komutátoru (1.1.1a) a poslední rovnost vyplývá ze vztahu (4.1.2). Induktivní opakování tohoto postupu vede na

$$\begin{aligned} [\hat{n}, \hat{a}^k] &= [\hat{n}, \hat{a}^{k-1} \hat{a}] = \hat{a}^{k-1} \underbrace{[\hat{n}, \hat{a}]}_{-\hat{a}} + [\hat{n}, \hat{a}^{k-1}] \hat{a} \\ &= -\hat{a}^k + [\hat{n}, \hat{a}^{k-2} \hat{a}] \hat{a} = -\hat{a}^k + \hat{a}^{k-2} \underbrace{[\hat{n}, \hat{a}]}_{-\hat{a}} \hat{a} + [\hat{n}, \hat{a}^{k-2}] \hat{a}^2 \\ &= -2\hat{a}^k + [\hat{n}, \hat{a}^{k-3} \hat{a}] \hat{a}^2 = \dots = -k\hat{a}^k. \end{aligned} \quad (4.1.10)$$

Zcela analogicky se ukáže, že

$$\left[\hat{n}, (\hat{a}^\dagger)^k \right] = k (\hat{a}^\dagger)^k. \quad (4.1.11)$$

3. Vlastní hodnoty a vlastní vektory operátoru \hat{n} splňují rovnici (4.1.5), kde $n \geq 0$. Za předpokladu $n \neq 0$ a díky vztahu (4.1.9) platí

$$\hat{n} \hat{a} |n\rangle = (\hat{a} \hat{n} - \hat{a} \hat{n} + \hat{n} \hat{a}) |n\rangle = (\hat{a} \hat{n} + [\hat{n}, \hat{a}]) |n\rangle = (\hat{a} \hat{n} - \hat{a}) |n\rangle = (n-1) \hat{a} |n\rangle. \quad (4.1.12)$$

Analogicky pak

$$\hat{n} \hat{a}^\dagger |n\rangle = (n+1) \hat{a}^\dagger |n\rangle. \quad (4.1.13)$$

Vektory $\hat{a} |n\rangle$ a $\hat{a}^\dagger |n\rangle$ jsou tedy oba vlastními stavy operátoru \hat{n} příslušejícími vlastním hodnotám $n-1$, respektive $n+1$. Norma těchto vektorů je

$$|\langle n | \hat{a}^\dagger \hat{a} | n \rangle| = |\langle n | \hat{n} | n \rangle| = n |\langle n | n \rangle| = n, \quad (4.1.14a)$$

$$|\langle n | \hat{a} \hat{a}^\dagger | n \rangle| = |\langle n | \hat{a}^\dagger \hat{a} + 1 | n \rangle| = n+1. \quad (4.1.14b)$$

Normované vlastní vektory operátoru \hat{n} jsou tedy navzájem svázaný operátory \hat{a} a \hat{a}^\dagger :

$$|n-1\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{n}} \hat{a} |n\rangle, \quad (4.1.15a)$$

$$|n+1\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{n+1}} \hat{a}^\dagger |n\rangle. \quad (4.1.15b)$$

4. k -násobným opakovaným působením operátoru \hat{a} na stav $|n\rangle$ se dospěje k normovanému vektoru

$$|n-k\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{n(n-1)\dots(n-k)}} \hat{a}^k |n\rangle, \quad (4.1.16)$$

což je vlastní vektor operátoru \hat{n} příslušející vlastní hodnotě $n-k$. **Pozitivita operátoru však omezuje hodnoty k : Pro žádné k není povoleno získat vektor, který by měl odpovídat záporné vlastní hodnotě.** Jelikož k lze volit libovolně, musí spektrum operátoru bezpodmínečně obsahovat hodnotu 0, tj. musí existovat vektor $|0\rangle$ takový, že

$$\hat{n} |0\rangle = 0 |0\rangle = 0, \quad (4.1.17)$$

a tedy $\hat{a} |0\rangle = 0$. Další aplikace operátoru \hat{a} dají identicky nulu.

Spektrum operátoru \hat{n} tedy tvoří všechna nezáporná celá čísla $n \in \mathbb{N}_0$.

5. Všechny normalizované vlastní vektory $|n\rangle$ lze nagenarovat ze stavu $|0\rangle$ pomocí vícenásobného použití operátoru \hat{a}^\dagger podle (4.1.15):

$$|n\rangle = \frac{(\hat{a}^\dagger)^n}{\sqrt{n!}} |0\rangle. \quad (4.1.18)$$

6. Dimenze Hilbertova prostoru, na kterém působí operátory \hat{a} a \hat{a}^\dagger , je nekonečná, přičemž za jeho bázi lze zvolit vektory $|n\rangle$. V maticové realizaci lze tento vektor vyjádřit jako nekonečný sloupec

$$|n\rangle \equiv \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix} \cdots n\text{-tá pozice} \quad (4.1.19)$$

Z algebraického vztahu mezi báзовými vektory (4.1.15) vyplývá

$$a = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \sqrt{4} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ & & & \vdots & \ddots \end{pmatrix}, \quad a^\dagger = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{4} & 0 \\ & & & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \equiv a^\top. \quad (4.1.20)$$

Operátor \hat{n} je v této bázi diagonální a jeho maticové vyjádření je

$$n = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 4 \\ & & & \vdots & \ddots \end{pmatrix}. \quad (4.1.21)$$

K tomuto vztahu lze rovněž dospět pronásobením nekonečných matic (4.1.20), tj. $n = a^\dagger a$.

Poznámka: Operátory \hat{a} , \hat{a}^\dagger posouvají vlastní stav operátoru \hat{n} z vyšší vlastní hodnoty na nižší a naopak, proto se obvykle nazývají *posunovací operátory*. Při využití těchto operátorů nad Fockovými prostory (kapitola 15), kde vytvářejí a ruší částice daných vlastností, se nazývají *anihilační a kreační operátory*.

4.2 Jednorozměrný harmonický oscilátor

Harmonický oscilátor je popsán Hamiltoniánem

$$\hat{H} = \frac{1}{2M} \hat{p}^2 + \frac{1}{2} M \Omega^2 \hat{x}^2, \quad (4.2.1)$$

kde M je hmotnost kmitající částice, $\Omega = \sqrt{k/M}$ je úhlová frekvence oscilátoru, \hat{x} je operátor souřadnice a \hat{p} operátor k němu přidružené hybnosti. Oba tyto samosdružené operátory splňují kanonický komutační vztah

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar. \quad (4.2.2)$$

V harmonickém oscilátoru lze vhodně nadefinovat operátory \hat{a} , \hat{a}^\dagger , a tím ho převést na algebraický systém, který jsme vyřešili v předchozím příkladu 4.1. Hledejte \hat{a} ve tvaru

$$\hat{a} = \alpha \hat{x} + \beta \hat{p}, \quad \alpha, \beta \in \mathbb{C}. \quad (4.2.3)$$

1. Nalezněte hodnoty konstant α , β a zapište Hamiltonián \hat{H} pomocí operátorů \hat{a} , \hat{a}^\dagger .
2. Nalezněte spektrum (vlastní energie a vlastní vektory) Hamiltoniánu.
3. Vyjádřete operátory hybnosti \hat{p} a souřadnice \hat{x} pomocí operátorů \hat{a} , \hat{a}^\dagger .
4. Spočítejte střední hodnoty

$$\langle n | \hat{x} | n \rangle, \quad \langle n | \hat{p} | n \rangle, \quad \langle n | \hat{x}^2 | n \rangle, \quad \langle n | \hat{p}^2 | n \rangle, \quad (4.2.4)$$

kde $|n\rangle$ je vlastní stav Hamiltoniánu.

5. Spočítejte střední hodnoty

$$\langle n | \hat{T} | n \rangle, \quad \langle n | \hat{V} | n \rangle, \quad (4.2.5)$$

kde \hat{T} a \hat{V} jsou operátory kinetické, resp. potenciální energie oscilátoru, a srovnajte s hodnotou energie ve stavu $|n\rangle$ (virialový teorém).

6. Ověřte platnost relací neurčitosti mezi polohou a hybností.
7. Pomocí posunovacích operátorů vyjádřených v x -reprezentaci nalezněte vlnové funkce Harmonického oscilátoru.

Řešení:

1. Dosazení lineární kombinace souřadnic a hybností (4.2.3) do definice operátoru \hat{n} dá

$$\begin{aligned}
 \hat{n} &= \hat{a}^\dagger \hat{a} = (\alpha^* \hat{x} + \beta^* \hat{p}) (\alpha \hat{x} + \beta \hat{p}) \\
 &= |\alpha|^2 \hat{x}^2 + \alpha^* \beta \underbrace{\hat{x} \hat{p}}_{\hat{p} \hat{x} + i\hbar} + \alpha \beta^* \hat{p} \hat{x} + |\beta|^2 \hat{p}^2 \\
 &= |\alpha|^2 \hat{x}^2 + (\alpha^* \beta + \alpha \beta^*) \hat{p} \hat{x} + i\hbar \alpha^* \beta + |\beta|^2 \hat{p}^2.
 \end{aligned} \tag{4.2.6}$$

Srovnáním tohoto výrazu s Hamiltoniánem (4.2.1) je patrné, že až na konstantní člen lze Hamiltonián harmonického oscilátoru zkonstruovat z operátoru \hat{n} , pokud vymizí členy mísící souřadnici a hybnost, tj. pokud

$$\alpha^* \beta + \alpha \beta^* = 0 \iff \operatorname{Re} \alpha^* \beta = 0. \tag{4.2.7}$$

Bez újmy na obecnosti lze zvolit α reálné a β ryze imaginární. Pak

$$\hat{H} = \gamma \hat{n} + \delta, \tag{4.2.8}$$

kde γ a δ jsou již reálná čísla.

Dodatečná podmínka plyne z komutačních relací (4.1.2),

$$\begin{aligned}
 1 &= [\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = (\alpha \hat{x} + \beta \hat{p}) (\alpha^* \hat{x} + \beta^* \hat{p}) - (\alpha^* \hat{x} + \beta^* \hat{p}) (\alpha \hat{x} + \beta \hat{p}) \\
 &= (\alpha \beta^* - \alpha^* \beta) \underbrace{\hat{x} \hat{p}}_{\hat{p} \hat{x} + i\hbar} + (\alpha^* \beta - \alpha \beta^*) \hat{p} \hat{x} \\
 &= (\alpha \beta^* - \alpha^* \beta) i\hbar \\
 &= 2\alpha \beta^* i\hbar,
 \end{aligned} \tag{4.2.9}$$

takže musí platit

$$\alpha \beta^* = \frac{1}{2i\hbar}. \tag{4.2.10}$$

Srovnáním příslušných členů výrazu (4.2.6) s Hamiltoniánem (4.2.1) a díky podmínce (4.2.10) lze přiřadit parametrům hodnoty

$$\alpha = \frac{1}{\sqrt{\gamma}} \sqrt{\frac{1}{2} M \Omega^2}, \tag{4.2.11a}$$

$$\beta = \frac{i}{\sqrt{\gamma}} \sqrt{\frac{1}{2M}}, \tag{4.2.11b}$$

$$\gamma = \hbar \Omega, \tag{4.2.11c}$$

$$\delta = \frac{\gamma}{2} = \frac{\hbar \Omega}{2}. \tag{4.2.11d}$$

Výsledkem je vyjádření Hamiltoniánu harmonického oscilátoru ve tvaru

$$\hat{H} = \hbar \Omega \left(\hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2} \right). \tag{4.2.12}$$

2. Spektrum Hamiltoniánu lze určit na základě znalosti spektra operátoru \hat{n} (4.1.18):

$$\begin{aligned}
 \hat{H} |E_n\rangle &= E_n |E_n\rangle \\
 \hbar \Omega \left(\hat{a}^\dagger \hat{a} |E_n\rangle + \frac{1}{2} |E_n\rangle \right) &= E_n |E_n\rangle \\
 \hbar \Omega \left(n + \frac{1}{2} \right) |n\rangle &= E_n |n\rangle,
 \end{aligned} \tag{4.2.13}$$

takže

$$E_n = \hbar\Omega \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad n \in \mathbb{N}_0 \quad (4.2.14)$$

a vlastní vektory jsou totožné s vlastními vektory operátoru \hat{n} , $|E_n\rangle \equiv |n\rangle$.

3. Dosazení α, β a γ z (4.2.11) do (4.2.3), vede na vztahy¹¹

$$\begin{aligned} \hat{a} &= \frac{\hat{A}}{\sqrt{\hbar\Omega}} = \frac{1}{\sqrt{\hbar\Omega}} \left(\sqrt{\frac{1}{2}M\Omega^2} \hat{x} + i\sqrt{\frac{1}{2M}} \hat{p} \right) \\ &= \sqrt{\frac{M\Omega}{2\hbar}} \left(\hat{x} + \frac{i}{M\Omega} \hat{p} \right), \end{aligned} \quad (4.2.17a)$$

$$\hat{a}^\dagger = \sqrt{\frac{M\Omega}{2\hbar}} \left(\hat{x} - \frac{i}{M\Omega} \hat{p} \right). \quad (4.2.17b)$$

Sečtení a odečtení vede k inverzní transformaci od posunovacích operátorů k operátorům souřadnice a hybnosti,

$$\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2M\Omega}} (\hat{a}^\dagger + \hat{a}), \quad (4.2.18a)$$

$$\hat{p} = i\sqrt{\frac{\hbar M\Omega}{2}} (\hat{a}^\dagger - \hat{a}). \quad (4.2.18b)$$

4. K výpočtu středních hodnot operátorů \hat{x} , \hat{p} se využije jejich vyjádření pomocí posunovacích operátorů (4.2.18) a poté vztahy (4.1.15):

$$\begin{aligned} \langle n | \hat{x} | n \rangle &= \sqrt{\frac{\hbar}{2M\Omega}} \langle n | \hat{a}^\dagger + \hat{a} | n \rangle \\ &= \sqrt{\frac{\hbar}{2M\Omega}} (\sqrt{n+1} \langle n | n+1 \rangle + \sqrt{n} \langle n | n-1 \rangle) \\ &= 0, \end{aligned} \quad (4.2.19)$$

jelikož vlastní vektory $|n-1\rangle$, $|n\rangle$ a $|n+1\rangle$ jsou na sebe kolmé. Stejně tak vychází

$$\langle n | \hat{p} | n \rangle = 0. \quad (4.2.20)$$

Lze odpozorovat **pravidlo**, že střední hodnota $\langle n | f(r, s; \hat{a}, \hat{a}^\dagger) | n \rangle$, kde $f(r, s; \hat{a}, \hat{a}^\dagger)$ je funkce součinu r operátorů \hat{a} a s operátorů \hat{a}^\dagger v libovolném pořadí, je nenulová pouze tehdy, pokud $r = s$. Obecněji maticový element $\langle m | f(r, s; \hat{a}, \hat{a}^\dagger) | n \rangle$ je nenulový, pokud $m + r = n + s$.

¹¹Lze navíc zavést veličiny rozměru souřadnice a hybnosti

$$x_0 \equiv \sqrt{\frac{\hbar}{M\Omega}}, \quad p_0 \equiv \frac{x_0}{\hbar} = \sqrt{\hbar M\Omega} \quad (4.2.15)$$

a vztahy (4.2.17) přepsat do bezrozměrného tvaru

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{\hat{x}}{x_0} + i \frac{\hat{p}}{p_0} \right). \quad (4.2.16)$$

Pro střední hodnoty kvadrátů operátorů souřadnice a hybnosti platí

$$\begin{aligned}
 \langle n | \hat{x}^2 | n \rangle &= \frac{\hbar}{2M\Omega} \left\langle n \left| \left(\hat{a}^\dagger + \hat{a} \right)^2 \right| n \right\rangle \\
 &= \frac{\hbar}{2M\Omega} \left\langle n \left| \underbrace{\left(\hat{a}^\dagger \right)^2}_0 + \hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a} + \underbrace{\hat{a}^2}_0 \right| n \right\rangle \\
 &= \frac{\hbar}{2M\Omega} \left\langle n \left| \sqrt{n+1}\sqrt{n+1} + \sqrt{n}\sqrt{n} \right| n \right\rangle \\
 &= \frac{\hbar}{2M\Omega} (2n+1), \tag{4.2.21}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \langle n | \hat{p}^2 | n \rangle &= -\frac{\hbar M\Omega}{2} \left\langle n \left| \left(\hat{a}^\dagger - \hat{a} \right)^2 \right| n \right\rangle \\
 &= -\frac{\hbar M\Omega}{2} \left\langle n \left| \underbrace{\left(\hat{a}^\dagger \right)^2}_0 - \hat{a}\hat{a}^\dagger - \hat{a}^\dagger\hat{a} + \underbrace{\left(\hat{a} \right)^2}_0 \right| n \right\rangle \\
 &= \frac{\hbar M\Omega}{2} (2n+1). \tag{4.2.22}
 \end{aligned}$$

5. Operátor kinetické energie je

$$\hat{T} = \frac{1}{2M} \hat{p}^2, \tag{4.2.23}$$

jehož střední hodnota vychází po dosazení (4.2.22)

$$\langle n | \hat{T} | n \rangle = \frac{1}{2M} \frac{\hbar M\Omega}{2} (2n+1) = \frac{1}{2} \hbar\Omega \left(n + \frac{1}{2} \right) = \frac{E_n}{2}. \tag{4.2.24}$$

Podobně potenciál

$$\hat{V} = \frac{1}{2} M\Omega^2 \hat{x}^2 \tag{4.2.25}$$

po dosazení (4.2.21) vychází

$$\langle n | \hat{V} | n \rangle = \frac{1}{2} M\Omega^2 \frac{\hbar}{2M\Omega} (2n+1) = \frac{1}{2} \hbar\Omega \left(n + \frac{1}{2} \right) = \frac{E_n}{2}. \tag{4.2.26}$$

Viriálový teorém udává vztah mezi střední hodnotou operátoru kinetické energie a operátoru potenciálu pro libovolný stav $|\psi\rangle$,¹² tedy nikoliv jen pro vlastní stav Hamiltoniánu:

$$2 \langle \psi | \hat{T} | \psi \rangle = \left\langle \psi \left| \hat{x} \frac{d}{d\hat{x}} \hat{V}(\hat{x}) \right| \psi \right\rangle. \tag{4.2.27}$$

To se v případě, že $\hat{V}(\hat{x})$ je homogenní funkce stupně s , dále zjednoduší na

$$2 \langle \psi | \hat{T} | \psi \rangle = s \langle \psi | \hat{V} | \psi \rangle. \tag{4.2.28}$$

V případě harmonického oscilátoru je $s = 2$. Pro střední hodnoty kinetické energie (4.2.24) a potenciálu (4.2.26) je viriálový teorém splněn.

6. Relace neurčitosti znějí

$$\Delta_n \hat{x}^2 \Delta_n \hat{p}^2 \geq \frac{\hbar^2}{4}, \tag{4.2.29}$$

kde

$$\Delta_n \hat{x}^2 = \langle n | \hat{x}^2 | n \rangle - \langle n | \hat{x} | n \rangle^2, \tag{4.2.30a}$$

$$\Delta_n \hat{p}^2 = \langle n | \hat{p}^2 | n \rangle - \langle n | \hat{p} | n \rangle^2. \tag{4.2.30b}$$

¹²Výrazu $\frac{d}{d\hat{x}} \hat{V}(\hat{x})$ je třeba rozumět ve smyslu $\frac{d}{dx} V(x)|_{x=\hat{x}}$.

Po dosazení vypočtených středních hodnot (4.2.19), (4.2.20), (4.2.21) a (4.2.22) do relací neurčitosti vychází

$$\begin{aligned}\Delta_n \hat{x}^2 \Delta_n \hat{p}^2 &= \langle n | \hat{x}^2 | n \rangle \langle n | \hat{p}^2 | n \rangle \\ &= \frac{\hbar}{2M\Omega} (2n+1) \frac{\hbar M\Omega}{2} (2n+1) \\ &= \frac{\hbar^2}{4} (2n+1)^2.\end{aligned}\quad (4.2.31)$$

Jelikož $n \geq 0$, relace neurčitosti jsou splněny. Stav s nejmenší možnou neurčitostí je základní stav $n = 0$.

7. Operátory \hat{a} a \hat{a}^\dagger v x -reprezentaci se získají ze vztahů (4.2.17) přechodem $\hat{x} \mapsto x$ a $\hat{p} \mapsto -i\hbar d/dx$,

$$\hat{a} = \sqrt{\frac{M\Omega}{2\hbar}} \left(x + \frac{\hbar}{M\Omega} \frac{d}{dx} \right). \quad (4.2.32)$$

Pro základní stav harmonického oscilátoru platí

$$\hat{a} |0\rangle = 0 \xrightarrow{x\text{-reprezentace}} \hat{a}\psi_0(x) = 0, \quad (4.2.33)$$

což vede v x -reprezentaci na obyčejnou diferenciální rovnici 1. řádu

$$\left(x + \frac{\hbar}{M\Omega} \frac{d}{dx} \right) \psi_0(x) = 0. \quad (4.2.34)$$

Její řešení získané separací proměnných zní

$$\psi_0(x) = N e^{-\frac{M\Omega}{2\hbar} x^2}. \quad (4.2.35)$$

Normalizační konstanta N vychází z podmínky

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi_0(x)|^2 dx = 1 \implies N = \sqrt[4]{\frac{M\Omega}{\pi\hbar}}. \quad (4.2.36)$$

Normalizovaná vlnová funkce základního stavu harmonického oscilátoru je tedy

$$\psi_0(x) = \sqrt[4]{\frac{M\Omega}{\pi\hbar}} e^{-\frac{M\Omega}{2\hbar} x^2}. \quad (4.2.37)$$

Vlnové funkce vzbuzených stavů se nageneryují ze základního stavu působením operátoru \hat{a}^\dagger podle vztahu (4.1.18),

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{n!}} \left(\frac{M\Omega}{2\hbar} \right)^{\frac{n}{2}} \left(x - \frac{\hbar}{M\Omega} \frac{d}{dx} \right)^n \psi_0(x) = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \sqrt[4]{\frac{M\Omega}{\pi\hbar}} e^{-\frac{M\Omega}{2\hbar} x^2} H_n \left(\sqrt{\frac{M\Omega}{\hbar}} x \right), \quad (4.2.38)$$

kde $H_n(\xi)$ je Hermitův polynom.

4.3 Stav s nenulovou výchylkou

Harmonický oscilátor je připraven ve stavu daném lineární kombinací dvou vlastních stavů Hamiltoniánu,

$$|\psi\rangle = \alpha |m\rangle + \beta |n\rangle, \quad (4.3.1)$$

kde $\alpha, \beta \in \mathbb{C}$.

1. Nalezněte čísla α, β tak, aby střední hodnota operátoru polohy ve stavu $|\psi\rangle$ byla maximální možná.
2. Pro tento stav určete $\langle \psi | \hat{x} | \psi \rangle$, $\langle \psi | \hat{p} | \psi \rangle$, střední kvadratické odchylky $\Delta_\psi \hat{x}^2$, $\Delta_\psi \hat{p}^2$ a ověřte platnost relací neurčitosti.

Řešení:

1. Střední hodnota operátoru polohy \hat{x} pro harmonický oscilátor ve stavu $|\psi\rangle$ je

$$\begin{aligned}
 \langle\psi|\hat{x}|\psi\rangle &= (\alpha^* \langle m| + \beta^* \langle n|) \sqrt{\frac{\hbar}{2M\Omega}} (\hat{a}^\dagger + \hat{a}) (\alpha |m\rangle + \beta |n\rangle) \\
 &= \sqrt{\frac{\hbar}{2M\Omega}} (\alpha^* \langle m| + \beta^* \langle n|) (\alpha \sqrt{m+1} |m+1\rangle + \beta \sqrt{n+1} |n+1\rangle \\
 &\quad + \alpha \sqrt{m} |m-1\rangle + \beta \sqrt{n} |n-1\rangle) \\
 &= \sqrt{\frac{\hbar}{2M\Omega}} \left[\alpha^* \beta (\sqrt{n+1} \delta_{n+1,m} + \sqrt{n} \delta_{n-1,m}) \right. \\
 &\quad \left. + \alpha \beta^* (\sqrt{m+1} \delta_{n,m+1} + \sqrt{m} \delta_{n,m-1}) \right] \\
 &= \sqrt{\frac{\hbar}{2M\Omega}} \left[\alpha^* \beta (\sqrt{m} \delta_{m,n+1} + \sqrt{m+1} \delta_{m+1,n}) \right. \\
 &\quad \left. + \alpha \beta^* (\sqrt{m} \delta_{m,n+1} + \sqrt{m+1} \delta_{m+1,n}) \right] \quad (4.3.2)
 \end{aligned}$$

(v posledním řádku byly přeuspořádány členy a využito δ funkcí k záměně čísel v odmocninách). Střední hodnota souřadnice je tedy nulová, pokud $|m-n| \neq 1$. Bez újmy na obecnosti stačí dále vyšetřovat případ $m = n+1$, pro který

$$\langle\psi|\hat{x}|\psi\rangle = \sqrt{\frac{\hbar m}{2M\Omega}} (\alpha^* \beta + \alpha \beta^*) = 2\sqrt{\frac{\hbar m}{2M\Omega}} \operatorname{Re}(\alpha^* \beta). \quad (4.3.3)$$

Dalším krokem je tedy nalézt maximum této funkce vzhledem k α a β . Parametry α a β nejsou nezávislé, nýbrž jsou vázány podmínkou

$$|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1 \quad (4.3.4)$$

plynoucí z normalizace vektoru $|\psi\rangle$.

Maximum lze určit dvěma způsoby:

- Absolutní hodnota součtu parametrů α a β je v přímém vztahu k reálné části součinu $\alpha^* \beta$,

$$|\alpha + \beta|^2 = (\alpha + \beta)^* (\alpha + \beta) = |\alpha|^2 + |\beta|^2 + 2 \operatorname{Re}(\alpha^* \beta) = 1 + 2 \operatorname{Re}(\alpha^* \beta). \quad (4.3.5)$$

takže namísto výrazu $2 \operatorname{Re}(\alpha^* \beta)$ se maximalizuje $|\alpha + \beta|$. Za dodatečné podmínky (4.3.4) je nejvyšší hodnoty dosaženo pro $\alpha = \beta = 1/\sqrt{2}$.

- Alternativně se dá využít polární reprezentace parametrů α a β

$$\alpha = \cos \theta e^{i\phi}, \quad \beta = \sin \theta, \quad (4.3.6)$$

kde $\theta, \phi \in [0, 2\pi)$ jsou dva úhly. Tato parametrizace automaticky splňuje podmínku (4.3.4). Střední hodnota (4.3.3) je v této parametrizaci

$$\langle\psi|\hat{x}|\psi\rangle = \sqrt{\frac{\hbar m}{2M\Omega}} \sin 2\theta \cos \phi \quad (4.3.7)$$

a nabývá maximální hodnoty, pokud je $2\theta = \pi/2$ a zároveň $\phi = 0$. To odpovídá hodnotám $\alpha = \beta = 1/\sqrt{2}$.

Vektor, který maximalizuje střední hodnotu polohy, má tedy tvar

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|m\rangle + |m-1\rangle), \quad (4.3.8)$$

a střední hodnota operátoru souřadnice nabývá velikosti

$$\langle\psi|\hat{x}|\psi\rangle = \sqrt{\frac{\hbar m}{2M\Omega}}. \quad (4.3.9)$$

2. Střední hodnota operátoru hybnosti pro stav $|\psi\rangle$ je

$$\langle\psi|\hat{p}|\psi\rangle = i\sqrt{\frac{\hbar M\Omega}{2}} \langle\psi|\hat{a}^\dagger - \hat{a}|\psi\rangle = 0. \quad (4.3.10)$$

3. Pro střední kvadratické odchylky je potřeba určit střední hodnoty kvadrátu operátorů souřadnice a hybnosti. K jejich výpočtu se využije již získaných vztahů (4.2.21) a (4.2.22):

$$\begin{aligned} \langle\psi|\hat{x}^2|\psi\rangle &= \frac{\hbar}{4M\Omega} (\langle n| + \langle n+1|) \left((\hat{a}^\dagger)^2 + \hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a} + \hat{a}^2 \right) (|n\rangle + |n+1\rangle) \\ &= \frac{\hbar}{4M\Omega} \left(\underbrace{\langle n|\hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a}|n\rangle}_{2n+1} + \underbrace{\langle n+1|\hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a}|n+1\rangle}_{2(n+1)+1} \right) \\ &= \frac{\hbar}{M\Omega} (n+1), \end{aligned} \quad (4.3.11a)$$

$$\langle\psi|\hat{p}^2|\psi\rangle = \hbar M\Omega (n+1). \quad (4.3.11b)$$

Střední kvadratické odchylky budou

$$\Delta_\psi \hat{x}^2 = \frac{\hbar}{M\Omega} (n+1) - \frac{\hbar}{2M\Omega} (n+1) = \frac{\hbar}{2M\Omega} (n+1), \quad (4.3.12a)$$

$$\Delta_\psi \hat{p}^2 = \hbar M\Omega (n+1) \quad (4.3.12b)$$

a relace neurčitosti pro harmonický oscilátor ve stavu $|\psi\rangle$ vycházejí

$$\Delta_\psi \hat{x}^2 \Delta_\psi \hat{p}^2 = \frac{\hbar^2}{2} (n+1)^2 > \frac{\hbar^2}{4}. \quad (4.3.13)$$

4.4 Posunutí harmonického oscilátoru

Je zadán operátor

$$\hat{T}(\alpha) = e^{-\alpha(\hat{a}-\hat{a}^\dagger)}, \quad (4.4.1)$$

kde \hat{a} , \hat{a}^\dagger jsou posunovací operátory splňující komutační relace (4.1.2) a α je reálný parametr.

1. Ověřte, že operátor $\hat{T}(\alpha)$ je unitární.
2. Ukažte, čemu se rovná $\hat{T}^{-1}(\alpha) \hat{a} \hat{T}(\alpha)$ a $\hat{T}^{-1}(\alpha) \hat{a}^\dagger \hat{T}(\alpha)$.
3. Ukažte, čemu se rovná $\hat{T}^{-1}(\alpha) \hat{x} \hat{T}(\alpha)$ a $\hat{T}^{-1}(\alpha) \hat{p} \hat{T}(\alpha)$.
4. Ukažte, čemu se rovná $\hat{H}' = \hat{T}^{-1}(\alpha) \hat{H} \hat{T}(\alpha)$, kde \hat{H} je operátor harmonického oscilátoru (4.2.1). Určete spektrum \hat{H}' .
5. Nalezněte střední hodnotu operátoru souřadnice, je-li harmonický oscilátor ve stavu $|n; \alpha\rangle = \hat{T}(\alpha) |n\rangle$, kde $|n\rangle$ je vlastní vektor harmonického oscilátoru příslušející k energii E_n .

Řešení:

1. Unitarita se ověří přímo z definice za využití vztahu (1.4.1) (v obou exponenciálách se vyskytuje stejný operátor $\hat{A} \equiv \hat{a} - \hat{a}^\dagger$, který samozřejmě komutuje sám se sebou)

$$\hat{T}^\dagger(\alpha) \hat{T}(\alpha) = e^{-\alpha(\hat{a}^\dagger - \hat{a})} e^{-\alpha(\hat{a} - \hat{a}^\dagger)} = e^{\alpha(\hat{a} - \hat{a}^\dagger) - \alpha(\hat{a} - \hat{a}^\dagger)} = e^0 = \hat{1}. \quad (4.4.2)$$

2. Z BCH formule (1.4.2) plyne

$$\begin{aligned}
 \hat{T}^{-1}(\alpha) \hat{a} \hat{T}(\alpha) &= e^{\alpha(\hat{a} - \hat{a}^\dagger)} \hat{a} e^{-\alpha(\hat{a} - \hat{a}^\dagger)} + \dots \\
 &= \hat{a} + \left[\alpha(\hat{a} - \hat{a}^\dagger), \hat{a} \right] + \dots \\
 &= \hat{a} + \underbrace{\alpha [\hat{a}, \hat{a}]}_0 + \underbrace{\alpha [\hat{a}, \hat{a}^\dagger]}_1 + \dots \\
 &= \hat{a} + \alpha
 \end{aligned} \tag{4.4.3}$$

(ostatní členy v rozvoji jsou nulové, jelikož komutátor odpovídající operátoru \hat{K}_1 je číslo, a tudíž vnořené komutátory vymizí). Stejný výraz vyjde i pro operátor \hat{a}^\dagger :

$$\hat{T}^{-1}(\alpha) \hat{a}^\dagger \hat{T}(\alpha) = \hat{a}^\dagger + \alpha. \tag{4.4.4}$$

3. Operátor souřadnice \hat{x} se vyjádří pomocí posunovacích operátorů (4.2.17) a poté se využije výsledků z předchozího bodu:

$$\begin{aligned}
 \hat{T}^{-1}(\alpha) \hat{x} \hat{T}(\alpha) &= \sqrt{\frac{\hbar}{2M\Omega}} \hat{T}^{-1}(\alpha) (\hat{a}^\dagger + \hat{a}) \hat{T}(\alpha) \\
 &= \sqrt{\frac{\hbar}{2M\Omega}} (\hat{a}^\dagger + \hat{a} + 2\alpha) \\
 &= \hat{x} + \alpha \sqrt{\frac{2\hbar}{M\Omega}}.
 \end{aligned} \tag{4.4.5}$$

Operátor $\hat{T}(\alpha)$ je speciální verze operátoru posunutí (1.5.1) o vzdálenost

$$d = \alpha \sqrt{\frac{2\hbar}{M\Omega}} = \sqrt{2} \alpha x_0. \tag{4.4.6}$$

To lze nahlédnout i přímo ze skutečnosti, že v argumentu exponenciály operátoru \hat{T} lze vyjádřit rozdíl $\hat{a} - \hat{a}^\dagger$ pomocí operátoru hybnosti (4.2.17),

$$\hat{a} - \hat{a}^\dagger = i \sqrt{\frac{2}{\hbar M \Omega}} \hat{p}, \tag{4.4.7}$$

takže

$$\hat{T}(\alpha) = e^{-\frac{i}{\hbar} \sqrt{\frac{2\hbar}{M\Omega}} \hat{p}} = e^{-\frac{i}{\hbar} d \hat{p}}, \tag{4.4.8}$$

což je forma ekvivalentní s (1.5.1). Jelikož operátor posunutí komutuje s operátorem hybnosti, je

$$\hat{T}^{-1}(\alpha) \hat{p} \hat{T}(\alpha) = \hat{p}. \tag{4.4.9}$$

4. Ze vztahů (4.4.3) a (4.4.4) vyplývá:

$$\begin{aligned}
 \hat{H}' &= \hat{T}^{-1}(\alpha) \hbar \Omega \left(\hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2} \right) \hat{T}(\alpha) \\
 &= \hbar \Omega \left(\hat{T}^{-1}(\alpha) \hat{a}^\dagger \hat{T}(\alpha) \underbrace{\hat{T}^{-1}(\alpha) \hat{a} \hat{T}(\alpha)}_1 + \frac{1}{2} \right) \\
 &= \hbar \Omega \left[(\hat{a}^\dagger + \alpha) (\hat{a} + \alpha) + \frac{1}{2} \right] \\
 &= \hbar \Omega \left(\hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2} \right) + \underbrace{\alpha \hbar \Omega (\hat{a}^\dagger + \hat{a})}_{\sqrt{\frac{2M\Omega}{\hbar}} \hat{x}} + \alpha^2 \hbar \Omega \\
 &= \hat{H} + \alpha \Omega \sqrt{2\hbar M} \hat{x} + \alpha^2 \hbar \Omega.
 \end{aligned} \tag{4.4.10}$$

Hamiltonián \hat{H}' má stejné vlastní hodnoty jako \hat{H} , jelikož oba dva spolu souvisí unitární transformací danou operátorem $\hat{T}(\alpha)$. Vlastní vektory posunutého Hamiltoniánu \hat{H}' jsou

$$|n; \alpha\rangle \equiv \hat{T}^{-1}(\alpha) |n\rangle. \tag{4.4.11}$$

5. Střední hodnota operátoru \hat{x} pro harmonický oscilátor ve stavu $|n; \alpha\rangle$ vychází

$$\langle n; \alpha | \hat{x} | n; \alpha \rangle = \left\langle n \left| \underbrace{\hat{T}^{-1}(\alpha) \hat{x} \hat{T}(\alpha)}_{\hat{x}+d} \right| n \right\rangle = \underbrace{\langle n | \hat{x} | n \rangle}_0 + d \underbrace{\langle n | n \rangle}_1 = d. \quad (4.4.12)$$

4.5 Nabitý harmonický oscilátor v elektrickém poli

Částice s nábojem q se nachází v potenciálu harmonického oscilátoru, a navíc v konstantním homogenním elektrickém poli intenzity \mathcal{E} , směřujícím podél souřadné osy z . Nalezněte spektrum tohoto systému.

Řešení:

Hamiltonián harmonického oscilátoru v homogenním elektrickém poli

$$\hat{H}'(\mathcal{E}) = \frac{1}{2M} \hat{p}^2 + \frac{1}{2} M \Omega^2 \hat{x}^2 - q \mathcal{E} \hat{x} \quad (4.5.1)$$

se přepíše pomocí výsledku (4.4.10) předchozího příkladu,

$$\hat{H}'(\mathcal{E}) = \hat{H} - q \mathcal{E} \hat{x} = \hat{T}^{-1}(\alpha) \hat{H} \hat{T}(\alpha) - e_0, \quad (4.5.2)$$

kde

$$\alpha \Omega \sqrt{2 \hbar \Omega M} = -q \mathcal{E} \quad \Rightarrow \quad \alpha = -\frac{q \mathcal{E}}{\Omega} \sqrt{\frac{1}{2 \hbar \Omega M}}, \quad (4.5.3a)$$

$$e_0 = \alpha^2 \hbar \Omega = \frac{q^2 \mathcal{E}^2}{\Omega^2} \frac{\hbar \Omega}{2 \hbar \Omega M} = \frac{q^2 \mathcal{E}^2}{2 M \Omega^2}, \quad (4.5.3b)$$

$$d = -\frac{q \mathcal{E}}{M \Omega^2}. \quad (4.5.3c)$$

Vlastní hodnoty a vlastní vektory Hamiltoniánu $\hat{H}'(\mathcal{E})$ tedy jsou

$$E'_n = E_n - e_0 = \hbar \Omega \left(n + \frac{1}{2} \right) - \frac{q^2 \mathcal{E}^2}{2 M \Omega^2} \quad (4.5.4a)$$

$$|n\rangle' = \hat{T}^{-1} \left(-\frac{q \mathcal{E}}{\Omega} \sqrt{\frac{1}{2 \hbar \Omega M}} \right) |n\rangle. \quad (4.5.4b)$$

Vlnové funkce $\psi'_n(x) \equiv \langle x | n \rangle'$ jsou oproti vlnovým funkcím harmonického oscilátoru posunuté v souřadnici o vzdálenost d , viz (1.5.11).

K výsledku lze alternativně dospět tak, že se Hamiltonián $\hat{H}'(\mathcal{E})$ upraví na úplný čtverec a převede na tvar \hat{H} vhodným přeznačením souřadnice.

4.6 Spektrum kvartického oscilátoru

1. V jednorozměrném harmonickém oscilátoru popsaném Hamiltoniánem

$$\hat{H}_0 = \frac{1}{2M} \hat{p}^2 + \frac{1}{2} M \Omega^2 \hat{x}^2 \quad (4.6.1)$$

vyjádřete maticové elementy

$$\langle m | \hat{x}^2 | n \rangle, \quad (4.6.2a)$$

$$\langle m | \hat{x}^4 | n \rangle, \quad (4.6.2b)$$

kde $|m\rangle$ a $|n\rangle$ jsou dva libovolné vlastní vektory Hamiltoniánu \hat{H}_0 .

2. Uvažujte Hamiltonián

$$\hat{H} = \frac{1}{2M}\hat{p}^2 + \frac{1}{2}M\Omega^2\hat{x}^2 + b\hat{x}^4 = \hat{H}_0 + b\hat{x}^4, \quad (4.6.3)$$

kde b je reálný kladný parametr.

- Napočítejte maticové elementy $H_{mn} = \langle m | \hat{H} | n \rangle$ pro $M = \Omega = \hbar = b = 1$ a numerickou diagonalizací matice $\mathbf{H} = (H_{mn})$ (například pomocí programů Mathematica, Maple, Matlab, GNU Octave, Python, Julia, knihoven LAPACK, atd.) učeťte energie základního stavu E_0 a prvních tří vzbuzených stavů $E_{1,2,3}$ Hamiltoniánu \hat{H} . Uvažujte pouze konečný počet N elementů báze, tj. $m, n = 0, 1, \dots, N-1$.
- Zakreslete graf závislosti $E_j(N)$, $j = 0, 1, 2, 3$ pro $N \leq 50$.
- Na základě výsledků z předchozího bodu odhadněte, jaká musí být nejmenší velikost matice N , aby čtyři nejnižší energie byly určeny s přesností na pět platných cifer.

3. Uvažujte Hamiltonián

$$\hat{H}' = \frac{1}{2M}\hat{p}^2 - \frac{1}{2}a\hat{x}^2 + \frac{1}{8}b\hat{x}^4, \quad (4.6.4)$$

kde $a > 0$, $b > 0$.

- Načtněte klasický potenciál

$$V(x) = -\frac{1}{2}ax^2 + bx^4 \quad (4.6.5)$$

pro $a = b = 1$ a nalezněte jeho stacionární body.

- Vypočítejte numericky první čtyři energetické hladiny pro $\hbar = 0.02$, $M = a = b = 1$. Velikost matice ať je taková, aby tyto hladiny byly určeny s přesností alespoň na pět platných cifer.
- Proč jsou dvojice hladin (E_0, E_1) a (E_2, E_3) v téměř degenerovaných dubletech?
- Opakujte výpočet pro jiné hodnoty \hbar , například $\hbar = 0.01$ a $\hbar = 0.1$, a diskutujte, jaký vliv má volba \hbar na výsledné spektrum. Nezapomeňte pokaždé zkontrolovat konvergenci energetických hladin (obecně pro menší hodnoty \hbar je potřeba více bazových stavů).

Poznámka: Dvoujámový systém popsáný Hamiltoniánem \hat{H}' se používá například k modelování amoniakového maseru, k modelování systémů ochlazených iontů, v teorii kvantové informace, při studiu kvantových fázových přechodů nebo v kvantové chemii.

5 Variační metoda

Variační metoda¹³ je jedna z přibližných časově nezávislých metod v kvantové mechanice. Dalším přibližným metodám — stacionární a nestacionární poruchové metodě — se věnují sekce 10 a 12.

Nechť E_0 je přesná energie základního stavu systému popsaného Hamiltoniánem \hat{H} . Pak pro libovolný (normalizovatelný) vektor $|\psi\rangle$ z Hilbertova prostoru \mathcal{H} tohoto systému platí

$$E_0 \leq \frac{\langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle}. \quad (5.0.1)$$

Pokud máme nějakou množinu testovacích funkcí $|\theta\rangle \in \mathcal{M} \subset \mathcal{H}$, pak nám základní stav nejlépe aproximuje minimum funkcionálu

$$E_{\min} = \min_{|\theta\rangle \in \mathcal{M}} E[|\theta\rangle] = \frac{\langle \theta | \hat{H} | \theta \rangle}{\langle \theta | \theta \rangle}.$$

V praxi se užívá takové množiny vektorů $|\theta(\lambda)\rangle$, která je zcela parametrizována sadou čísel λ . Pak

$$E_{\min} = \min_{\lambda} E(\lambda) = \frac{\langle \theta(\lambda) | \hat{H} | \theta(\lambda) \rangle}{\langle \theta(\lambda) | \theta(\lambda) \rangle}. \quad (5.0.2)$$

5.1 Aproximace základního stavu nekonečně hluboké potenciálové jámy

Pomocí variačního principu nalezněte nejlepší aproximaci základního stavu nekonečně hluboké potenciálové jámy pološířky a

$$V(x) = \begin{cases} 0 & |x| < a \\ \infty & |x| > a \end{cases} \quad (5.1.1)$$

s testovací funkcí

$$\theta_{\lambda}(x) = \langle x | \theta(\lambda) \rangle = a^{\lambda} - |x|^{\lambda} \quad (5.1.2)$$

a srovnajte s přesným řešením

$$E_1 = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\pi^2}{4a^2}, \quad (5.1.3a)$$

$$\phi_1(x) = \frac{1}{\sqrt{a}} \cos \frac{\pi x}{2a}. \quad (5.1.3b)$$

Řešení:

K řešení se využije vztah (5.0.2), kde se minimalizace bude provádět přes jediný parametr λ . Výpočet spočívá ve dvou krocích:

¹³Běžně se označuje také jako *Ritzova variační metoda*.

1. Výpočet střední hodnoty Hamiltoniánu pro vlnovou funkci $\theta_\lambda(x)$:

$$\begin{aligned}
 \bar{H}(\lambda) &\equiv \frac{\langle \theta(\lambda) | \hat{H} | \theta(\lambda) \rangle}{\langle \theta(\lambda) | \theta(\lambda) \rangle} = \frac{-\frac{\hbar^2}{2m} \int_{-a}^a \theta_\lambda^*(x) \frac{d^2}{dx^2} \theta_\lambda(x) dx}{\int_{-a}^a |\theta_\lambda(x)|^2 dx} = \\
 &= \left| \begin{array}{l} \text{v čitateli i jmenovateli integrujeme sudé funkce} \\ \text{– stačí počítat na intervalu } (0; a) \end{array} \right| = \\
 &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\int_0^a (a^\lambda - x^\lambda) \frac{d^2}{dx^2} (a^\lambda - x^\lambda) dx}{\int_0^a (a^\lambda - x^\lambda)^2 dx} = \\
 &= \frac{\hbar^2}{2m} \lambda(\lambda-1) \frac{\int_0^a (a^\lambda - x^\lambda) x^{\lambda-2} dx}{\int_0^a (a^{2\lambda} - 2x^\lambda a^\lambda + x^{2\lambda}) dx} = \\
 &= \frac{\hbar^2}{2m} \lambda(\lambda-1) \frac{\left[\frac{1}{\lambda-1} a^\lambda x^{\lambda-1} - \frac{1}{2\lambda-1} x^{2\lambda-1} \right]_0^a}{\left[a^{2\lambda} x - \frac{2}{\lambda+1} a^\lambda x^{\lambda+1} + \frac{1}{2\lambda+1} x^{2\lambda+1} \right]} = \\
 &= \frac{\hbar^2}{2ma^2} \lambda(\lambda-1) \frac{\frac{1}{\lambda-1} - \frac{1}{2\lambda-1}}{1 - \frac{2}{\lambda+1} + \frac{1}{2\lambda+1}} = \\
 &= \frac{\hbar^2}{2ma^2} \lambda(\lambda-1) \frac{\frac{2\lambda-1-\lambda+1}{(\lambda-1)(2\lambda-1)}}{\frac{(\lambda+1)(2\lambda+1)-2(2\lambda+1)+\lambda+1}{(\lambda+1)(2\lambda+1)}} = \\
 &= \frac{\hbar^2}{4ma^2} \frac{(\lambda+1)(2\lambda+1)}{(2\lambda-1)}. \tag{5.1.4}
 \end{aligned}$$

2. Výpočet minima funkce $\bar{H}(\lambda)$:

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial \bar{H}(\lambda)}{\partial \lambda} &= 0 \\
 (2\lambda+2+2\lambda+1)(2\lambda-1) - 2(\lambda+1)(2\lambda+1) &= 0 \\
 4\lambda^2 - 4\lambda - 5 &= 0 \tag{5.1.5}
 \end{aligned}$$

Minimum je dáno kladným kořenem

$$\lambda_{\min} = \frac{1 + \sqrt{6}}{2} \approx 1,723. \tag{5.1.6}$$

Po dosazení vychází

$$\begin{aligned}
 E_{\min} \equiv \bar{H}(\lambda_{\min}) &= \frac{\hbar^2}{4ma^2} \frac{2\sqrt{6}+5}{2} = \\
 &= \frac{2\sqrt{6}+5}{\pi^2} E_0 \approx \\
 &\approx 1,00298 E_0 \tag{5.1.7}
 \end{aligned}$$

Za pozornost stojí, že i velice jednoduchá testovací funkce závislá jen na jednom jediném parametru dává velice přesný odhad energie základního stavu.

6 Skládání momentu hybnosti

Jsou zadány dva nezávislé operátory momentu hybnosti $\hat{\mathbf{J}}^{(1)}, \hat{\mathbf{J}}^{(2)}$, $[\hat{\mathbf{J}}^{(1)}, \hat{\mathbf{J}}^{(2)}] = 0$, které působí na Hilbertových prostorech $\mathcal{H}^{(1)}, \mathcal{H}^{(2)}$. Operátor celkového impulsmomentu¹⁴

$$\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{J}}^{(1)} + \hat{\mathbf{J}}^{(2)} \quad (6.0.3)$$

pak působí na Hilbertově prostoru $\mathcal{H} = \mathcal{H}^{(1)} \otimes \mathcal{H}^{(2)}$. Mezi jednotlivými operátory a jejich složkami platí komutační relace

$$[\hat{J}_j, \hat{J}_k] = i\epsilon_{jkl}\hat{J}_l, \quad (6.0.4a)$$

$$[\hat{J}_j, \hat{\mathbf{J}}^2] = 0, \quad (6.0.4b)$$

$$[\hat{\mathbf{J}}^2, \hat{\mathbf{J}}^{(1)2}] = [\hat{\mathbf{J}}^2, \hat{\mathbf{J}}^{(2)2}] = 0, \quad (6.0.4c)$$

$$[\hat{J}_j, \hat{\mathbf{J}}^{(1)2}] = [\hat{J}_j, \hat{\mathbf{J}}^{(2)2}] = 0. \quad (6.0.4d)$$

Z toho vyplývá, že na prostoru \mathcal{H} lze volit za úplnou množinu komutujících operátorů jednu z následujících dvou množin operátorů se svými bázemi:

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{J}}^{(1)2}, \hat{J}_3^{(1)}, \hat{\mathbf{J}}^{(2)2}, \hat{J}_3^{(2)} &\longrightarrow \{|j_1 m_1\rangle \otimes |j_2 m_2\rangle\} \\ \hat{\mathbf{J}}^{(1)2}, \hat{\mathbf{J}}^{(2)2}, \hat{\mathbf{J}}^2, \hat{J}_3 &\longrightarrow \{|j_1 j_2 j m\rangle\} \end{aligned} \quad (6.0.5)$$

(dále budeme užívat zjednodušené značení $|j_1 m_1\rangle \otimes |j_2 m_2\rangle \equiv |j_1 m_1 j_2 m_2\rangle$). Platí tedy

$$\hat{\mathbf{J}}^{(1)2} |j_1 l_2 l m\rangle = j_1(j_1 + 1) |j_1 j_2 j m\rangle, \quad (6.0.6a)$$

$$\hat{\mathbf{J}}^{(2)2} |j_1 j_2 j m\rangle = j_2(j_2 + 1) |j_1 j_2 j m\rangle, \quad (6.0.6b)$$

$$\hat{\mathbf{J}}^2 |j_1 j_2 j m\rangle = j(j + 1) |j_1 j_2 j m\rangle, \quad (6.0.6c)$$

$$\hat{J}_3 |j_1 j_2 j m\rangle = m |j_1 j_2 j m\rangle, \quad (6.0.6d)$$

přičemž kvantová čísla musejí splňovat

$$|j_1 - j_2| \leq j \leq j_1 + j_2, \quad m_1 + m_2 = m. \quad (6.0.7)$$

Mezi oběma bázemi platí vztah

$$|j_1 j_2 j m\rangle = \sum_{m_1 m_2} C_{j_1 m_1 j_2 m_2}^{j m} |j_1 m_1\rangle |j_2 m_2\rangle, \quad (6.0.8)$$

kde $C_{j_1 m_1 j_2 m_2}^{j m}$ jsou *Clebsch-Gordanovy koeficienty*¹⁵.

6.1 Explicitní výpočet Clebsch-Gordanových koeficientů

Explicitním výpočtem pomocí posunovacích operátorů $\hat{J}_\pm = \hat{J}_1 \pm i\hat{J}_2$ nalezněte Clebsch-Gordanovy koeficienty pro skládání impulsmomentů $j_1 = j_2 = 1$.

¹⁴Formálně by se mělo správně psát

$$\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{J}}^{(1)} \otimes \hat{\mathbf{1}}^{(2)} + \hat{\mathbf{1}}^{(1)} \otimes \hat{\mathbf{J}}^{(2)}, \quad (6.0.1)$$

což ve složkách znamená

$$\hat{J}_j = \hat{J}_j^{(1)} \otimes \hat{\mathbf{1}}^{(2)} + \hat{\mathbf{1}}^{(1)} \otimes \hat{J}_j^{(2)}, \quad j = 1, 2, 3, \quad (6.0.2)$$

ve shodě s již dříve použitým operátorem dvou spinů (3.1.3).

¹⁵Jiné způsoby zápisu Clebsch-Gordanových koeficientů používané v literatuře jsou

$$C_{j_1 m_1 j_2 m_2}^{j m} = \langle j_1 m_1 j_2 m_2 | j m \rangle = (j_1 j_2 j | m_1 m_2 m) \quad (6.0.9)$$

Řešení:

Budeme užívat zkrácený zápis

$$|j_1 j_2 j m\rangle = |1 1 j m\rangle \rightarrow |j m\rangle \quad (6.1.1a)$$

$$|j_{1,2} m_{1,2}\rangle = |1 m_{1,2}\rangle \rightarrow |m_{1,2}\rangle \quad (6.1.1b)$$

Na základě trojúhelníkové nerovnosti (6.0.7) může celkový moment hybnosti nabývat pouze hodnot $j \in \{0, 1, 2\}$.

- Začíná se obvykle s vektory s nejvyšší váhou:

$$|2 2\rangle = |1\rangle |1\rangle \quad (6.1.2)$$

(fázi můžeme volit obecně libovolně, jednička je v tzv. *Condon-Shortleyově fázové konvenci*), takže

$$C_{1111}^{22} = 1. \quad (6.1.3)$$

- K výpočtu dalších Clebsch-Gordanových koeficientů v podprostoru $j = 2$ se využívá postupného působení posunovacích operátorů \hat{J}_\pm , které splňují

$$\boxed{\begin{aligned} \hat{J}_\pm |j m\rangle &= \alpha^{(\pm)}(j, m) |j m \pm 1\rangle, \\ \alpha^{(\pm)}(j, m) &= \sqrt{j(j+1) - m(m \pm 1)} \end{aligned}} \quad (6.1.4)$$

(analogické vztahy platí pro jednotlivé impulsmomenty $\mathbf{J}^{(1,2)}$, přičemž $\hat{J}_\pm = \hat{J}_\pm^{(1)} + \hat{J}_\pm^{(2)}$). Působení operátoru \hat{J}_- na obě strany rovnosti (6.1.2) dá

$$\hat{J}_- |2 2\rangle = 2 |2 1\rangle, \quad (6.1.5a)$$

$$\begin{aligned} \hat{J}_- |1\rangle |1\rangle &= \hat{J}_-^{(1)} |1\rangle |1\rangle + \hat{J}_-^{(2)} |1\rangle |1\rangle \\ &= \sqrt{2} (|0\rangle |1\rangle + |1\rangle |0\rangle), \end{aligned} \quad (6.1.5b)$$

z čehož vyplývá, že

$$|2 1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|1\rangle |0\rangle + |0\rangle |1\rangle), \quad (6.1.6)$$

a tedy

$$C_{1011}^{21} = C_{1110}^{21} = \frac{1}{\sqrt{2}}. \quad (6.1.7)$$

- Jelikož musí platit $m = m_1 + m_2$, viz (6.0.7), jsou ostatní Clebsch-Gordanovy koeficienty s $j = 2$ a $m = 1$ nulové:

$$C_{1111}^{21} = C_{1010}^{21} = C_{1-110}^{21} = C_{101-1}^{21} = C_{1-11-1}^{21} = 0. \quad (6.1.8)$$

- Další působení posunovacího operátoru vede na

$$\hat{J}_- |2 1\rangle = \sqrt{6} |2 0\rangle, \quad (6.1.9a)$$

$$\begin{aligned} \hat{J}_- \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle |1\rangle + |1\rangle |0\rangle) &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\sqrt{2} |-1\rangle |1\rangle + \sqrt{2} |0\rangle |0\rangle + \sqrt{2} |0\rangle |0\rangle + \sqrt{2} |1\rangle |-1\rangle) = \\ &= |-1\rangle |1\rangle + 2 |0\rangle |0\rangle + |1\rangle |-1\rangle, \end{aligned} \quad (6.1.9b)$$

takže

$$|2 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}} (|-1\rangle |1\rangle + 2 |0\rangle |0\rangle + |1\rangle |-1\rangle). \quad (6.1.10)$$

Odpovídající Clebsch-Gordanovy koeficienty jsou

$$C_{1-111}^{20} = C_{111-1}^{20} = \frac{1}{\sqrt{6}} \quad (6.1.11a)$$

$$C_{1010}^{20} = \frac{2}{\sqrt{6}}. \quad (6.1.11b)$$

Všechny ostatní koeficienty s $l = 2$, $m = 0$ jsou nulové.

- Opakování postupu působení operátorem \hat{J}_- dá

$$|2 - 1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle |-1\rangle + |-1\rangle |0\rangle), \quad (6.1.12a)$$

$$|2 - 2\rangle = |-1\rangle |-1\rangle \quad (6.1.12b)$$

a příslušné Clebsch-Gordanovy koeficienty jsou

$$C_{101-1}^{2-1} = C_{1-110}^{2-1} = \frac{1}{\sqrt{2}} \quad (6.1.13a)$$

$$C_{1-11-1}^{2-2} = 1. \quad (6.1.13b)$$

- V dalším kroku se přejde do podprostoru $j = 1$. Vektor s nejvyšší vahou $|1 1\rangle$ lze zkonstruovat pouze ze dvou vektorů báze nesložených momentů hybnosti,

$$|1 1\rangle = c_1 |0\rangle |1\rangle + c_2 |1\rangle |0\rangle. \quad (6.1.14)$$

Tento vektor musí být kolmý na $|2 1\rangle$,

$$\langle 2 1 | 1 1 \rangle = 0, \quad (6.1.15)$$

z čehož plyne rovnice

$$\frac{c_1}{\sqrt{2}} + \frac{c_2}{\sqrt{2}} = 0. \quad (6.1.16)$$

Koeficienty c_1, c_2 jsou navíc vázány normalizační podmínkou $|c_1|^2 + |c_2|^2 = 1$. Podle Condon-Shortleyovy fázové konvence se koeficienty c_1, c_2 volí reálné, a navíc koeficient u $|1\rangle |0\rangle$ kladný. To vede na jednoznačné vyjádření

$$|1 1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|1\rangle |0\rangle - |0\rangle |1\rangle), \quad (6.1.17)$$

z čehož lze získat Clebsch-Gordanovy koeficienty

$$C_{1110}^{11} = \frac{1}{\sqrt{2}}, \quad (6.1.18a)$$

$$C_{1011}^{11} = -\frac{1}{\sqrt{2}}. \quad (6.1.18b)$$

- Nyní lze opět působit operátorem \hat{J}_- , což dá

$$|1 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|1\rangle |-1\rangle - |-1\rangle |1\rangle), \quad (6.1.19a)$$

$$|1 - 1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle |-1\rangle - |-1\rangle |0\rangle), \quad (6.1.19b)$$

takže

$$C_{111-1}^{10} = \frac{1}{\sqrt{2}}, \quad (6.1.20a)$$

$$C_{1-111}^{10} = -\frac{1}{\sqrt{2}}, \quad (6.1.20b)$$

$$C_{101-1}^{1-1} = \frac{1}{\sqrt{2}}, \quad (6.1.20c)$$

$$C_{1-110}^{1-1} = -\frac{1}{\sqrt{2}}. \quad (6.1.20d)$$

- Zbývá určit poslední stav, který leží v jednorozměrném podprostoru $j = 0$:

$$|0 0\rangle = d_1 |1\rangle |-1\rangle + d_2 |0\rangle |0\rangle + d_3 |-1\rangle |1\rangle. \quad (6.1.21)$$

Podmínky ortogonality

$$\langle 2 0 | 0 0 \rangle = \langle 1 0 | 0 0 \rangle = 0 \quad (6.1.22)$$

vedou na soustavu rovnic

$$\frac{d_1}{\sqrt{6}} + \frac{2d_2}{\sqrt{6}} + \frac{d_3}{\sqrt{6}} = 0, \quad (6.1.23a)$$

$$\frac{d_1}{\sqrt{2}} - \frac{d_3}{\sqrt{2}} = 0, \quad (6.1.23b)$$

z které vyplývají vztahy mezi koeficienty

$$d_1 = d_3 = -d_2. \quad (6.1.24)$$

S uvážením Condon-Shortleyovy fázové konvence je tedy

$$|00\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} (|1\rangle |-1\rangle - |0\rangle |0\rangle + |-1\rangle |1\rangle) \quad (6.1.25)$$

a

$$C_{111-1}^{00} = C_{1-111}^{00} = \frac{1}{\sqrt{3}} \quad (6.1.26a)$$

$$C_{1010}^{00} = -\frac{1}{\sqrt{3}}. \quad (6.1.26b)$$

j m m_1 m_2	2 +2	2 +1	1 +1	2 0	1 0	0 0	2 -1	1 -1	2 -2
+1 +1	1								
+1 0		$\frac{1}{\sqrt{2}}$	$\frac{1}{\sqrt{2}}$						
0 +1		$\frac{1}{\sqrt{2}}$	$-\frac{1}{\sqrt{2}}$						
+1 -1				$\frac{1}{\sqrt{6}}$	$\frac{1}{\sqrt{2}}$	$\frac{1}{\sqrt{3}}$			
0 0				$\frac{2}{\sqrt{6}}$	0	$-\frac{1}{\sqrt{3}}$			
-1 +1				$\frac{1}{\sqrt{6}}$	$-\frac{1}{\sqrt{2}}$	$\frac{1}{\sqrt{3}}$			
0 -1							$\frac{1}{\sqrt{2}}$	$\frac{1}{\sqrt{2}}$	
-1 0							$\frac{1}{\sqrt{2}}$	$-\frac{1}{\sqrt{2}}$	
-1 -1									1

Tabulka 1: Clebsch-Gordanovy koeficienty pro impulsmomenty $j_1 = j_2 = 1$. Pokud v tabulce není uvedeno žádné číslo, je příslušný C-G koeficient nulový.

Všechny vypočítané Clebsch-Gordanovy koeficienty pro impulsmomenty $j_1 = j_2 = 1$ jsou přehledně uvedeny v tabulce 1.

Shrnutí

Obecný postup výpočtu Clebsch-Gordanových koeficientů je tedy následující:

1. Začne se s vektorem s nejvyšší vahou

$$|j_1, j_2, j = j_1 + j_2, m = j_1 + j_2\rangle = |j_1 j_1\rangle |j_2 m_2\rangle \quad (6.1.27)$$

2. Opakovaně se zapůsobí posunovacím operátorem \hat{J}_- na obě strany rovnice. Tím se naleznou všechny vektory $|j_1, j_2, j = j_1 + j_2, m\rangle$, $m \in \{-(j_1 + j_2), \dots, j_1 + j_2\}$ z podprostoru $j = j_1 + j_2$.
3. Vektor z podprostoru s o jedničku nižším $j = j_1 + j_2 - 1$ a s odpovídajícím nejvyšším možným $m = j_1 + j_2 - 1$ se určí z podmínky kolmosti na již vypočtený vektor z prostoru $j = j_1 + j_2$,

$$\langle j_1, j_2, j = j_1 + j_2 - 1, m = j_1 + j_2 - 1 | j_1, j_2, j = j_1 + j_2, m = j_1 + j_2 - 1 \rangle = 0. \quad (6.1.28)$$

V Condon-Shortleyově fázové konvenci je pak koeficient u členu s nejvyšším m_1 kladný a reálný.

4. Body 2 a 3 se opakují do té doby, než se dospěje do podprostoru s nejnižším možným $j = |j_1 - j_2|$.

6.2 Maticová realizace operátoru momentu hybnosti

Nalezněte maticovou realizaci operátoru $\hat{\mathbf{J}}$ pro částici se spinem $j = \frac{3}{2}$.

Řešení:

Hilbertův prostor všech stavů je čtyřrozměrný a jeho bázi tvoří vektory $|\frac{3}{2} m\rangle$, kde $m \in \{-\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{3}{2}\}$. Operátory \hat{J}_j budou tedy realizovány maticemi 4×4 . Stav $|\frac{3}{2} m\rangle$ se přiřadí k vektorům

$$\left|\frac{3}{2}, \frac{3}{2}\right\rangle \equiv \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \left|\frac{3}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle \equiv \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (6.2.1a)$$

$$\left|\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle \equiv \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \left|\frac{3}{2}, -\frac{3}{2}\right\rangle \equiv \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (6.2.1b)$$

Jelikož $\hat{J}_3 |j m\rangle = m |j m\rangle$, matice J_3 bude diagonální, přičemž na diagonále budou vlastní hodnoty m :

$$J_3 = \begin{pmatrix} \frac{3}{2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\frac{3}{2} \end{pmatrix}. \quad (6.2.2)$$

Pro výpočet J_1 a J_2 se využijeme vlastností operátorů $\hat{J}_{\pm} \equiv \hat{J}_1 \pm i\hat{J}_2$ (6.1.4):

$$J_- \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \alpha^{(-)} \left(\frac{3}{2}, \frac{3}{2}\right) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \sqrt{\frac{3}{2} \left(\frac{3}{2} + 1\right) - \frac{3}{2} \left(\frac{3}{2} - 1\right)} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \sqrt{3} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (6.2.3a)$$

a podobně

$$J_- \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \alpha^{(-)} \left(\frac{3}{2}, \frac{1}{2}\right) \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} = 2 \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (6.2.3b)$$

$$J_- \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \alpha^{(-)} \left(\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}\right) \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \sqrt{3} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (6.2.3c)$$

takže

$$J_- = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ \sqrt{3} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 \end{pmatrix}, \quad J_+ = J_-^\dagger = \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{3} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{3} \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (6.2.4)$$

a z inverzních vztahů k definici \hat{J}_{\pm} se dostane

$$J_1 = \frac{J_+ + J_-}{2} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{3} & 0 & 0 \\ \sqrt{3} & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & \sqrt{3} \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 \end{pmatrix}, \quad (6.2.5a)$$

$$J_2 = \frac{J_+ - J_-}{2i} = \frac{i}{2} \begin{pmatrix} 0 & -\sqrt{3} & 0 & 0 \\ \sqrt{3} & 0 & -2 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & -\sqrt{3} \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 \end{pmatrix}. \quad (6.2.5b)$$

Přímým výpočtem se lze přesvědčit, že tyto matice splňují komutační relace pro impulsmoment $[J_j, J_k] = i\epsilon_{jkl}J_l$. Jedná se o čtyřrozměrnou reprezentaci rotační grupy $SO(3)$.

6.3 Moment hybnosti atomu vodíku

Jádro atomu vodíku (proton) má spin $s_p = \frac{1}{2}$, spin obíhajícího elektronu je $s_e = \frac{1}{2}$ a elektron se nachází na orbitalu d (orbitální moment hybnosti je tedy $l = 2$). Operátor celkového momentu hybnosti označíme

$$\mathbf{J} = \mathbf{\hat{S}}^{(p)} + \mathbf{\hat{S}}^{(e)} + \mathbf{\hat{L}}. \quad (6.3.1)$$

1. Určete celkový počet kvantových stavů, kterých může moment hybnosti \mathbf{J} nabývat.
2. Určete, jaké hodnoty může mít celkový moment hybnosti j a kolik stavů přísluší každé jeho hodnotě.
3. Určete normalizované stavy

$$|j\ m\rangle = \begin{cases} |3\ 3\rangle \\ |3\ 2\rangle \\ |3\ 1\rangle \end{cases}, \quad (6.3.2)$$

kde m značí projekci celkového momentu hybnosti \mathbf{J} na třetí souřadnou osu.

4. Určete střední hodnotu

$$\langle 3\ 2 | \mathbf{\hat{S}}^{(e)} \cdot \mathbf{\hat{S}}^{(p)} | 3\ 2 \rangle. \quad (6.3.3)$$

Nápověda: Skalární součin operátorů $\mathbf{\hat{S}}^{(e)} \cdot \mathbf{\hat{S}}^{(p)}$ vyjádřete pomocí operátorů $\hat{S}_{\pm}^{(e,p)}$ a $\hat{S}_3^{(e,p)}$.

Řešení:

1. Pro obecnou hodnotu momentu hybnosti j existuje $2j + 1$ odlišných stavů, takže

- $s_p = \frac{1}{2}$ dává 2 možné stavy,
- $s_e = \frac{1}{2}$ dává také 2 možné stavy a
- $l = 2$ dává 5 možných stavů,

celkem tedy $2 \times 2 \times 5 = 20$ stavů.

2. Složení dvou momentů hybnosti j_1 a j_2 vede díky trojúhelníkové nerovnosti (6.0.7) na celkový moment hybnosti s možnými hodnotami od $|j_1 - j_2|$ do $j_1 + j_2$. Složení dvou spinů s_p a s_e dá tedy dvě možné hodnoty momentu hybnosti $s = 0$ a $s = 1$. Pokud se k mezivýsledku $s = 0$ přidá orbitální moment hybnosti $l = 2$, výsledkem bude jediná možná hodnota $j = 2$ (5 možných stavů). Přidá-li se orbitální moment hybnosti k mezivýsledku $s = 1$, budou možné tři různé hodnoty $j = 1$ (3 možné stavy), $j = 2$ (5 možných stavů) a $j = 3$ (7 možných stavů). Platí tedy:

- $j = 1$ dává 3 možné stavy,
- $j = 2$ dává 10 možných stavů (5 pro $s = 0$ a 5 pro $s = 1$) a
- $j = 3$ dává 7 možných stavů,

celkem tedy $3 + 10 + 7 = 20$ stavů, což souhlasí s výsledkem předchozího bodu.

3. Stav $|j\ m\rangle = |3\ 3\rangle$ je jedinečný (je to stav s nejvyšší vahou), který má v bázi jednotlivých momentů hybnosti vyjádření

$$|3\ 3\rangle = \left| \frac{1}{2} \frac{1}{2} \right\rangle_p \otimes \left| \frac{1}{2} \frac{1}{2} \right\rangle_e \otimes |2\ 2\rangle_J. \quad (6.3.4)$$

Stav $|3\ 2\rangle$ se získá působením posunovacího operátoru $\hat{J}_- = \hat{S}_{p-} + \hat{S}_{e-} + \hat{J}_-$ na obě strany rovnosti za využití vzorců (6.1.4) (pro zjednodušení zápisu vynecháváme znak tenzorového součinu):

$$\begin{aligned} \sqrt{6} |3\ 2\rangle &= \left| \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right\rangle_p \left| \frac{1}{2} \frac{1}{2} \right\rangle_e |2\ 2\rangle_J + \left| \frac{1}{2} \frac{1}{2} \right\rangle_p \left| \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right\rangle_e |2\ 2\rangle_J \\ &\quad + 2 \left| \frac{1}{2} \frac{1}{2} \right\rangle_p \left| \frac{1}{2} \frac{1}{2} \right\rangle_e |2\ 1\rangle_J, \end{aligned} \quad (6.3.5)$$

z čehož se vyjádří stav $|3\ 2\rangle$ vydělením $\sqrt{6}$.

Opakované působení operátorem \hat{J}_- dá zbývající hledané stavy

$$\begin{aligned}
 |3\ 1\rangle &= \frac{1}{2\sqrt{15}} \left(\left| \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right\rangle_p \left| \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right\rangle_e |2\ 2\rangle_J + 2 \left| \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right\rangle_p \left| \frac{1}{2} \frac{1}{2} \right\rangle_e |2\ 1\rangle_J \right. \\
 &\quad + \left| \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right\rangle_p \left| \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right\rangle_e |2\ 2\rangle_J + 2 \left| \frac{1}{2} \frac{1}{2} \right\rangle_p \left| \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right\rangle_e |2\ 1\rangle_J \\
 &\quad + 2 \left| \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right\rangle_p \left| \frac{1}{2} \frac{1}{2} \right\rangle_e |2\ 1\rangle_J + 2 \left| \frac{1}{2} \frac{1}{2} \right\rangle_p \left| \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right\rangle_e |2\ 1\rangle_J \\
 &\quad \left. + 2\sqrt{6} \left| \frac{1}{2} \frac{1}{2} \right\rangle_p \left| \frac{1}{2} \frac{1}{2} \right\rangle_e |2\ 0\rangle_J \right) \\
 &= \frac{1}{\sqrt{15}} \left(\left| \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right\rangle_p \left| \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right\rangle_e |2\ 2\rangle_J + 2 \left| \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right\rangle_p \left| \frac{1}{2} \frac{1}{2} \right\rangle_e |2\ 1\rangle_J \right. \\
 &\quad \left. + 2 \left| \frac{1}{2} \frac{1}{2} \right\rangle_p \left| \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right\rangle_e |2\ 1\rangle_J + \sqrt{6} \left| \frac{1}{2} \frac{1}{2} \right\rangle_p \left| \frac{1}{2} \frac{1}{2} \right\rangle_e |2\ 0\rangle_J \right). \quad (6.3.6)
 \end{aligned}$$

4. Pro dva obecné momenty hybnosti $\hat{\mathbf{A}}, \hat{\mathbf{B}}$ platí **rozklad**

$$\hat{\mathbf{A}} \cdot \hat{\mathbf{B}} = \hat{A}_1 \hat{B}_1 + \hat{A}_2 \hat{B}_2 + \hat{A}_3 \hat{B}_3 = \frac{1}{2} (\hat{A}_+ \hat{B}_- + \hat{A}_- \hat{B}_+) + \hat{A}_3 \hat{B}_3, \quad (6.3.7)$$

takže speciálně pro $\hat{\mathbf{A}} = \hat{\mathbf{S}}_p$ a $\hat{\mathbf{B}} = \hat{\mathbf{S}}_e$ se dostane

$$\begin{aligned}
 \hat{S}_{p3} \hat{S}_{e3} |3\ 2\rangle &= \frac{1}{\sqrt{6}} \left(-\frac{1}{4} \left| \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right\rangle_p \left| \frac{1}{2} \frac{1}{2} \right\rangle_e |2\ 2\rangle_J - \frac{1}{4} \left| \frac{1}{2} \frac{1}{2} \right\rangle_p \left| \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right\rangle_e |2\ 2\rangle_J \right. \\
 &\quad \left. + \frac{1}{2} \left| \frac{1}{2} \frac{1}{2} \right\rangle_p \left| \frac{1}{2} \frac{1}{2} \right\rangle_e |2\ 1\rangle_J \right), \quad (6.3.8a)
 \end{aligned}$$

$$\hat{S}_{p+} \hat{S}_{e-} |3\ 2\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}} \left| \frac{1}{2} \frac{1}{2} \right\rangle_p \left| \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right\rangle_e |2, 2\rangle_J, \quad (6.3.8b)$$

$$\hat{S}_{p-} \hat{S}_{e+} |3\ 2\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}} \left| \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right\rangle_p \left| \frac{1}{2} \frac{1}{2} \right\rangle_e |2, 2\rangle_J, \quad (6.3.8c)$$

Dílčí maticové elementy pro rozklad (6.3.7) jsou

$$\langle 3\ 2 | \hat{S}_{p3} \hat{S}_{e3} | 3\ 2 \rangle = \frac{1}{6} \left(-\frac{1}{4} - \frac{1}{4} + 1 \right) = \frac{1}{12}, \quad (6.3.9a)$$

$$\langle 3\ 2 | \hat{S}_{p+} \hat{S}_{e-} | 3\ 2 \rangle = \langle 3\ 2 | \hat{S}_{p-} \hat{S}_{e+} | 3\ 2 \rangle = \frac{1}{6}, \quad (6.3.9b)$$

a hledaný maticový element má tedy hodnotu

$$\langle 3\ 2 | \hat{\mathbf{S}}_p \cdot \hat{\mathbf{S}}_e | 3\ 2 \rangle = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{6} + \frac{1}{6} \right) + \frac{1}{12} = \frac{1}{4}. \quad (6.3.10)$$

Poznámka: Příklad je převzat ze sbírky [8], příklad 3.12.

7 Potenciály s δ -funkcemi

7.1 Jednoduchá δ jáma nebo bariéra

Částice o hmotnosti M se nachází v potenciálu ve tvaru jednoduché δ funkce,

$$V(x) = c \delta(x), \quad (7.1.1)$$

kde c je konstanta, jejíž velikost udává „sílu“ potenciálu. Pokud je $c < 0$, jedná se o jámu, v opačném případě o bariéru.

1. Napište Schrödingerovu rovnici pro tento model a nalezněte podmínky, které musí splňovat vlnová funkce v bodě, ve kterém se nachází δ funkce.
2. Pro případ jámy $c < 0$ nalezněte všechny vázané stavy (tj. stavy se zápornou energií, existují-li) a příslušné normalizované vlastní funkce.
3. Nalezněte řešení pro $E > 0$ (v této oblasti je spektrum spojitě). Vypočítejte pravděpodobnost průchodu T a pravděpodobnost odrazu R na potenciálu a nakreslete graf $T = T(E)$, $R = R(E)$.
4. Vypočítejte fázové posunutí δ vlnové funkce a zakreslete funkci $\delta = \delta(E)$.

Řešení:

1. Schrödingerova rovnice pro vlnovou funkci $\psi(x)$ zní

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2M} \frac{d^2}{dx^2} + c \delta(x) \right] \psi(x) = E \psi(x). \quad (7.1.2)$$

Integrace v malém okolí $x = 0$, ve kterém sedí δ funkce, vede na vztah

$$-\frac{\hbar^2}{2M} [\psi'(\epsilon) - \psi'(-\epsilon)] + c\psi(0) = E \int_{-\epsilon}^{\epsilon} \psi(x) dx, \quad (7.1.3)$$

kde $\psi'(x) \equiv d\psi(x)/dx$. Limita $\epsilon \rightarrow 0+$ dá sešívací podmínku¹⁶

$$\boxed{\psi'(0+) - \psi'(0-) = K\psi(0)}, \quad (7.1.6)$$

kde $\psi'(0\pm)$ označuje limitu zleva ($-$), resp. zprava ($+$) funkce $\psi'(x)$ v bodě $x = 0$ a

$$K = \frac{2Mc}{\hbar^2}. \quad (7.1.7)$$

Vlnová funkce při průchodu δ funkcí potenciálu musí být spojitá a její derivace má skok daný vzorcem (7.1.6).

2. Vázaný stav se musí nacházet na energii $E < 0$. Pro $x \neq 0$ má Schrödingerova rovnice (7.1.2) tvar jako pro volnou částici

$$-\frac{\hbar^2}{2M} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = E\psi(x) \quad (7.1.8)$$

a její obecné řešení je

$$\psi(x) = A e^{\kappa x} + B e^{-\kappa x}, \quad (7.1.9)$$

¹⁶Rovnice (7.1.6) lze též formálně přepsat pomocí logaritmické derivace

$$L(x) \equiv \frac{\psi'(x)}{\psi(x)} = \frac{d}{dx} \ln \psi(x) \quad (7.1.4)$$

na tvar

$$L(0+) - L(0-) = K. \quad (7.1.5)$$

kde $A, B \in \mathbb{C}$ jsou konstanty a

$$\kappa = \sqrt{-\frac{2ME}{\hbar^2}}. \quad (7.1.10)$$

Vlnová funkce v oblastech I (nalevo od δ funkce, $x < 0$) a II (napravo od δ funkce, $x > 0$), viz obrázek 5, je

$$\psi_I(x) = A e^{\kappa x} + B e^{-\kappa x}, \quad x < 0, \quad (7.1.11a)$$

$$\psi_{II}(x) = C e^{\kappa x} + D e^{-\kappa x}, \quad x > 0. \quad (7.1.11b)$$

Aby byla vlnová funkce normovatelná (kvadraticky integrovatelná), musí vymizet v nekonečnu, $\lim_{x \rightarrow \pm\infty} \psi(x) = 0$, z čehož plyne, že

$$B = C = 0. \quad (7.1.12)$$

Sešívací podmínky [spojitost, skok v derivaci (7.1.6)] v bodě $x = 0$ dávají

$$\psi_I(0) = \psi_{II}(0), \quad (7.1.13a)$$

$$\psi'_{II}(0) - \psi'_I(0) = K\psi_I(0), \quad (7.1.13b)$$

takže

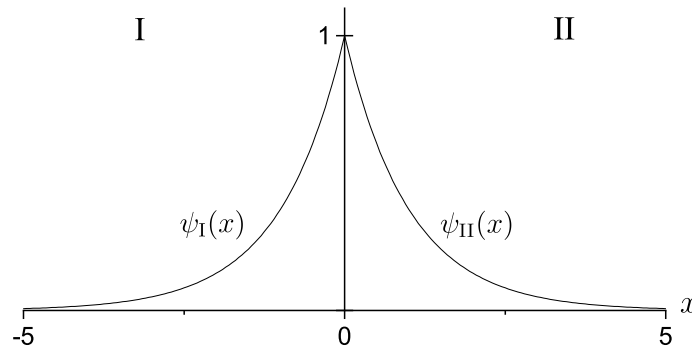
$$A = D, \quad (7.1.14a)$$

$$\kappa = -\frac{K}{2}. \quad (7.1.14b)$$

Dosazení (7.1.7) a (7.1.10) vede na kvantovací podmínku

$$E = -\frac{Mc^2}{2\hbar^2}, \quad (7.1.15)$$

která udává energii *jediného* vázaného stavu systému.



Obrázek 5: Normalizovaná vlnová funkce vázaného stavu pro $M = \hbar = 1$, $c = -1$.

Zbývá nanormovat vlnovou funkci, tj. nalézt hodnotu parametru A :

$$\begin{aligned} 1 &= \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = \int_{-\infty}^0 |\psi_I(x)|^2 dx + \int_0^{\infty} |\psi_{II}(x)|^2 dx \\ &= |A|^2 \left\{ \int_{-\infty}^0 e^{2\kappa x} dx + \int_0^{\infty} e^{-2\kappa x} dx \right\} \\ &= |A|^2 \left\{ \left[\frac{1}{2\kappa} e^{2\kappa x} \right]_{-\infty}^0 + \left[-\frac{1}{2\kappa} e^{-2\kappa x} \right]_0^{\infty} \right\} = \frac{|A|^2}{\kappa}, \end{aligned} \quad (7.1.16)$$

Při volbě nulové komplexní fáze normalizačního parametru je

$$A = D = \sqrt{\kappa} = \sqrt{-\frac{Mc}{\hbar^2}} \quad (7.1.17)$$

[veličina κ byla vyjádřena pomocí (7.1.14b) a (7.1.10)]. Normalizovaná vlnová funkce vázaného stavu (7.1.15) je tedy

$$\psi_I(x) = \sqrt{-\frac{Mc}{\hbar^2}} e^{-\frac{Mc}{\hbar^2}x}, \quad (7.1.18a)$$

$$\psi_{II}(x) = \sqrt{-\frac{Mc}{\hbar^2}} e^{\frac{Mc}{\hbar^2}x}, \quad (7.1.18b)$$

nebo souhrnně

$$\psi(x) = \sqrt{-\frac{Mc}{\hbar^2}} e^{-\frac{Mc}{\hbar^2}|x|}. \quad (7.1.19)$$

Její průběh je znázorněn na obrázku 5.

3. Jedná se o rozptylovou úlohu na 1D potenciálu. Částice přichází z oblasti, ve které je asymptoticky volná, do lokalizované interakční oblasti. Interakce způsobí, že se částice může s určitou nenulovou pravděpodobností odrazit. Pokud naopak projde, může se změnit její fáze. Tyto změny udávají měřitelné veličiny pravděpodobnost průchodu T , pravděpodobnost odrazu R a fázový posun δ .

V kladných energiích má systém spojité spektrum. V oblastech I a II je řešením Schödingerovy rovnice (7.1.11) se vlnová funkce vyjádří jako

$$\begin{aligned} \psi_I(x) &= A e^{ikx} + B e^{-ikx}, \\ \psi_{II}(x) &= C e^{ikx} + D e^{-ikx}, \end{aligned} \quad (7.1.20a)$$

kde

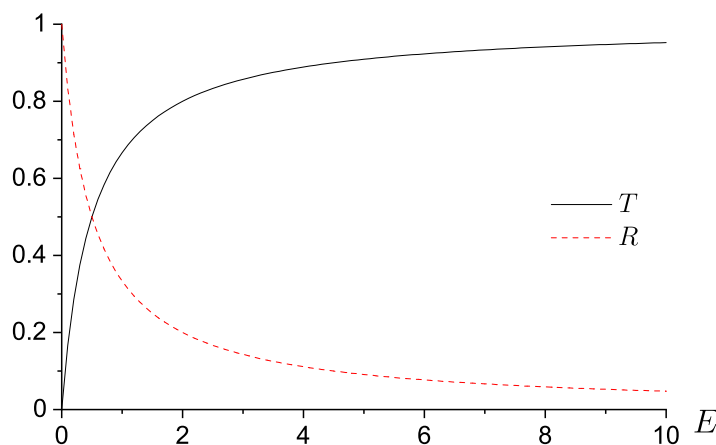
$$k = \sqrt{\frac{2ME}{\hbar^2}}. \quad (7.1.21)$$

Pro určení pravděpodobností průchodu a odrazu se předpokládá, že k δ funkci přichází vlna zleva (člen úměrný A) a rozdělí se na odraženou vlnu (člen úměrný B) a prošlou vlnu (člen úměrný D). Zprava žádná vlna nepřichází, takže $D = 0$. Hledané pravděpodobnosti se pak definují jako

$$R = |\Re|^2, \quad \Re = \frac{B}{A}, \quad (7.1.22a)$$

$$T = |\Im|^2, \quad \Im = \frac{C}{A} = |T| e^{i\delta}, \quad (7.1.22b)$$

kde \Re je amplituda odrazu, \Im je amplituda průchodu a δ je fázové posunutí.



Obrázek 6: Pravděpodobnost průchodu (černá čára) a odrazu (červená přerušovaná čára) pro potenciál tvořený jednou δ funkcí ($M = \hbar = c = 1$). Jejich součet je roven 1.

Sešívání vlnové funkce (7.1.20) v bodě $x = 0$ vede na podmínky

$$A + B = C, \quad (7.1.23a)$$

$$ik(C + B - A) = KC. \quad (7.1.23b)$$

Vyjádřením B z první podmínky a dosazením do druhé se dostane

$$C = \frac{A}{1 - \frac{K}{2ik}}. \quad (7.1.24)$$

Pravděpodobnost průchodu je tedy

$$T = \frac{1}{1 - \frac{K}{2ik}} \frac{1}{1 + \frac{K}{2ik}} = \frac{1}{1 + \left(\frac{K}{2k}\right)^2} = \frac{1}{1 + \frac{Mc^2}{2\hbar^2 E}} \quad (7.1.25)$$

a analogicky pravděpodobnost odrazu

$$R = \frac{1}{1 + \left(\frac{2K}{k}\right)^2} = \frac{1}{1 + \frac{2\hbar^2 E}{Mc^2}}. \quad (7.1.26)$$

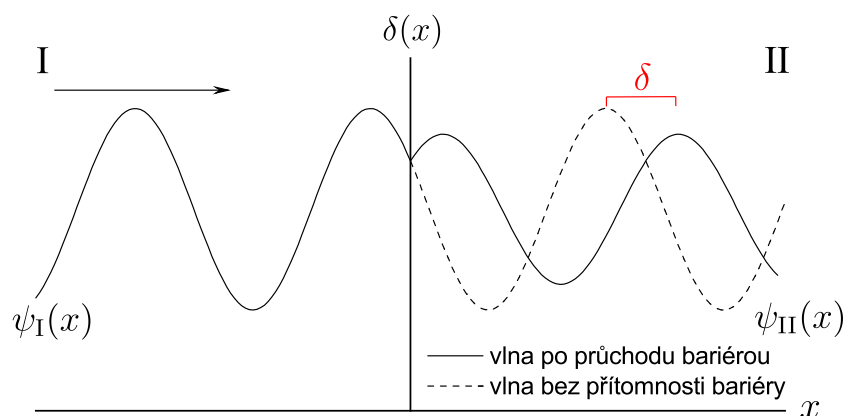
Platí, že $T + R = 1$. Obě pravděpodobnosti jsou zakresleny na obrázku 6.

Poznámka: Povšiměte si, že R ani T nezávisí na znaménku c , tj. pravděpodobnost průchodu a odrazu je při zadané energii stejná pro δ jámu i pro δ bariéru.

4. Fázové posunutí¹⁷ δ značí fázi, o kterou se posune rovinná vlna kvůli přítomnosti potenciálu oproti případu bez potenciálu. Situace je schematicky znázorněna na obrázku 7. Pro určení fázového posunutí se vyjde z definice (7.1.22b), což po dosazení dá

$$\delta = \arctan \frac{\text{Im } \mathfrak{T}}{\text{Re } \mathfrak{T}} = -\arctan \frac{K}{2k} = -\arctan c \sqrt{\frac{M}{2\hbar^2 E}}. \quad (7.1.27)$$

Energetická závislost fázového posunutí je zakreslena na obrázku 8.



Obrázek 7: Vlnová funkce pro výpočet fázového posunutí δ (červeně). Vlnová funkce za nepřítomnosti potenciálu $V(x) = c \delta(x)$ je znázorněna přerušovanou čarou.

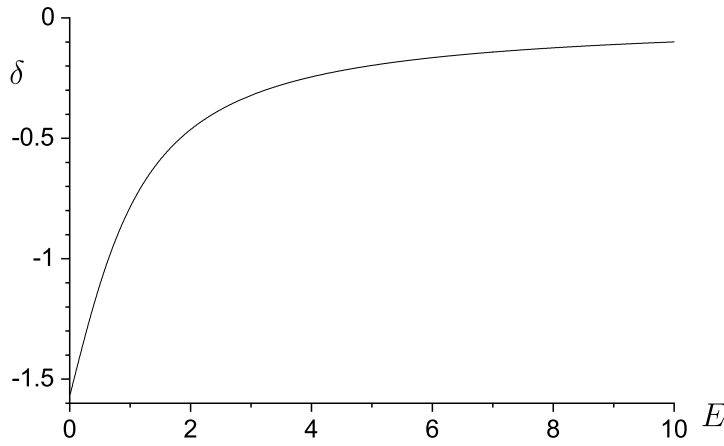
Poznámka: Potenciál ve tvaru δ funkce má simulovat velmi úzkou a hlubokou potenciálovou jámu, resp. bariéru. Jedná se vlastně o limitní případ konečné jámy (bariéry) šířky a a hloubky (výšky) v , kde $a \rightarrow 0$ a zároveň $va \equiv c = \text{const}$.

7.2 Dvě δ jámy nebo bariéry

Částice o hmotnosti M se pohybuje v potenciálu složeném ze dvou δ funkcí vzdálených od sebe o délku a ,

$$V(x) = c \left[\delta\left(x - \frac{a}{2}\right) + \delta\left(x + \frac{a}{2}\right) \right]. \quad (7.2.1)$$

¹⁷Držíme se zavedené notace, proto pro fázové posunutí i pro δ funkci se používá stejné, přestože kolizní označení.

Obrázek 8: Fázové posunutí pro jednu δ funkci ($M = \hbar = c = 1$).

1. Nalezněte rovnici pro vázané stavy systému ($E < 0$, $c < 0$) a vyřešte ji numericky. Porovnejte výsledné energetické spektrum s případem jedné jámy.
2. Pro $E > 0$ určete pravděpodobnost průchodu $T(E)$ a pravděpodobnost odrazu $R(E)$. Zakreslete $T(E)$ do grafu společně s pravděpodobností průchodu skrz jednu δ funkci.
3. Pro $E > 0$ určete fázové posunutí $\delta_{\pm}(E)$ zvlášť pro liché a zvlášť pro sudé vlnové funkce. Zakreslete obě fázová posunutí do grafu společně s fázovým posunutím pro jednu δ funkci.

Pro všechny číselné výpočty uvažujte $\hbar = M = |c| = a = 1$.

Řešení:

1. Jelikož Hamiltonián (7.2.1) komutuje s operátorem parity \hat{P} , tj. je symetrický vůči záměně $x \leftrightarrow -x$, $p \leftrightarrow -p$, vlnové funkce $\psi(x)$ musejí být sudé nebo liché,

$$\psi_+(x) = \psi_+(-x) : \quad \psi_{II}(x) = A_+ \cosh \kappa_+ x \quad (7.2.2a)$$

$$\psi_{III}(x) = B_+ e^{-\kappa_+ x} = \psi_I(-x) \quad (7.2.2b)$$

$$\psi_-(x) = -\psi_-(-x) : \quad \psi_{II}(x) = A_- \sinh \kappa_- x \quad (7.2.2c)$$

$$\psi_{III}(x) = B_- e^{-\kappa_- x} = -\psi_I(-x), \quad (7.2.2d)$$

kde κ_{\pm} jsou dána vztahem (7.1.10). Aplikace podmínky spojitosti v bodě $x = a/2$ a skoku v derivaci (7.1.6) vede pro sudé řešení na rovnice

$$\begin{aligned} A_+ \cosh \kappa_+ \frac{a}{2} &= B_+ e^{-\kappa_+ \frac{a}{2}} \\ -B_+ \kappa_+ e^{-\kappa_+ \frac{a}{2}} - A_+ \kappa_+ \sinh \kappa_+ \frac{a}{2} &= K B_+ e^{-\kappa_+ \frac{a}{2}}, \end{aligned} \quad (7.2.3a)$$

jejichž vydělením se obdrží kvantovací podmínka

$$\boxed{\kappa_+ \tanh \kappa_+ \frac{a}{2} = -(\kappa_+ + K)}. \quad (7.2.4)$$

Pro lichá řešení stačí provést záměnu $\sinh x \leftrightarrow \cosh x$, což vede na rovnici

$$\boxed{\kappa_- \coth \kappa_- \frac{a}{2} = -(\kappa_- + K)}. \quad (7.2.5)$$

Po vyjádření hyperbolických funkcí pomocí exponenciál

$$\tanh x = \frac{1}{\coth x} = \frac{e^x - e^{-x}}{e^x + e^{-x}} \quad (7.2.6)$$

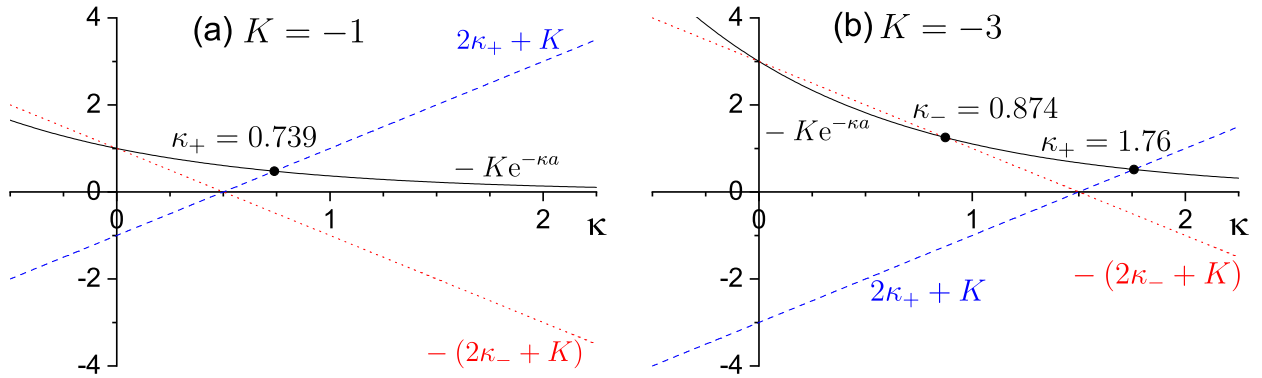
lze podmínky (7.2.4) a (7.2.5) kompaktně zapsat jedinou rovnicí

$$-K e^{-\kappa_{\pm} a} = \pm (2\kappa_{\pm} + K). \quad (7.2.7)$$

Řešením této rovnice je průsečík exponenciály $-K e^{-\kappa_{\pm} a}$ (pro vázané stavy je $K < 0$, takže exponenciála leží v horní polovině grafu) s přímkami $\pm(2\kappa_{\pm} + K)$. Zatímco sudé řešení existuje vždy, existence lichého řešení je podmíněna tím, že směrnice přímky v bodě $\kappa_- = 0$ musí být větší než směrnice exponenciály v tomto bodě:

$$Ka < -2. \quad (7.2.8)$$

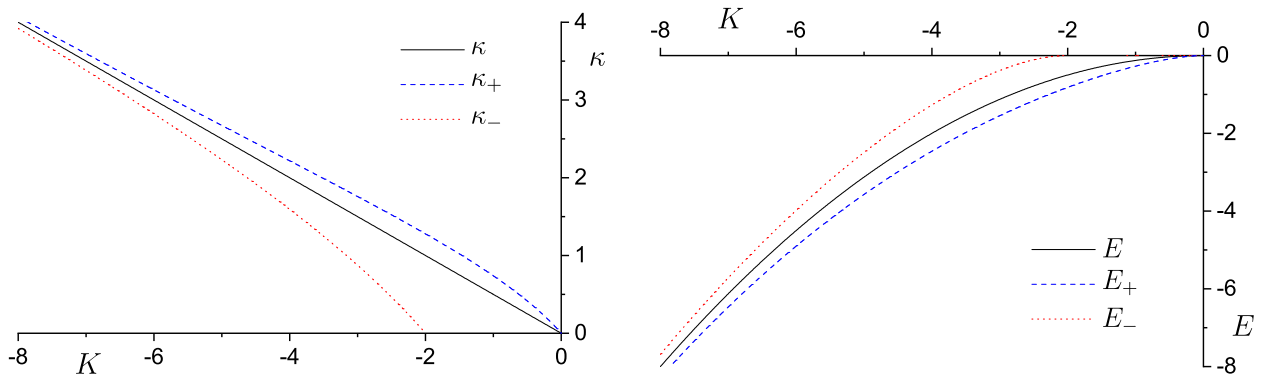
Obě situace jsou znázorněny na obrázku 9.



Obrázek 9: Numerické řešení rovnice (7.2.7) pro dvě hodnoty $K = -1$ a $K = -3$. V případě $K = -1$ existuje pouze sudé řešení s energií $E_+ = -0.273$ (liché řešení $E_- = 0$ vede na nenormalizovatelnou vlnovou funkci), v případě $K = -3$ existují dvě řešení $E_+ = -1.55$ a $E_- = -0.382$.

Řešení rovnic (7.2.7) lze explicitně vyjádřit pomocí Lambertových W funkcí¹⁸

$$\kappa_{\pm} = -\frac{K}{2} + \frac{1}{a} W\left(\mp \frac{Ka}{2} e^{\frac{Ka}{2}}\right). \quad (7.2.10)$$



Obrázek 10: Závislost spektra dvou δ jam κ_{\pm} a E_{\pm} na síle interakce K a srovnání s jednou jámou κ a E , viz (7.1.15) a (7.1.7).

S klesající hodnotou K (rostoucí silou δ funkcí v potenciálu) se řešení více a více přibližují k sobě. Pokud $Ka \ll 0$, jámy popsané δ funkcemi mezi sebou jen velmi slabě interagují a energie budou tudíž téměř degenerované (paritní dublety) a budou blízké energii jedné δ jámy (7.1.15) s dvojnásobnou silou K . Závislost řešení $\kappa_{\pm}(K)$ a odpovídajících energií $E_{\pm}(K)$ je vykreslena na obrázku 10.

¹⁸Lambertovy W funkce jsou definovány jako řešení rovnice

$$y = x e^x. \quad (7.2.9)$$

V programu Mathematica se skrývají pod označením [ProductLog](#).

Normalizované vlnové funkce musejí splňovat normalizační podmínku

$$1 = \int_{-\infty}^{\infty} |\psi_{\pm}(x)|^2 dx = 2 \int_0^{\infty} |\psi_{\pm}(x)|^2 dx \quad (7.2.11)$$

(druhá rovnost platí díky sudosti / lichosti vlnových funkcí). Sudé vlnové funkce jsou tedy

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} &= \int_0^{\frac{a}{2}} A_+^2 \cosh^2 \kappa_+ x dx + \int_{\frac{a}{2}}^{\infty} B_+^2 e^{-2\kappa_+ x} dx \\ &= A_+^2 \left[\frac{x}{2} + \frac{\sinh 2\kappa_+ x}{4\kappa_+} \right]_0^{\frac{a}{2}} + B_+^2 \left[\frac{e^{-2\kappa_+ x}}{-2\kappa_+} \right]_{\frac{a}{2}}^{\infty} \\ &= \frac{A_+^2}{4\kappa_+} (\kappa_+ a + \sinh \kappa_+ a) + \frac{B_+^2}{2\kappa_+} e^{-\kappa_+ a} \\ &= \frac{A_+^2}{4\kappa_+} \left(\kappa_+ a + \sinh \kappa_+ a + 2 \cosh^2 \kappa_+ \frac{a}{2} \right) = \\ &= \frac{A_+^2}{4\kappa_+} (e^{\kappa_+ a} + \kappa_+ a + 1) \end{aligned} \quad (7.2.12)$$

(v průběhu odvození byla použita sešívací podmínka (7.2.3)), přičemž hodnoty parametrů A_+ a B_+ jsou

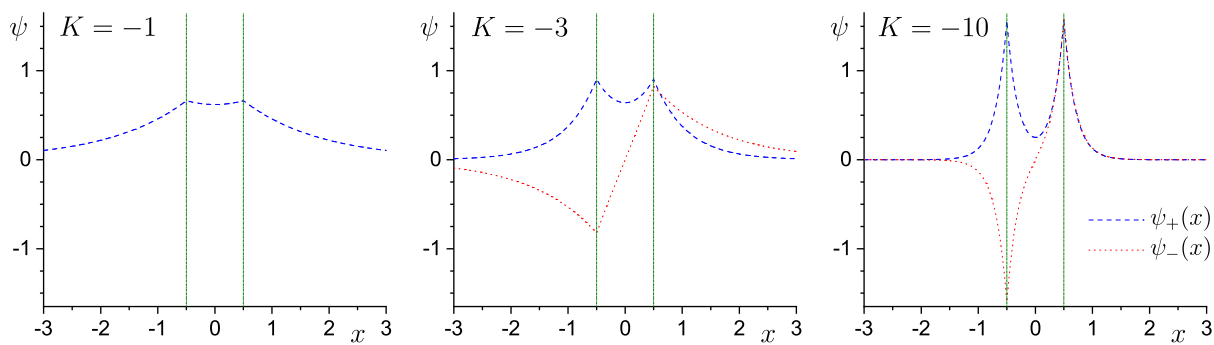
$$\begin{aligned} A_+ &= \sqrt{\frac{2\kappa_+}{e^{\kappa_+ a} + \kappa_+ a + 1}} = \sqrt{\frac{2(2\kappa_+ + K)}{a(2\kappa_+ + K) + 2}}, \\ B_+ &= \frac{e^{\kappa_+ a} + 1}{2} A_+ = \frac{\kappa_+}{2\kappa_+ + K} A_+, \end{aligned} \quad (7.2.13a)$$

kam se dosadilo z rovnice (7.1.10). Liché vlnové funkce mají hodnoty parametrů

$$\begin{aligned} A_- &= \sqrt{\frac{2\kappa_-}{e^{\kappa_- a} - \kappa_- a - 1}} = \sqrt{\frac{2(2\kappa_+ + K)}{a(2\kappa_+ + K) + 2}}, \\ B_- &= \frac{e^{\kappa_- a} - 1}{2} A_- = -\frac{\kappa_-}{2\kappa_+ + K} A_-. \end{aligned} \quad (7.2.14a)$$

Souhrnně lze tedy psát

$$A_{\pm} = \sqrt{\pm \frac{2(2\kappa_+ + K)}{a(2\kappa_+ + K) + 2}}, \quad B_{\pm} = \pm \frac{\kappa_-}{2\kappa_+ + K} A_-. \quad (7.2.15)$$



Obrázek 11: Normalizované vlnové funkce pro tři hodnoty K . Pro $K = -1$ existuje jen jeden vázaný stav (sudá vlnová funkce), pro ostatní hodnoty K existují dva vázané stavy: sudý $\psi_+(x)$ a lichý $\psi_-(x)$. Polohy δ funkcí jsou znázorněny svislými zelenými čerchovanými čarami.

Normalizované vlnové funkce pro tři různé hodnoty K jsou zobrazeny na obrázku 11.

2. Pro stanovení pravděpodobnosti průchodu a odrazu se v analogii s (7.1.20) opět vyjde z vlnové funkce ve tvaru (vlna přichází zleva)

$$\psi_I(x) = A e^{ikx} + B e^{-ikx}, \quad (7.2.16a)$$

$$\psi_{II}(x) = C e^{ikx} + D e^{-ikx}, \quad (7.2.16b)$$

$$\psi_{III}(x) = F e^{ikx}, \quad (7.2.16c)$$

kde k je dáno vztahem (7.1.21). Pravděpodobnost průchodu a odrazu bude

$$T = \left| \frac{F}{A} \right|^2, \quad R = \left| \frac{B}{A} \right|^2. \quad (7.2.17)$$

Podmínky spojitosti a skoku v derivaci vlnové funkce v bodě $x = -a/2$ vedou k rovnicím

$$A e^{-ik\frac{a}{2}} + B e^{ik\frac{a}{2}} = C e^{-ik\frac{a}{2}} + D e^{-ik\frac{a}{2}} \quad (7.2.18a)$$

$$ik \left(C e^{-ik\frac{a}{2}} - D e^{ik\frac{a}{2}} - A e^{-ik\frac{a}{2}} + B e^{+ik\frac{a}{2}} \right) = K \left(A e^{-ik\frac{a}{2}} + B e^{ik\frac{a}{2}} \right). \quad (7.2.18b)$$

Z první rovnice vynásobené faktorem ik se vyjádří

$$C i k e^{-ik\frac{a}{2}} = ik \left(A e^{-ik\frac{a}{2}} + B e^{ik\frac{a}{2}} - D e^{ik\frac{a}{2}} \right) \quad (7.2.19)$$

a tento výraz se dosadí do druhé rovnice, což po úpravách dá

$$ik \left(B e^{ik\frac{a}{2}} - D e^{ik\frac{a}{2}} \right) = \frac{K}{2} \left(A e^{-ik\frac{a}{2}} + B e^{ik\frac{a}{2}} \right), \quad (7.2.20)$$

a tedy

$$D = \frac{iK}{2k} \left(A e^{-ika} + B \right) + B. \quad (7.2.21)$$

Zpětným dosazením do (7.2.19) se dostane

$$C = A - \frac{iK}{2k} \left(A + B e^{ika} \right). \quad (7.2.22)$$

Analogický postup se zopakuje v bodě $x = a/2$, případně stačí vzít výsledek (7.2.21) a (7.2.22) a provést záměnu $k \mapsto -k$, $A \mapsto F$, $B \mapsto 0$:

$$C = \frac{-K + 2ik}{2ik} F \quad D = -\frac{iK}{2k} F e^{ika}. \quad (7.2.23)$$

Zkombinování vztahů (7.2.21), (7.2.22) a (7.2.23) vede na soustavu dvou rovnic pro neznámé B a E :

$$\frac{iK}{2k} \left(A e^{-ika} + B \right) + B = -\frac{iK}{2k} F e^{ika}, \quad (7.2.24a)$$

$$A - \frac{iK}{2k} \left(A + B e^{-ika} \right) = \frac{-K + 2ik}{2ik} F. \quad (7.2.24b)$$

Bez újmy na obecnosti lze volit $A = 1$, čímž se vztahy pro pravděpodobnosti průchodu a odrazu zjednoduší na $T = |F|^2$ a $R = |B|^2$.

Řešení posledních dvou rovnic zní

$$F = \frac{4k^2}{K^2 e^{2ika} - (K - 2ik)^2}. \quad (7.2.25)$$

Po úpravách se získá finální výraz pro pravděpodobnost průchodu

$$\begin{aligned}
 T = FF^* &= \frac{4k^2}{K^2 e^{2ika} - (K - 2ik)^2} \frac{4k^2}{K^2 e^{-2ika} - (K + 2ik)^2} \\
 &= \frac{16k^4}{\underbrace{(K^2 + 4k^2)^2 + K^4 - K^2 [(K + 2ik)^2 e^{2ika} + (K - 2ik)^2 e^{-2ika}]}_{2\clubsuit = 2K^4 + 8K^2 k^2 + 16k^4}} \\
 &= \frac{16k^4}{2\clubsuit - K^2 [(K^2 - 4k^2)(e^{2ika} + e^{-2ika}) + 4iKk(e^{2ika} - e^{-2ika})]} \\
 &= \frac{16k^4}{2\clubsuit - K^2 [2(K^2 - 4k^2) \cos 2ka - 8Kk \sin 2ka]} \\
 &= \frac{8k^4}{\clubsuit - K^2 [(K^2 - 4k^2)(\cos^2 ka - \sin^2 ka) - 8Kk \sin ka \cos ka]} \\
 &= \frac{8k^4}{\clubsuit - K^4 \cos^2 ka + K^4 \sin^2 ka + 4K^2 k^2 \cos^2 ka - 4K^2 k^2 \sin^2 ka + 8K^3 k \sin ka \cos ka} \\
 &= \frac{4k^4}{4k^4 + 2K^4 \sin 2ka + 8K^2 k^2 \cos^2 ka + 8K^3 k \sin ka \cos ka} \\
 &= \frac{4k^4}{4k^4 + K^2 (K \sin ka + 2k \cos ka)^2} \\
 &= \frac{1}{1 + \frac{K^2}{4k^2} (2 \cos ka + \frac{K}{k} \sin ka)^2}. \tag{7.2.26}
 \end{aligned}$$

Srovnání s pravděpodobností průchodu pro jednu δ funkci (7.1.25) ukazuje, že v případě dvou δ funkcí se T liší o modulační faktor v závorce ve jmenovateli. Ten způsobuje, že pro speciální hodnoty k dané rovnicí

$$2 \cos ka + \frac{K}{k} \sin ka = 0, \tag{7.2.27}$$

tj.

$$\tan ka = -\frac{2k}{K} \tag{7.2.28}$$

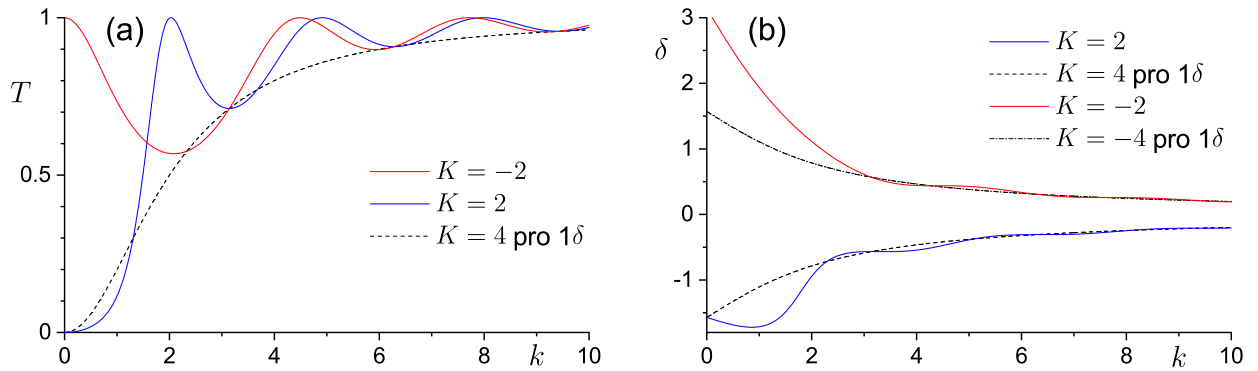
je pravděpodobnost průchodu $T = 1$ a pravděpodobnost odrazu $R = 0$. To je speciální případ tzv. *Ramsauerova-Townsendova efektu*, viz též [2], kapitola 4.10. Pravděpodobnost průchodu T je pro dvě hodnoty K zobrazena na obrázku 12 (a) a srovnána s případem pravděpodobnosti průchodu pro jednu δ funkci (7.1.25) s dvojnásobnou silou K (limitní případ $a \rightarrow 0$). Pravděpodobnost odrazu se dopočítá pomocí relace $R = 1 - T$.

3. Fázové posunutí se spočítá pomocí definičního vztahu (7.1.22b) z výrazu (7.2.25):

$$\begin{aligned}
 F &= \frac{4k^2}{K^2 (\cos 2ka + i \sin 2ka) - (K - 2ik)^2} \\
 &= \frac{4k^2}{K^2 (\cos 2ka - 1) + 4k^2 + iK(K \sin 2ka + 4k)} \\
 &= \frac{4k^2 [K^2 (\cos 2ka - 1) + 4k^2 - iK(K \sin 2ka + 4k)]}{[K^2 (\cos 2ka - 1) + 4k^2]^2 + K^2 (K \sin 2ka + 4k)^2}, \tag{7.2.29}
 \end{aligned}$$

$$\delta = -\arctan \frac{\sin 2ka + \frac{4k}{K}}{\cos 2ka - 1 + \frac{4k^2}{K^2}}. \tag{7.2.30}$$

Fázové posunutí je zobrazeno na obrázku 12 (b). Přitažlivý potenciál ($K < 0$) dává fázové posunutí záporné, odpudivý potenciál ($K > 0$) kladné.



Obrázek 12: (a) Pravděpodobnost průchodu a (b) fázové posunutí δ pro potenciál dvou δ jam s $K = -2$ (červeně) a $K = 2$ (modře). Pro srovnání s případem jedné jámy síly $K = \pm 4$ slouží černá čárkovaná čára (v případě jedné jámy je pravděpodobnost průchodu stejná pro obě znaménka K).

7.3 Maticový formalismus

Částice hmotnosti M se pohybuje v jednorozměrném potenciálu složeném z n různě silných δ funkcí,

$$V(x) = \sum_{j=1}^n c_j \delta(x - x_j), \quad (7.3.1)$$

kde c_j jsou jejich „síly“ a $x_1 < x_2 < \dots < x_n$ jejich polohy.

1. Obecnou vlnovou funkci pro částici v bodě x zapište ve formě dvousložkového vektoru.
2. Nalezněte transformaci posunutí vlnové funkce o vzdálenost a a zapište tuto transformaci ve formě matice.
3. Nalezněte transformaci vlnové funkce při průchodu δ funkcí v bodě x_j .
4. Nalezněte transformaci Ξ , která dává do vztahu vlnovou funkci před první jámou s vlnovou funkcí po poslední jámě.
5. Pro případ dvou stejně silných jam vzdálených od sebe a najděte podmínku na to, aby vlnová funkce pro vázané stavy $E < 0$ byla normalizovatelná.

Řešení:

1. Až na jednotlivé body x_j se jedná o vlnovou funkci volné částice

$$\psi(x) = \underbrace{A_+ e^{ikx}}_{\psi_+(x)} + \underbrace{A_- e^{-ikx}}_{\psi_-(x)}, \quad (7.3.2)$$

kde $k = \sqrt{2ME/\hbar^2}$ [pro vázané stavy $E < 0$ je k ryze imaginární, nebo je možné přejít k veličině κ (7.1.10)]. Vlnová funkce se zapíše v kompaktním tvaru dvousložkového vektoru

$$\Psi(x) \equiv \begin{pmatrix} \psi_+(x) \\ \psi_-(x) \end{pmatrix}. \quad (7.3.3)$$

2. Posunutá vlnová funkce je

$$\psi(x+a) = A_+ e^{ikx+ika} + A_- e^{-ikx-ika} = e^{ika} \psi_+(x) + e^{-ika} \psi_-(x), \quad (7.3.4)$$

takže

$$\Psi(x+a) = \begin{pmatrix} e^{ika} \psi_+(x) \\ e^{-ika} \psi_-(x) \end{pmatrix} = \underbrace{\begin{pmatrix} e^{ika} & 0 \\ 0 & e^{-ika} \end{pmatrix}}_{T(a)} \Psi(x). \quad (7.3.5)$$

3. Sešívací podmínka (7.1.6) pro vlnovou funkci (7.3.2) je lineární, a proto ji lze rovněž vyjádřit maticovou transformací vektoru $\Psi(x)$. Označí-li se vlnová funkce nalevo od j -té δ funkce jako $\Psi^{(L)}(x_j)$ a vlnová funkce napravo od δ funkce jako $\Psi^{(R)}(x_j)$, pak podmínka na spojitost a na skok v derivaci v bodě x_j zní

$$\psi_+^{(L)} + \psi_-^{(L)} = \psi_+^{(R)} + \psi_-^{(R)}, \quad (7.3.6a)$$

$$ik \left(\psi_+^{(R)} - \psi_-^{(R)} + \psi_+^{(L)} - \psi_-^{(L)} \right) = K_j \left(\psi_+^{(L,R)} + \psi_-^{(L,R)} \right). \quad (7.3.6b)$$

Z první rovnice plyne $\psi_-^{(R)} = \psi_+^{(L)} + \psi_-^{(L)} - \psi_+^{(R)}$, což po dosazení do druhé rovnice dá

$$\psi_+^{(R)} = \frac{K_j}{2ik} \left(\psi_+^{(L)} + \psi_-^{(L)} \right) + \psi_+^{(L)} = \left(1 + \frac{K_j}{2ik} \right) \psi_+^{(L)} + \frac{K_j}{2ik} \psi_-^{(L)}, \quad (7.3.7a)$$

$$\psi_+^{(L)} = -\frac{K_j}{2ik} \left(\psi_+^{(L)} + \psi_-^{(L)} \right) + \psi_-^{(L)} = -\frac{K_j}{2ik} \psi_+^{(L)} + \left(1 - \frac{K_j}{2ik} \right) \psi_-^{(L)}. \quad (7.3.7b)$$

To je lineární transformace, kterou lze zapsat jako

$$\Psi^{(R)}(x_j) = \underbrace{\begin{pmatrix} 1 + \frac{K_j}{2ik} & \frac{K_j}{2ik} \\ -\frac{K_j}{2ik} & 1 - \frac{K_j}{2ik} \end{pmatrix}}_{R(K_j)} \Psi^{(L)}(x_j). \quad (7.3.8)$$

4. Transformace Ξ je složením transformací posunutí mezi δ funkcemi T a transformací přechodu přes δ funkce R :

$$\Xi(x_n; x_1) = R(K_n)T(x_n - x_{n-1})R(K_{n-1}) \cdots R(K_2)T(x_2 - x_1)R(K_1). \quad (7.3.9)$$

5. Transformace (7.3.9) má pro dvě δ funkce tvar

$$\begin{aligned} \Xi(a) &= R(K)T(a)R(K) \\ &= \begin{pmatrix} 1 + \frac{K}{2\pi k} & \frac{K}{2ik} \\ -\frac{K}{2ik} & 1 - \frac{K}{2ik} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{ika} & 0 \\ 0 & e^{-ika} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 + \frac{K}{2\pi k} & \frac{K}{2ik} \\ -\frac{K}{2ik} & 1 - \frac{K}{2ik} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \left(1 + \frac{K}{2ik}\right)^2 e^{ika} - \left(\frac{K}{2ik}\right)^2 e^{-ika} & \frac{K}{2ik} \left[\left(1 + \frac{K}{2ik}\right) e^{ika} + \left(1 - \frac{K}{2ik}\right) e^{-ika} \right] \\ -\frac{K}{2ik} \left[\left(1 + \frac{K}{2ik}\right) e^{ika} + \left(1 - \frac{K}{2ik}\right) e^{-ika} \right] & -\left(\frac{K}{2ik}\right)^2 e^{ika} + \left(1 - \frac{K}{2ik}\right)^2 e^{-ika} \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (7.3.10)$$

Stav bude normalizovatelný, pokud $\psi_+^{(L)} = \psi_-^{(R)} = 0$, kde $\psi_+^{(L)}$ zde značí část vlnové funkce s kladným znaménkem nalevo před levou δ funkcí a $\psi_-^{(R)}$ část vlnové funkce napravo za pravou δ funkcí potenciálu.¹⁹ Jelikož $\Psi^{(R)} = \Xi\Psi^{(L)}$, platí

$$\psi_-^{(R)} = \Xi_{21}\psi_+^{(L)} + \Xi_{22}\psi_-^{(L)}, \quad (7.3.11)$$

a pokud se kvůli správnému asymptotickému chování má vynulovat $\psi_+^{(L)}$ a $\psi_-^{(R)}$, musí být $\Xi_{22} = 0$, neboli (po zavedení $k = i\kappa$)

$$-\left(\frac{K}{2\kappa}\right)^2 e^{-\kappa a} + \left(1 + \frac{K}{2\kappa}\right)^2 e^{\kappa a} = 0, \quad (7.3.12)$$

$$K^2 e^{-2\kappa a} = (K + 2\kappa)^2, \quad (7.3.13a)$$

$$|K| e^{-\kappa a} = \pm (K + 2\kappa). \quad (7.3.13b)$$

Rovnice je identická s rovnicemi (7.2.4) a (7.2.5). Jejím řešením bychom dostali energie vázaných stavů.

¹⁹Pro vázané stavy je $k = i\sqrt{-2ME/\hbar} = i\kappa$.

7.4 Periodická δ funkce (Diracův hřeben)

Částice o hmotnosti M se pohybuje v jednorozměrné mřížce popsané periodickým potenciálem

$$V(x) = c \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(x - na), \quad (7.4.1)$$

kde a je vzdálenost mezi sousedními δ funkcemi (mřížková konstanta).

Hledejte vlnovou funkci ve tvaru Blochovy vlny

$$\psi_q(x) = e^{iqx} u_q(x), \quad (7.4.2)$$

kde funkce $u_q(x)$ je periodická s periodou a

$$u_q(x) = u_q(x + a) \quad (7.4.3)$$

a q je kvazihybnost (mřížková hybnost).²⁰

1. Aplikujte sešívací podmínky pro navazování vlnové funkce na δ funkci a nalezněte energetické spektrum pro $c > 0$, $E > 0$. Diskutujte jeho vlastnosti a závislost na parametru c .
2. Pro dvě hodnoty $K = 1$ a $K = 10$ vypočítejte a zakreslete do grafu disperzní relaci $E(q)$ pro nejnížší čtyři energetické pásy. Uvažujte následující konvenci: pokud $\pi n \leq ka \leq \pi(n+1)$, pak $\pi n \leq qa \leq \pi(n+1)$, $n \in \mathbb{N}$.
3. Vypočítejte grupovou rychlost

$$v_g = \frac{\partial \omega}{\partial q} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E}{\partial q} \quad (7.4.4)$$

a zakreslete její závislost na q a na E pro dvě hodnoty parametru $K = 1$, $K = 10$ a nejnížší čtyři energetické pásy. Srovnejte s rychlostí volné částice.

4. Nalezněte parametry A , B vlnové funkce. Vlnovou funkci normalizujte na vzdálenosti mezi dvěma delta funkcemi:

$$\int_0^a |\psi_q(x)|^2 dx = 1. \quad (7.4.5)$$

5. Najděte řešení Schrödingerovy rovnice pro případ $K < 0$ (v tomto případě může být energie i záporná). Podobně jako v 2. bodě zakreslete disperzní relaci $E(q)$ pro $K = -1$ a $K = -10$.

Pro všechny numerické výpočty předpokládejte $a = M = \hbar = 1$.

Poznámka: Diracův hřeben je triviální jednorozměrný model, na kterém lze studovat základní vlastnosti pohybu elektronů v pevné látce (pásová struktura, disperzní relace). Obecnější jednorozměrný potenciál, který místo opakujících se δ funkcí uvažuje pravoúhlé bariéry o konečné šířce b a výšce V_0 , vzdálené od sebe o mřížkovou konstantu $a > b$, se nazývá *Kronigův-Penneyův potenciál* [9]. V limitě

$$b \rightarrow 0, V_0 \rightarrow \infty, bV_0 = c = \text{const} \quad (7.4.6)$$

přejde Kronigův-Penneyův potenciál na Diracův hřeben.

²⁰Někdy se též nazývá *Floquetův exponent*.

Řešení:

1. Vlnová funkce na intervalu $x \in (0; a)$ odpovídá vlnové funkci volné částice

$$\psi_q^{(0;a)}(x) = A e^{ikx} + B e^{-ikx}, \quad k \equiv \sqrt{\frac{2ME}{\hbar^2}}. \quad (7.4.7)$$

Vyjádřená v Blochově formě podle (7.4.2) zní

$$\psi_q^{(0;a)}(x) = e^{iqx} \underbrace{\left(A e^{-iqx} e^{ikx} + B e^{-iqx} e^{-ikx} \right)}_{u_q(x)}. \quad (7.4.8)$$

Podle Blochova teorému (7.4.3) lze využít **periodicity** funkce $u_q(x)$ a posunout vlnovou funkci na interval $x \in (-a; 0)$,²¹

$$\begin{aligned} \psi_q^{(-a;0)}(x) &= e^{iqx} u_q(x+a) \\ &= e^{iqx} \left[A e^{-iq(x+a)} e^{ik(x+a)} + B e^{-iq(x+a)} e^{-ik(x+a)} \right] \\ &= e^{-iqa} \left[A e^{ik(x+a)} + B e^{-ik(x+a)} \right]. \end{aligned} \quad (7.4.10)$$

Nyní se aplikují **sešívací podmínky** pro δ funkci [spojitost + skok v derivaci (7.1.6)] v bodě $x = 0$:

$$A + B = e^{-iqa} \left[A e^{ika} + B e^{-ika} \right], \quad (7.4.11a)$$

$$ik(A - B) - ik e^{-iqa} \left(A e^{ika} - B e^{-ika} \right) = K(A + B), \quad (7.4.11b)$$

kde $K = 2Mc/\hbar^2$, viz výraz (7.1.7). Toto je homogenní soustava dvou rovnic pro dvě neznámé A, B ,

$$M \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = 0, \quad M = \begin{pmatrix} 1 - e^{-iqa} e^{ika} & 1 - e^{-iqa} e^{-ika} \\ 1 - e^{-iqa} e^{ika} - \frac{K}{ik} & -1 + e^{-iqa} e^{-ika} - \frac{K}{ik} \end{pmatrix}, \quad (7.4.12)$$

která má řešení, pokud

$$\begin{aligned} 0 = \det M &= \left(1 - e^{-iqa} e^{ika} \right) \left(-1 + e^{-iqa} e^{-ika} - \frac{K}{ik} \right) \\ &\quad - \left(1 - e^{-iqa} e^{-ika} \right) \left(1 - e^{-iqa} e^{ika} - \frac{K}{ik} \right) \\ &= -1 + e^{-iqa} e^{ika} + e^{-iqa} e^{-ika} - e^{-2iqa} - \frac{K}{ik} + \frac{K}{ik} e^{-iqa} e^{-ika} \\ &\quad - 1 + e^{-iqa} e^{-ika} + e^{-iqa} e^{ika} - e^{-2iqa} + \frac{K}{ik} - \frac{K}{ik} e^{-iqa} e^{ika} \\ &= -2 + 2 e^{-iqa} \underbrace{\left(e^{ika} + e^{-ika} \right)}_{2 \cos ka} - 2 e^{-2iqa} + \frac{K}{ik} e^{-iqa} \underbrace{\left(e^{ika} - e^{-ika} \right)}_{2i \sin ka}. \end{aligned} \quad (7.4.13)$$

Vynásobením výrazem e^{iqa} vede na

$$-2 e^{iqa} + 4 \cos ka - 2 e^{-iqa} + \frac{2K}{k} \sin ka = 0 \quad (7.4.14)$$

$$\boxed{\cos qa = \cos ka + \frac{K}{2k} \sin ka}, \quad (7.4.15)$$

což je rovnice pro povolené energie (kvantovací podmínka). Tato rovnice je splněna, pokud

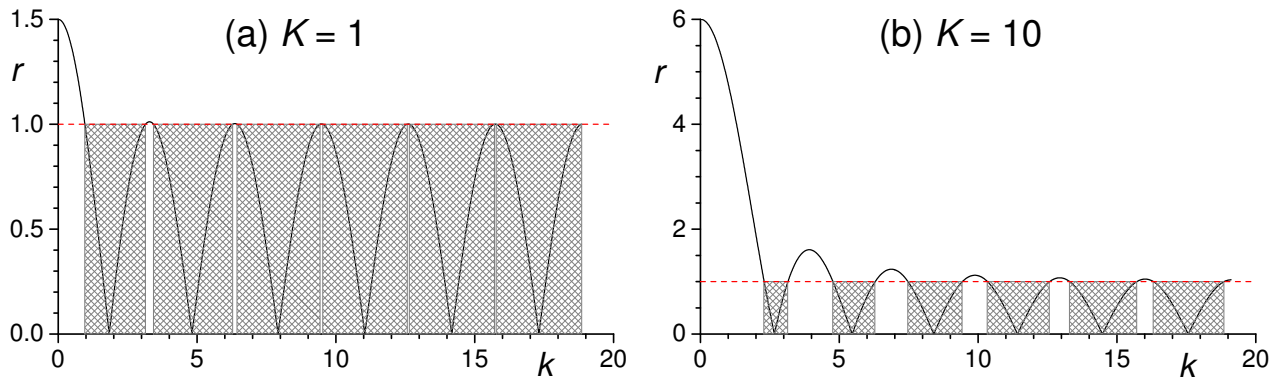
$$r \equiv \left| \cos ka + \frac{K}{2k} \sin ka \right| \leq 1. \quad (7.4.16)$$

Veličina r je pro dvě hodnoty K zakreslena na obrázku 13. Několik pozorování:

²¹Zapůsobíme-li na Blochovu vlnu (7.4.2) operátorem posunutí $\hat{T}(a) = e^{-\frac{i}{\hbar} a \hat{p}}$, který byl zaveden vztahem (1.5.1), dostaneme

$$\hat{T}(a) \psi_q(x) = \psi_q(x-a) = e^{iq(x-a)} u_q(x-a) = e^{iq(x-a)} u_q(x) = e^{-iqa} \psi_q(x). \quad (7.4.9)$$

Vlnová funkce ve tvaru Blochovy vlny je tedy vlastní funkcí operátoru posunutí $\hat{T}(a)$ s vlastní hodnotou e^{-iqa} .



Obrázek 13: Funkce r (černá čára) pro dvě hodnoty parametru K a mřížkovou konstantu $a = 1$. Pásky, v nichž je splněna podmínka (7.4.16) jsou vyznačeny šrafováním.

- Pro $K \neq 0$ má energetické spektrum *pásovou strukturu*: povolené pásy $r \leq 1$ střídají zakázané pásy $r > 1$, viz obrázek 13.
- Hodnota funkce r pro $k = 0$ je

$$r_0 = \left| 1 + \frac{Ka}{2} \right|, \quad (7.4.17)$$

tj. pokud $K > 0$ nebo $K < -\frac{4}{a}$, je na nulové energii vždy zakázaný pás.

- Pro $K > 0$ je horní hranice povoleného pásu vždy na hodnotě

$$ka = n\pi, \quad n \in \mathbb{N}. \quad (7.4.18)$$

Pásky lze tedy indexovat číslem n .

- Pokud $K = 0$, jsou povolené všechny energie $E > 0$. Řešení odpovídá pohybu volné částice.
- S rostoucí hodnotou K se pásy zužují a pro $K \rightarrow \infty$ se spektrum redukuje na čárové spektrum (7.4.18), tj.

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2Ma^2} n^2, \quad (7.4.19)$$

což odpovídá spektru nekonečné hluboké jednorozměrné pravoúhlé jámy šířky a .

2. Pokud rovnici (7.4.15) pro hodnotu ka splňuje nějaké qa , pak ji stejně dobře splňuje $qa + 2\pi m$, kde $m \in \mathbb{Z}$, přičemž vlnová funkce zůstane stejná. Jedna možná konvence znázornění výsledů tedy spočívá v tom, že se ke každé hodnotě $\pi n \leq ka \leq \pi(n+1)$ přidruží qa tak, aby leželo v intervalu $\pi m \leq qa \leq \pi(m+1)$ pro $n = m$, tj.

$$\pi n \leq ka \leq \pi(n+1), \quad (7.4.20a)$$

$$\pi n \leq qa \leq \pi(n+1), \quad n \in \mathbb{N}. \quad (7.4.20b)$$

Tímto způsobem je docíleno jednoznačného přiřazení $k \leftrightarrow q$.

Druhá běžně používaná konvence omezuje hodnotu q na tzv. 1. Brillouinovu zónu, což je množina nejmenších q takových, že dávají v daném pásu n jednoznačně vlnovou funkci. Pro jednorozměrnou mřížku je 1. Brillouinova zóna interval

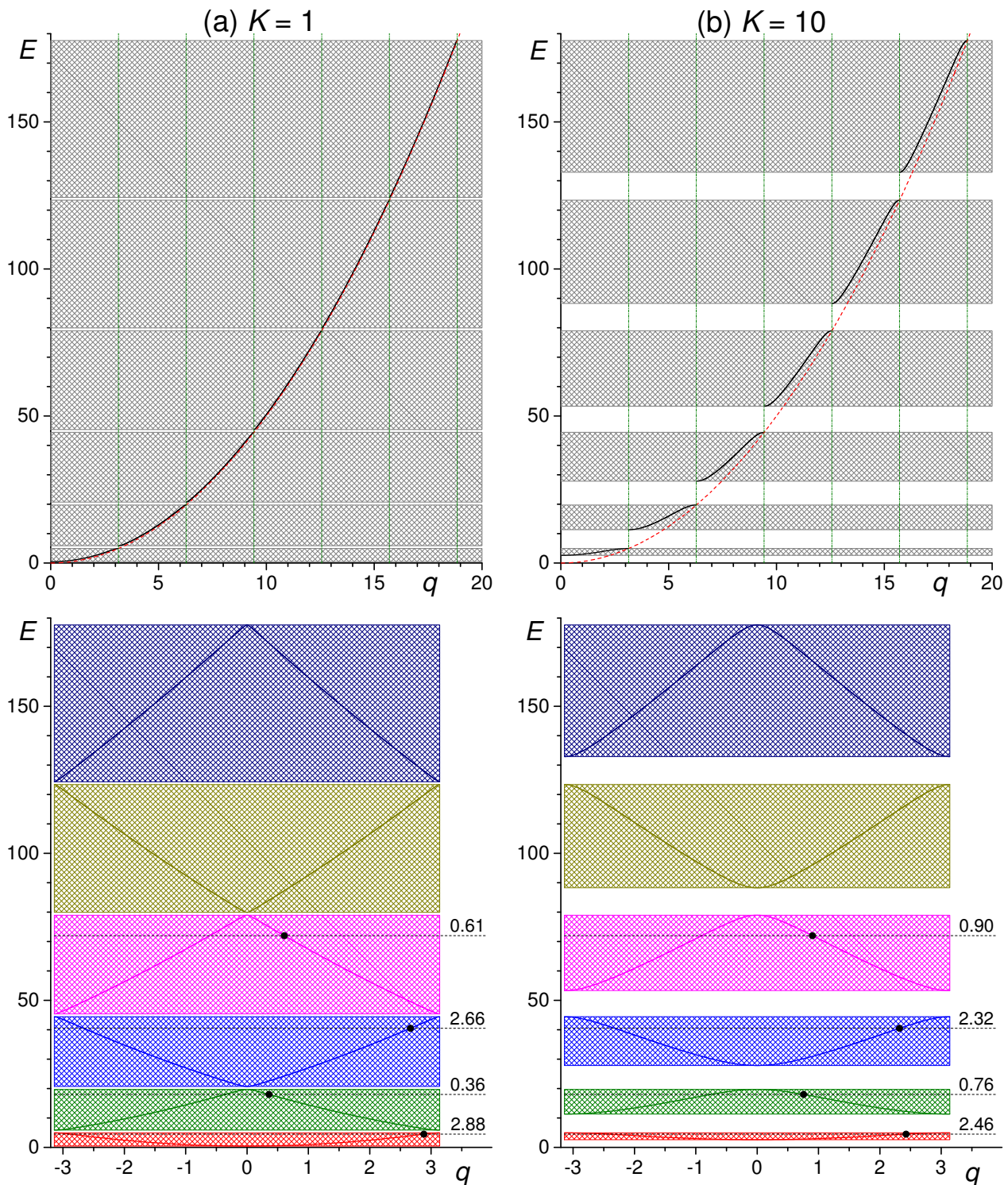
$$qa \in [-\pi, \pi]. \quad (7.4.21)$$

Disperzní relace $E = E(q)$ v obou konvencích je zobrazena na obrázku 14.

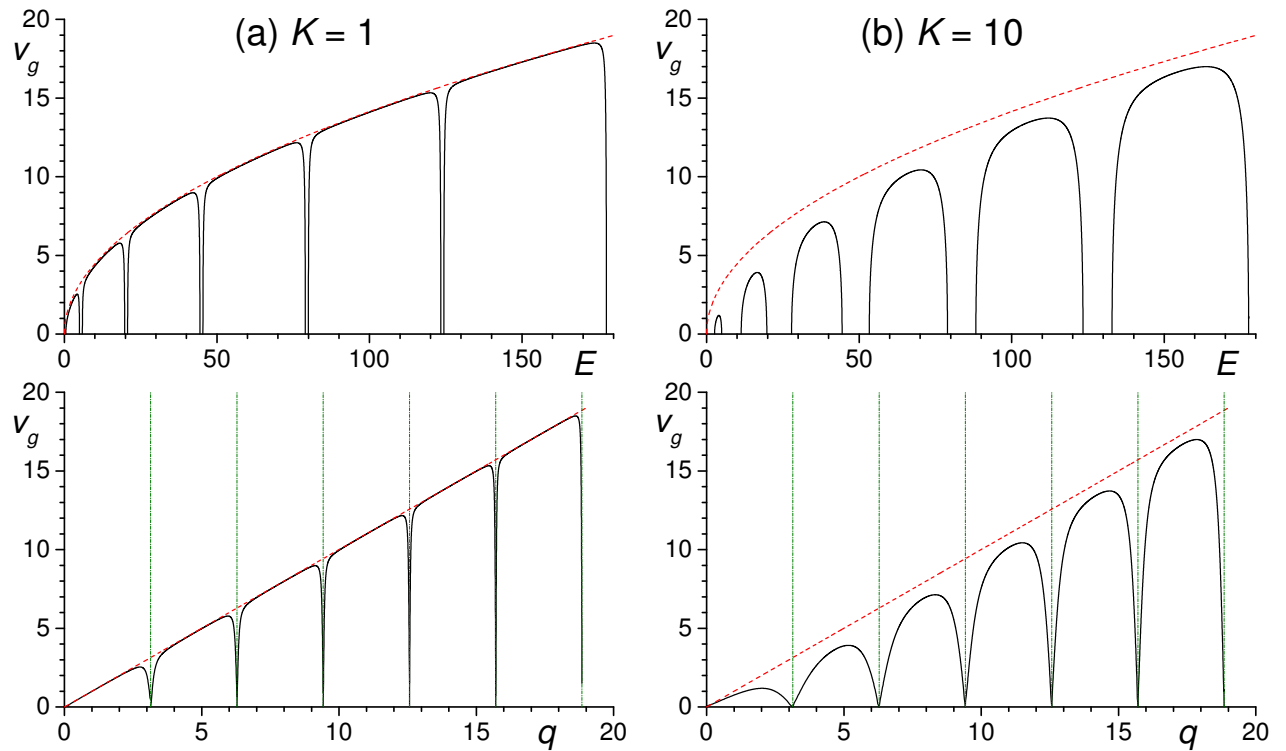
Poznámka: V 1. Brillouinově zóně musí mít Schrödingerova rovnice dvě lineárně nezávislá řešení. Druhé řešení získáme komplexním sdružením $\psi_q(x) \mapsto \psi_q^*(x) = \psi_{-q}(x)$. Tato vlnová funkce odpovídá opačné hodnotě kvazimomentu.

3. Grupová rychlost je zakreslena na obrázku 15. Pro q v blízkosti hranice pásu klesá rychlost k nule.
4. Ze sešívací podmínky na spojitost vlnové funkce (7.4.11) plyne

$$A [1 - e^{-iqa} e^{ika}] = -B [1 - e^{-iqa} e^{-ika}], \quad (7.4.22)$$



Obrázek 14: 1. řádek: Disperzní relace v konvenci (7.4.20) pro dvě hodnoty K (černá čára). Červená čárkovaná čára odpovídá disperzní relaci pro volnou částici $E = \hbar^2 q^2 / (2M)$. Svislé zelené čerchované čáry vyznačují horní hranice pásů (7.4.18). Šrafováním jsou znázorněny povolené pásy. 2. řádek: Disperzní relace pro 1. Brillouinovu zónu (7.4.21). Jednotlivé pásy jsou znázorněny odlišnými barvami. Černými čárkovanými čarami jsou vyznačeny energie a vypsány hodnoty kvazihybnosti q pro obrázek 16.



Obrázek 15: Grupová rychlost (7.4.4) v závislosti na energii (1. řádek) a na kvazimomentu (2. řádek). Ve 2. řádku jsou hranice pásmů $q = \pi n$ znázorněny svislými zelenými čerchovanými čarami. Červená čárkovaná čára odpovídá rychlosti pro volnou částici $E = \hbar q/M$.

což dává vztah mezi konstantami A a B :

$$A = -B \frac{1 - e^{-iqa} e^{-ika}}{1 - e^{-iqa} e^{ika}} = B \frac{\cos qa - \cos ka}{1 - \cos(q-k)a} e^{-ika}, \quad (7.4.23a)$$

$$B = -A \frac{1 - e^{-iqa} e^{ika}}{1 - e^{-iqa} e^{-ika}} = B \frac{\cos qa - \cos ka}{1 - \cos(q+k)a} e^{ika}. \quad (7.4.23b)$$

Integrace vlnové funkce na intervalu $[0, a]$ (7.4.5) dává podmínku

$$\begin{aligned} 1 &= \int_0^a (A e^{ikx} + B e^{-ikx}) (A^* e^{-ikx} + B^* e^{ikx}) dx \\ &= \int_0^a (|A|^2 + |B|^2 + AB^* e^{2ikx} + A^* B e^{-2ikx}) dx \\ &= (|A|^2 + |B|^2) a + \frac{1}{2ik} [AB^* (e^{2ika} - 1) + A^* B (1 - e^{-2ika})]. \end{aligned} \quad (7.4.24)$$

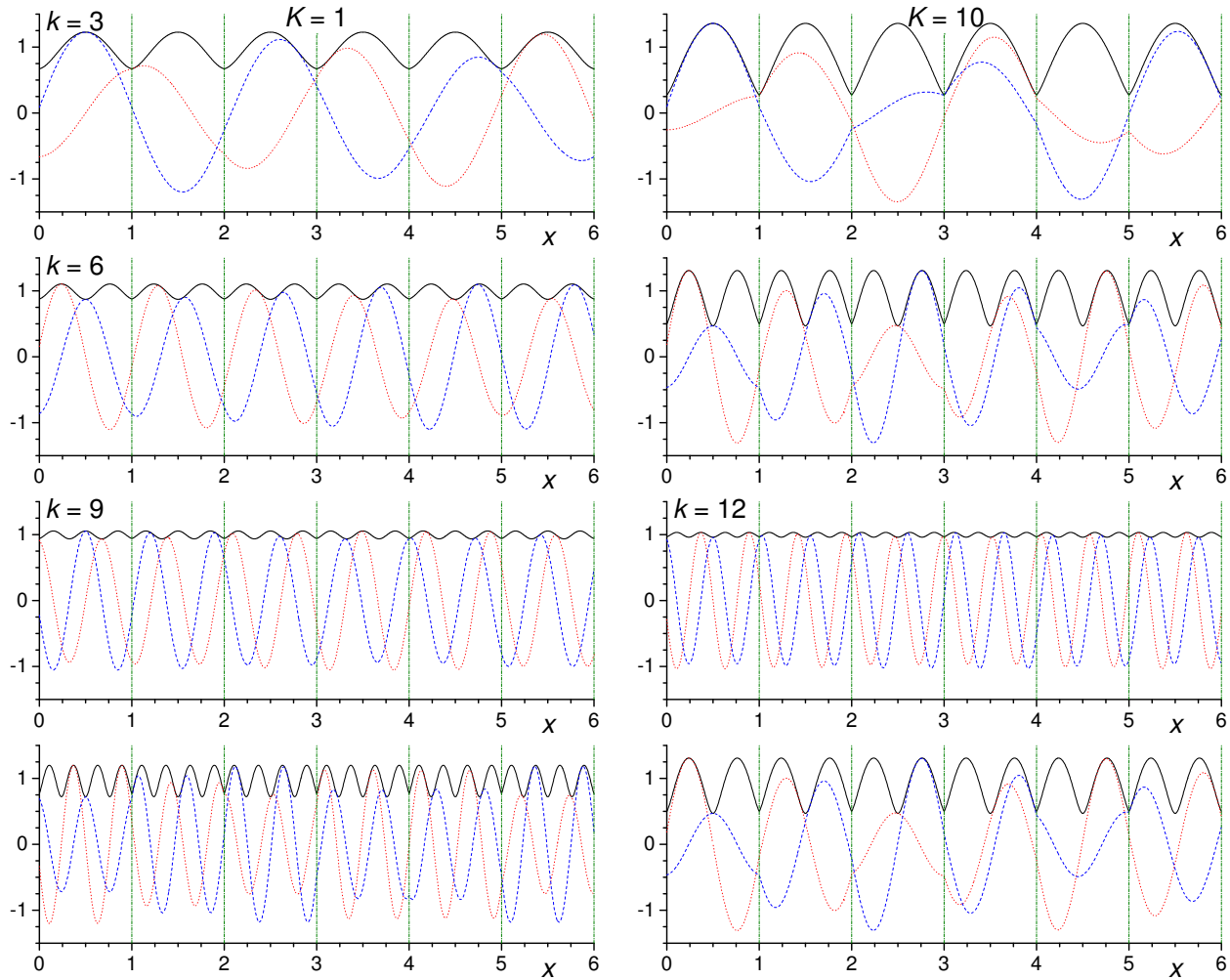
Spojení posledních dvou vztahů vede k výrazům

$$\begin{aligned} 1 &= a |B|^2 \left\{ 1 + \left[\frac{\cos qa - \cos ka}{1 - \cos(q-k)a} \right]^2 + \underbrace{\frac{2 \sin ka}{ka}}_{\frac{4}{Ka} (\cos qa - \cos ka)} \frac{\cos qa - \cos ka}{1 - \cos(q-k)a} \right\} \\ &= 2a |B|^2 \frac{1 - \cos qa \cos ka + \frac{2}{Ka} (\cos qa - \cos ka)^2}{1 - \cos(q-k)a}, \end{aligned} \quad (7.4.25)$$

kde bylo využito vztahu (7.4.15) a první dva členy byly upraveny podle vzorců pro goniomet-

rické funkce:

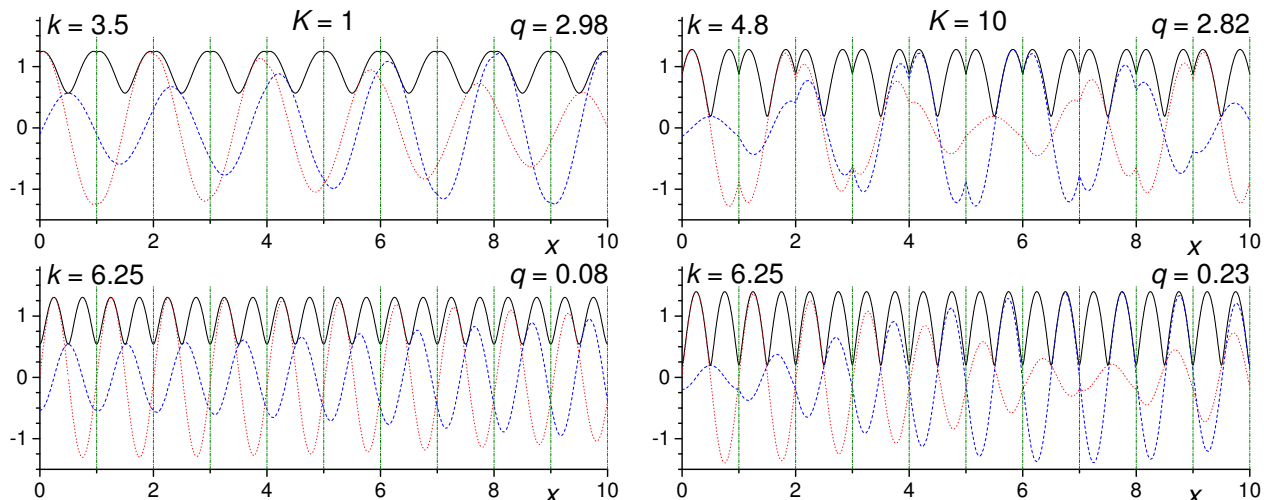
$$\begin{aligned}
 1 + \left[\frac{\cos qa - \cos ka}{1 - \cos(q-k)a} \right]^2 &= 1 + \left[\frac{-2 \sin \frac{q-k}{2}a \sin \frac{q+k}{2}a}{2 \sin^2 \frac{q-k}{2}a} \right]^2 \\
 &= \frac{\sin^2 \frac{q-k}{2}a + \sin^2 \frac{q+k}{2}a}{\sin^2 \frac{q-k}{2}a} \\
 &= \frac{1 - \cos(q-k)a + 1 - \cos(q+k)a}{1 - \cos(q-k)a} \\
 &= \frac{2 - 2 \cos qa \cos ka}{1 - \cos(q-k)a}. \tag{7.4.26}
 \end{aligned}$$



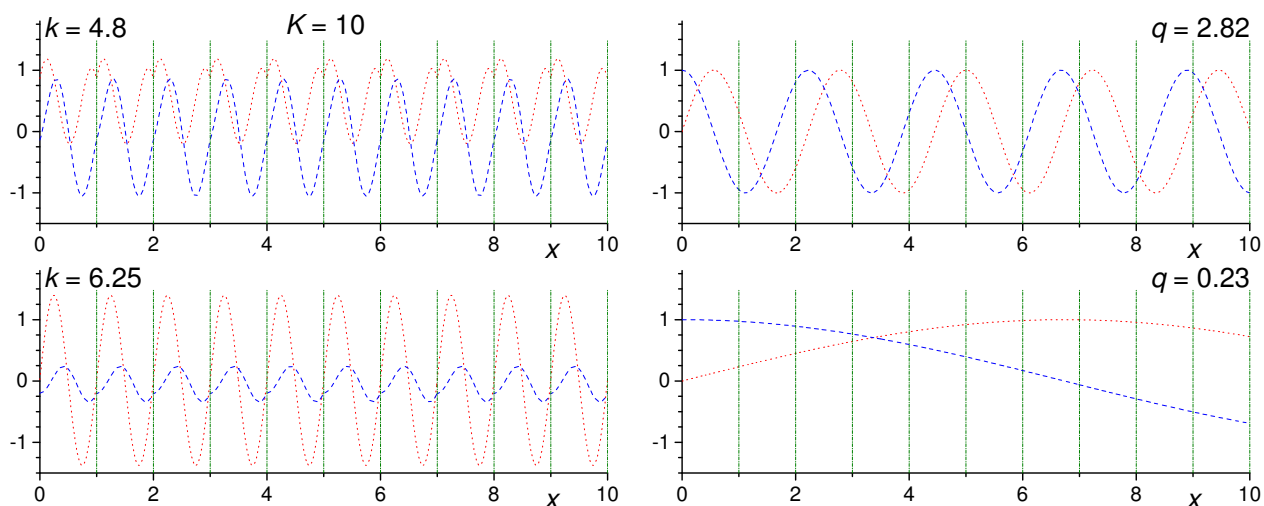
Obrázek 16: Vlnové funkce $\psi_q(x)$ normalizované na intervalu $(0, a)$ pro $a = 1$, dvě hodnoty K a nejmenší čtyři povolené pásy. Hodnoty $q > 0$ leží v 1. Brillouinově zóně. Modrá čárkovaná čára – reálná část, červená tečkovaná čára – imaginární část, černá čára – absolutní hodnota. Zelené čerchované čáry odpovídají místům, v nichž leží δ -funkce potenciálu. Odpovídající energie a hodnoty kvazihybnosti q jsou vyznačeny v obrázku 14.

Podobně lze vyjádřit

$$1 = 2a |A|^2 \frac{1 - \cos qa \cos ka + \frac{2}{Ka} (\cos qa - \cos ka)^2}{1 - \cos(q+k)a}, \tag{7.4.27}$$



Obrázek 17: Totéž jako v obrázku 16, jen pro vlnové funkce z krajů 2. pásu.

Obrázek 18: Periodická část vlnové funkce $u_q(x)$ (vlevo) a Blochova vlna e^{iqx} (vpravo). Modrá čárkovaná čára – reálná část, červená tečkovaná čára – imaginární část. Pronásobení sloupců mezi sebou dá vlnové funkce z pravého sloupce obrázku 17.

takže normalizační konstanty jsou

$$A = s \sqrt{\frac{1}{2a} \frac{1 - \cos(q+k)a}{1 - \cos qa \cos ka + \frac{2}{Ka} (\cos qa - \cos ka)^2}} e^{-i\frac{ka}{2}}, \quad (7.4.28a)$$

$$B = \sqrt{\frac{1}{2a} \frac{1 - \cos(q-k)a}{1 - \cos qa \cos ka + \frac{2}{Ka} (\cos qa - \cos ka)^2}} e^{i\frac{ka}{2}}, \quad (7.4.28b)$$

$$s = \text{sign}(\cos qa - \cos ka) \quad (7.4.28c)$$

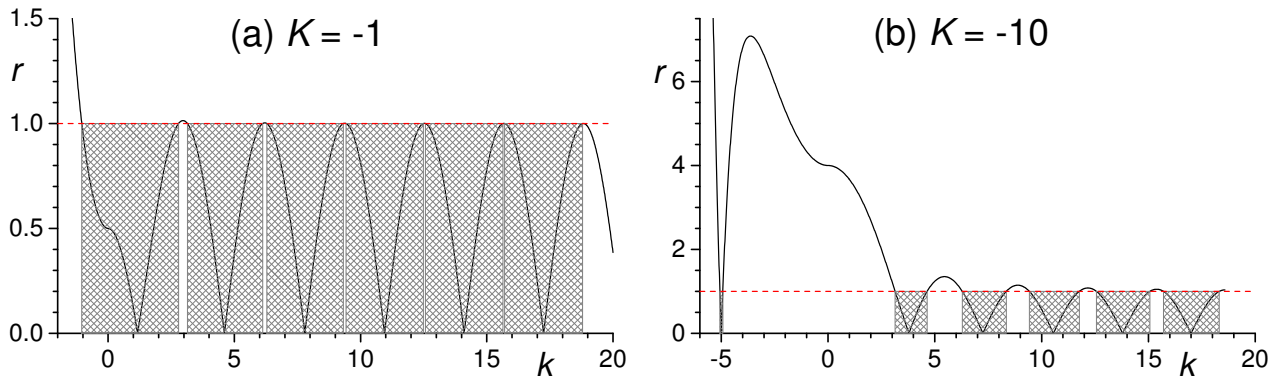
(komplexní fáze se rozdělila stejným dílem mezi A a B; je nutné udržet znaménko mezi A a B). Získaný výsledek je v souladu s rovnicí (9) článku [9].

Vlnová funkce normalizovaná na interval $(0, a)$ je tedy

$$\psi_q(x) = \frac{e^{iqna}}{\sqrt{2a}} \frac{1}{\sqrt{1 - \cos qa \cos ka + \frac{2}{Ka} (\cos qa - \cos ka)^2}} \quad (7.4.29)$$

$$* \left[s \sqrt{1 - \cos(q+k)a} e^{ik(x-na-\frac{a}{2})} + \sqrt{1 - \cos(q-k)a} e^{-ik(x-na-\frac{a}{2})} \right].$$

Několik příkladů vlnových funkcí je na obrázcích 16 a 17. Vlnová funkce rozložená na periodickou část a Blochovu vlnu je na obrázku 18. Je vidět, že pro slabou interakci a střed pásu je pravděpodobnost nalezení částice prakticky konstantní (obrázek 16, 1. sloupec, 3.–5. řádek). Naopak na krajích pásu nebo pro silnější interakci hustota pravděpodobnosti více osciluje (obrázek 16, 2. sloupec, a obrázek 17).



Obrázek 19: Funkce r (černá čára) pro dvě záporné hodnoty parametru K a mřížkovou konstantu $a = 1$. Pásy, v nichž lze vyřešit rovnici (7.4.15) (pro $E < 0$) a (7.4.31) (pro $E > 0$) jsou vyznačeny šrafováním.

5. V souladu s případem izolovaných δ jam (viz příklady 7.1 a 7.2) se označí

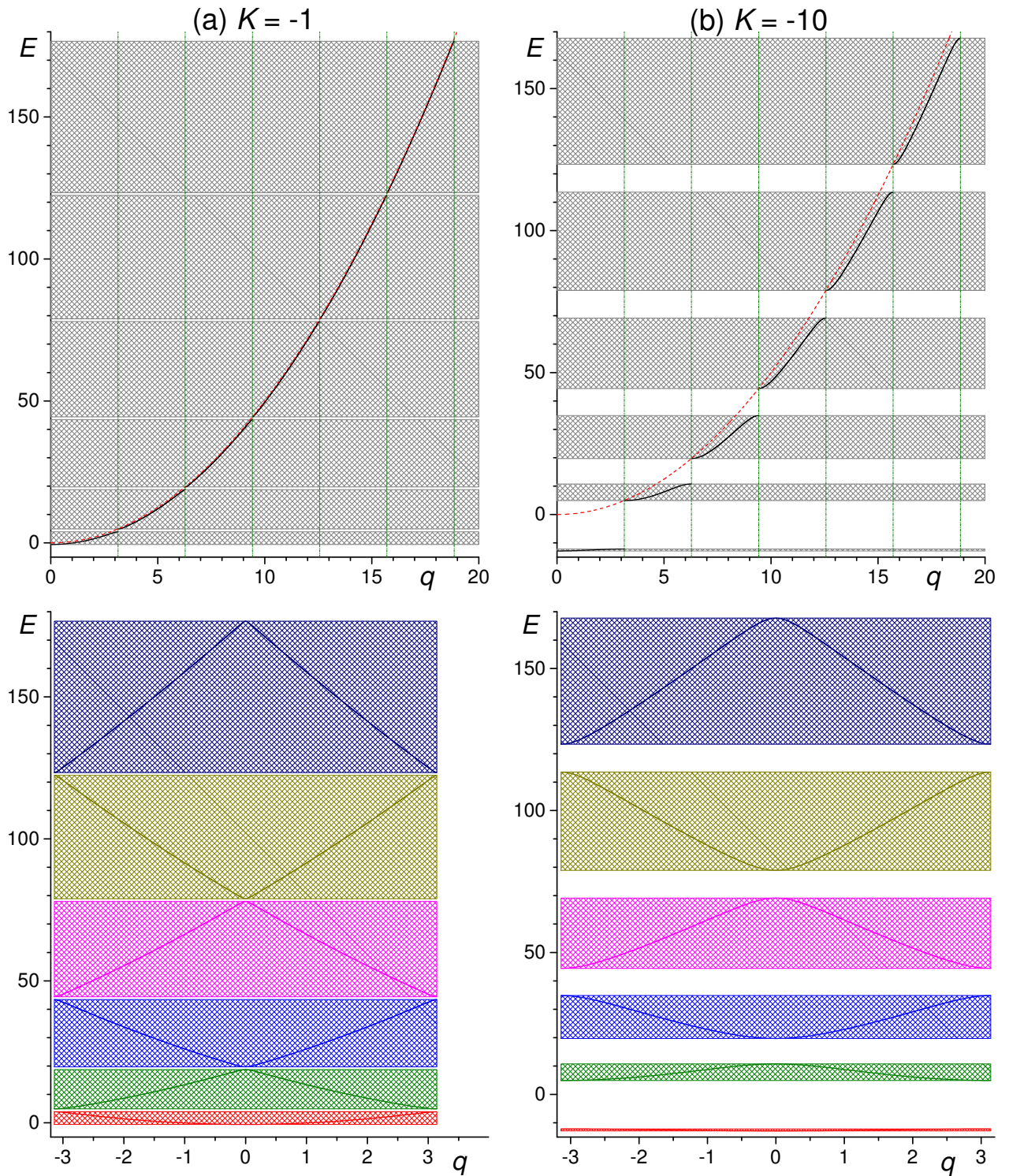
$$\kappa = \sqrt{-\frac{2ME}{\hbar^2}}. \quad (7.4.30)$$

Formálně tedy platí $k = i\kappa$, čehož lze využít v rovnici (7.4.15) a dojít k podmínce

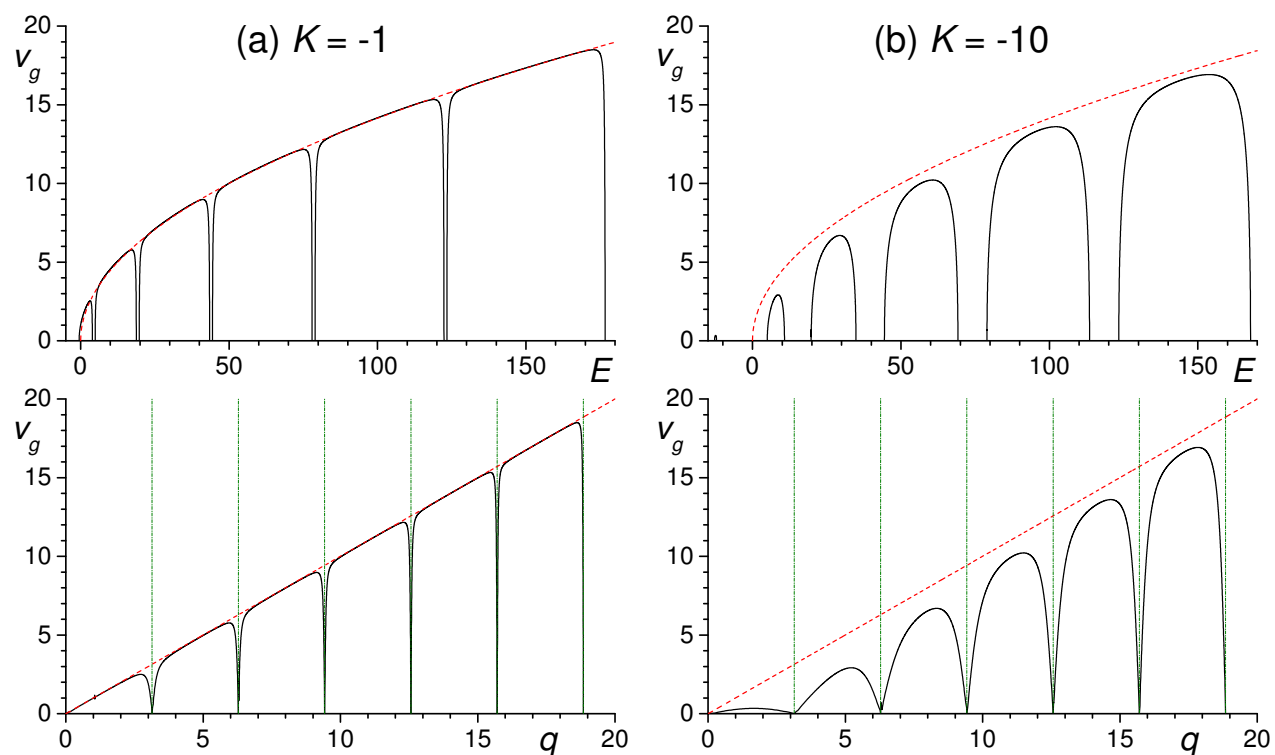
$$\cos qa = \cosh \kappa a + \frac{K}{2\kappa} \sinh \kappa a. \quad (7.4.31)$$

Pro $K \in (-\frac{4}{a}, 0)$ leží nulová energie v nejnižším pásu. Pokud $K < -\frac{4}{a}$, první povolený pás se nachází na energii $E < 0$ a na energii $E = 0$ je zakázaný pás.

V analogii s obrázky 14–15 je na obrázcích 20–21 zobrazen průběh veličiny r , disperzní relace $E(q)$ v konvenci (7.4.20) a v 1. Brillouinově zóně a grupová rychlost pro dvě záporné hodnoty síly interakce K .



Obrázek 20: 1. řádek: Disperzní relace v konvenci (7.4.20) pro dvě hodnoty K (černá čára). Červená čárkovaná čára odpovídá disperzní relaci pro volnou částici $E = \hbar^2 q^2 / (2M)$. Svislé zelené čerchované čáry vyznačují horní hranice pásů (7.4.18). Šrafováním jsou znázorněny povolené pásy. 2. řádek: Disperzní relace pro 1. Brillouinovu zónu (7.4.21). Jednotlivé pásy jsou znázorněny odlišnými barvami.



Obrázek 21: Grupová rychlost (7.4.4) v závislosti na energii (1. řádek) a na kvazihybnosti (2. řádek). Ve 2. řádku jsou hranice pásů $q = \pi n$ znázorněny svislými zelenými čerchovanými čarami. Červená čárkovaná čára odpovídá rychlosti pro volnou částici $E = \hbar q/M$.

8 Koherentní stavy harmonického oscilátoru

V této části se navazuje zejména na kapitolu 4 o algebraickém řešení harmonického oscilátoru. Cílem je prozkoumat vlastnosti *koherentního stavu* jednorozměrného harmonického oscilátoru

$$|z\rangle = e^{-\frac{|z|^2}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle, \quad (8.0.1)$$

kde $z \in \mathbb{C}$ je libovolné komplexní číslo a $|n\rangle$ je vlastní stav harmonického oscilátoru (4.1.3) příslušející energii E_n , dané vztahem (4.2.14).

Níže uvedený postup je deduktivní a vychází z definice koherentního stavu (8.0.1). Dá se však postupovat i opačně: (i) buď hledat stavy harmonického oscilátoru, které minimalizují relace neurčitosti (8.4.12), jak je popsáno v práci [10] (strana 220), nebo hledat takové stavy, které co nejlépe aproximují pohyb klasické částice, tj. splňují vztah (8.5.9) pro střední hodnoty \hat{x} a \hat{p} . Tento postup je sledován například v učebnici [11].

8.1 Poissonovo rozdělení

Poissonovo rozdělení udává počet n výskytu jevů v určitém intervalu, pokud jsou jednotlivé jevy statisticky nezávislé. Rozdělení je dáno předpisem

$$P_n = \frac{\lambda^n}{n!} e^{-\lambda}, \quad (8.1.1)$$

kde λ je parametr Poissonova rozdělení.

1. Ukažte, že rozdělení je normalizované.
2. Nalezněte střední hodnotu Poissonova rozdělení.
3. Nalezněte rozptyl Poissonova rozdělení.

Řešení:

1. Normalizace

$$\sum_{n=0}^{\infty} P_n = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\lambda^n}{n!} = e^{-\lambda} e^{\lambda} = 1. \quad (8.1.2)$$

2. Střední hodnota

$$\langle n \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} n P_n = e^{-\lambda} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\lambda^n}{(n-1)!} = e^{-\lambda} \lambda e^{\lambda} = \lambda. \quad (8.1.3)$$

3. Střední hodnota kvadrátu je

$$\begin{aligned} \langle n^2 \rangle &= \sum_{n=0}^{\infty} n^2 P_n = e^{-\lambda} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\lambda^n}{(n-1)!} \underbrace{n}_{n-1+1} \\ &= e^{-\lambda} \left[\lambda^2 \sum_{n=2}^{\infty} \frac{\lambda^{n-2}}{(n-2)!} + \lambda \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\lambda^{n-1}}{(n-1)!} \right] \\ &= \lambda^2 + \lambda, \end{aligned} \quad (8.1.4)$$

takže rozptyl vychází

$$(\Delta n)^2 = \langle n^2 \rangle - \langle n \rangle^2 = \lambda. \quad (8.1.5)$$

Poissonovo rozdělení má tedy rozptyl i střední hodnotu stejnou a danou velikostí parametru λ .

8.2 Základní vlastnosti koherentních stavů

1. Ukažte, že skalární součin dvou koherentních stavů (8.0.1) je

$$\langle z|z'\rangle = e^{-\frac{|z-z'|^2}{2} + i|z||z'| \sin(\phi' - \phi)}, \quad (8.2.1)$$

kde

$$z = |z| e^{i\phi}, \quad \phi \in [0, 2\pi). \quad (8.2.2)$$

Koherentní stavy jsou tedy normalizované, avšak nejsou navzájem ortogonální, z čehož vyplývá, že $|z\rangle$ nelze vzít za bázi Hilbertova prostoru harmonického oscilátoru (resp. někdy se říká, že báze pomocí koherentních stavů je přeuredená).

2. Ukažte, čemu se rovná pravděpodobnost nalezení stavu $|z'\rangle$, pokud máme systém připravený ve stavu $|z\rangle$.

3. Ukažte, že je splněna relace uzavřenosti ve tvaru

$$\int |z\rangle \langle z| \frac{dz}{\pi} = 1. \quad (8.2.3)$$

4. Ukažte, že rozdělení energií v koherentním stavu je Poissonovo, tj. že lze psát

$$P_n = |\langle n|z\rangle|^2 = \frac{\lambda^n}{n!} e^{-\lambda}. \quad (8.2.4)$$

Nalezněte λ .

5. Na základě vlastností Poissonova rozdělení nalezněte, čemu se rovná střední hodnota energie harmonického oscilátoru v koherentním stavu $\langle E \rangle_z$.

Řešení:

1. Na základě definice (8.0.1) platí:

$$\begin{aligned} \langle z|z'\rangle &= e^{-\frac{|z|^2+|z'|^2}{2}} \sum_{n,n'=0}^{\infty} \frac{(z^*)^n (z')^{n'}}{\sqrt{n!n'}} \underbrace{\langle n|n'\rangle}_{\delta_{nn'}} \\ &= e^{-\frac{|z|^2+|z'|^2}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(z^* z')^n}{n!}. \end{aligned} \quad (8.2.5)$$

Po zavedení

$$z^* = |z| e^{-i\phi}, \quad z' = |z'| e^{i\phi'} \quad (8.2.6)$$

lze absolutní hodnotu rozdílu dvou komplexních čísel rozepsat jako

$$\begin{aligned} |z - z'|^2 &= (z - z')(z^* - z'^*) \\ &= |z|^2 + |z'|^2 - z z'^* - z^* z' \\ &= |z|^2 + |z'|^2 - |z||z'| e^{i(\phi - \phi')} - |z||z'| e^{-i(\phi - \phi')} \\ &= |z|^2 + |z'|^2 - 2|z||z'| \cos(\phi - \phi'). \end{aligned} \quad (8.2.7)$$

Pak

$$\begin{aligned} \langle z|z'\rangle &= e^{-\frac{|z|^2+|z'|^2}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{|z|^n |z'|^n}{n!} e^{in(\phi' - \phi)} \\ &= e^{-\frac{|z|^2+|z'|^2}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{[|z||z'| e^{i(\phi' - \phi)}]^n}{n!} \\ &= e^{-\frac{|z|^2+|z'|^2}{2}} e^{|z||z'|[\cos(\phi' - \phi) + i \sin(\phi' - \phi)]} \\ &= e^{-\frac{|z-z'|^2}{2} + i|z||z'| \sin(\phi' - \phi)}. \end{aligned} \quad (8.2.8)$$

Je tedy $\langle z|z\rangle = 1$, avšak $\langle z|z'\rangle \neq 0$ je obecně nenulové komplexní číslo.

2. Hledaná pravděpodobnost je dána kvadrátem amplitudy (8.2.1)

$$p = |\langle z' | z \rangle|^2 = e^{-|z'-z|^2} . \quad (8.2.9)$$

3. Komplexní číslo z se opět vyjádří pomocí velikosti a fáze (8.2.2), kde pro zjednodušení zápisu označíme $r \equiv |z|$. Pak $dz = r dr d\phi$ a integrál relací uzavřenosti dá

$$\begin{aligned} \int |z\rangle \langle z| \frac{dz}{\pi} &= \int e^{-r^2} \sum_{n,n'=0}^{\infty} \frac{r^n e^{in\phi}}{\sqrt{n!}} \frac{r^{n'} e^{-in'\phi}}{\sqrt{n'!}} |n\rangle \langle n'| \frac{r}{\pi} dr d\phi \\ &= \sum_{n,n'=0}^{\infty} \frac{|n\rangle \langle n'|}{\pi \sqrt{n!n'!}} \underbrace{\int_0^{\infty} e^{-r^2} r^{n+n'+1} dr}_{\rho \equiv r^2, \quad d\rho = 2r dr} \underbrace{\int_0^{2\pi} e^{i(n-n')\phi} d\phi}_{2\pi \delta_{nn'}} \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{2}{\pi} \frac{|n\rangle \langle n|}{n!} \frac{1}{2} \underbrace{\int_0^{\infty} \rho^n e^{-\rho} d\rho}_{\Gamma(n+1)=n!} \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} |n\rangle \langle n| = 1 . \end{aligned} \quad (8.2.10)$$

4. Pravděpodobnost se získá dosazením do definičního vztahu (8.2.1)

$$P_n = |\langle n | z \rangle|^2 = \left| e^{-\frac{|z|^2}{2}} \frac{z^n}{\sqrt{n!}} \right|^2 = e^{-|z|^2} \frac{|z|^{2n}}{n!}$$

a srovnáním s Poissonovým rozdělením (8.1.1)

$$\lambda = |z|^2 . \quad (8.2.11)$$

5. Energie vlastního stavu harmonického oscilátor $|n\rangle$ je dána vztahem (4.2.14). Po dosazení

$$\langle E \rangle_z = \sum_{n=0}^{\infty} \hbar \Omega \left(n + \frac{1}{2} \right) e^{-\lambda} \frac{\lambda^n}{n!} = \hbar \Omega \left(\lambda + \frac{1}{2} \right) = \hbar \Omega \left(|z|^2 + \frac{1}{2} \right) . \quad (8.2.12)$$

8.3 Vlastní stav operátoru \hat{a}

1. Ukažte, že pro posunovací operátor \hat{a} platí

$$\boxed{\hat{a} |z\rangle = z |z\rangle} . \quad (8.3.1)$$

To znamená, že koherentní stav $|z\rangle$ je vlastním stavem \hat{a} s vlastní hodnotou z . Operátor \hat{a} není hermitovský, proto jsou jeho vlastní hodnoty komplexní.

2. Ukažte, že neexistuje žádný vlastní stav posunovacího operátoru \hat{a}^\dagger .

3. Pomocí Bakerovy-Campbellové-Hausdorffovy formule (1.4.16) ukažte, že koherentní stav lze vyjádřit také ve tvaru

$$|z\rangle = e^{z\hat{a}^\dagger - z^*\hat{a}} |0\rangle . \quad (8.3.2)$$

Řešení:

1. Při důkazu se vychází z definice koherentního stavu (8.0.1) a vztahu pro posunovací operátor (4.1.15):

$$\begin{aligned}\hat{a}|z\rangle &= e^{-\frac{|z|^2}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^n}{\sqrt{n!}} \underbrace{\hat{a}|n\rangle}_{\sqrt{n}|n-1\rangle} \\ &= z e^{-\frac{|z|^2}{2}} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{z^{n-1}}{\sqrt{(n-1)!}} |n-1\rangle \\ &= z|z\rangle.\end{aligned}\tag{8.3.3}$$

2. Předpokládejme, že existuje vlastní stav operátoru \hat{a}^\dagger s vlastní hodnotou λ

$$\hat{a}^\dagger |\psi(z)\rangle = \lambda |\psi(z)\rangle,\tag{8.3.4}$$

který lze vyjádřit v bázi $|n\rangle$ jako rozvoj

$$|\psi(z)\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \frac{z^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle.\tag{8.3.5}$$

Působení \hat{a}^\dagger na tento vztah dá

$$\hat{a}^\dagger |\psi(z)\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \frac{z^n}{(n+1)!} |n+1\rangle,\tag{8.3.6}$$

takže v rozvoji (8.3.5) musí být $a_0 = 0$. Indukcí vyplývá, že musí platit $a_n = 0$ pro všechna $n \in \mathbb{N}_0$. Vlastní stav $|\psi(z)\rangle$ tedy neexistuje.

3. Využijte se BCH formule ve tvaru (1.4.16),

$$e^{\hat{A}+\hat{B}} = e^{-\frac{1}{2}[\hat{A},\hat{B}]} e^{\hat{A}} e^{\hat{B}},\tag{8.3.7}$$

která platí za předpokladu

$$[\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]] = [\hat{B}, [\hat{A}, \hat{B}]] = 0.\tag{8.3.8}$$

Dosazení $\hat{A} = z\hat{a}^\dagger$, $\hat{B} = -z^*\hat{a}$ (komutační relace (8.3.8) jsou splněny, jelikož $[z\hat{a}^\dagger, -z^*\hat{a}] = zz^* = |z|^2$ je c -číslo) vede na

$$e^{z\hat{a}^\dagger - z^*\hat{a}} = e^{-\frac{|z|^2}{2}} e^{z\hat{a}^\dagger} e^{z^*\hat{a}}.\tag{8.3.9}$$

Jelikož $\hat{a}|0\rangle = 0$, je také

$$e^{-z^*\hat{a}}|0\rangle = 0\tag{8.3.10}$$

a díky vztahu (4.1.18) a po rozvinutí zbývajících exponenciál se dostane

$$\begin{aligned}e^{z\hat{a}^\dagger - z^*\hat{a}}|0\rangle &= e^{-\frac{|z|^2}{2}} e^{z\hat{a}^\dagger}|0\rangle \\ &= e^{-\frac{|z|^2}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^n}{n!} \hat{a}^{\dagger n}|0\rangle \\ &= e^{-\frac{|z|^2}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^n}{n!} \sqrt{n!}|n\rangle \\ &= |z\rangle.\end{aligned}\tag{8.3.11}$$

8.4 Střední hodnoty operátorů

1. Nalezněte střední hodnotu energie harmonického oscilátoru ve stavu $|z\rangle$ a porovnejte s výsledkem (8.2.12).

2. Určete střední hodnoty operátorů polohy a hybnosti

$$\langle \hat{x} \rangle_z \equiv \langle z | \hat{x} | z \rangle, \quad (8.4.1a)$$

$$\langle \hat{p} \rangle_z \equiv \langle z | \hat{p} | z \rangle \quad (8.4.1b)$$

a vyjádřete pomocí nich číslo z .

3. Určete střední kvadratickou odchylku operátorů souřadnice a hybnosti

$$\Delta_z \hat{x}^2 \equiv \langle z | (\hat{x} - \langle \hat{x} \rangle_z)^2 | z \rangle, \quad (8.4.2a)$$

$$\Delta_z \hat{p}^2 \equiv \langle z | (\hat{p} - \langle \hat{p} \rangle_z)^2 | z \rangle \quad (8.4.2b)$$

a pomocí nich ukažte, že koherentní stavy minimalizují relace neurčitosti.

Řešení:

1. Hamiltonián harmonického oscilátoru se vyjádří pomocí posunovacích operátorů (4.2.12) a využije se vztahy (8.3.1):

$$\langle z | \hat{H} | z \rangle = \langle z | \hbar \Omega \left(\hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2} \right) | z \rangle = \hbar \Omega \left(|z|^2 + \frac{1}{2} \right). \quad (8.4.3)$$

To se rovná dříve obdrženému výsledku (8.2.12).

2. Přímočarý postup rozvinutím koherentních stavů do řady a využitím vztahu mezi souřadnicí a posunovacími operátory (4.2.17)²² se dostane

$$\begin{aligned} \langle z | \hat{x} | z \rangle &= e^{-|z|^2} \sum_{n,n'=0}^{\infty} \frac{z^{*n}}{\sqrt{n!}} \frac{z^{n'}}{\sqrt{n'!}} \underbrace{\langle n' | \hat{x} | n \rangle}_{\sqrt{\frac{\hbar}{2M\Omega}} (\sqrt{n+1} \delta_{n',n+1} + \sqrt{n} \delta_{n',n-1})} \\ &= e^{-|z|^2} \sqrt{\frac{\hbar}{2M\Omega}} \left[\sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^{*n} z^{n+1}}{\sqrt{n!(n+1)!}} \sqrt{n+1} + \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^{*n} z^{n-1}}{\sqrt{n!(n-1)!}} \sqrt{n} \right] \\ &= e^{-|z|^2} \sqrt{\frac{\hbar}{2M\Omega}} \left[z e^{|z|^2} + z^* e^{|z|^2} \right] \\ &= \sqrt{\frac{2\hbar}{M\Omega}} \operatorname{Re} z \end{aligned} \quad (8.4.5)$$

a analogicky pro operátor hybnosti

$$\langle z | \hat{p} | z \rangle = \sqrt{2\hbar M\Omega} \operatorname{Im} z. \quad (8.4.6)$$

Číslo z lze tedy vyjádřit jako

$$z = \sqrt{\frac{M\Omega}{2\hbar}} \left(\langle \hat{x} \rangle_z + \frac{i}{M\Omega} \langle \hat{p} \rangle_z \right). \quad (8.4.7)$$

Reálná část čísla z udává střední hodnotu *souřadnice*, imaginární část z střední hodnotu *hybnosti*.

²²Místo explicitního výpočtu lze využít i **jednodušší postup díky vztahu (8.3.1)**:

$$\langle z | \hat{a}^\dagger | z \rangle = z, \quad \langle z | \hat{a} | z \rangle = (\langle z | \hat{a}^\dagger | z \rangle)^* = z^*. \quad (8.4.4)$$

3. Kvadrát operátoru souřadnice vyjádřený pomocí posunovacích operátorů (4.2.17) je

$$\begin{aligned}\hat{x}^2 &= \frac{\hbar}{2M\Omega} (\hat{a}^2 + \hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a} + \hat{a}^{\dagger 2}) \\ &= \frac{\hbar}{2M\Omega} (\hat{a}^2 + 2\hat{a}^\dagger\hat{a} + 1 + \hat{a}^{\dagger 2})\end{aligned}\quad (8.4.8)$$

(využily se navíc komutační relace $[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1$). Na základě vztahů analogických k (8.4.4) je střední hodnota operátoru \hat{x}^2 rovna

$$\langle z | \hat{x}^2 | z \rangle = \frac{\hbar}{2M\Omega} (z^2 + 2|z|^2 + 1 + z^{*2}). \quad (8.4.9)$$

Střední kvadratická odchylka tedy vychází

$$\Delta_z \hat{x}^2 = \frac{\hbar}{2M\Omega} (z^2 + 2|z|^2 + 1 + z^{*2} - z^2 - 2|z|^2 - z^{*2}) = \frac{\hbar}{2M\Omega} \quad (8.4.10)$$

a podobně pro operátor hybnosti

$$\Delta_z \hat{p}^2 = \frac{\hbar M \Omega}{2}. \quad (8.4.11)$$

Relace neurčitosti pro koherentní stav tedy znějí

$$\Delta_z \hat{x}^2 \Delta_z \hat{p}^2 = \frac{\hbar^2}{4}, \quad (8.4.12)$$

což je minimální hodnota, kterou může neurčitost mezi polohou a hybností nabývat.

8.5 Časový vývoj

1. Nalezněte vyjádření koherentního stavu v čase t , tj. stav

$$|z(t)\rangle = \hat{U}(t) |z\rangle, \quad (8.5.1)$$

kde $\hat{U}(t)$ je operátor časového vývoje.

2. Určete střední hodnoty operátorů polohy a hybnosti v čase t

$$\langle \hat{x}(t) \rangle_z \equiv \langle z(t) | \hat{x} | z(t) \rangle, \quad \langle \hat{p}(t) \rangle_z \equiv \langle z(t) | \hat{p} | z(t) \rangle. \quad (8.5.2)$$

Ukažte, že časový vývoj koherentního stavu lze znázornit jako elipsu v grafu, ve kterém na osy vynášíme $\langle \hat{x}(t) \rangle_z$ proti $\langle \hat{p}(t) \rangle_z$. To je konzistentní s dynamikou klasické částice v potenciálu harmonického oscilátoru.

3. Nalezněte podmínku pro hodnotu z , za které bude elipsa v klasickém případě a v kvantovém případě pro střední hodnoty stejná.

Řešení:

1. Evoluční operátor pro harmonický oscilátor zní

$$\hat{U}(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t} = e^{-i\Omega t (\hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2})}. \quad (8.5.3)$$

Jeho působení na koherentní stav dává

$$\begin{aligned}|z(t)\rangle &= e^{-\frac{|z|^2}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^n}{\sqrt{n!}} e^{-i\Omega t (n + \frac{1}{2})} |n\rangle \\ &= e^{-\frac{|z|^2}{2} - \frac{i\Omega t}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(z e^{-i\Omega t})^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle \\ &= e^{-\frac{i\Omega t}{2}} |z e^{-i\Omega t}\rangle.\end{aligned}\quad (8.5.4)$$

Při časovém vývoji tedy (až na fázi) číslo z periodicky osciluje s frekvencí Ω ,

$$z(t) = z e^{-i\Omega t} . \quad (8.5.5)$$

Jak víme z předchozího příkladu 8.4, reálná a imaginární část čísla z udávají střední hodnotu polohy a hybnosti (8.4.7). Tyto střední hodnoty se tedy budou měnit v čase, jak se také explicitně ukáže v následující části úlohy.

2. Díky vyjádření komplexního čísla z pomocí rozkladu na velikost a fázi (8.2.2) lze časový vývoj středních hodnot zapsat ve tvaru

$$\langle \hat{x}(t) \rangle_z = \sqrt{\frac{2\hbar}{M\Omega}} \operatorname{Re} z(t) = \sqrt{\frac{2\hbar}{M\Omega}} |z| \cos [\phi_0 - \Omega t], \quad (8.5.6a)$$

$$\langle \hat{p}(t) \rangle_z = \sqrt{2\hbar M\Omega} \operatorname{Im} z(t) = \sqrt{2\hbar M\Omega} |z| \sin [\phi_0 - \Omega t], \quad (8.5.6b)$$

kde fáze ϕ_0 je fixována střední hodnotou operátorů souřadnice a hybnosti v čase $t = 0$. Vztahy (8.5.6) se pak dají přepsat do tvaru

$$\frac{\langle \hat{x}(t) \rangle_z^2}{A_q^2} + \frac{\langle \hat{p}(t) \rangle_z^2}{B_q^2} = 1, \quad (8.5.7)$$

což je rovnice elipsy s poloosami

$$A_q = \sqrt{\frac{2\hbar}{M\Omega}} |z|, \quad (8.5.8a)$$

$$B_q = \sqrt{2\hbar M\Omega} |z|. \quad (8.5.8b)$$

3. V klasickém případě je energie harmonického oscilátoru (klasický Hamiltonián)

$$E = \frac{1}{2M} p^2 + \frac{1}{2} M \Omega^2 x^2, \quad (8.5.9)$$

takže

$$\frac{x^2}{A_c^2} + \frac{p^2}{B_c^2} = 1, \quad (8.5.10)$$

kde

$$A_c = \sqrt{\frac{2E}{M\Omega^2}}, \quad (8.5.11a)$$

$$B_c = \sqrt{2ME}. \quad (8.5.11b)$$

Střední hodnota energie v kvantovém případě popsaném koherentním stavem $|z\rangle$ je (8.2.12). Pro velké hodnoty z lze zanedbat faktor $\frac{1}{2}$ a přibližně tedy platí

$$\langle E \rangle_z \approx \hbar\Omega |z|^2. \quad (8.5.12)$$

Čím větší je hodnota z , tím lépe bude koherentní stav odpovídat pohybu klasické částice o stejné energii.

9 Časový vývoj

9.1 Breit-Wignerovo rozdělení

Kvantový systém je popsán časově nezávislým Hamiltoniánem \hat{H} , takže unitární operátor časového vývoje má tvar

$$\hat{U}(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t} \quad (9.1.1)$$

za předpokladu $\hat{U}(0) = \hat{1}$. Časově vyvinutý stav $|\psi(0)\rangle$ lze rozložit jako

$$|\psi(t)\rangle = A(t) |\psi(0)\rangle + |\phi(t)\rangle = \hat{U}(t) |\psi(0)\rangle, \quad (9.1.2)$$

kde

$$A(t) \equiv \langle \psi(0) | \psi(t) \rangle \quad (9.1.3)$$

a stav $|\psi(0)\rangle$ je kolmý na stav $|\phi(t)\rangle$,

$$\langle \psi(0) | \phi(t) \rangle = 0. \quad (9.1.4)$$

Na stav $|\psi(t)\rangle$ lze pohlížet například jako na superpozici rozpadlého a nerozpadlého jádra, přičemž $A(t)$ udává amplitudu pravděpodobnosti, že se systém od času 0 do času t nerozpadne (amplituda přežití).

1. Užitím rozkladu operátoru identity

$$\hat{1} = \int_{-\infty}^{\infty} |E\rangle \langle E| dE \quad (9.1.5)$$

ověřte, že amplituda $A(t)$ se dá vyjádřit jako Fourierova transformace hustoty pravděpodobnosti $f(\omega)$ v energetické reprezentaci

$$A(t) = \int_{-\infty}^{\infty} f(\omega) e^{-i\omega t} d\omega, \quad (9.1.6)$$

kde

$$f(\omega) = \frac{1}{\hbar} \left| \langle E | \psi(0) \rangle \right|^2 \Big|_{E=\hbar\omega} \quad (9.1.7)$$

Nechť

$$P(t) \equiv |A(t)|^2 = e^{-\frac{\Gamma}{\hbar} t}, \quad t \geq 0, \quad \Gamma > 0 \quad (9.1.8)$$

je pravděpodobnost exponenciálního rozpadového zákona (pravděpodobnost, že se systém rozpadne v čase $t \geq 0$), přičemž střední doba života je $\tau \equiv \hbar/\Gamma$. Amplituda pravděpodobnosti se vyjádří jako

$$A(t) = e^{-\frac{\Gamma}{2\hbar} t} e^{i\omega_0 t}, \quad t \geq 0 \quad (9.1.9)$$

kde $e^{i\omega_0 t}$ udává komplexní fázi.

2. Nalezněte vyjádření pro $A(-t)$.

3. Ukažte, že

$$\frac{d}{dt} P(t) \Big|_{t=0} = 0. \quad (9.1.10)$$

4. Inverzní Fourierovou transformací spočítejte $f(\omega)$ z $A(t)$. Získáte *Breit-Wignerovo (Cauchyho) rozdělení*

$$f(\omega) = \frac{1}{2\pi} \frac{\Gamma}{\left(\frac{\Gamma}{2}\right)^2 + \hbar^2 (\omega - \omega_0)^2}. \quad (9.1.11)$$

5. Dokažte, že

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(\omega) d\omega = 1, \quad (9.1.12)$$

takže veličinu $f(\omega)$ lze považovat za hustotu pravděpodobnosti (nalezení částice s frekvencí ω).

6. Vypočítejte střední hodnotu energie a disperzi

$$\langle E \rangle = \hbar \langle \omega \rangle = \hbar \int_{-\infty}^{\infty} \omega f(\omega) d\omega \quad (9.1.13a)$$

$$(\Delta E)^2 = \hbar^2 \left(\langle E \rangle^2 - \langle E^2 \rangle \right) = \hbar^2 \langle E \rangle^2 - \hbar^2 \int_{-\infty}^{\infty} \omega^2 f(\omega) d\omega. \quad (9.1.13b)$$

7. Ukažte, že šířka křivky rozdělení $f(\omega)$ v polovině výšky je rovna Γ .

Řešení:

1. Do rovnice (9.1.3) se dosadí relace uzavřenosti (9.1.7):

$$\begin{aligned} A(t) &= \langle \psi(0) | \psi(t) \rangle \\ &= \left\langle \psi(0) \left| e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t} \right| \psi(0) \right\rangle \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dE \int_{-\infty}^{\infty} dE' \langle \psi(0) | E \rangle \underbrace{\left\langle E \left| e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t} \right| E' \right\rangle}_{e^{-\frac{i}{\hbar} E t} \delta(E-E')} \langle E' | \psi(0) \rangle \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dE |\langle E | \psi(0) \rangle|^2 e^{-\frac{i}{\hbar} E t} = \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{1}{\hbar} |\langle E | \psi(0) \rangle|^2 e^{-i\omega t}, \end{aligned} \quad (9.1.14)$$

což je dokazovaný výraz (9.1.6).

2. Obecně platí

$$\begin{aligned} A(-t) &= \left\langle \psi(0) \left| e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H} t} \right| \psi(0) \right\rangle \\ &= \left\langle \psi(0) \left| -e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H} t} \right| \psi(0) \right\rangle^* \\ &= A^*(t), \end{aligned} \quad (9.1.15)$$

takže speciálně pro amplitudu (9.1.9) exponenciálního rozpadového zákona vychází

$$A(t) = A^*(-t) = e^{\frac{\Gamma}{2\hbar} t} e^{i\omega_0 t}, \quad t < 0. \quad (9.1.16)$$

3. Jelikož $P(t) = A^*(t)A(t)$, pak výsledek předchozího bodu (9.1.16) vede na

$$\frac{dP(t)}{dt} = \frac{dA^*(t)}{dt} A(t) + A^*(t) \frac{dA(t)}{dt} = -A'(-t)A(t) + A'(t)A(-t) \xrightarrow{t \rightarrow 0} 0. \quad (9.1.17)$$

Z toho vyplývá, že kvantový rozpad musí být pro malé časy vždy alespoň kvadratická funkce času t . Exponenciální rozpadový zákon toto *nesplňuje*.

4. Inverzní Fourierova transformace k transformaci (9.1.6) je

$$f(\omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} A(t) e^{i\omega t} dt, \quad (9.1.18)$$

kde integrace $x \in (-\infty, 0)$ se dá provést díky rozšíření (9.1.16):

$$\begin{aligned} f(\omega) &= \frac{1}{2\pi} \left\{ \int_{-\infty}^0 e^{[\frac{\Gamma}{2\hbar} + i(\omega - \omega_0)]t} dt + \int_0^{\infty} e^{[-\frac{\Gamma}{2\hbar} + i(\omega - \omega_0)]t} dt \right\} \\ &= \frac{1}{2\pi} \left[\frac{1}{\frac{\Gamma}{2\hbar} + i(\omega - \omega_0)} - \frac{1}{-\frac{\Gamma}{2\hbar} + i(\omega - \omega_0)} \right] \\ &= \frac{\hbar}{\pi} \frac{\frac{\Gamma}{2}}{(\frac{\Gamma}{2})^2 + \hbar^2 (\omega - \omega_0)^2}. \end{aligned} \quad (9.1.19)$$

5. Normalizace

$$\begin{aligned} I_0 \equiv \int_{-\infty}^{\infty} f(\omega) d\omega &= \frac{\hbar}{\pi} \frac{\Gamma}{2} \left(\frac{2}{\Gamma} \right)^2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{1 + \left(\frac{2\hbar}{\Gamma} \right)^2 (\omega - \omega_0)^2} = \left| \begin{array}{l} x = \frac{2\hbar}{\Gamma} (\omega - \omega_0) \\ d\omega = \frac{\Gamma}{2\hbar} dx \end{array} \right| \\ &= \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{1 + x^2} \\ &= \frac{1}{\pi} [\arctan x]_{-\infty}^{\infty} = 1. \end{aligned} \quad (9.1.20)$$

6. Střední hodnota²³

$$\begin{aligned} I_1 \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \omega f(\omega) d\omega &= \frac{\hbar}{\pi} \frac{\Gamma}{2} \left(\frac{2}{\Gamma} \right)^2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{(\omega - \omega_0 + \omega_0) d\omega}{1 + \left(\frac{2\hbar}{\Gamma} \right)^2 (\omega - \omega_0)^2} = \left| \begin{array}{l} y = \omega - \omega_0 \\ d\omega = dy \end{array} \right| \\ &= \omega_0 I_0 + \underbrace{\frac{2}{\pi \hbar \Gamma} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{y dy}{1 + \left(\frac{2\hbar}{\Gamma} \right)^2 y^2}}_0 \\ &= \omega_0. \end{aligned} \quad (9.1.21)$$

Střední hodnota ω^2

$$\begin{aligned} I_2 \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \omega^2 f(\omega) d\omega &= \frac{\Gamma}{2\pi\hbar} \left(\frac{2}{\Gamma} \right)^2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{(\omega^2 - 2\omega\omega_0 + \omega_0^2 + 2\omega\omega_0 - \omega_0^2) d\omega}{1 + \left(\frac{2\hbar}{\Gamma} \right)^2 (\omega - \omega_0)^2} \\ &= 2\omega_0 I_1 - \omega_0^2 I_0 + \frac{2}{\pi \hbar \Gamma} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{y^2 dy}{1 + \left(\frac{2\hbar}{\Gamma} \right)^2 y^2} = \left| \begin{array}{l} z = \frac{2\hbar}{\Gamma} y \\ dy = \frac{\Gamma}{2\hbar} dz \end{array} \right| \\ &= \omega_0^2 + \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{z^2 dz}{1 + z^2} \\ &= \omega_0^2 + \frac{1}{\pi} [x - \arctan x]_{-\infty}^{\infty}, \end{aligned} \quad (9.1.22)$$

takže

$$(\Delta\omega)^2 = [x - \arctan x]_{-\infty}^{\infty} \rightarrow \infty. \quad (9.1.23)$$

Breit-Wignerovo rozdělení má tedy nekonečnou disperzi.

Poznámka: Lineární chování exponenciálního rozpadového zákona v $t = 0$ a nekonečná disperze Breit-Wignerova rozdělení spolu souvisejí. Breit-Wignerovo rozdělení nemůže být fyzikální, jelikož není omezené na energiích zespolu.

Poznámka: (Payleyův-Wienerův teorém) Je-li Hamiltonián systému omezený odspodu, tj. existuje-li E_0 taková, že

$$\langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle \geq E_0 \quad \forall |\psi\rangle \in \mathcal{H}, \quad (9.1.24)$$

²³Poslední integrál při výpočtu střední hodnoty je lichá funkce, odpovídající primitivní funkce je tedy sudá. Primitivní funkce však diverguje pro $y \rightarrow \infty$. Integrál přes nekonečný interval je tedy nutno chápat tak, že interval je symetrický, tj. ve smyslu limity $\lim_{z \rightarrow -\infty} \int_{-z}^z$, ve které integrál vymizí.

a je-li $|A(t)|$ kvadraticky integrovatelná funkce, pak zároveň platí

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{|\ln |A(t)||}{1+t^2} dt < \infty. \quad (9.1.25)$$

Tato podmínka je rovněž vhodným kritériem pro to, jestli $A(t)$ je dobrá funkce pro konsistentní teorii kvantového rozpadu.

Breit-Wignerovo rozdělení tuto podmínku nespĺňuje:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\Gamma}{2\hbar} \frac{|t|}{1+t^2} dt = \frac{\Gamma}{\hbar} \int_0^{\infty} \frac{t}{1+t^2} dt = \frac{\Gamma}{2\hbar} \left[\ln(1+t^2) \right]_0^{\infty} \rightarrow \infty. \quad (9.1.26)$$

9.2 Ramseyův přístroj

Částice se spinem $1/2$ a velikostí magnetického momentu μ , popsaná vlnovou funkcí (spinorem)

$$|\psi\rangle(t) = \psi_{\uparrow}(t) |\uparrow\rangle + \psi_{\downarrow}(t) |\downarrow\rangle = \begin{pmatrix} \psi_{\uparrow}(t) \\ \psi_{\downarrow}(t) \end{pmatrix}, \quad (9.2.1)$$

se pohybuje v zařízení složeném ze tří oblastí. V první oblasti (1. Ramseyova oblast) je zapnuté magnetické pole složené ze stacionární složky \mathbf{B}_0 směřující podél osy z a rotující složky $\mathbf{B}_1(t)$ v rovině (x, y)

$$\mathbf{B}_0 = (0, 0, B_0), \quad (9.2.2a)$$

$$\mathbf{B}_1(t) = (B_1 \cos \omega t, -B_1 \sin \omega t, 0), \quad (9.2.2b)$$

a částice v ní stráví dobu τ . V druhé oblasti je rotující pole vypnuto a po dobu T se částice pohybuje pouze ve stacionárním poli \mathbf{B}_0 . Poté (2. Ramseyova oblast) je rotující pole zapnuto, a to opět na dobu τ ²⁴.

1. Napište Hamiltonián v Ramseyově oblasti.
2. Nalezněte složky evolučního operátoru [12]

$$U(t) = e^{i\frac{\omega t}{2} \sigma_3} e^{-i\frac{\Omega t}{2} (\hat{n}_{\Omega} \cdot \sigma)} \quad (9.2.3)$$

kde

$$\Omega = \sqrt{(\omega - \omega_0)^2 + \omega_1^2}, \quad \hat{n}_{\Omega} = \frac{1}{\Omega} \begin{pmatrix} -\omega_1 \\ 0 \\ \omega - \omega_0 \end{pmatrix}, \quad \omega_{0,1} = \frac{2\mu}{\hbar} B_{0,1}. \quad (9.2.4)$$

3. Nalezněte složky evolučního operátoru $U(t; t_0)$, který vyvíjí systém z času t_0 do času t .
4. Nalezněte složky evolučního operátoru $U_0(\tau + T; \tau)$ oblasti, kde je vypnuté pole \mathbf{B}_1 .
5. Proces průchodu zařízením složeným z dvou Ramseyových oblastí s mezioblastí s vypnutým polem \mathbf{B}_1 je dán evolučním operátorem

$$U_F = U(2\tau + T; \tau + T) U_0(\tau + T; \tau) U(\tau; 0). \quad (9.2.5)$$

Nalezněte amplitudu pravděpodobnosti $A_{\downarrow\uparrow}$ a pravděpodobnost $p_{\downarrow\uparrow}$, že systém připravený na počátku ve stavu, kdy projekce spinu na osu z je $+1/2$,

$$|\psi_i\rangle = |\uparrow\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (9.2.6)$$

bude po průchodu zařízením ve stavu, kdy projekce spinu bude $-1/2$ (dojde k překlopení spinu²⁵):

$$|\psi_f\rangle = |\downarrow\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (9.2.7)$$

²⁴Experiment navrhl v 50. letech 20. století Norman Foster Ramsley a v roce 1989 za něj dostal Nobelovu cenu.

²⁵Spin flip.

6. Nalezněte amplitudu pravděpodobnosti $A_{\downarrow\uparrow}^{(1)}$ ($A_{\uparrow\uparrow}^{(1)}$), že k přehození spinu dojde (nedojde) po průchodu 1. Ramseyovou oblastí a oblastí bez oscilujícího pole.
7. Nalezněte amplitudu pravděpodobnosti $A_{\downarrow\uparrow}^{(2)}$ ($A_{\downarrow\downarrow}^{(2)}$), že k přehození spinu dojde (nedojde) po průchodu 2. Ramseyovou oblastí.
8. Ověřte, že složením amplitud pravděpodobnosti z předchozích dvou bodů dostanete amplitudu pravděpodobnosti A_{12} . Ukažte, že pravděpodobnost obsahuje interferenční člen.
9. V rezonančním případě, kdy je úhlová frekvence oscilujícího pole ω stejná jako Larmorova frekvence ω_0 , najděte matici pravděpodobností přechodu \mathbf{p}^{rez} , jejíž složky p_{fi}^{rez} udávají pravděpodobnosti, že spin, který vletá do zařízení s polarizací $i \in \{\uparrow, \downarrow\}$ vylétne s polarizací $f \in \{\uparrow, \downarrow\}$.

Poznámka: Příklad je přejat z monografie [11], kapitola 8.8.

Řešení:

1. Pauliho matice σ jsou dány vztahy (2.0.1). Matice Hamiltoniánu v Ramseyově oblasti je

$$\begin{aligned} H &= -\mu \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B}(t) \\ &= -\mu \begin{pmatrix} B_0 & B_1(\cos \omega t + i \sin \omega t) \\ B_1(\cos \omega t - i \sin \omega t) & -B_0 \end{pmatrix} \\ &= -\begin{pmatrix} \frac{\hbar \omega_0}{2} & \frac{\hbar \omega_1}{2} e^{i\omega t} \\ \frac{\hbar \omega_1}{2} e^{-i\omega t} & -\frac{\hbar \omega_0}{2} \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (9.2.8)$$

2. Evoluční operátor (9.2.3) se vypočítá pomocí vztahu (2.2.1)²⁶. Jeho použití vede na²⁷

$$e^{i\frac{\omega t}{2}\sigma_3} = \cos \frac{\omega t}{2} + i \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \sin \frac{\omega t}{2} = \begin{pmatrix} e^{i\frac{\omega t}{2}} & 0 \\ 0 & e^{-i\frac{\omega t}{2}} \end{pmatrix}, \quad (9.2.9a)$$

$$\begin{aligned} e^{-i\frac{\Omega t}{2}(\hat{\mathbf{n}}_{\Omega} \cdot \boldsymbol{\sigma})} &= \cos \frac{\Omega t}{2} - i(\hat{\mathbf{n}}_{\Omega} \cdot \boldsymbol{\sigma}) \sin \frac{\Omega t}{2} \\ &= \cos \frac{\Omega t}{2} - \frac{i}{\Omega} \begin{pmatrix} \omega - \omega_0 & -\omega_1 \\ -\omega_1 & -(\omega - \omega_0) \end{pmatrix} \sin \frac{\Omega t}{2} \\ &= \begin{pmatrix} \cos \frac{\Omega t}{2} - \frac{i}{\Omega}(\omega - \omega_0) \sin \frac{\Omega t}{2} & i\frac{\omega_1}{\Omega} \sin \frac{\Omega t}{2} \\ i\frac{\omega_1}{\Omega} \sin \frac{\Omega t}{2} & \cos \frac{\Omega t}{2} + \frac{i}{\Omega}(\omega - \omega_0) \sin \frac{\Omega t}{2} \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (9.2.9b)$$

a vynásobením těchto dvou matic dává

$$U(t) = \begin{pmatrix} \left[\cos \frac{\Omega t}{2} - i\frac{\Delta\omega}{\Omega} \sin \frac{\Omega t}{2} \right] e^{i\frac{\omega t}{2}} & i\frac{\omega_1}{\Omega} \sin \frac{\Omega t}{2} e^{i\frac{\omega t}{2}} \\ i\frac{\omega_1}{\Omega} \sin \frac{\Omega t}{2} e^{-i\frac{\omega t}{2}} & \left[\cos \frac{\Omega t}{2} + i\frac{\Delta\omega}{\Omega} \sin \frac{\Omega t}{2} \right] e^{-i\frac{\omega t}{2}} \end{pmatrix}, \quad (9.2.10)$$

kde $\Delta\omega \equiv \omega - \omega_0$.

3. Evoluční operátor (9.2.10) vyvíjí systém z času $t_0 = 0$ do času t , jedná se tedy formálně o operátor $U(t; 0)$. Operátor $U(t; t_0)$ je díky unitaritě evolučního operátoru a díky Stoneově teorému

$$U(t; t_0) = U(t; 0)U(0; t_0) = U(t; 0)U^{-1}(t_0; 0) = U(t; 0)U^{\dagger}(t_0; 0). \quad (9.2.11)$$

Výsledek lze získat buď přímým pronásobením odpovídajících matic (9.2.10), nebo z definičního vztahu (9.2.3)

$$\begin{aligned} U(t; t_0) &= e^{i\frac{\omega t}{2}\sigma_3} e^{-i\frac{\Omega t}{2}(\hat{\mathbf{n}}_{\Omega} \cdot \boldsymbol{\sigma})} e^{i\frac{\Omega t_0}{2}(\hat{\mathbf{n}}_{\Omega} \cdot \boldsymbol{\sigma})} e^{-i\frac{\omega t_0}{2}\sigma_3} \\ &= e^{i\frac{\omega t}{2}\sigma_3} e^{-i\frac{\Omega(t-t_0)}{2}(\hat{\mathbf{n}}_{\Omega} \cdot \boldsymbol{\sigma})} e^{-i\frac{\omega t_0}{2}\sigma_3}, \end{aligned} \quad (9.2.12)$$

²⁶Vztah (2.2.1) je možné použít jen v případě, že $|\hat{\mathbf{n}}| = 1$. To je zaručeno normalizačním faktorem $\frac{1}{\Omega}$ ve vyjádření vektoru $\hat{\mathbf{n}}$ v (9.2.4).

²⁷První vztah lze určit i přímo díky tomu, že matice σ_3 je diagonální.

což po dosazení matic (9.2.9a) a (9.2.9b) vede na

$$U_{11}(t; t_0) = \left[\cos \frac{\Omega(t - t_0)}{2} - i \frac{\Delta\omega}{\Omega} \sin \frac{\Omega(t - t_0)}{2} \right] e^{i \frac{\omega(t - t_0)}{2}}, \quad (9.2.13a)$$

$$U_{12}(t; t_0) = -U_{21}^*(t; t_0) = i \frac{\omega_1}{\Omega} \sin \frac{\Omega(t - t_0)}{2} e^{i \frac{\omega(t - t_0)}{2}}, \quad (9.2.13b)$$

$$U_{22}(t; t_0) = \left[\cos \frac{\Omega(t - t_0)}{2} + i \frac{\Delta\omega}{\Omega} \sin \frac{\Omega(t - t_0)}{2} \right] e^{-i \frac{\omega(t - t_0)}{2}} \quad (9.2.13c)$$

(v exponenciálách mimodiagonálních prvků je *součet* časů $t + t_0$).

4. Evoluční operátor v oblasti vypnutého pole \mathbf{B}_1 lze získat například přímým výpočtem z (9.2.13). V této oblasti je $\omega_1 = 0$, takže $\Omega = \omega - \omega_0 = \Delta\omega$ a

$$U_0(\tau + T; \tau) = \begin{pmatrix} e^{-i \frac{\Delta\omega T}{2}} e^{i \frac{\omega T}{2}} & 0 \\ 0 & e^{i \frac{\Delta\omega T}{2}} e^{-i \frac{\omega T}{2}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{i \frac{\omega_0 T}{2}} & 0 \\ 0 & e^{-i \frac{\omega_0 T}{2}} \end{pmatrix}. \quad (9.2.14)$$

Jelikož v této oblasti Hamiltonián nezávisí na čase, tak evoluční operátor závisí jen na rozdílu počátečního a koncového času.

5. Cílem je najít amplitudu pravděpodobnosti

$$A_{\downarrow\uparrow} = \langle \psi_f | \hat{U}_F | \psi_i \rangle = \begin{pmatrix} 0 & 1 \end{pmatrix} U_F \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (9.2.15)$$

Výpočet se rozdělí na dvě části:

$$\begin{aligned} U_0(\tau + T; \tau) U(\tau; 0) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} e^{i \frac{\omega_0 T}{2}} & 0 \\ 0 & e^{-i \frac{\omega_0 T}{2}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \left(\cos \frac{\Omega\tau}{2} - i \frac{\Delta\omega}{\Omega} \sin \frac{\Omega\tau}{2} \right) e^{i \frac{\omega\tau}{2}} \\ i \frac{\omega_1}{\Omega} \sin \frac{\Omega\tau}{2} e^{-i \frac{\omega\tau}{2}} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \left(\cos \frac{\Omega\tau}{2} - i \frac{\Delta\omega}{\Omega} \sin \frac{\Omega\tau}{2} \right) e^{i \frac{\omega\tau}{2}} e^{i \frac{\omega_0 T}{2}} \\ i \frac{\omega_1}{\Omega} \sin \frac{\Omega\tau}{2} e^{-i \frac{\omega\tau}{2}} e^{-i \frac{\omega_0 T}{2}} \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (9.2.16)$$

a

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 \end{pmatrix} U(2\tau + T; \tau + T) = \begin{pmatrix} i \frac{\omega_1}{\Omega} \sin \frac{\Omega\tau}{2} e^{-i \frac{\omega(3\tau+2T)}{2}} \\ \left(\cos \frac{\Omega\tau}{2} + i \frac{\Delta\omega}{\Omega} \sin \frac{\Omega\tau}{2} \right) e^{-i \frac{\omega\tau}{2}} \end{pmatrix}. \quad (9.2.17)$$

Vzájemné vynásobení těchto dvou výrazů vede na hledaný výsledek

$$\begin{aligned} A_{\downarrow\uparrow} &= i \frac{\omega_1}{\Omega} \sin \frac{\Omega\tau}{2} e^{-i\omega\tau} e^{-i \frac{\omega T}{2}} \\ &\quad * \left[\left(\cos \frac{\Omega\tau}{2} - i \frac{\Delta\omega}{\Omega} \sin \frac{\Omega\tau}{2} \right) e^{-i \frac{\Delta\omega T}{2}} + \left(\cos \frac{\Omega\tau}{2} + i \frac{\Delta\omega}{\Omega} \sin \frac{\Omega\tau}{2} \right) e^{i \frac{\Delta\omega T}{2}} \right]. \end{aligned} \quad (9.2.18)$$

Pravděpodobnost přehození spinu je tedy (v průběhu výpočtu je pro zjednodušení použito značení $s \equiv \sin \frac{\Omega\tau}{2}$, $c \equiv \cos \frac{\Omega\tau}{2}$, $f \equiv \frac{\Delta\omega T}{2}$)

$$\begin{aligned} P_{\downarrow\uparrow} &= A_{\downarrow\uparrow}^* A_{\downarrow\uparrow} \\ &= \left(\frac{\omega_1}{\Omega} \right)^2 s^2 \left[\left(c - i \frac{\Delta\omega}{\Omega} s \right) e^{-if} + \left(c + i \frac{\Delta\omega}{\Omega} s \right) e^{if} \right]^2 \\ &= \left(\frac{\omega_1}{\Omega} \right)^2 s^2 \left[\left(c^2 - \frac{2i\Delta\omega}{\Omega} cs - \frac{\Delta\omega^2}{\Omega^2} \right) e^{-2if} + \left(c^2 + \frac{2i\Delta\omega}{\Omega} cs - \frac{\Delta\omega^2}{\Omega^2} \right) e^{2if} \right. \\ &\quad \left. + 2 \left(c^2 + \frac{\Delta\omega^2}{\Omega^2} s^2 \right) \right] \\ &= \left(\frac{\omega_1}{\Omega} \right)^2 s^2 \left[c^2 (e^{2if} + e^{-2if} + 2) - \frac{\Delta\omega^2}{\Omega^2} s^2 (e^{2if} + e^{-2if} - 2) + \frac{2i\Delta\omega}{\Omega} cs (e^{2if} + e^{-2if}) \right] \\ &= \left(\frac{\omega_1}{\Omega} \right)^2 s^2 \left[c^2 (2 + 2 \cos 2f) + \frac{\Delta\omega^2}{\Omega^2} s^2 (2 - 2 \cos 2f) - \frac{4\Delta\omega}{\Omega} cs \sin 2f \right] \\ &= \left(\frac{\omega_1}{\Omega} \right)^2 s^2 \left(4c^2 \cos^2 f + 4 \frac{\Delta\omega^2}{\Omega^2} s^2 \sin^2 f - \frac{8\Delta\omega}{\Omega} cs \cos f \sin f \right) \\ &= 4 \left(\frac{\omega_1}{\Omega} \right)^2 \sin^2 \frac{\Omega\tau}{2} \left(\cos \frac{\Omega\tau}{2} \cos \frac{\Delta\omega T}{2} - \frac{\Delta\omega}{\Omega} \sin \frac{\Omega\tau}{2} \sin \frac{\Delta\omega T}{2} \right)^2. \end{aligned} \quad (9.2.19)$$

6. K výpočtu amplitud $A_{\downarrow\uparrow}^{(1)}$ a $A_{\uparrow\uparrow}^{(1)}$ se využije mezivýsledku (9.2.16):

$$A_{\downarrow\uparrow}^{(1)} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \end{pmatrix} U_0(\tau + T; \tau) U(\tau; 0) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = i \frac{\omega_1}{\Omega} \sin \frac{\Omega\tau}{2} e^{-i\frac{\omega\tau}{2}} e^{-i\frac{\omega_0 T}{2}}, \quad (9.2.20a)$$

$$A_{\uparrow\uparrow}^{(1)} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \end{pmatrix} U_0(\tau + T; \tau) U(\tau; 0) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \left(\cos \frac{\Omega\tau}{2} - i \frac{\Delta\omega}{\Omega} \sin \frac{\Omega\tau}{2} \right) e^{i\frac{\omega\tau}{2}} e^{i\frac{\omega_0 T}{2}}. \quad (9.2.20b)$$

7. K výpočtu amplitud $A_{\downarrow\uparrow}^{(2)}$ a $A_{\downarrow\downarrow}^{(2)}$ se využije mezivýsledku (9.2.17):

$$A_{\downarrow\uparrow}^{(2)} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \end{pmatrix} U(2\tau + T; \tau + T)(\tau; 0) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = i \frac{\omega_1}{\Omega} \sin \frac{\Omega\tau}{2} e^{-i\frac{\omega(3\tau+2T)}{2}}, \quad (9.2.21a)$$

$$A_{\downarrow\downarrow}^{(2)} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \end{pmatrix} U(2\tau + T; \tau + T)(\tau; 0) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \left(\cos \frac{\Omega\tau}{2} + i \frac{\Delta\omega}{\Omega} \sin \frac{\Omega\tau}{2} \right) e^{-i\frac{\omega\tau}{2}}. \quad (9.2.21b)$$

8. Přímé dosazení předchozích výsledků dává

$$A_{\downarrow\uparrow} = \underbrace{A_{\downarrow\uparrow}^{(2)} A_{\uparrow\uparrow}^{(1)}}_{A_{\downarrow\uparrow\uparrow}} + \underbrace{A_{\downarrow\downarrow}^{(2)} A_{\downarrow\uparrow}^{(1)}}_{A_{\downarrow\downarrow\uparrow}}. \quad (9.2.22)$$

Pravděpodobnost přehození spinu tedy je

$$p_{\downarrow\uparrow} = |A_{\downarrow\uparrow\uparrow}|^2 + |A_{\downarrow\downarrow\uparrow}|^2 + \underbrace{A_{\downarrow\uparrow\uparrow}^* A_{\downarrow\downarrow\uparrow} + A_{\downarrow\uparrow\uparrow} A_{\downarrow\downarrow\uparrow}^*}_{\text{interferenční člen}}. \quad (9.2.23)$$

9. V rezonančním případě je podle (9.2.4) $\Omega = \omega_1$ a $\Delta\omega = 0$, takže

$$p_{\downarrow\uparrow}^{\text{rez}} = 4 \sin^2 \frac{\omega_1 \tau}{2} \cos^2 \frac{\omega_1 \tau}{2} = \sin^2 \omega_1 \tau. \quad (9.2.24)$$

K výpočtu ostatních pravděpodobností se využije vlastností

$$\begin{aligned} p_{\downarrow\downarrow} + p_{\downarrow\uparrow} &= 1 = p_{\uparrow\downarrow} + p_{\uparrow\uparrow} = 1 \\ p_{\downarrow\uparrow} &= p_{\uparrow\downarrow} \end{aligned} \quad (9.2.25)$$

(první vztah vyplývá z toho, že spin musí projít v jednom ze dvou možných ortogonálních stavů, druhý vztah plyne ze symetrie systému). Všechny hledané pravděpodobnosti lze zapsat ve tvaru matice

$$\mathbf{p}^{\text{rez}} = \begin{pmatrix} \cos^2 \omega_1 \tau & \sin^2 \omega_1 \tau \\ \sin^2 \omega_1 \tau & \cos^2 \omega_1 \tau \end{pmatrix}. \quad (9.2.26)$$

Speciální případy:

$$\begin{aligned} \omega_1 \tau &= k\pi & \mathbf{p}^{\text{rez}} &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} & \text{– spin projde bez překlopení} \\ \omega_1 \tau &= \left(k + \frac{1}{2}\right)\pi & \mathbf{p}^{\text{rez}} &= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} & \text{– 100\% pravděpodobnost překlopení spinu} \\ \omega_1 \tau &= \frac{1}{2} \left(k + \frac{1}{2}\right)\pi & \mathbf{p}^{\text{rez}} &= \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix} & \end{aligned} \quad (9.2.27)$$

přičemž $k \in \mathbb{Z}$.

9.3 Ramseyův přístroj pro spin 1

Částice se spinem 1 a velikostí magnetického momentu μ , popsaná vlnovou funkcí

$$|\psi(t)\rangle = \psi_{+1}(t) | +1 \rangle + \psi_0(t) | 0 \rangle + \psi_{-1}(t) | -1 \rangle = \begin{pmatrix} \psi_{+1}(t) \\ \psi_0(t) \\ \psi_{-1}(t) \end{pmatrix}, \quad (9.3.1)$$

kde dolní index určuje projekci spinu na osu z , se pohybuje v zařízení složeném ze tří oblastí. V první oblasti (1. Ramseyova oblast) je zapnuté magnetické pole složené ze stacionární složky \mathbf{B}_0 směřující podél osy z a rotující složky $\mathbf{B}_1(t)$ v rovině (x, y) ,

$$\mathbf{B}_0 = (0, 0, B_0), \quad \mathbf{B}_1(t) = (B_1 \cos \omega t, -B_1 \sin \omega t, 0), \quad (9.3.2)$$

a částice v ní stráví dobu τ . V druhé oblasti je rotující pole vypnuto a po dobu T se částice pohybuje pouze ve stacionárním poli \mathbf{B}_0 . Poté (2. Ramseyova oblast) je rotující pole zapnuto, a to opět na dobu τ .

1. Matice generující rotace částice se spinem 1 jsou $\mathbf{S}_j^{(1)} = \hbar \mathbf{s}_j$, kde

$$\mathbf{s}_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{s}_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{s}_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (9.3.3)$$

Ukažte, že tyto matice splňují komutační relace pro moment hybnosti

$$[\mathbf{s}_j, \mathbf{s}_k] = i\epsilon_{jkl} \mathbf{s}_l. \quad (9.3.4)$$

(Matice \mathbf{s}_j jsou analogické k Pauliho maticím σ_j popisujícím částici se spinem 1/2 a tvoří generátory jednorozměrné ireducibilní reprezentace grupy $\text{SO}(3)$.)

2. Dokažte, že pro matice \mathbf{s}_j platí $\mathbf{s}_j^{n+2} = \mathbf{s}_j^n$, kde $n \in \mathbb{N}$, a na základě tohoto vztahu vyjádřete exponenciálu

$$e^{i\phi(\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{s})} = ? \quad (9.3.5)$$

kde $\hat{\mathbf{n}}$ je jednotkový vektor určující osu rotace, okolo které se systém otočí o úhel ϕ , a

$$\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{s} \equiv \hat{n}_1 \mathbf{s}_1 + \hat{n}_2 \mathbf{s}_2 + \hat{n}_3 \mathbf{s}_3. \quad (9.3.6)$$

3. Vyjádřete složky evolučního operátoru

$$\mathbf{U}(t) = e^{i\omega t \mathbf{s}_3} e^{-i\Omega t(\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{s})}, \quad (9.3.7)$$

kde

$$\Omega = \sqrt{(\omega - \omega_0)^2 + \omega_1^2}, \quad \hat{\mathbf{n}}_\Omega = \frac{1}{\Omega} \begin{pmatrix} -\omega_1 \\ 0 \\ \omega - \omega_0 \end{pmatrix}, \quad \omega_{0,1} = \frac{2\mu}{\hbar} B_{0,1}. \quad (9.3.8)$$

4. Vyjádřete složky evolučního operátoru $\mathbf{U}(t; t_0)$, který vyvíjí systém z času t_0 do času t .
 5. Vyjádřete složky evolučního operátoru $\mathbf{U}_0(\tau + T; \tau)$ oblasti, kde je vypnuté pole \mathbf{B}_1 .
 6. Proces průchodu zařízením složeným z dvou Ramseyových oblastí s mezioblastí s vypnutým polem \mathbf{B}_1 je dán evolučním operátorem

$$\mathbf{U}_F = \mathbf{U}(2\tau + T; \tau + T) \mathbf{U}_0(\tau + T; \tau) \mathbf{U}(\tau; 0). \quad (9.3.9)$$

Vyjádřete složky evolučního operátoru $\mathbf{U}_F^{\text{rez}}$ pro speciální případ $\omega = \omega_0$ (frekvence oscilujícího magnetického pole \mathbf{B}_1 je v rezonanci s Larmorovou frekvencí ω_0).

7. Vypočítejte matici \mathbf{P}^{rez} se složkami P_{fi}^{rez} , které udávají pravděpodobnosti, že systém připravený na před vstupem do přístroje ve stavu s projekcí spinu na osu z rovnou $i \in \{+1, 0, -1\}$, naměříme po průchodu zařízením ve stavu s projekcí spinu $f \in \{+1, 0, -1\}$.

Řešení:

1. Důkaz se provede prostým dosazením.
2. Vztah $\mathbf{s}_j^{n+2} = \mathbf{s}_j^n$ se dokáže dosazením. Pro mocniny matice $\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{s}$ platí

$$\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{s} = \begin{pmatrix} n_3 & \frac{1}{\sqrt{2}}(n_1 - in_2) & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}}(n_1 + in_2) & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}}(n_1 - in_2) \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}}(n_1 + in_2) & -n_3 \end{pmatrix}, \quad (9.3.10a)$$

$$(\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{s})^2 = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}(n_1^2 + n_2^2) + n_3^2 & \frac{n_3}{\sqrt{2}}(n_1 - in_2) & \frac{1}{2}(n_1^2 - n_2^2 - 2in_1n_2) \\ \frac{n_3}{\sqrt{2}}(n_1 + in_2) & n_1^2 + n_2^2 & -\frac{n_3}{\sqrt{2}}(n_1 - in_2) \\ \frac{1}{2}(n_1^2 - n_2^2 + 2in_1n_2) & -\frac{n_3}{\sqrt{2}}(n_1 + in_2) & \frac{1}{2}(n_1^2 + n_2^2) + n_3^2 \end{pmatrix}, \quad (9.3.10b)$$

$$(\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{s})^3 = \begin{pmatrix} n_3 & \frac{1}{\sqrt{2}}(n_1 - in_2) & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}}(n_1 + in_2) & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}}(n_1 - in_2) \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}}(n_1 + in_2) & -n_3 \end{pmatrix} = \hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{s}, \quad (9.3.10c)$$

a tedy

$$(\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{s})^{2j+1} = \hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{s}, \quad (9.3.11a)$$

$$(\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{s})^{2j} = (\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{s})^2, \quad (9.3.11b)$$

kde $j \in \mathbb{N}$. Rozvinutí exponenciály do řady pak vede po úpravách na hledaný výsledek²⁸

$$\begin{aligned} e^{i\phi(\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{s})} &= \sum_{j=0}^{\infty} \frac{(i\phi)^j}{j!} (\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{s})^j \\ &= 1 + \sum_{j=0}^{\infty} \frac{(i\phi)^{2j+1}}{(2j+1)!} (\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{s})^{2j+1} + \sum_{j=1}^{\infty} \frac{(i\phi)^{2j}}{(2j)!} (\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{s})^{2j} \\ &= 1 + i \sum_{j=0}^{\infty} \frac{(-1)^j \phi^{2j+1}}{(2j+1)!} (\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{s}) + \sum_{j=1}^{\infty} \frac{(-1)^j \phi^{2j}}{(2j)!} (\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{s})^2 \\ &= 1 + i (\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{s}) \sin \phi + (\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{s})^2 (\cos \phi - 1). \end{aligned} \quad (9.3.12)$$

3. Složky evolučního operátoru $U(t)$ se dostanou ze vzorce (9.3.13) dosazením $t_0 = 0$.
4. Postup je zcela stejný jako v příkladu 9.2. Vychází se ze vztahu (9.3.5), což vede na

$$U_{11}(t; t_0) = \left[1 - i \frac{\Delta\omega}{\Omega} \sin \Omega(t - t_0) - \left(\frac{2\Delta\omega^2}{\Omega^2} + \frac{\omega_1^2}{\Omega^2} \right) \sin^2 \frac{\Omega(t - t_0)}{2} \right] e^{i\omega(t-t_0)}, \quad (9.3.13a)$$

$$U_{12}(t; t_0) = \frac{\omega_1}{\sqrt{2}\Omega} \left[i \sin \Omega(t - t_0) + \frac{2\Delta\omega}{\Omega} \sin^2 \frac{\Omega(t - t_0)}{2} \right] e^{i\omega t}, \quad (9.3.13b)$$

$$U_{13}(t; t_0) = -\frac{\omega_1^2}{\Omega^2} \sin^2 \frac{\Omega(t - t_0)}{2} e^{i\omega(t+t_0)}, \quad (9.3.13c)$$

$$U_{21}(t; t_0) = \frac{\omega_1}{\sqrt{2}\Omega} \left[i \sin \Omega(t - t_0) + \frac{2\Delta\omega}{\Omega} \sin^2 \frac{\Omega(t - t_0)}{2} \right] e^{-i\omega t_0}, \quad (9.3.13d)$$

$$U_{22}(t; t_0) = 1 - \frac{\omega_1^2}{\Omega^2} \sin^2 \frac{\Omega(t - t_0)}{2}, \quad (9.3.13e)$$

$$U_{23}(t; t_0) = \frac{\omega_1}{\sqrt{2}\Omega} \left[i \sin \Omega(t - t_0) - \frac{2\Delta\omega}{\Omega} \sin^2 \frac{\Omega(t - t_0)}{2} \right] e^{i\omega t_0}, \quad (9.3.13f)$$

$$U_{31}(t; t_0) = -\frac{\omega_1^2}{\Omega^2} \sin^2 \frac{\Omega(t - t_0)}{2} e^{-i\omega(t+t_0)}, \quad (9.3.13g)$$

$$U_{32}(t; t_0) = \frac{\omega_1}{\sqrt{2}\Omega} \left[i \sin \Omega(t - t_0) - \frac{2\Delta\omega}{\Omega} \sin^2 \frac{\Omega(t - t_0)}{2} \right] e^{-i\omega t}, \quad (9.3.13h)$$

$$U_{33}(t; t_0) = \left[1 + i \frac{\Delta\omega}{\Omega} \sin \Omega(t - t_0) - \left(\frac{2\Delta\omega^2}{\Omega^2} + \frac{\omega_1^2}{\Omega^2} \right) \sin^2 \frac{\Omega(t - t_0)}{2} \right] e^{-i\omega(t-t_0)}, \quad (9.3.13i)$$

²⁸Viz též příklady 9.3 a 9.28 ve sbírce [2].

5. Dosazení $\omega_1 = 0$ do (9.3.13) dává

$$U_0(\tau + T; \tau) = \begin{pmatrix} e^{i\omega_0 T} & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & e^{-i\omega_0 T} \end{pmatrix} \quad (9.3.14)$$

6. V rezonančním případě $\omega = \omega_0$ je $\Delta\omega = 0$ a $\Omega = \omega_1$, čímž se (9.3.13) zjednoduší na

$$U^{\text{rez}}(t; t_0) = \begin{pmatrix} e^{i\omega(t-t_0)} \cos^2 \frac{\omega_1(t-t_0)}{2} & \frac{i}{\sqrt{2}} e^{i\omega t} \sin \omega_1(t-t_0) & -e^{i\omega(t+t_0)} \sin^2 \frac{\omega_1(t-t_0)}{2} \\ \frac{i}{\sqrt{2}} e^{-i\omega t_0} \sin \omega_1(t-t_0) & \cos \omega_1(t-t_0) & \frac{i}{\sqrt{2}} e^{i\omega t_0} \sin \omega_1(t-t_0) \\ -e^{-i\omega(t+t_0)} \sin^2 \frac{\omega_1(t-t_0)}{2} & \frac{i}{\sqrt{2}} e^{-i\omega t} \sin \omega_1(t-t_0) & e^{-i\omega(t-t_0)} \cos^2 \frac{\omega_1(t-t_0)}{2} \end{pmatrix} \quad (9.3.15)$$

a matice celkového evolučního operátoru pak získá tvar

$$U_F^{\text{rez}} = \begin{pmatrix} e^{i\omega(2\tau+T)} \cos^2 \omega_1 \tau & \frac{i}{\sqrt{2}} e^{i\omega(2\tau+T)} \sin 2\omega_1 \tau & -e^{i\omega(2\tau+T)} \sin^2 \omega_1 \tau \\ \frac{i}{\sqrt{2}} \sin 2\omega_1 \tau & \cos 2\omega_1 \tau & \frac{i}{\sqrt{2}} \sin 2\omega_1 \tau \\ -e^{-i\omega(2\tau+T)} \sin^2 \omega_1 \tau & \frac{i}{\sqrt{2}} e^{-i\omega(2\tau+T)} \sin 2\omega_1 \tau & e^{-i\omega(2\tau+T)} \cos^2 \omega_1 \tau \end{pmatrix}. \quad (9.3.16)$$

7. Matice pravděpodobností v rezonančním případě má složky

$$P^{\text{rez}} = \begin{pmatrix} \cos^4 \omega_1 \tau & \frac{1}{2} \sin^2 2\omega_1 \tau & \sin^4 \omega_1 \tau \\ \frac{1}{2} \sin^2 2\omega_1 \tau & \cos^2 2\omega_1 \tau & \frac{1}{2} \sin^2 2\omega_1 \tau \\ \sin^4 \omega_1 \tau & \frac{1}{2} \sin^2 2\omega_1 \tau & \cos^4 \omega_1 \tau \end{pmatrix}. \quad (9.3.17)$$

Při speciálním naladění frekvence ω_1 a doby τ vychází podobně jako v Ramseyově přístroji pro spin $\frac{1}{2}$ (9.2.27)

$$\begin{aligned} \omega_1 \tau = k\pi & \quad P^{\text{rez}} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} & \quad \text{– spin projde bez změny} \\ \omega_1 \tau = \left(k + \frac{1}{2}\right)\pi & \quad P^{\text{rez}} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} & \quad \text{– 100% pravděpodobnost překlopení spinu} \\ \omega_1 \tau = \frac{1}{2} \left(k + \frac{1}{2}\right)\pi & \quad P^{\text{rez}} = \begin{pmatrix} \frac{1}{4} & \frac{1}{2} & \frac{1}{4} \\ \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{4} & \frac{1}{2} & \frac{1}{4} \end{pmatrix} & \quad (9.3.18) \end{aligned}$$

kde $k \in \mathbb{Z}$.

9.4 Volné mionium

Mionium je vázaný stav (anti-)mionu μ^+ s elektronem, podobný např. atomu vodíku. Vznikne při ozařování vzorku svazkem μ^+ . Miony se interakcí s látkou zpomalují a při dostatečně malé rychlosti zachytí elektron. S ním vytvoří vázaný stav, který se velmi rychle (řádově za 10^{-9} s, pro srovnání střední doba života μ^+ je $\tau_{\mu^+} = 2,2 \mu\text{s}$) dostane do základního stavu. Při ozařování slabé fólie kovu je mionium po zachytu elektronu elektricky neutrální a volné a díky tomu může difundovat ven ze vzorku.

Nachází-li se mionium v základním stavu, lze interakci spinu mionu a spinu elektronu popsat Hamiltoniánem²⁹

$$\hat{H} = E_0 + \frac{A}{\hbar^2} \hat{\mathbf{s}}_\mu \cdot \hat{\mathbf{s}}_e, \quad (9.4.2)$$

²⁹Obecný tvar interakčního Hamiltoniánu dvou částic se spinem je (viz např. [10], kapitola 8.6.1.2)

$$H_I = V_0(\mathbf{r}) + 4V_\sigma(\mathbf{r}) (\hat{\mathbf{s}}_1 \cdot \hat{\mathbf{s}}_2) + V_T(\mathbf{r}) \hat{\mathbf{T}} + \dots, \quad (9.4.1)$$

kde $\hat{\mathbf{T}}$ je tenzorový operátor. Zbývající neuvedené tři členy nejsou invariantní vůči prostorové inverzi.

kde $E_0 = -m_r c^2 \alpha^2 / 2$ [$m_r \equiv m_e m_\mu / (m_e + m_\mu)$] je redukovaná hmotnost elektronu a mionu, α je konstanta jemné struktury, A je vazebná konstanta (její hodnotu lze určit teoreticky), $\hat{\mathbf{S}}_\mu$ je operátor spinu příslušející mionu a $\hat{\mathbf{S}}_e$ operátor spinu příslušející elektronu. Oba spinové operátory jsou definované na Hilbertově prostoru $\mathcal{H} = \mathcal{H}^{(\mu)} \otimes \mathcal{H}^{(e)}$:

$$\hat{\mathbf{S}}_\mu = \frac{\hbar}{2} \hat{\boldsymbol{\sigma}}^{(\mu)} \otimes \hat{\mathbf{1}}^{(e)} \quad (9.4.3)$$

$$\hat{\mathbf{S}}_e = \hat{\mathbf{1}}^{(\mu)} \otimes \frac{\hbar}{2} \hat{\boldsymbol{\sigma}}^{(e)}, \quad (9.4.4)$$

přičemž operátor $\hat{\boldsymbol{\sigma}} = (\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3)$ je realizován Pauliho maticemi (2.0.1).

1. Nalezněte maticové vyjádření operátoru $\hat{\mathbf{S}} \equiv \hat{\mathbf{S}}_\mu \cdot \hat{\mathbf{S}}_e$. Spočítejte vlastní hodnoty a vlastní vektory této matice.
2. Ukažte, že vlastní vektory lze označit $|S, S_3\rangle$, kde S je velikost celkového spinu a S_3 je projekce spinu složeného systému do směru osy z .
3. Nalezněte vlastní hodnoty (energetické spektrum) Hamiltoniánu \hat{H} .
4. Předpokládejte, že spin mionu, kterým ozařujeme vzorek, má orientaci ve směru osy z , tj. $|\psi_\mu\rangle = |\uparrow\rangle^{(\mu)}$, a že spin elektronu má libovolně orientovaný spin daný normalizovaným vektorem

$$|\psi_e\rangle = \alpha |\uparrow\rangle^{(e)} + \beta |\downarrow\rangle^{(e)}, \quad |\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1. \quad (9.4.5)$$

Určete pravděpodobnost naměření jednotlivých energií pro stav $|\psi\rangle \equiv |\psi_\mu\rangle \otimes |\psi_e\rangle$.

5. Nalezněte stav systému $|\psi(t)\rangle$ v čase t .
6. Určete pravděpodobnost $p_{\mu\uparrow}(t)$, že v čase t změříte projekci spinu mionu ve směru osy z . Využijte k tomu projektor

$$\hat{P}_{\mu\uparrow} = |\uparrow\rangle^{(\mu)} \langle\uparrow|^{(\mu)}. \quad (9.4.6)$$

7. Zopakujte celý výpočet pro případ, že stav elektronu na počátku je ve smíšeném stavu daném operátorem hustoty

$$\hat{\rho}_e = a |\uparrow\rangle^{(e)} \langle\uparrow|^{(e)} + b |\downarrow\rangle^{(e)} \langle\downarrow|^{(e)}, \quad (9.4.7)$$

kde $a + b = 1$ (nalezněte matici hustoty složeného systému mion-elektron v čase $t = 0$, následně v čase t , udělejte parciální stopu přes elektronové stavy, které neměříte, a poté aplikujte projektor $\hat{P}_{\mu\uparrow}$).

Poznámka: Příklad je inspirován kapitolou 19 sbírky [3].

Poznámky k notaci: Každý z operátorů $\hat{\mathbf{S}}_{\mu,e}$ je vektorovým operátorem jednoho spinu (mionu, resp. elektronu) působícím na celém Hilbertově prostoru dvou spinů \mathcal{H} . Jedná se tedy o dvě sady tří matic rozměru 4×4 , kde každá ze tří matic operátoru příslušejícího mionu je dána direktním součinem odpovídající Pauliho matice a jednotkové matice,

$$\hat{\mathbf{S}}_{\mu j} = \frac{\hbar}{2} \sigma_j^{(\mu)} \otimes \hat{\mathbf{1}}^{(e)}, \quad j = 1, 2, 3, \quad (9.4.8)$$

analogicky pro operátor spinu elektronu. Skalární součin se pak provádí mezi složkami vektorů $\hat{\mathbf{S}}_\mu$ a $\hat{\mathbf{S}}_e$, explicitně

$$\hat{\mathbf{S}}_\mu \cdot \hat{\mathbf{S}}_e \equiv \hat{S}_{\mu 1} \hat{S}_{e 1} + \hat{S}_{\mu 2} \hat{S}_{e 2} + \hat{S}_{\mu 3} \hat{S}_{e 3}, \quad (9.4.9)$$

kde součiny jsou běžné maticové součiny matic 4×4 (v každém sčítanci se tedy jedná o postupné působení dvou operátorů na prvky Hilbertova prostoru \mathcal{H} ; z konstrukce je jasné, že operátory $\hat{\mathbf{S}}_{\mu j}$ komutují s $\hat{S}_{e j}$, nezáleží tedy na pořadí jejich působení; navíc jsou hermitovské, není tedy nutné ošetřovat sdružení matic na levé straně skalárního součinu).

Řešení:

1. Explicitní vyjádření spinových operátorů $\hat{\mathbf{S}}_{\mu,e}$ v maticové realizaci na Hilbertově prostoru celého systému s bází $\mathcal{B} = \{|\uparrow\uparrow\rangle, |\uparrow\downarrow\rangle, |\downarrow\uparrow\rangle, |\downarrow\downarrow\rangle\}$ je (viz též příklad 3.1)

$$\mathbf{s}_{\mu} = \frac{\hbar}{2} \left(\begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & 0 & -i & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -i \\ i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & i & 0 & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \right), \quad (9.4.10)$$

$$\mathbf{s}_e = \frac{\hbar}{2} \left[\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \right]. \quad (9.4.11)$$

Tyto vektory skalárně vynásobené vedou na matici³⁰

$$\mathbf{s} = \frac{\hbar^2}{4} \left(\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \right) \quad (9.4.15)$$

$$= \frac{\hbar^2}{4} \underbrace{\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & 0 \\ 0 & 2 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}}_{\tilde{\mathbf{s}}} \quad (9.4.16)$$

($\tilde{\mathbf{s}}$ označuje matici bez rozměrového faktoru $\hbar^2/4$). **Matrice $\tilde{\mathbf{s}}$ má blokově diagonální tvar, díky čemuž lze dvě její vlastní hodnoty ihned určit,**

$$\tilde{s}_{1,4} = 1, \quad (9.4.17)$$

zbývající dvě jsou řešením sekulární rovnice vnitřního bloku 2×2 ,

$$\det \begin{pmatrix} -1 - \tilde{s} & 2 \\ 2 & -1 - \tilde{s} \end{pmatrix} = (\tilde{s} + 1)^2 - 4 = 0, \quad (9.4.18)$$

které dává

$$\tilde{s}_2 = 1, \quad \tilde{s}_3 = -3. \quad (9.4.19)$$

Matrice \mathbf{s} má tedy trojnásobně degenerovanou vlastní hodnotu (*tripletní stav*) s vlastními vektory

$$s_{1,2,4} = \frac{\hbar^2}{4} \quad |s_1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \equiv |\uparrow\uparrow\rangle \quad |s_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle) \quad |s_4\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \equiv |\downarrow\downarrow\rangle \quad (9.4.20)$$

a jednou degenerovanou vlastní hodnotu (*singletní stav*) s vlastním vektorem

$$s_3 = -\frac{3}{4}\hbar^2 \quad |s_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix} \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle). \quad (9.4.21)$$

³⁰Operátor $\hat{\mathbf{S}}$ lze zavést ekvivalentně přímo přes tenzorový součin

$$\hat{\mathbf{S}} \equiv \frac{\hbar}{2} \hat{\boldsymbol{\sigma}}_{\mu} \otimes \frac{\hbar}{2} \hat{\boldsymbol{\sigma}}_e, \quad (9.4.12)$$

což v maticové realizaci vede na stejný výsledek pro matici \mathbf{s} :

$$\mathbf{s} = \frac{\hbar^2}{4} \left[\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \right] \quad (9.4.13)$$

$$= \frac{\hbar^2}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & 0 \\ 0 & 2 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (9.4.14)$$

2. Operátor celkového spinu $\hat{\mathbf{S}}$ splňuje relace pro moment hybnosti

$$[\hat{S}_j, \hat{S}_k] = i\hbar \epsilon_{jkl} \hat{S}_l, \quad (9.4.22)$$

což znamená, že existují společné vlastní vektory jeho kvadrátu $\hat{\mathbf{S}}^2$ a jeho třetí složky \hat{S}_3

$$\hat{\mathbf{S}}^2 |S, S_3\rangle = \hbar^2 S(S+1) |S, S_3\rangle, \quad (9.4.23)$$

$$\hat{S}_3 |S, S_3\rangle = \hbar S_3 |S, S_3\rangle, \quad (9.4.24)$$

O tom se lze přesvědčit následujícím přímým výpočtem. Operátor spinu systému složeného ze dvou spinů $\frac{1}{2}$ byl jako matice vyjádřen již v příkladu 3.1, takže

$$\mathbf{S}^2 = \hbar^2 \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2 \end{pmatrix} \quad \mathbf{S}_3 = \hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (9.4.25)$$

Matice \mathbf{S}^2 má trojnásobně degenerovanou vlastní hodnotu $2\hbar^2$ (tripletní stav, odpovídá velikosti momentu hybnosti $S = 1$) a nedegenerovanou vlastní hodnotu 0 (singletní stav, odpovídá momentu hybnosti $S = 0$). Společné vlastní vektory matic \mathbf{S}^2 a \mathbf{S}_3 příslušející vlastním číslům S, S_3 tedy jsou

$$|1, 1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad |1, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad |1, -1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad |0, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (9.4.26)$$

Tento výsledek vyjadřuje skutečnost, že dva spiny o velikosti $\frac{1}{2}$ lze složit třemi způsoby na spin velikosti 1 a jedním způsobem na spin velikosti 0: pokud spiny $\frac{1}{2}$ míří podél osy z , složí se na stav $|1, 1\rangle$, pokud míří proti ose z , složí se na stav $|1, -1\rangle$; pokud však jeden spin míří podél osy z a druhý proti ní, mohou se složit buď na stav $|1, 0\rangle$ s celkovým spinem $S = 1$ nebo na stav $|0, 0\rangle$ s celkovým spinem $S = 0$ (projekce na osu z je v obou těchto případech samozřejmě $S_3 = 0$).

Srovnání s vlastními vektory předchozího bodu vede k závěru, že stavy příslušející vlastní hodnotě $s_{1,2,4}$ odpovídají stavům s $S = 1$ a stav s_3 odpovídá stavu s $S = 0$.

3. Vlastní hodnoty a odpovídající vlastní vektory Hamiltoniánu popisujícího mionium (9.4.2) se díky linearitě získají dosazením parametrů a konstant:

$$E_{1,2,4} = E_0 + \frac{A}{\hbar^2} s_{1,2,4} = E_0 + \frac{A}{4} \quad \begin{aligned} |E_1\rangle &= |1, 1\rangle = |\uparrow\uparrow\rangle \\ |E_2\rangle &= |1, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle) \\ |E_4\rangle &= |1, -1\rangle = |\downarrow\downarrow\rangle \end{aligned} \quad (9.4.27a)$$

$$E_3 = E_0 + \frac{A}{\hbar^2} s_3 = E_0 - \frac{3A}{4} \quad |E_3\rangle = |0, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle). \quad (9.4.27b)$$

4. Vektor $|\psi\rangle$ se v bázi \mathcal{B} a v bázi $\{|S, S_3\rangle; S = 0, 1; S_3 = -S, \dots, S\}$ vyjádří jako

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}^{(\mu)} \otimes \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}^{(e)} = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \alpha |\uparrow\uparrow\rangle + \beta |\downarrow\downarrow\rangle = \alpha |1, 1\rangle + \frac{\beta}{\sqrt{2}} (|1, 0\rangle + |0, 0\rangle). \quad (9.4.28)$$

Pravděpodobnosti naměření energií $E_{1,2,4}$, resp. E_3 systému připraveného ve stavu $|\psi\rangle$ jsou tudíž

$$p_{1,2,4} = |\langle E_1|\psi\rangle|^2 + |\langle E_2|\psi\rangle|^2 + |\langle E_4|\psi\rangle|^2 = \alpha^2 + \frac{1}{2}\beta^2, \quad (9.4.29a)$$

$$p_3 = |\langle E_3|\psi\rangle|^2 = \frac{1}{2}\beta^2. \quad (9.4.29b)$$

5. Stav systému v čase t je dán evolučním operátorem, který lze vyjádřit díky znalosti spektrálního rozkladu Hamiltoniánu:

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle &= e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t} |\psi\rangle = \sum_{k=1}^4 e^{-\frac{i}{\hbar} E_k t} |E_k\rangle \langle E_k | \psi \rangle \\ &= e^{-\frac{i}{\hbar} (E_0 + \frac{A}{4}) t} \left(\alpha |1, 1\rangle + \frac{\beta}{\sqrt{2}} |1, 0\rangle + \frac{\beta}{\sqrt{2}} e^{\frac{i}{\hbar} A t} |0, 0\rangle \right) \\ &= e^{-\frac{i}{\hbar} (E_0 + \frac{A}{4}) t} \left[\alpha |\uparrow\uparrow\rangle + \beta e^{\frac{i}{2\hbar} A t} \left(\cos \frac{A t}{2\hbar} |\uparrow\downarrow\rangle - i \sin \frac{A t}{2\hbar} |\downarrow\uparrow\rangle \right) \right]. \end{aligned} \quad (9.4.30)$$

6. Pravděpodobnost nalezení mionu ve stavu $|\uparrow\rangle^{(\mu)}$ v čase t pak je

$$p_{\mu\uparrow}(t) = \langle \psi(t) | \hat{P}_{\mu\uparrow} | \psi(t) \rangle = \left| \hat{P}_{\mu\uparrow} | \psi(t) \rangle \right|^2. \quad (9.4.31)$$

Projektor (9.4.6) působí na báze vektory vyskytující se v rozvoji stavu $|\psi(t)\rangle$ jako³¹

$$\hat{P}_{\mu\uparrow} |1, 1\rangle = \hat{P}_{\mu\uparrow} |\uparrow\uparrow\rangle = |\uparrow\uparrow\rangle, \quad (9.4.32a)$$

$$\hat{P}_{\mu\uparrow} |1, 0\rangle = \hat{P}_{\mu\uparrow} |0, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |\uparrow\downarrow\rangle, \quad (9.4.32b)$$

takže

$$\hat{P}_{\mu\uparrow} |\psi(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} (E_0 + \frac{A}{4}) t} \left(\alpha |\uparrow\uparrow\rangle + \beta e^{\frac{i}{2\hbar} A t} \cos \frac{A t}{2\hbar} |\uparrow\downarrow\rangle \right) \quad (9.4.33)$$

a díky ortogonalitě vektorů $|\uparrow\uparrow\rangle$ a $|\uparrow\downarrow\rangle$ je hledaná pravděpodobnost

$$p_{\mu\uparrow}(t) = |\alpha|^2 + |\beta|^2 \cos^2 \frac{A t}{2\hbar}. \quad (9.4.34)$$

Tento výsledek lze interpretovat jako rotaci spinu mionu s úhlovou frekvencí

$$\omega = \frac{A}{2\hbar}. \quad (9.4.35)$$

Speciální případy: Pokud je na počátku elektron polarizován podél osy z , tj. $(\alpha, \beta) = (1, 0)$, a nachází se ve stavu $|\psi_e\rangle = |\uparrow\rangle^{(e)}$, k žádné rotaci mionu nedochází. Naopak pokud na počátku spin elektronu míří proti ose z , tj. $(\alpha, \beta) = (0, 1)$, což odpovídá stavu $|\psi_e\rangle = |\downarrow\rangle^{(e)}$, je modlace spinu mionu důsledkem rotace nejsilnější a pro časy

$$t_{\text{flip}} \equiv \frac{2\pi\hbar}{A} \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad n \in \mathbb{Z} \quad (9.4.36)$$

dochází dokonce k jeho úplnému překlopení.

7. Matice hustoty v čase $t = 0$ má tvar

$$\begin{aligned} \hat{\rho}(0) &= a |\uparrow\uparrow\rangle \langle\uparrow\uparrow| + b |\uparrow\downarrow\rangle \langle\uparrow\downarrow| \\ &= a |1, 1\rangle \langle 1, 1| + \frac{b}{2} (|1, 0\rangle \langle 1, 0| + |1, 0\rangle \langle 0, 0| + |0, 0\rangle \langle 1, 0| + |0, 0\rangle \langle 0, 0|) \end{aligned} \quad (9.4.37)$$

a v čase se vyvíjí podle vztahu

$$\begin{aligned} \hat{\rho}(t) &= \hat{U}(t) \hat{\rho}(0) \hat{U}^{-1}(t) \\ &= a |1, 1\rangle \langle 1, 1| + \frac{b}{2} \left(|1, 0\rangle \langle 1, 0| + e^{-\frac{i}{\hbar} A t} |1, 0\rangle \langle 0, 0| + e^{\frac{i}{\hbar} A t} |0, 0\rangle \langle 1, 0| + |0, 0\rangle \langle 0, 0| \right) \\ &= a |\uparrow\uparrow\rangle \langle\uparrow\uparrow| + \frac{b}{2} \left[|\uparrow\downarrow\rangle \langle\uparrow\downarrow| + |\uparrow\downarrow\rangle \langle\downarrow\uparrow| + |\downarrow\uparrow\rangle \langle\uparrow\downarrow| + \right. \\ &\quad \left. + \cos \frac{A t}{\hbar} (|\uparrow\downarrow\rangle \langle\uparrow\downarrow| - |\downarrow\uparrow\rangle \langle\downarrow\uparrow|) + i \sin \frac{A t}{\hbar} (|\uparrow\downarrow\rangle \langle\downarrow\uparrow| - |\downarrow\uparrow\rangle \langle\uparrow\downarrow|) \right]. \end{aligned} \quad (9.4.38)$$

³¹Přesněji se zde používá nikoliv projektor $\hat{P}_{\mu\uparrow}$, který působí pouze na Hilbertově prostoru $\mathcal{H}^{(\mu)}$, nýbrž $\hat{P}_{\mu\uparrow} \otimes \hat{I}^{(e)}$ celého Hilbertova prostoru \hat{H} . Pro zjednodušení zápisu se operátor identity spojený s elektronovým podprostorem vynechává.

Parciální stopa přes elektronové stavy vede na parciální matici hustoty

$$\begin{aligned}\hat{\rho}^{(\mu)}(t) &= \text{Tr}_e \hat{\rho}(t) = \langle \uparrow |^{(e)} \hat{\rho}(t) | \uparrow \rangle^{(e)} + \langle \downarrow |^{(e)} \hat{\rho}(t) | \downarrow \rangle^{(e)} \\ &= a |\uparrow\rangle^{(\mu)} \langle \uparrow|^{(\mu)} + \frac{b}{2} \left[|\uparrow\rangle^{(\mu)} \langle \uparrow|^{(\mu)} + |\downarrow\rangle^{(\mu)} \langle \downarrow|^{(\mu)} + \cos \frac{At}{\hbar} \left(|\uparrow\rangle^{(\mu)} \langle \downarrow|^{(\mu)} + |\downarrow\rangle^{(\mu)} \langle \uparrow|^{(\mu)} \right) \right],\end{aligned}\quad (9.4.39)$$

ze které se pomocí projektoru (9.4.6) určí pravděpodobnost nalezení mionu ve stavu $|+\rangle^{(\mu)}$,

$$p'_{\mu\uparrow}(t) = \text{Tr}_\mu \hat{P}_{\mu\uparrow} \hat{\rho}^{(\mu)}(t) = \langle + |^{(\mu)} \hat{\rho}^{(\mu)}(t) | + \rangle^{(\mu)} = a + \frac{b}{2} \left(1 + \cos \frac{At}{\hbar} \right) = a + b \cos^2 \frac{At}{2\hbar}. \quad (9.4.40)$$

Pravděpodobnost nalezení mionu ve stavu, kdy míří podél osy z v čase t , tedy nezávisí na tom, jestli je na počátku elektron v čistém stavu daném superpozicí (9.4.5), nebo ve smíšeném stavu popsaném maticí hustoty (9.4.7). Zcela nekoherentní směs $a = b = 1/\sqrt{2}$ nebo $\alpha = \beta = 1/\sqrt{2}$ dá stejnou pravděpodobnost naměření spinu mionu mířícího vzhůru

$$p_{\mu\uparrow}^{(0)}(t) = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \cos^2 \frac{At}{2\hbar} = \frac{3}{4} + \frac{1}{4} \cos \frac{At}{\hbar}. \quad (9.4.41)$$

9.5 Mionium v křemíku

Pokud se dostatečně silná vrstva krystalu křemíku bombarduje (anti-)miony μ^+ , vznikne mionium a naváže se uvnitř krystalové mřížky za tvorby šesterečné struktury s okolními atomy. Interakce mionia s krystalem se dá modelovat Hamiltoniánem

$$\hat{H}' = E_0 + \frac{A'}{\hbar^2} \hat{\mathbf{s}}_\mu \cdot \hat{\mathbf{s}}_e + \frac{D}{\hbar^2} \hat{s}_{\mu 3} \hat{s}_{e 3}, \quad (9.5.1)$$

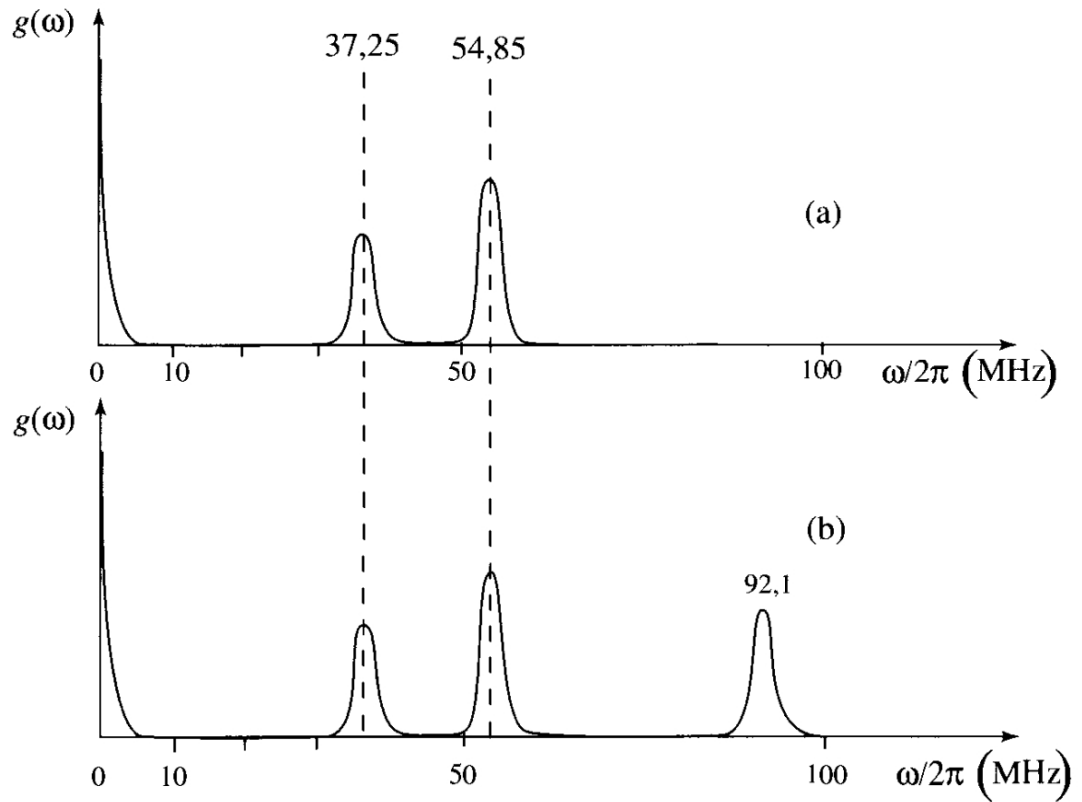
což je rozšířený Hamiltonián volného mionia. Interakce s mříží je popsána druhým a třetím členem, proto je v obecném případě konstanta A' odlišná od konstanty A pro volné mionium.³² Konstanty $A' > 0$, $D < 0$ se určují experimentálně, jejich znaménko je dané.

1. Napište matici Hamiltoniánu \hat{H}' a určete její vlastní hodnoty a vlastní stavy.
2. Předpokládejte, že dopadající miony jsou polarizovány do kladného směru osy x , tj. $|\psi_\mu\rangle = |x+\rangle^{(\mu)} = |+\rangle^{(\mu)}$. Nalezněte vyjádření počátečního vektoru mionu v bázi $\{|\uparrow\rangle^{(\mu)}, |\downarrow\rangle^{(\mu)}\}$.
3. Předpokládejte, že elektrony jsou před vznikem mionia polarizovány v kladném, resp. záporném směru osy z , tj. uvažujeme dva případy $|\psi_{e\uparrow}\rangle = |\uparrow\rangle^{(e)}$, $|\psi_{e\downarrow}\rangle = |\downarrow\rangle^{(e)}$. Nalezněte stav složeného systému elektron-mion v čase $t = 0$, v čase t a pravděpodobnost $p_{\mu\rightarrow}(t)$, že v čase t naměříte spin mionu orientovaný ve směru osy x pro obě dvě počáteční orientace spinu elektronu.
4. Spočítejte totéž jako v předchozím bodu pro případ, že jsou elektrony na počátku ve smíšeném stavu

$$\hat{\rho}_e = \frac{1}{2} |\uparrow\rangle^{(e)} \langle \uparrow|^{(e)} + \frac{1}{2} |\downarrow\rangle^{(e)} \langle \downarrow|^{(e)}. \quad (9.5.2)$$

Pravděpodobnost označte $p'_{\mu\rightarrow}(t)$.

³²Poslední člen v Hamiltoniánu narušuje sférickou symetrii interakce. Rotační symetrie okolo osy z však zůstane zachována.



Obrázek 22: Naměřená funkce $g(\omega) = \text{Re } f(\omega)$ pro mionium (převzato z [3]).

Srovnání s experimentem:

Z důvodu konečné doby života se mion v mioniu rozpadá a emituje pozitron e^+ s největší pravděpodobností ve směru polarizace mionia. V praxi se tedy měří směr vylétávajícího pozitronu jako funkce času t . Při bombardování balíkem N_0 mionů je počet pozitronů v čase vylétávajících podél osy x

$$\frac{dN(t)}{dt} = \frac{N_0}{\tau} p_{\mu \rightarrow}(t) e^{-\frac{t}{\tau}}, \quad (9.5.3)$$

přičemž faktor $\frac{1}{\tau} e^{-\frac{t}{\tau}}$ ve výrazu postihuje exponenciální rozpad mionu se střední dobou $\tau \approx 2.2 \mu\text{s}$. Experimentálně se neměří přímo pravděpodobnost $p_{\mu \rightarrow}(t)$, nýbrž tzv. *charakteristická funkce* $g(\omega) = \text{Re } f(\omega)$, kde

$$f(\omega) = \frac{1}{\tau} \int_0^\infty p_{\mu \rightarrow}(t) e^{-\frac{t}{\tau}} e^{i\omega t} dt \quad (9.5.4)$$

je Fourierova transformace funkce $\frac{p_{\mu \rightarrow}(t)}{\tau} e^{-\frac{t}{\tau}}$. Příklad naměřené funkce $g(\omega)$ je na obrázku 22.

5. Nalezněte explicitní výraz pro $f(\omega)$ pomocí $f_0(\omega)$, kde

$$f_0(\omega) \equiv \frac{1}{\tau} \int_0^\infty e^{-\frac{t}{\tau}} e^{i\omega t} dt \quad (9.5.5)$$

je charakteristická funkce volného mionu.

6. Z udané hodnoty střední doby života mionu určete, jaká by měla být pološířka vrcholů.

7. Z měření zobrazeném na obrázku 22(a) nalezněte hodnoty parametrů A' a D .

8. Na obrázku 22(b) je totéž měření, jen uspořádání měřícího zařízení bylo lehce pozměněno. Diskutujte, k jaké změně v zapojení experimentu došlo.

Řešení:

1. Matice Hamiltoniánu \hat{H}' vyjádřená v bázi \mathcal{B} (3.1.14) má tvar

$$H' = E_0 + \begin{pmatrix} \frac{A'}{4} + D & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{A'}{4} - D & \frac{A'}{2} & 0 \\ 0 & \frac{A'}{2} & -\frac{A'}{4} - D & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{A'}{4} + D \end{pmatrix} \quad (9.5.6)$$

a spektrum po zdiagonalizování je

$$E'_{1,4} = E_0 + \frac{A'}{4} + D, \quad \begin{aligned} |E'_1\rangle &= |1, 1\rangle = |\uparrow\uparrow\rangle \\ |E'_4\rangle &= |1, -1\rangle = |\downarrow\downarrow\rangle \end{aligned}, \quad (9.5.7a)$$

$$E'_2 = E_0 + \frac{A'}{4} - D, \quad |E'_2\rangle = |1, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle), \quad (9.5.7b)$$

$$E'_3 = E_0 - \frac{3A'}{4} - D, \quad |E'_3\rangle = |0, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle). \quad (9.5.7c)$$

Vlastní vektory jsou tedy totožné jako v případě volného mionia, jediný rozdíl je v tom, že dodatečná interakce řízená parametrem D rozštěpila tripletní stav.

2. Počáteční stav mionu je podle (2.0.4)

$$|\psi_\mu\rangle = |\rightarrow\rangle^{(\mu)} = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\rangle^{(\mu)} + |\downarrow\rangle^{(\mu)}). \quad (9.5.8)$$

3. Počáteční stav složeného systému mion+elektron je

$$|\psi_+\rangle = |\psi_\mu\rangle \otimes |\psi_{e\uparrow}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\uparrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}} |1, 1\rangle + \frac{1}{2} (|1, 0\rangle - |0, 0\rangle), \quad (9.5.9a)$$

$$|\psi_-\rangle = |\psi_\mu\rangle \otimes |\psi_{e\downarrow}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\downarrow\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}} |1, -1\rangle + \frac{1}{2} (|1, 0\rangle + |0, 0\rangle). \quad (9.5.9b)$$

Stav složeného systému v libovolném čase t je pak dán evolucí

$$\begin{aligned} |\psi_+(t)\rangle &= \frac{e^{-i\omega_1 t}}{\sqrt{2}} |1, 1\rangle + \frac{e^{-i\omega_2 t}}{2} |1, 0\rangle - \frac{e^{-i\omega_3 t}}{2} |0, 0\rangle \\ &= \frac{e^{-i\omega_1 t}}{\sqrt{2}} |\uparrow\uparrow\rangle + \frac{e^{-i\omega_2 t} - e^{-i\omega_3 t}}{2\sqrt{2}} |\uparrow\downarrow\rangle + \frac{e^{-i\omega_2 t} + e^{-i\omega_3 t}}{2\sqrt{2}} |\downarrow\uparrow\rangle, \end{aligned} \quad (9.5.10a)$$

$$\begin{aligned} |\psi_-(t)\rangle &= \frac{e^{-i\omega_4 t}}{\sqrt{2}} |1, -1\rangle + \frac{e^{-i\omega_2 t}}{2} |1, 0\rangle + \frac{e^{-i\omega_3 t}}{2} |0, 0\rangle \\ &= \frac{e^{-i\omega_4 t}}{\sqrt{2}} |\downarrow\downarrow\rangle + \frac{e^{-i\omega_2 t} + e^{-i\omega_3 t}}{2\sqrt{2}} |\uparrow\downarrow\rangle + \frac{e^{-i\omega_2 t} - e^{-i\omega_3 t}}{2\sqrt{2}} |\downarrow\uparrow\rangle, \end{aligned} \quad (9.5.10b)$$

kde $\omega_k \equiv E'_k/\hbar$.

Pravděpodobnost nalezení mionu ve stavu $|\rightarrow\rangle^{(\mu)}$ je

$$p_{\pm, \mu \rightarrow}(t) = \langle \psi_\pm(t) | \hat{P}_{\mu \rightarrow} | \psi_\pm(t) \rangle = \left| \hat{P}_{\mu \rightarrow} | \psi_\pm(t) \rangle \right|^2. \quad (9.5.11)$$

Mionový projektor lze díky vztahu mezi projektorem a Pauliho maticemi (2.1.2) vyjádřit ve tvaru

$$\hat{P}_{\mu \rightarrow} \equiv |\rightarrow\rangle^{(\mu)} \langle \rightarrow|^{(\mu)} = \frac{1}{2} (\hat{1}^{(\mu)} + \hat{\sigma}_1^{(\mu)}). \quad (9.5.12)$$

Jelikož $\hat{\sigma}_1 |\uparrow\rangle = |\downarrow\rangle$ a obráceně $\hat{\sigma}_1 |\downarrow\rangle = |\uparrow\rangle$, platí

$$\begin{aligned} \langle \psi_+(t) | \hat{\sigma}_1 | \psi_+(t) \rangle &= \frac{1}{4} \left[e^{i\omega_1 t} (e^{-i\omega_2 t} + e^{-i\omega_3 t}) + e^{-i\omega_1 t} (e^{i\omega_2 t} + e^{i\omega_3 t}) \right] \\ &= \frac{1}{2} \operatorname{Re} \left[e^{i\omega_1 t} (e^{-i\omega_2 t} + e^{-i\omega_3 t}) \right] = \frac{1}{2} [\cos(\omega_1 - \omega_2)t + \cos(\omega_1 - \omega_3)t] \\ &= \frac{1}{2} \left[\cos \frac{2Dt}{\hbar} + \cos \frac{(A' + 2D)t}{\hbar} \right], \end{aligned} \quad (9.5.13a)$$

$$\langle \psi_-(t) | \hat{\sigma}_1 | \psi_-(t) \rangle = \frac{1}{2} \operatorname{Re} \left[e^{i\omega_4 t} (e^{-i\omega_2 t} + e^{-i\omega_3 t}) \right] = \langle \psi_+(t) | \hat{\sigma}_1 | \psi_+(t) \rangle \quad (9.5.13b)$$

(poslední rovnost plyne z $\omega_1 = \omega_4$). Hledaná pravděpodobnost tedy nezáleží na tom, zda na počátku mívá spin elektronu podél nebo proti směru osy z , a rovná se

$$p_{\mu \rightarrow}(t) \equiv p_{\pm, \mu \rightarrow}(t) = \frac{1}{2} + \frac{1}{4} \left[\cos \frac{2Dt}{\hbar} + \cos \frac{(A' + 2D)t}{\hbar} \right]. \quad (9.5.14)$$

4. Díky rovnosti pravděpodobností $p_{+, \mu \rightarrow}(t) = p_{-, \mu \rightarrow}(t)$ dostaneme pro smíšený stav tutéž pravděpodobnost jako v předchozím bodě:

$$p'_{\mu \rightarrow}(t) = \frac{1}{2} [p_{+, \mu \rightarrow}(t) + p_{-, \mu \rightarrow}(t)] = \frac{1}{2} + \frac{1}{4} \left[\cos \frac{2Dt}{\hbar} + \cos \frac{(A' + 2D)t}{\hbar} \right]. \quad (9.5.15)$$

5. Rozepsání $\cos x = (e^{ix} + e^{-ix})/2$ ve výrazu pro pravděpodobnost $p_{\mu \rightarrow}(t)$ vede na

$$f(\omega) = \frac{1}{2} f_0(\omega) + \frac{1}{8} \left[f_0\left(\omega - \frac{2D}{\hbar}\right) + f_0\left(\omega + \frac{2D}{\hbar}\right) \right] + \frac{1}{8} \left[f_0\left(\omega - \frac{A' + 2D}{\hbar}\right) + f_0\left(\omega + \frac{A' + 2D}{\hbar}\right) \right]. \quad (9.5.16)$$

6. Fourierova transformace funkce exponenciálního rozpadu je funkce

$$f_0(\omega) = \frac{1}{1 - i\omega\tau}, \quad (9.5.17)$$

s reálnou hodnotou

$$g_0(\omega) = \text{Re } f_0(\omega) = \frac{1}{1 + \omega^2\tau^2}, \quad (9.5.18)$$

což je (nenormované) Breit-Wignerovo rozdělení s pološířkou

$$\text{HWHM} = \frac{1}{\tau} = 450 \text{ kHz}. \quad (9.5.19)$$

7. Jelikož musí být $D < 0$, $A' > 0$, můžeme vrcholy přiřadit parametrům těmito dvěma způsoby:

$$1. \quad \frac{2D}{\hbar} = -37.25 \text{ MHz}, \quad \frac{A' + 2D}{\hbar} = 54.85 \text{ MHz} \quad \implies \quad \frac{A'}{\hbar} = 92.1 \text{ MHz} \quad (9.5.20a)$$

$$2. \quad \frac{2D}{\hbar} = -54.85 \text{ MHz}, \quad \frac{A' + 2D}{\hbar} = 37.25 \text{ MHz} \quad \implies \quad \frac{A'}{\hbar} = 92.1 \text{ MHz}. \quad (9.5.20b)$$

8. V obrázku 22(b) se objevuje vrchol na frekvenci $A'/\hbar = 92.1 \text{ MHz}$, což odpovídá rozdílu frekvencí $\omega_2 - \omega_3$. Ten se ve výrazu pro pravděpodobnost objeví, bude-li se měřit výsledný spin mionu podél osy, která nebude kolmá na osu z .

10 Stacionární poruchová metoda

Mějme Hamiltonián \hat{H} , který lze rozložit na součet

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \lambda \hat{H}_I \quad (10.0.1)$$

tak, že spektrum \hat{H}_0 je známé a **nedegenerované**,

$$\hat{H}_0 |\phi_m\rangle = E_m^{(0)} |\phi_m\rangle, \quad (10.0.2a)$$

$$\langle \phi_m | \phi_n \rangle = \delta_{mn}, \quad (10.0.2b)$$

$$\sum_m |\phi_m\rangle \langle \phi_m| = \hat{1}, \quad (10.0.2c)$$

a \hat{H}_I je malá porucha (interakce) řízená parametrem λ ($\lambda = 0$ v neporušeném případě, řešení pro $\lambda = 1$ hledáme; mocnina λ ve výsledku koresponduje s řádem opravy).

Předpokládáme, že vlastní vektor Hamiltoniánu \hat{H} a příslušné vlastní energie lze vyjádřit ve tvaru součtu

$$|\chi_m(\lambda)\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \lambda^n |\chi_m^{(n)}\rangle, \quad (10.0.3a)$$

$$E_m(\lambda) = \sum_{n=0}^{\infty} \lambda^n E_m^{(n)}, \quad (10.0.3b)$$

$$\hat{H} |\chi_m(\lambda)\rangle = E_m(\lambda) |\chi_m(\lambda)\rangle \quad (10.0.3c)$$

přičemž platí $|\chi_m^{(0)}\rangle \equiv |\phi_m\rangle$, kde n udává řád opravy. Upustili jsme od normalizace vektorů $|\chi_m^{(n)}\rangle$, avšak požadujeme, aby

$$\langle \phi_m | \chi_m(\lambda) \rangle = 1. \quad (10.0.4)$$

V tomto označení platí pro první opravu

$$\boxed{\begin{aligned} E_m^{(1)} &= \langle \phi_m | \hat{H}_I | \phi_m \rangle \\ |\chi_m^{(1)}\rangle &= \sum_{n \neq m} \frac{\langle \phi_n | \hat{H}_I | \phi_m \rangle}{E_m^{(0)} - E_n^{(0)}} |\phi_n\rangle \end{aligned}} \quad (10.0.5)$$

a pro druhou opravu

$$\boxed{E_m^{(2)} = \sum_{n \neq m} \frac{|\langle \phi_n | \hat{H}_I | \phi_m \rangle|^2}{E_m^{(0)} - E_n^{(0)}}.} \quad (10.0.6)$$

Druhá oprava k základnímu stavu je vždy záporná. Výsledné stavy vyjádřené do daného řádu N lze následně nanormovat.

Pokud je spektrum H_0 **degenerované**, pak uvedenou metodu nelze použít (to lze triviálně nahlédnout například z toho, že v prvním z výrazů v (10.0.5) by byla nejednoznačnost ve volbě vlastního vektoru $|\phi_m\rangle$, a také že ve jmenovateli výrazů (10.0.5) a (10.0.6) bychom dostávali nuly). Předpokládáme, že platí

$$\hat{H}_0 |\phi_{mj}\rangle = E_m |\phi_{mj}\rangle, \quad (10.0.7a)$$

$$\langle \phi_{mj} | \phi_{mk} \rangle = \delta_{jk}. \quad (10.0.7b)$$

Všechny vlastní vektory v charakteristickém podprostoru operátoru \hat{H}_0 příslušejícím k vlastní hodnotě E_m jsou indexovány druhým indexem. První opravu $E_{mj}^{(1)}$ a příslušné vlastní vektory na

tomto podprostoru získáme diagonalizací

$$\det \begin{pmatrix} \langle \phi_{m1} | \hat{H}_I | \phi_{m1} \rangle - E_m^{(1)} & \langle \phi_{m1} | \hat{H}_I | \phi_{m2} \rangle & \dots \\ \langle \phi_{m2} | \hat{H}_I | \phi_{m1} \rangle & \langle \phi_{m2} | \hat{H}_I | \phi_{m2} \rangle - E_m^{(1)} & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} = 0. \quad (10.0.8)$$

Porucha může degeneraci sejmut buď úplně, nebo jen částečně.

10.1 Porucha harmonického oscilátoru

Částice hmotnosti M se pohybuje v potenciálu jednorozměrného lineárního harmonického oscilátoru

$$\hat{V}_0 = \frac{1}{2} M \Omega^2 \hat{x}^2 \quad (10.1.1)$$

s malou poruchou

$$\hat{V}_I = \lambda \cos(\kappa \hat{x} + \varphi). \quad (10.1.2)$$

1. Spočítejte 1. řád opravy energie základního stavu.
2. Vyjádřete střední hodnotu operátoru souřadnice \hat{x} a střední hodnotu kvadrátu operátoru souřadnice \hat{x}^2 v tomto stavu.

Řešení:

1. Oprava k energii je podle (10.0.5)

$$E_0^{(1)} = \langle 0 | \cos(\kappa \hat{x} + \varphi) | 0 \rangle = \text{Re} \left\langle 0 \left| e^{i\kappa \hat{x}} e^{i\varphi} \right| 0 \right\rangle = \text{Re} \left[e^{i\varphi} \langle 0 | e^{i\kappa \hat{x}} | 0 \rangle \right] \quad (10.1.3)$$

(neporušenou bázi harmonického oscilátoru značíme v souladu s dříve užívanou konvencí $|\phi_n\rangle \equiv |n\rangle$, $n = 0, 1, 2, \dots$). Operátor souřadnice vyjádříme pomocí posunovacích operátorů \hat{a} , \hat{a}^\dagger [vztah (4.2.18)]

$$\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2M\Omega}} (\hat{a}^\dagger + \hat{a}) \quad (10.1.4)$$

a použijeme Baker-Campbell-Hausdorffovu formuli (1.4.16)

$$e^{\hat{A}+\hat{B}} = e^{\hat{A}} e^{\hat{B}} e^{-\frac{1}{2}[\hat{A},\hat{B}]}, \quad (10.1.5a)$$

$$\hat{A} \equiv i\kappa \sqrt{\frac{\hbar}{2M\Omega}} \hat{a}^\dagger, \quad (10.1.5b)$$

$$\hat{B} \equiv i\kappa \sqrt{\frac{\hbar}{2M\Omega}} \hat{a}, \quad (10.1.5c)$$

$$[\hat{A}, \hat{B}] = -\kappa^2 \frac{\hbar}{2M\Omega} \underbrace{[\hat{a}^\dagger, \hat{a}]}_{-1}, \quad (10.1.5d)$$

$$(10.1.5e)$$

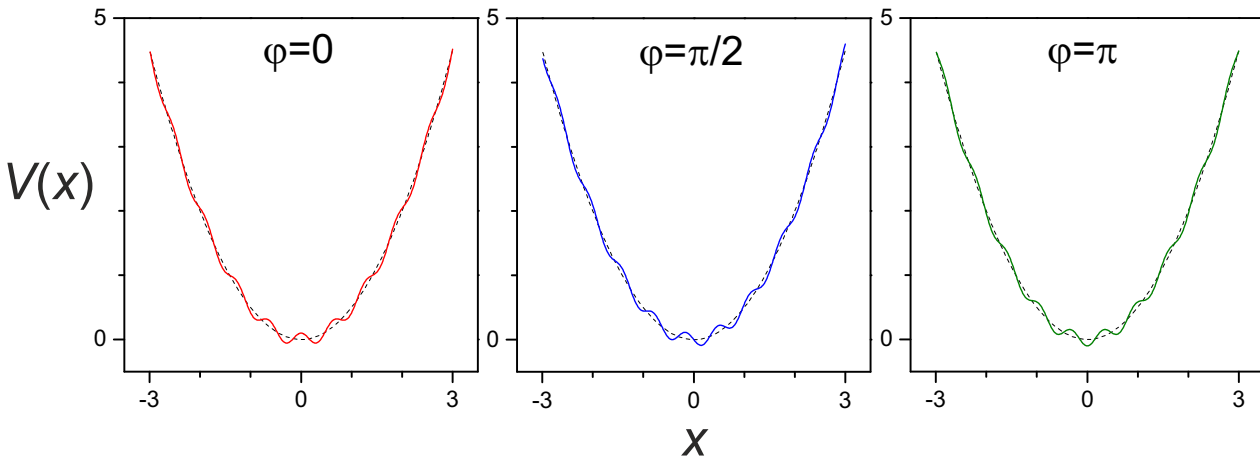
takže

$$e^{i\kappa \hat{x}} = e^{i\kappa \sqrt{\frac{\hbar}{2M\Omega}} \hat{a}^\dagger} e^{i\kappa \sqrt{\frac{\hbar}{2M\Omega}} \hat{a}} e^{-\kappa^2 \frac{\hbar}{4M\Omega}} \quad (10.1.6)$$

a

$$\begin{aligned} E_0^{(1)} &= \Re \left[e^{i\varphi} e^{-\kappa^2 \frac{\hbar}{4M\Omega}} \left\langle 0 \left| e^{i\kappa \sqrt{\frac{\hbar}{2M\Omega}} \hat{a}^\dagger} e^{i\kappa \sqrt{\frac{\hbar}{2M\Omega}} \hat{a}} \right| 0 \right\rangle \right] \\ &= \Re \left[e^{i\varphi} e^{-\kappa^2 \frac{\hbar}{4M\Omega}} \left\langle 0 \left| \left(\hat{1} + i\kappa \sqrt{\frac{\hbar}{2M\Omega}} \hat{a}^\dagger + \dots \right) \left(\hat{1} + i\kappa \sqrt{\frac{\hbar}{2M\Omega}} \hat{a} + \dots \right) \right| 0 \right\rangle \right] \\ &= e^{-\kappa^2 \frac{\hbar}{4M\Omega}} \cos \varphi. \end{aligned} \quad (10.1.7)$$

Pokud je $\phi = k\pi$, $k \in \mathbb{Z}$ je první oprava k energii základního stavu nejvyšší (porucha je sudá funkce), pokud naopak $\phi = k\pi + \pi/2$, je oprava nulová (porucha je lichá funkce).



Obrázek 23: Potenciál $V(x) = V_0(x) + V_1(x)$ pro tři hodnoty fáze φ (silnou barevnou čarou) a neporušený potenciál $V_0(x)$ (čárkovanou černou čarou). Hodnoty parametrů jsou $M = \Omega = 1$, $\kappa = 10$, $\lambda = 0,1$. Při volbě $\hbar = 0,1$ je energie neporušeného základního stavu $E_0^{(0)} = 0,05$ a poruchy v jednotlivých případech $E_0^{(1)} = \{0,0082; 0; -0,0082\}$. Střední hodnota souřadnice se posune o 0,082 v případě $\varphi = \pi/2$, ve zbylých dvou případech zůstane nulová.

2. Oprava k vlastnímu vektoru základního stavu je podle (10.0.5)

$$|\chi_0^{(1)}\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\langle n | \cos(\kappa \hat{x} + \varphi) | 0 \rangle}{E_0^{(0)} - E_n^{(0)}} |n\rangle = -\frac{1}{\hbar\Omega} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n} \Re \left[e^{i\varphi} \langle n | e^{i\kappa \hat{x}} | 0 \rangle \right] |n\rangle. \quad (10.1.8)$$

Využijeme vztahu (10.1.6), a maticový element v sumě vyjádříme jako

$$\begin{aligned} \langle n | e^{i\kappa \hat{x}} | 0 \rangle &= e^{-\kappa^2 \frac{\hbar}{4M\Omega}} \left\langle n \left| e^{i\kappa \sqrt{\frac{\hbar}{2M\Omega}} \hat{a}^\dagger} e^{i\kappa \sqrt{\frac{\hbar}{2M\Omega}} \hat{a}} \right| 0 \right\rangle \\ &= e^{-\kappa^2 \frac{\hbar}{4M\Omega}} \left\langle n \left| e^{i\kappa \sqrt{\frac{\hbar}{2M\Omega}} \hat{a}^\dagger} \right| 0 \right\rangle \\ &= e^{-\kappa^2 \frac{\hbar}{4M\Omega}} \left\langle n \left| \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} \left(i\kappa \sqrt{\frac{\hbar}{2M\Omega}} \right)^k \hat{a}^{\dagger k} \right| 0 \right\rangle \\ &= \frac{e^{-\kappa^2 \frac{\hbar}{4M\Omega}}}{\sqrt{n!}} \left(i\kappa \sqrt{\frac{\hbar}{2M\Omega}} \right)^n, \end{aligned} \quad (10.1.9)$$

takže

$$\begin{aligned} |\chi_0^{(1)}\rangle &= -\frac{1}{\hbar\Omega} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n} \frac{e^{-\kappa^2 \frac{\hbar}{4M\Omega}}}{\sqrt{n!}} \Re \left[e^{i\varphi} \left(i\kappa \sqrt{\frac{\hbar}{2M\Omega}} \right)^n \right] |n\rangle \\ &= -\frac{1}{\hbar\Omega} e^{-\kappa^2 \frac{\hbar}{4M\Omega}} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n\sqrt{n!}} \Re \left[(\cos \varphi + i \sin \varphi) \left(i\kappa \sqrt{\frac{\hbar}{2M\Omega}} \right)^n \right] |n\rangle \\ &= -\frac{1}{\hbar\Omega} e^{-\kappa^2 \frac{\hbar}{4M\Omega}} \left[\cos \varphi \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{2n\sqrt{(2n)!}} \kappa^{2n} \left(\frac{\hbar}{2M\Omega} \right)^n |2n\rangle \right. \\ &\quad \left. - \sin \varphi \sqrt{\frac{\hbar}{2M\Omega}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(2n+1)\sqrt{(2n+1)!}} \kappa^{2n+1} \left(\frac{\hbar}{2M\Omega} \right)^n |2n+1\rangle \right]. \end{aligned} \quad (10.1.10)$$

Střední hodnota operátoru souřadnice je tedy (do prvního řádu v λ)

$$\begin{aligned}
 \langle \chi_0 | \hat{x} | \chi_0 \rangle &= \sqrt{\frac{\hbar}{2M\Omega}} \left[\langle 0 | + \lambda \langle \chi_0^{(1)} | \right] \hat{a}^\dagger + \hat{a} \left[| 0 \rangle + \lambda | \chi_0^{(1)} \rangle \right] \\
 &\approx \lambda \sqrt{\frac{\hbar}{2M\Omega}} \left[\langle 0 | \hat{a} | \chi_0^{(1)} \rangle + \langle \chi_0^{(1)} | \hat{a}^\dagger | 0 \rangle \right] \\
 &= 2\lambda \sqrt{\frac{\hbar}{2M\Omega}} \langle \chi_0^{(1)} | \hat{a}^\dagger | 0 \rangle \\
 &= 2\lambda \sqrt{\frac{\hbar}{2M\Omega}} \frac{1}{\hbar\Omega} e^{-\kappa^2 \frac{\hbar}{4M\Omega}} \sin \varphi \sqrt{\frac{\hbar}{2M\Omega}} \kappa \\
 &= \frac{\lambda \kappa}{M\Omega^2} e^{-\kappa^2 \frac{\hbar}{4M\Omega}} \sin \varphi
 \end{aligned} \tag{10.1.11}$$

a střední hodnota kvadrátu operátoru souřadnice (opět do prvního řádu v λ)

$$\begin{aligned}
 \langle \chi_0 | \hat{x}^2 | \chi_0 \rangle &\approx \frac{\hbar}{2M\Omega} \left[\langle 0 | \hat{a} \hat{a}^\dagger | 0 \rangle + 2\lambda \langle \chi_0^{(1)} | \hat{a}^{\dagger 2} | 0 \rangle \right] \\
 &= \frac{\hbar}{2M\Omega} \left[1 + \frac{\lambda \kappa^2}{2M\Omega^2} e^{-\kappa^2 \frac{\hbar}{4M\Omega}} \cos \varphi \right].
 \end{aligned} \tag{10.1.12}$$

Výsledky jsou zobrazeny na obrázku 23.

10.2 Van der Waalsova interakce

Uvažujte dva atomy vodíku, přičemž vektor vzájemné polohy jejich jader \mathbf{R} míří od prvního atomu k druhému, polohy elektronů vůči příslušným atomům jsou udány vektory $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2$.

Pro dostatečně velkou vzájemnou vzdálenost atomů vůči vzdálenostem jejich elektronů a při hrubé aproximaci $E_{n \geq 2}^{(0)} \approx 0$ (to značí, že všechny energie jednotlivých atomů vodíku kromě základních stavů berte jako nulové) naleznete opravu k energii základního stavu systému a rozhodněte, zda uvažovaná interakce bude přitažlivá či odpuzivá.

Výpočet provádějte v adiabatické aproximaci, tj. předpokládejte, že atomy se vůči sobě nepohybují.

Řešení:

Neporušený Hamiltonián je součtem Hamiltoniánů dvou neinteragujících atomů vodíku, jehož spektrum (vlastní energie a vlastní funkce) je známé. Oprava (porucha) pak bude dána interakcemi konstituentů jednoho atomu s konstituenty atomu druhého:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_I, \tag{10.2.1a}$$

$$\hat{H}_0 = \frac{\hat{\mathbf{p}}_1^2}{2m} + \frac{\hat{\mathbf{p}}_2^2}{2m} - \frac{\gamma}{\hat{r}_1} - \frac{\gamma}{\hat{r}_2}, \tag{10.2.1b}$$

$$\hat{H}_I = \frac{\gamma}{\hat{R}} + \frac{\gamma}{\hat{r}} - \frac{\gamma}{|\hat{\mathbf{R}} + \hat{\mathbf{r}}_2|} - \frac{\gamma}{|\hat{\mathbf{R}} - \hat{\mathbf{r}}_1|}. \tag{10.2.1c}$$

V interakčním Hamiltoniánu souvisí jednotlivé členy postupně s interakcí kladně nabitých jader, interakcí elektronů ($\hat{r} = |\hat{\mathbf{R}} + \hat{\mathbf{r}}_2 - \hat{\mathbf{r}}_1|$), interakcí prvního jádra s elektronem druhého atomu a interakcí druhého jádra s elektronem prvního atomu.

Za předpokladu, že rozměry atomů jsou mnohem menší než jejich vzájemná vzdálenost, lze vzít jen **nejnižší členy multipólového rozvoje**

$$\begin{aligned}
 \frac{1}{|\mathbf{R} - \mathbf{r}|} &= \frac{1}{R} - r_i \frac{\partial}{\partial R_i} \frac{1}{R} + \frac{1}{2} r_i r_j \frac{\partial^2}{\partial R_i \partial R_j} \frac{1}{R} - \dots = \\
 &= \frac{1}{R} + \frac{R_i r_i}{R^3} + \frac{1}{2R^3} \left(3 \frac{R_i R_j}{R^2} - \delta_{ij} \right) r_i r_j + \dots = \\
 &= \frac{1}{R} + \frac{\mathbf{R} \cdot \mathbf{r}}{R^3} + \frac{1}{2R^3} \left(3 \frac{(\mathbf{R} \cdot \mathbf{r})^2}{R^2} - r^2 \right) + \dots
 \end{aligned} \tag{10.2.2}$$

Další člen multipólového rozvoje je $\frac{\mathbf{R} \cdot \mathbf{r}}{2R^5} \left(5 \frac{(\mathbf{R} \cdot \mathbf{r})^2}{R^2} - 3r^2 \right)$. Jednotlivé řády multipólového rozvoje H_I jsou:

$$\hat{H}_I^{(0)} = 0, \quad (10.2.3a)$$

$$\hat{H}_I^{(1)} = \frac{\gamma}{\hat{R}^3} [\hat{\mathbf{R}} \cdot (\hat{\mathbf{r}}_1 - \hat{\mathbf{r}}_2) + \hat{\mathbf{R}} \cdot \hat{\mathbf{r}}_2 - \hat{\mathbf{R}} \cdot \hat{\mathbf{r}}_1] = 0, \quad (10.2.3b)$$

$$\begin{aligned} \hat{H}_I^{(2)} &= \frac{\gamma}{2\hat{R}^3} \left[3 \frac{(\hat{\mathbf{R}} \cdot (\hat{\mathbf{r}}_1 - \hat{\mathbf{r}}_2))^2}{\hat{R}^2} - (\hat{\mathbf{r}}_1 - \hat{\mathbf{r}}_2)^2 - \right. \\ &\quad \left. - 3 \frac{(\hat{\mathbf{R}} \cdot \hat{\mathbf{r}}_2)^2}{\hat{R}^2} + \hat{r}_2^2 - 3 \frac{(\hat{\mathbf{R}} \cdot \hat{\mathbf{r}}_1)^2}{\hat{R}^2} + \hat{r}_1^2 \right] = \\ &= \frac{\gamma}{\hat{R}^3} \left[\hat{\mathbf{r}}_1 \cdot \hat{\mathbf{r}}_2 - 3 \frac{(\hat{\mathbf{R}} \cdot \hat{\mathbf{r}}_1)(\hat{\mathbf{R}} \cdot \hat{\mathbf{r}}_2)}{\hat{R}^2} \right]. \end{aligned} \quad (10.2.3c)$$

Nadále se omezíme na přiblížení $\hat{H}_I \approx \hat{H}_I^{(2)}$ ³³.

Ve **speciálně zvolené souřadné soustavě**, ve které osa z směřuje ve směru spojnice jader atomů od prvního jádra ke druhému, je

$$\begin{aligned} \hat{H}_I &= \frac{\gamma}{\hat{R}^3} \left[\hat{x}_1 \hat{x}_2 + \hat{y}_1 \hat{y}_2 + \hat{z}_1 \hat{z}_2 - 3 \frac{(\hat{R} \hat{z}_1)(\hat{R} \hat{z}_2)}{\hat{R}^2} \right] = \\ &= \frac{\gamma}{\hat{R}^3} [\hat{x}_1 \hat{x}_2 + \hat{y}_1 \hat{y}_2 - 2 \hat{z}_1 \hat{z}_2]. \end{aligned} \quad (10.2.5)$$

přičemž $\hat{\mathbf{r}}_1 = (\hat{x}_1, \hat{y}_1, \hat{z}_1)$ jsou složky vektoru $\hat{\mathbf{r}}_1$; analogicky pro vektor $\hat{\mathbf{r}}_2$.

Neporušený základní stav dvou volných atomů vodíku je dán vlnovou funkcí

$$|\phi_1\rangle = |n=1, l=0, m=0\rangle_1 |n=1, l=0, m=0\rangle_2 \equiv |1\rangle |2\rangle \quad (10.2.6)$$

(při použití zjednodušeného označení $|1, 2\rangle \equiv |n=1, l=0, m=0\rangle_{1,2}$). Atomy jsou nerozlišitelné, vlnový vektor tudíž musí být symetrický nebo antisymetrický vůči záměně částic.³⁴ To je splněno.

1. oprava k energii je dle poruchové teorie

$$\begin{aligned} E_{11}^{(1)} &= \langle \phi_1 | \hat{H}_I | \phi_1 \rangle = \\ &= \frac{\gamma}{\hat{R}^3} \left[\langle 1 | \hat{x}_1 | 1 \rangle \langle 2 | \hat{x}_2 | 2 \rangle + \langle 1 | \hat{y}_1 | 1 \rangle \langle 2 | \hat{y}_2 | 2 \rangle - 2 \langle 1 | \hat{z}_1 | 1 \rangle \langle 2 | \hat{z}_2 | 2 \rangle \right]. \end{aligned} \quad (10.2.7)$$

K určení maticových elementů lze využít výběrová pravidla podle Wigner-Eckartova teorému (14.0.9). Komponenty vektorových operátorů $\hat{\mathbf{r}}_{1,2}$ se vyjádří pomocí komponent tenzorových operátorů 1. řádu, viz (14.1.1)). Je tedy $\lambda = 1$ a jednotlivé komponenty jsou odlišeny indexem μ . Výběrová pravidla pak dávají $J = j \pm 1$ a $M = m + \mu$, kde v našem případě $J \equiv l = 0$, $j \equiv l = 0$, $M = m = 0$. To není splněno pro žádnou ze složek operátorů $\hat{\mathbf{r}}_{1,2}$, takže všechny maticové elementy na pravé straně výrazu pro 1. opravu jsou nulové.³⁵

³³To je vlastně interakční energie dvou dipólových momentů $\hat{\mathbf{d}}_{1,2} = -e \hat{\mathbf{r}}_{1,2}$:

$$\hat{H}_I^{(2)} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{R^3} \left[\hat{\mathbf{d}}_1 \cdot \hat{\mathbf{d}}_2 - 3 \frac{(\hat{\mathbf{R}} \cdot \hat{\mathbf{d}}_1)(\hat{\mathbf{R}} \cdot \hat{\mathbf{d}}_2)}{\hat{R}^2} \right]. \quad (10.2.4)$$

³⁴Pro úplnou analýzu je potřeba zahrnout i spinový stav elektronů; pro účely této úlohy stačí uvažovat, že spin elektronů se složí na antisymetrický singletní stav, aby celková vlnová funkce byla antisymetrická.

³⁵To úzce souvisí s tím, že dipólový moment atomů v základním stavu je nulový.

2. oprava k energii základního stavu dává

$$\begin{aligned}
 E_{11}^{(2)} &= \sum_{\substack{n_1 \neq 1 \\ n_2 \neq 1 \\ l_1 m_1 l_2 m_2}} \frac{|\langle 2 | \langle 1 | \hat{H}_I | n_1 l_1 m_1 \rangle | n_2 l_2 m_2 \rangle|^2}{2E_1^{(0)} - E_{n_1}^{(0)} - E_{n_2}^{(0)}} \approx \\
 &\approx \frac{1}{2E_1^{(0)}} \sum \langle 2 | \langle 1 | \hat{H}_I | n_1 l_1 m_1 \rangle | n_2 l_2 m_2 \rangle \langle n_1 l_1 m_1 | \langle n_2 l_2 m_2 | \hat{H}_I | 1 \rangle | 2 \rangle = \\
 &= \frac{1}{2E_1^{(0)}} \langle 2 | \langle 1 | \hat{H}_I (\hat{1} - |1\rangle \langle 1|) | 2 \rangle \langle 2 | \langle 1 | \hat{H}_I | 1 \rangle | 2 \rangle = \\
 &= \frac{1}{2E_1^{(0)}} \langle 2 | \langle 1 | \hat{H}_I^2 | 1 \rangle | 2 \rangle, \tag{10.2.8}
 \end{aligned}$$

kde se provedla **hrubá aproximace** $E_{n \geq 2}^{(0)} \approx 0$, využily se relace úplnosti a znalost nulovosti maticových elementů $\langle 2 | \langle 1 | \hat{H}_I | 1 \rangle | 2 \rangle$. Při formálně zcela správném řešení je nutné uvažovat nerozlišitelnost částic, avšak výsledek bude stejný (díky užití relací úplnosti).

Kvadrát Hamiltoniánu poruchy je

$$\hat{H}_I^2 = \frac{\gamma^2}{\hat{R}_6} [\hat{x}_1^2 \hat{x}_2^2 + \hat{y}_1^2 \hat{y}_2^2 + 4\hat{z}_1^2 \hat{z}_2^2 + 2\hat{x}_1 \hat{x}_2 \hat{y}_1 \hat{y}_2 - 4\hat{x}_1 \hat{x}_2 \hat{z}_1 \hat{z}_2 - 4\hat{y}_1 \hat{y}_2 \hat{z}_1 \hat{z}_2]. \tag{10.2.9}$$

Maticový element pro smíšené členy (poslední tři členy v závorce) se vynuluje díky symetrii základního stavu.³⁶ Ze symetrie také vyplývá

$$\langle 1 | \hat{x}_1^2 | 1 \rangle = \langle 1 | \hat{y}_1^2 | 1 \rangle = \langle 1 | \hat{z}_1^2 | 1 \rangle = \frac{1}{3} \langle 1 | \hat{r}_1^2 | 1 \rangle, \tag{10.2.11}$$

takže druhou opravu k energii lze nakonec vyjádřit jako

$$\begin{aligned}
 E_{11}^{(2)} &= \frac{\gamma^2}{2E_1^{(0)} R^6} [\langle 1 | \hat{x}_1^2 | 1 \rangle \langle 2 | \hat{x}_2^2 | 2 \rangle + \langle 1 | \hat{y}_1^2 | 1 \rangle \langle 2 | \hat{y}_2^2 | 2 \rangle + 4 \langle 1 | \hat{z}_1^2 | 1 \rangle \langle 2 | \hat{z}_2^2 | 2 \rangle] = \\
 &= \frac{\gamma^2}{2E_1^{(0)} R^6} \frac{6}{9} \langle 1 | \hat{r}_1^2 | 1 \rangle \langle 2 | \hat{r}_2^2 | 2 \rangle \tag{10.2.12}
 \end{aligned}$$

Zbytek úlohy se dořeší v x -reprezentaci. Energetické hladiny atomu vodíku jsou

$$E_n^{(0)} = -\frac{\gamma}{2a_0} \frac{1}{n^2} \tag{10.2.13}$$

a radiální část vlnové funkce základního stavu zní³⁷

$$R_{10}(r) = \langle r | 100 \rangle = \frac{2}{a_0^3} e^{-\frac{r}{a_0}}, \tag{10.2.14}$$

³⁶Toto lze opět dokázat pomocí Wigner-Eckartova teorému. Na základě příkladu 14.10 lze dyadický součin dvou vektorových operátorů \hat{R}, \hat{S} vyjádřit pomocí tenzorových operátorů nultého, prvního a druhého řádu. Speciálně pro $\hat{R} = \hat{S}$ a pro smíšené složky $R_j, R_k, j \neq k$ platí

$$\hat{R}_1 \hat{R}_2 = \frac{\hat{T}_2^{(2)} - \hat{T}_{-2}^{(2)}}{2i}, \quad \hat{R}_2 \hat{R}_3 = -\frac{\hat{T}_1^{(2)} + \hat{T}_{-1}^{(2)}}{2i}, \quad \hat{R}_1 \hat{R}_3 = -\frac{\hat{T}_1^{(2)} - \hat{T}_{-1}^{(2)}}{2}, \tag{10.2.10}$$

dají se tedy vyjádřit pomocí tenzorového operátoru řádu $\lambda = 2$ s projekcí $\mu \neq 0$. Po nahrazení $(\hat{R}_1, \hat{R}_2, \hat{R}_3) = (\hat{x}_{1,2}, \hat{y}_{1,2}, \hat{z}_{1,2})$ se dospěje na základě výběrových pravidel Wigner-Eckartova teorému k závěru, že libovolný maticový element $\langle 100 | R_j R_k | 100 \rangle = 0, j \neq k$.

³⁷Celá vlnová funkce základního stavu je $\langle r, \theta, \phi | 100 \rangle = R_{10}(r) Y_{00}(\theta, \phi)$, kde $Y_{00}(\theta, \phi) = 1/\sqrt{4\pi}$. Úhlovou a radiální část lze od sebe odseparovat a zde se počítá maticový element operátoru, který na úhlovou část nepůsobí, proto stačí uvažovat pouze radiální část.

kde $a_0 = \hbar^2/\gamma m$ je Bohrov poloměr. Maticový element je dán integrálem

$$\begin{aligned}
 \langle 100|\hat{r}^2|100\rangle &= \frac{4}{a_0^3} \int_0^\infty e^{-\frac{r}{a_0}} r^2 e^{-\frac{r}{a_0}} r^2 dr = \\
 &= \frac{4}{a_0^3} \int_0^\infty r^4 e^{-\frac{2r}{a_0}} dr = \\
 &= -\frac{4}{a_0^3} 4 \frac{a_0}{2} \int_0^\infty r^3 e^{-\frac{2r}{a_0}} dr = \dots = \\
 &= -\frac{4}{a_0^3} 4! \left(\frac{a_0}{2}\right)^5 \left[e^{-\frac{2r}{a_0}}\right]_0^\infty = \\
 &= \frac{4}{a_0^3} 24 \left(\frac{a_0}{2}\right)^5 = \\
 &= 3a_0^2,
 \end{aligned} \tag{10.2.15}$$

který po dosazení do vztahu pro 2. opravu energie (10.2.12) dá konečný výsledek

$$E_{11}^{(2)} = \frac{3\gamma^2 a_0^4}{E_1^{(0)} R^6} = -\frac{6\gamma a_0^5}{R^6}. \tag{10.2.16}$$

Oprava je záporná, lze z ní tedy usuzovat na přitažlivost sil mezi atomy a na její rychlý pokles s narůstající vzdáleností.

Atomy nemusí být nutně vodíkové, výsledek platí i pro jiné atomy nebo molekuly, pouze musí dostatečně přesně platit, že na tento systém lze nahlížet jako na soustavu kladně nabitého centra (jádro + elektrony z vnitřních slupek) a okolo obíhající valenční elektron. Pak vidíme, že Van der Waalsova síla je tím větší, čím jsou větší rozměry atomů.

Zatímco pro základní stav je 1. oprava poruchové teorie k nulová, pro excitované stavy již tomu tak být nemusí. To znamená, že atomy v excitovaných stavech se budou ovlivňovat silněji na velkých vzdálenostech, velikost opravy bude klesat jen jako $\sim 1/R^3$. Navíc excitované stavy mohou být degenerované a je nutné použít degenerovanou poruchovou teorii.

Ačkoliv jsou jednotlivé dipólové momenty atomů v základním stavu nulové (dipólový moment \equiv střední hodnota operátoru dipólového momentu), jsou Van der Waalsovy síly projevem dipól-dipólové interakce. Je to důsledek toho, že základní stav není vlastním stavem dipólového operátoru $\hat{\mathbf{d}}$.

Detaily ohledně Van der Waalsovy síly naleznete v přehledovém článku [13] či v učebnici [10], kapitola 10.10.3.

11 Měření

11.1 Ramseyův přístroj s měřením

Tento příklad navazuje na příklad 9.2.

Předpokládejme, že na oblasti s vypnutým oscilujícím polem B_1 provedeme měření pomocí dvouhladinového systému (například pomocí další částice se spinem 1/2). Namísto Hamiltoniánu

$$H_0 = -\mu\sigma_3 B_0 \quad (11.1.1)$$

budeme uvažovat Hamiltonián

$$H'_0 = \begin{cases} -\mu B_0 \sigma_3 \otimes (1 + \lambda m), & \tau \leq t < \tau + T_0, \\ -\mu B_0 \sigma_3 \otimes 1, & \tau + T_0 \leq t < \tau + T, \end{cases} \quad (11.1.2)$$

kde

$$m \equiv \frac{1}{2} (1 - \sigma_1) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix}. \quad (11.1.3)$$

Tento Hamiltonián působí na Hilbertově prostoru $\mathcal{H} = \mathcal{H}_s \otimes \mathcal{H}_m$, což je tenzorový součin Hilbertova prostoru \mathcal{H}_s spinu prolétajícího Ramseyovým přístrojem a Hilbertova prostoru \mathcal{H}_m měřícího dvouhladinového systému.

Dobu T_0 zvolíme speciálně jako (při využití notace (11.1.4) zimního semestru)

$$T_0 = \frac{\hbar\pi}{2\mu B_0 \lambda} = \frac{\pi}{\omega_0 \lambda}, \quad (11.1.4)$$

což, jak se ukáže během řešení, je doba potřebná k tomu, aby na sebe měřící zařízení přijalo kvantovou informaci o směru prolétavajícího spinu.

1. Nalezněte evoluční operátor $U'_0(T)$ v oblasti mezi dvěma Ramseyovými zónami.
2. Za počáteční stav měřícího zařízení budeme uvažovat

$$|\phi_i\rangle = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 - i \\ 1 + i \end{pmatrix}. \quad (11.1.5)$$

V případě, že by měřící zařízení byl spin 1/2, ukažte, do jakého směru by mířil.

3. Ukažte, že pro počáteční stav ve tvaru

$$|\psi'_i\rangle = |\psi_i\rangle \otimes |\phi_i\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \otimes \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 - i \\ 1 + i \end{pmatrix} \quad (11.1.6)$$

lze pravděpodobnost naměření koncového stavu, ve kterém je spin, který prolétl Ramseyovým zařízením otočený dolů bez ohledu na to, jaký je stav měřícího zařízení, vyjádřit jako

$$p_{\downarrow\uparrow} = |A_{\downarrow\uparrow\uparrow}|^2 + |A_{\downarrow\uparrow\downarrow}|^2, \quad (11.1.7)$$

kde $A_{\downarrow\uparrow\uparrow}$ a $A_{\downarrow\uparrow\downarrow}$ jsou definovány ve výrazu (9.2.22). Měřením tedy vymizí interferenční člen.

Řešení:

1. Evoluční operátor pro část Hamiltoniánu

$$h \equiv - \underbrace{\mu B_0}_{\frac{\hbar\omega_0}{2}} \lambda \sigma_3 \otimes m \quad (11.1.8)$$

se spočítá rozvinutím do řady:

$$u \equiv e^{-\frac{i}{\hbar} h T_0} = \sum_{j=0}^{\infty} \underbrace{\left(\frac{i \omega_0 \lambda T_0}{2} \right)^j}_a \frac{1}{j!} (\sigma_3 \otimes m)^j. \quad (11.1.9)$$

Jelikož

$$\sigma_3^2 = 1, \quad (11.1.10)$$

$$m^2 = m, \quad (11.1.11)$$

vychází

$$\begin{aligned} u &= 1 + \sum_{j=0}^{\infty} \frac{a^{2j+1}}{(2j+1)!} \sigma_3 \otimes m + \sum_{j=1}^{\infty} \frac{a^{2j}}{(2j)!} 1 \otimes m \\ &= 1 \otimes 1 + \left[i \sigma_3 \sin \frac{\omega_0 \lambda T_0}{2} + 1 \left(\cos \frac{\omega_0 \lambda T_0}{2} - 1 \right) \right] \otimes m. \end{aligned} \quad (11.1.12)$$

Speciální volba T_0 podle (11.1.4) vede na

$$u = 1 \otimes 1 + (i \sigma_3 - 1) \otimes m. \quad (11.1.13)$$

Jelikož h komutuje s $H_0 = -\mu B_0 \sigma_3 \otimes 1$, lze psát

$$\begin{aligned} U'_0(T) &= e^{-\frac{i}{\hbar} H_0 T} e^{-\frac{i}{\hbar} h T} \\ &= \left[\begin{pmatrix} e^{i \frac{\omega_0 T}{2}} & 0 \\ 0 & e^{-i \frac{\omega_0 T}{2}} \end{pmatrix} \otimes 1 \right] [1 \otimes 1 + (i \sigma_3 - 1) \otimes m] \\ &= \left(e^{i \frac{\omega_0 T}{2}} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & e^{-i \frac{\omega_0 T}{2}} \end{pmatrix} \otimes 1 - \begin{pmatrix} (1-i) e^{i \frac{\omega_0 T}{2}} & 0 \\ 0 & (1+i) e^{-i \frac{\omega_0 T}{2}} \end{pmatrix} \right) \otimes m. \end{aligned} \quad (11.1.14)$$

2. Lze využít dvou postupů:

- V příkladu 2.1 bylo ukázáno, že normalizovaný vektor spinu orientovaného do směru jednotkového vektoru $\hat{n} = (\sin \theta \cos \phi, \sin \theta \sin \phi, \cos \theta)$ popsaného pomocí sférických úhlů (θ, ϕ) je

$$|\hat{n}\rangle = \begin{pmatrix} e^{-i\phi} \cos \frac{\theta}{2} \\ \sin \frac{\theta}{2} \end{pmatrix}. \quad (11.1.15)$$

Poměr složek

$$z = e^{-i\phi} \cot \frac{\theta}{2} \quad (11.1.16)$$

tedy udává úhly (θ, ϕ) (stereografická projekce v [12]). V případě tohoto příkladu je

$$z = \frac{1-i}{1+i} = -i = (\cos \phi - i \sin \phi) \cot \frac{\theta}{2}, \quad (11.1.17)$$

takže $\phi = \pi/2$ a $\theta = 0$. To odpovídá projekci spinu podél souřadné osy y .

- Druhý způsob výpočtu spočívá ve vyjádření matice hustoty spinového stavu

$$\rho_n = |n\rangle \langle n| = \frac{1}{2} (1 + \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}) \quad (11.1.18)$$

($|\mathbf{n}| = 1$ pro čistý stav, $|\mathbf{n}| < 1$ pro smíšený stav). V případě zadaného stavu je

$$\begin{aligned} \rho_{\phi_i} &= |\phi_i\rangle \langle \phi_i| = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1-i \\ 1+i \end{pmatrix} \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1+i & 1-i \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & -i \\ i & 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} (1 + \sigma_2), \end{aligned} \quad (11.1.19)$$

což opět udává orientaci spinu podél osy y .³⁸

³⁸Platí tedy, že stav $|\phi_i\rangle$ je vlastním stavem matice σ_2 .

3. Koncový stav systému, který vyvíjí počáteční stav $|\psi'_i\rangle$, je

$$|\psi'_F\rangle \equiv |\psi'(T+2\tau)\rangle = \hat{U}'_F |\psi'_i\rangle, \quad (11.1.20)$$

kde

$$\hat{U}'_F \equiv \hat{U}(2\tau+T, \tau+T) \hat{U}'_0(T) \hat{U}(\tau, 0). \quad (11.1.21)$$

Hledaná pravděpodobnost je

$$p'_{\downarrow\uparrow} = \langle \psi'_F | \hat{P} | \psi'_F \rangle, \quad (11.1.22)$$

kde \hat{P} je projektor na koncový stav,

$$\hat{P} = |\psi_f\rangle\langle\psi_f| \otimes \hat{1}_m = |\psi_f\rangle\langle\psi_f| \otimes (|\uparrow\rangle\langle\uparrow| + |\downarrow\rangle\langle\downarrow|) = |\downarrow\uparrow\rangle\langle\downarrow\uparrow| + |\downarrow\downarrow\rangle\langle\downarrow\downarrow|. \quad (11.1.23)$$

Pravděpodobnost se tedy dá rozepsat jako

$$\begin{aligned} p'_{\downarrow\uparrow} &= \langle \psi'_i | \hat{U}'_F | \downarrow\uparrow \rangle \langle \downarrow\uparrow | \hat{U}'_F | \psi'_i \rangle + \langle \psi'_i | \hat{U}'_F | \downarrow\downarrow \rangle \langle \downarrow\downarrow | \hat{U}'_F | \psi'_i \rangle \\ &= \langle \uparrow \otimes | \hat{U}'_F | \downarrow\uparrow \rangle \langle \downarrow\uparrow | \hat{U}'_F | \uparrow \otimes \rangle + \langle \uparrow \otimes | \hat{U}'_F | \downarrow\downarrow \rangle \langle \downarrow\downarrow | \hat{U}'_F | \uparrow \otimes \rangle \\ &= |A'_{\downarrow\uparrow\uparrow}|^2 + |A'_{\downarrow\uparrow\downarrow}|^2, \end{aligned} \quad (11.1.24)$$

kde horní index značí, jaký stav bude mít výsledný spin, a $|\phi_i\rangle \equiv |\otimes\rangle$. Analogicky s (9.2.22) lze jednotlivé amplitudy dále rozepsat jako

$$\begin{aligned} A'_{\downarrow\uparrow\uparrow} &= \langle \downarrow\uparrow | \hat{U}'_F | \uparrow \otimes \rangle \\ &= \langle \downarrow\uparrow | \hat{U}(2\tau+T, \tau+T) (|\uparrow_s\rangle\langle\uparrow_s| + |\downarrow_s\rangle\langle\downarrow_s|) \otimes (|\uparrow_m\rangle\langle\uparrow_m| + |\downarrow_m\rangle\langle\downarrow_m|) \hat{U}'_0(T) \hat{U}(\tau, 0) | \uparrow \otimes \rangle \\ &= \langle \downarrow\uparrow | \hat{U}(2\tau+T, \tau+T) | \uparrow\uparrow \rangle \underbrace{\langle \uparrow\uparrow | \hat{U}'_0(T) \hat{U}(\tau, 0) | \uparrow \otimes \rangle}_0 + \langle \downarrow\uparrow | \hat{U}(2\tau+T, \tau+T) | \uparrow\downarrow \rangle \underbrace{\langle \uparrow\downarrow | \hat{U}'_0(T) \hat{U}(\tau, 0) | \uparrow \otimes \rangle}_0 \\ &\quad + \langle \downarrow\uparrow | \hat{U}(2\tau+T, \tau+T) | \downarrow\uparrow \rangle \underbrace{\langle \downarrow\uparrow | \hat{U}'_0(T) \hat{U}(\tau, 0) | \uparrow \otimes \rangle}_0 + \langle \downarrow\uparrow | \hat{U}(2\tau+T, \tau+T) | \downarrow\downarrow \rangle \underbrace{\langle \downarrow\downarrow | \hat{U}'_0(T) \hat{U}(\tau, 0) | \uparrow \otimes \rangle}_0 \\ &= A_{\downarrow\uparrow\uparrow}^{(2)} A_{\uparrow\uparrow\uparrow}'^{(1)} + A_{\downarrow\uparrow\downarrow}^{(2)} A_{\uparrow\uparrow\downarrow}'^{(1)}, \end{aligned} \quad (11.1.25a)$$

$$A'_{\downarrow\uparrow\downarrow} = A_{\downarrow\uparrow\uparrow}^{(2)} A_{\uparrow\uparrow\downarrow}'^{(1)} + A_{\downarrow\uparrow\downarrow}^{(2)} A_{\uparrow\uparrow\uparrow}'^{(1)}, \quad (11.1.25b)$$

kde vyznačené elementy jsou nulové díky ortogonalitě a díky tomu, že operátor \hat{U} nemění stav měřícího spinu, a $A_{\downarrow\uparrow\uparrow}^{(2)}, A_{\downarrow\uparrow\downarrow}^{(2)}$ jsou dány vztahy (9.2.21).

Využití vztahů (9.2.20) pro Ramseyův přístroj v první Ramseyově oblasti vede k amplitudám

$$\begin{aligned} A_{\uparrow\uparrow\uparrow}'^{(1)} &= [(1 \ 0) \otimes (1 \ 0)] U'_0(T) U(\tau; 0) \left[\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \otimes |\phi_i\rangle \right] \\ &= \left[\left(e^{i\frac{\omega_0 T}{2}} \ 0 \right) \otimes (1 \ 0) - (1-i) \left(e^{i\frac{\omega_0 T}{2}} \ 0 \right) \otimes \frac{1}{2} (1 \ -1) \right] U(\tau; 0) \left[\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \otimes \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1-i \\ 1+i \end{pmatrix} \right] \\ &= \left[\left(e^{i\frac{\omega_0 T}{2}} \ 0 \right) \otimes \frac{1}{2} (1+i \ 1-i) \right] U(\tau; 0) \left[\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \otimes \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1-i \\ 1+i \end{pmatrix} \right] \\ &= A_{\uparrow\uparrow\uparrow}^{(1)} \frac{1}{2} (1+i \ 1-i) \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1-i \\ 1+i \end{pmatrix} \\ &= A_{\uparrow\uparrow\uparrow}^{(1)}, \end{aligned} \quad (11.1.26a)$$

$$\begin{aligned} A_{\downarrow\uparrow\uparrow}'^{(1)} &= [(0 \ 1) \otimes (1 \ 0)] U'_0(T) U(\tau; 0) \left[\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \otimes |\phi_i\rangle \right] \\ &= A_{\downarrow\uparrow\uparrow}^{(1)} \frac{1}{2} (1-i \ 1+i) \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1-i \\ 1+i \end{pmatrix} \\ &= 0, \end{aligned} \quad (11.1.26b)$$

$$A_{\uparrow\uparrow\downarrow}'^{(1)} = 0, \quad (11.1.26c)$$

$$A_{\downarrow\uparrow\downarrow}'^{(1)} = A_{\downarrow\uparrow\downarrow}^{(1)}, \quad (11.1.26d)$$

takže

$$A'_{\downarrow\uparrow} = A_{\downarrow\uparrow}^{(2)} A_{\uparrow\uparrow}^{(1)} = A_{\downarrow\uparrow\uparrow}, \quad (11.1.27a)$$

$$A'_{\downarrow\downarrow} = A_{\downarrow\downarrow}^{(2)} A_{\downarrow\uparrow}^{(1)} = A_{\downarrow\downarrow\uparrow}. \quad (11.1.27b)$$

Hledaná pravděpodobnost překlopení spinu je tedy podle (11.1.24)

$$p_{\downarrow\uparrow} = |A_{\downarrow\uparrow\uparrow}|^2 + |A_{\downarrow\downarrow\uparrow}|^2. \quad (11.1.28)$$

Začlenění měřicího přístroje tedy zničí interferenci. Vývoj je však unitární, kvantová informace se přenesla na měřicí spin. Měřicí spin se bude nacházet ve stavu $|\uparrow\rangle$, pokud se spin procházející přístrojem nachází za 1. Ramseyovou oblastí ve stavu $|\uparrow\rangle$, a obdobně pro spin mířící dolů.

Výpočet se dá provést i jinak. Jelikož stav měřicího spinu ovlivňuje pouze oblast bez oscilujícího magnetického pole \mathbf{B}_1 , stačí určit

$$\begin{aligned} U'_0(T) [1 \otimes |\phi_i\rangle] &= \begin{pmatrix} e^{i\frac{\omega_0 T}{2}} & 0 \\ 0 & e^{-i\frac{\omega_0 T}{2}} \end{pmatrix} \otimes \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1-i \\ 1+i \end{pmatrix} \\ &\quad - \begin{pmatrix} (1-i)e^{i\frac{\omega_0 T}{2}} & 0 \\ 0 & (1+i)e^{-i\frac{\omega_0 T}{2}} \end{pmatrix} \otimes \underbrace{\left[\frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix} \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1-i \\ 1+i \end{pmatrix} \right]}_{\frac{i}{2} \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \end{pmatrix}} \\ &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} e^{i\frac{\omega_0 T}{2}} \begin{pmatrix} 1-i \\ 1+i \end{pmatrix} & 0 \\ 0 & e^{-i\frac{\omega_0 T}{2}} \begin{pmatrix} 1-i \\ 1+i \end{pmatrix} \end{pmatrix} \\ &\quad - \frac{1}{2} \begin{pmatrix} (i+1)e^{i\frac{\omega_0 T}{2}} \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \end{pmatrix} & 0 \\ 0 & (i-1)e^{-i\frac{\omega_0 T}{2}} \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \end{pmatrix} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} e^{i\frac{\omega_0 T}{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} & 0 \\ 0 & e^{-i\frac{\omega_0 T}{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} e^{i\frac{\omega_0 T}{2}} & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & e^{-i\frac{\omega_0 T}{2}} \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Z tohoto výrazu již vyplývají výše uvedené výsledky.

Poznámka: Formálně jednodušší přístup je pomocí matice hustoty. Pokud se použije Ramseyův přístroj bez měřicího zařízení, vyvine se spin z počátečního stavu (9.2.6) do stavu

$$|\psi_F\rangle = |\psi_i(T_F)\rangle = (A_{\uparrow\uparrow\uparrow} + A_{\uparrow\downarrow\uparrow}) |\uparrow\rangle + (A_{\downarrow\uparrow\uparrow} + A_{\downarrow\downarrow\uparrow}) |\downarrow\rangle, \quad (11.1.29)$$

kde $T_f \equiv 2\tau + T$, takže matice hustoty bude

$$\begin{aligned} \hat{\rho}_i(T_f) &= |\psi_i(T_f)\rangle \langle \psi_i(T_f)| \\ &= \begin{pmatrix} |A_{\uparrow\uparrow\uparrow} + A_{\uparrow\downarrow\uparrow}|^2 & (A_{\uparrow\uparrow\uparrow} + A_{\uparrow\downarrow\uparrow})(A_{\downarrow\uparrow\uparrow} + A_{\downarrow\downarrow\uparrow})^* \\ (A_{\uparrow\uparrow\uparrow} + A_{\uparrow\downarrow\uparrow})^* (A_{\downarrow\uparrow\uparrow} + A_{\downarrow\downarrow\uparrow}) & |A_{\downarrow\uparrow\uparrow} + A_{\downarrow\downarrow\uparrow}|^2 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (11.1.30)$$

a pravděpodobnost naměření stavu $|\psi_f\rangle$ (9.2.7) je

$$p_{\downarrow\uparrow} = \langle \psi_f | \hat{\rho}_i(T_f) | \psi_f \rangle = |A_{\downarrow\uparrow\uparrow} + A_{\downarrow\downarrow\uparrow}|^2, \quad (11.1.31)$$

což je výsledek (9.2.23).

Při zapnutí měřicího přístroje je koncový stav

$$\begin{aligned} |\psi_i(T_f)\rangle &= A_{\uparrow\uparrow\uparrow} |\uparrow\rangle \otimes |\uparrow\rangle + A_{\uparrow\downarrow\uparrow} |\uparrow\rangle \otimes |\downarrow\rangle \\ &\quad + A_{\downarrow\uparrow\uparrow} |\downarrow\rangle \otimes |\uparrow\rangle + A_{\downarrow\downarrow\uparrow} |\downarrow\rangle \otimes |\downarrow\rangle. \end{aligned} \quad (11.1.32)$$

Matice hustoty se zapnutým měřícím přístrojem má tedy složky

$$\rho'_{ab,cd}(T_f) = A_{ab\uparrow} A_{cd\uparrow}^*, \quad (11.1.33)$$

kde první index $a, c \in \{\uparrow, \downarrow\}$ odpovídá stavu spinu, druhý index $b, d \in \{\uparrow, \downarrow\}$ měřícímu přístroji.

V koncovém stavu nás nezajímá stav měřícího přístroje, což formálně znamená, že všechnu informaci nese parciální stopa matice hustoty přes \mathcal{H}_m :

$$\begin{aligned} \hat{\rho}'_s(T_F) &= \text{Tr}_m \hat{\rho}'(T_F) \\ &= \langle \uparrow_m | \hat{\rho}'(T_F) | \uparrow_m \rangle + \langle \downarrow_m | \hat{\rho}'(T_F) | \downarrow_m \rangle \\ &= \begin{pmatrix} \rho'_{\uparrow\uparrow,\uparrow\uparrow}(T_F) + \rho'_{\uparrow\downarrow,\uparrow\downarrow}(T_F) & \rho'_{\uparrow\uparrow,\downarrow\uparrow}(T_F) + \rho'_{\uparrow\downarrow,\downarrow\downarrow}(T_F) \\ \rho'_{\downarrow\uparrow,\uparrow\uparrow}(T_F) + \rho'_{\downarrow\downarrow,\uparrow\downarrow}(T_F) & \rho'_{\downarrow\uparrow,\downarrow\uparrow}(T_F) + \rho'_{\downarrow\downarrow,\downarrow\downarrow}(T_F) \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} |A_{\uparrow\uparrow\uparrow}|^2 + |A_{\uparrow\downarrow\uparrow}|^2 & A_{\uparrow\uparrow\uparrow} A_{\downarrow\uparrow\uparrow}^* + A_{\uparrow\downarrow\uparrow} A_{\downarrow\downarrow\uparrow}^* \\ A_{\downarrow\uparrow\uparrow} A_{\uparrow\uparrow\uparrow}^* + A_{\downarrow\downarrow\uparrow} A_{\uparrow\downarrow\uparrow}^* & |A_{\downarrow\uparrow\uparrow}|^2 + |A_{\downarrow\downarrow\uparrow}|^2 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (11.1.34)$$

Hledaná pravděpodobnost je pak

$$p'_{\downarrow\uparrow} = \langle \downarrow_s | \rho'_s(T_F) | \downarrow_s \rangle = |A_{\downarrow\uparrow\uparrow}|^2 + |A_{\downarrow\downarrow\uparrow}|^2, \quad (11.1.35)$$

v souladu s (11.1.28).

12 Nestacionární poruchová metoda

Schödingerův, Heisenbergův, Diracův obraz

Předpokládejme, že systém popsaný Hamiltoniánem \hat{H} lze rozložit na část \hat{H}_0 nezávislejší na čase a na časově závislou poruchu \hat{H}_I :

$$\hat{H}(t) = \hat{H}_0 + \hat{H}_I(t). \quad (12.0.1)$$

Dále mějme v čase t_0 vektor $|\psi(t_0)\rangle$ popisující stav systému, libovolný časově nezávislý operátor \hat{A} a časově závislý operátor $\hat{B}(t)$. Fyzikální závěry se nezmění, pokud provedeme unitární transformaci současně stavového vektoru a operátorů, danou unitárním operátorem \hat{U} :

$$|\psi'\rangle = \hat{U} |\psi\rangle, \quad (12.0.2a)$$

$$\hat{A}' = \hat{U} \hat{A} \hat{U}^\dagger. \quad (12.0.2b)$$

Tuto transformaci lze v každém čase t uvažovat různou. V praxi se užívají tři takovéto transformace (fyzikálně ekvivalentní obrazy).

1. Schrödingerův obraz

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle \quad \hat{A}, \hat{B}(t) \quad (12.0.3)$$

Operátor \hat{A} zůstává v čase konstantní, operátor $\hat{B}(t)$ se mění v čase podle svého funkčního předpisu.

Diferenciální rovnice (spolu s počáteční podmínkou) pro evoluční operátor $\hat{U}(t, t_0)$:

$$i\hbar \frac{\partial \hat{U}(t, t_0)}{\partial t} = \hat{H}(t) \hat{U}(t, t_0), \quad \hat{U}(t_0, t_0) = \hat{1}, \quad (12.0.4)$$

která má v případě, že celkový Hamiltonián \hat{H} nezávisí na čase, řešení

$$\hat{U}(t, t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t-t_0)}. \quad (12.0.5)$$

Z evoluční rovnice pro evoluční operátor plyne rovnice pro stavový vektor (*časová Schrödingerova rovnice*)

$$i\hbar \frac{\partial |\psi(t)\rangle}{\partial t} = \hat{H}(t) |\psi(t)\rangle. \quad (12.0.6)$$

2. Heisenbergův obraz

$$|\psi^H(t; t_1)\rangle = \hat{U}^\dagger(t, t_1) |\psi(t)\rangle = |\psi(t_1)\rangle = \text{const}, \quad (12.0.7a)$$

$$\hat{A}^H(t; t_1) = \hat{U}^\dagger(t, t_1) \hat{A} \hat{U}(t, t_1), \quad (12.0.7b)$$

$$\hat{B}^H(t; t_1) = \hat{U}^\dagger(t, t_1) \hat{B}(t) \hat{U}(t, t_1). \quad (12.0.7c)$$

(t_1 je vnější parametr). Stavový vektor $|\psi\rangle$ se s časem nemění, veškerý časový vývoj je zahrnut v časové závislosti operátorů.

Diferenciální rovnice pro stavový vektor a pro operátory:

$$\frac{\partial |\psi^H(t; t_1)\rangle}{\partial t} = 0 \quad |\psi^H(t_1; t_1)\rangle = |\psi(t_1)\rangle \quad (12.0.8a)$$

$$\frac{\partial \hat{A}^H(t; t_1)}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar} [\hat{A}^H(t; t_1), \hat{H}^H(t)] \quad \hat{A}^H(t_1; t_1) = \hat{A} \quad (12.0.8b)$$

$$\frac{\partial \hat{B}^H(t; t_1)}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar} [\hat{A}^H(t; t_1), \hat{H}^H(t)] + \frac{\partial \hat{B}^H(t)}{\partial t} \quad \hat{B}^H(t_1; t_1) = \hat{B}(t_1), \quad (12.0.8c)$$

kde

$$\frac{\partial^H \hat{\mathbf{B}}(t)}{\partial t} \equiv \hat{\mathbf{U}}^\dagger(t, t_1) \frac{\partial \hat{\mathbf{B}}(t)}{\partial t} \hat{\mathbf{U}}(t, t_1). \quad (12.0.9)$$

Pokud je systém v časově neproměnném vnějším poli, tj. $[\hat{\mathbf{H}}, \hat{\mathbf{U}}(t; t_1)] = 0$, pak

$$\hat{\mathbf{H}}^H(t; t_1) = \hat{\mathbf{U}}^\dagger(t, t_1) \hat{\mathbf{H}} \hat{\mathbf{U}}(t, t_1) = \hat{\mathbf{H}}. \quad (12.0.10)$$

3. Diracův (interakční) obraz

$$|\psi^D(t; t_1)\rangle = \hat{\mathbf{U}}_0^\dagger(t; t_1) |\psi(t)\rangle \quad (12.0.11a)$$

$$\hat{\mathbf{A}}^D(t; t_1) = \hat{\mathbf{U}}_0^\dagger(t; t_1) \hat{\mathbf{A}} \hat{\mathbf{U}}_0(t; t_1) \quad (12.0.11b)$$

$$\hat{\mathbf{B}}^D(t; t_1) = \hat{\mathbf{U}}_0^\dagger(t; t_1) \hat{\mathbf{B}}(t) \hat{\mathbf{U}}_0(t; t_1) \quad (12.0.11c)$$

Zde

$$\hat{\mathbf{U}}_0(t; t_1) = e^{-\frac{i}{\hbar} H_0(t-t_1)} \quad (12.0.12)$$

je evoluční operátor Hamiltoniánu $\hat{\mathbf{H}}_0$, tj. řešení diferenciální rovnice

$$i\hbar \frac{\partial \hat{\mathbf{U}}_0(t; t_1)}{\partial t} = \hat{\mathbf{H}}_0 \hat{\mathbf{U}}_0(t; t_1) \quad \hat{\mathbf{U}}_0(t_1; t_1) = \hat{\mathbf{1}}. \quad (12.0.13)$$

Bez újmy na obecnosti lze volit čas t_1 stejný jako v případě obrazu Heisenbergova.

Diferenciální rovnice pro stavový vektor a pro operátory znějí:³⁹

$$i\hbar \frac{\partial |\psi^D(t; t_1)\rangle}{\partial t} = \hat{\mathbf{H}}_I^D(t; t_1) |\psi^D(t; t_1)\rangle \quad |\psi^D(t_1; t_1)\rangle = |\psi(t_1)\rangle \quad (12.0.15a)$$

$$\frac{\partial \hat{\mathbf{A}}^D(t; t_1)}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar} [\hat{\mathbf{A}}^D(t; t_1), \hat{\mathbf{H}}_I^D(t; t_1)] \quad \hat{\mathbf{A}}^D(t_1; t_1) = \hat{\mathbf{A}} \quad (12.0.15b)$$

$$\frac{\partial \hat{\mathbf{B}}^D(t; t_1)}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar} [\hat{\mathbf{B}}^D(t; t_1), \hat{\mathbf{H}}_I^D(t; t_1)] + \frac{\partial^D \hat{\mathbf{B}}(t)}{\partial t} \quad \hat{\mathbf{B}}^D(t_1; t_1) = \hat{\mathbf{B}}(t_1), \quad (12.0.15c)$$

kde (podobně jako u obrazu Heisenbergova)

$$\frac{\partial^D \hat{\mathbf{B}}(t)}{\partial t} \equiv \hat{\mathbf{U}}_0^\dagger(t, t_1) \frac{\partial \hat{\mathbf{B}}(t)}{\partial t} \hat{\mathbf{U}}_0(t, t_1). \quad (12.0.16)$$

Řešení první rovnice, která se v literatuře nazývá *Schwingerova-Tomonagova* a je analogií Schrödingerovy rovnice, lze psát ve tvaru

$$|\psi^D(t; t_1)\rangle = \hat{\mathbf{S}}(t, t_0; t_1) |\psi^D(t_0; t_1)\rangle, \quad (12.0.17)$$

kde evoluční operátor v Diracově obraze

$$\hat{\mathbf{S}}(t, t_0; t_1) = \hat{\mathbf{U}}_0^\dagger(t, t_1) \hat{\mathbf{U}}(t, t_0) \hat{\mathbf{U}}_0(t_0, t_1) \quad (12.0.18)$$

je řešením diferenciální rovnice

$$i\hbar \frac{\partial \hat{\mathbf{S}}(t, t_0; t_1)}{\partial t} = \hat{\mathbf{H}}_I^D(t; t_1) \hat{\mathbf{S}}(t, t_0; t_1) \quad \hat{\mathbf{S}}(t_0, t_0; t_1) = \hat{\mathbf{1}}. \quad (12.0.19)$$

³⁹Ve shodě s definicí operátoru v Diracově obraze je

$$\hat{\mathbf{H}}_I^D(t; t_1) = \hat{\mathbf{U}}_0^\dagger(t; t_1) \hat{\mathbf{H}}_I(t) \hat{\mathbf{U}}_0(t; t_1). \quad (12.0.14)$$

V Heisenbergově i Diracově obraze se objevuje vnější parametr t_1 , který udává čas, ve kterém se operátory i stavové vektory všech tří uvedených obrazů rovnají. Od této chvíle budeme volit $t_1 = 0$ a nebudeme tento parametr ve vzorcích explicitně vypisovat.

Pokud \hat{H}_0 představuje volný Hamiltonián, pak se zavádějí ještě *Møllerovy operátory*

$$\Omega^{(\pm)} = \lim_{t_0 \rightarrow \mp\infty} \hat{S}(0, t_0) \quad (12.0.20)$$

a operátor S -matice

$$\hat{S} = \lim_{\substack{t \rightarrow +\infty \\ t_0 \rightarrow -\infty}} \hat{S}(t, t_0). \quad (12.0.21)$$

Řešení rovnice (12.0.19) lze hledat ve tvaru integrální rovnice, kterou lze vyjádřit ve formě řady⁴⁰

$$\begin{aligned} \hat{S}(t, t_0) &= \hat{1} - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \hat{H}_I^D(t_1) \hat{S}(t_1, t_0) dt_1 = \\ &= \hat{1} - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \hat{H}_I^D(t_1) \left\{ \hat{1} - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^{t_1} \hat{H}_I^D(t_2) \hat{S}(t_2, t_0) dt_2 \right\} dt_1 = \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \hat{S}^{(n)}(t, t_0), \end{aligned} \quad (12.0.22)$$

kde

$$\hat{S}^{(0)} = \hat{1} \quad (12.0.23a)$$

$$\hat{S}^{(1)} = -\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \hat{H}_I^D(t_1) dt_1 \quad (12.0.23b)$$

\vdots

$$\hat{S}^{(n)} = \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^n \int_{t_0}^t \hat{H}_I^D(t_1) \int_{t_0}^{t_1} \hat{H}_I^D(t_2) \cdots \int_{t_0}^{t_{n-1}} \hat{H}_I^D(t_n) dt_n \cdots dt_2 dt_1 \quad (12.0.23c)$$

Rozvoj (12.0.22) lze formálně sečíst. Jelikož však Diracovy obrazy Hamiltoniánu v různých časech mezi sebou navzájem nekomutují, $[\hat{H}_I^D(t_j), \hat{H}_I^D(t_k)] \neq 0$ pro $t_j \neq t_k$, musíme užít T-součin, definovaný následujícím způsobem: Nechť operátory $\hat{A}_j(t)$ ve stejném čase komutují, tj. nechť $[\hat{A}_j(t), \hat{A}_k(t)] = 0$. Pak

$$T(\hat{A}_N(t_N) \cdots \hat{A}_1(t_1)) \equiv \hat{A}_{i_N}(t_{i_N}) \cdots \hat{A}_{i_1}(t_{i_1}) \quad t_{i_N} \geq t_{i_{N-1}} \geq \cdots \geq t_{i_1} \quad (12.0.24)$$

Díky T-součinu lze řadu formálně napsat jako exponenciálu

$$\hat{S}(t, t_0) = T \exp \left(-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \hat{H}_I^D(t') dt' \right). \quad (12.0.25)$$

Nestacionární poruchová metoda

Stejně jako u stacionární poruchové teorie se i v případě časově závislých Hamiltoniánů $\hat{H}(t)$ předpokládá, že spektrum \hat{H}_0 je známé:

$$\hat{H}_0 |\phi_m\rangle = E_m^{(0)} |\phi_m\rangle \quad (12.0.26a)$$

$$\langle \phi_m | \phi_n \rangle = \delta_{mn} \quad (12.0.26b)$$

$$\sum_m |\phi_m\rangle \langle \phi_m| = \hat{1}. \quad (12.0.26c)$$

⁴⁰Dysonova řada.

Maticové elementy rozvoje evolučního operátoru v Diracově obraze (12.0.22) v této bázi označíme jako

$$S_{fi}^{(n)}(t, t_0) \equiv \langle \phi_f | \hat{S}^{(n)}(t, t_0) | \phi_i \rangle \quad (12.0.27)$$

a pro jednotlivé členy (12.0.23) pak platí

$$\begin{aligned} S_{fi}^{(0)}(t, t_0) &= \delta_{fi} \\ S_{fi}^{(1)}(t, t_0) &= -\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t H_{Ifi}(t_1) e^{i\omega_{fi}t_1} dt_1 \\ S_{fi}^{(2)}(t, t_0) &= \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \sum_m \int_{t_0}^t \int_{t_0}^{t_1} H_{Ifm}(t_1) e^{i\omega_{fm}t_1} H_{Imi}(t_2) e^{i\omega_{mi}t_2} dt_1 dt_2 \end{aligned} \quad (12.0.28)$$

kde jsme zavedli⁴¹

$$H_{Ifi}(t) \equiv \langle \phi_f | \hat{H}_I(t) | \phi_i \rangle \quad \omega_{fi} \equiv \frac{1}{\hbar} (E_f^{(0)} - E_i^{(0)}) \quad (12.0.29)$$

Pravděpodobnost přechodu z počátečního stavu $|\phi_i\rangle$ připraveného v čase t_0 do koncového stavu $|\phi_f\rangle$ v čase t je

$$\begin{aligned} \mathcal{P}_{i \rightarrow f}(t_0 \rightarrow t) &\equiv \left| \langle \phi_f(t) | \hat{U}(t, t_0) | \phi_i(t_0) \rangle \right|^2 \\ &= \left| \langle \phi_f^D | \hat{S}(t, t_0) | \phi_i^D \rangle \right|^2 \end{aligned} \quad (12.0.30)$$

což v poruchové teorii dává

$$\mathcal{P}_{i \rightarrow f}(t_0 \rightarrow t) = \left| S_{fi}^{(0)}(t, t_0) + S_{fi}^{(1)}(t, t_0) + S_{fi}^{(2)}(t, t_0) + \dots \right|^2. \quad (12.0.31)$$

Pro časově neproměnnou poruchu zapnutou v čase t_0 dostaneme do 1. řádu poruchové teorie

$$\mathcal{P}_{i \rightarrow f}(t_0 \rightarrow t) = \frac{2\pi}{\hbar} |H_{Ifi}|^2 \delta_{\Delta t}(\omega_{fi}) \Delta t \quad (12.0.32)$$

kde $\Delta t = t - t_0$ a

$$\delta_{\Delta t}(\omega_{fi}) \equiv \frac{1}{\pi} \frac{\sin^2 \frac{\omega_{fi} \Delta t}{2}}{\frac{\omega_{fi}^2 \Delta t}{2}} \xrightarrow{\Delta t \rightarrow \infty} \delta(\omega_{kj}) \quad (12.0.33)$$

je funkce, která má v okolí nuly ostré maximum pološířky $\approx 2\pi/\Delta t$ a výšky $\Delta t/2\pi$. Za dobu Δt tedy dojde k přechodům prakticky pouze v oblasti tohoto maxima, tj.

$$\omega_{fi} \gtrsim \frac{2\pi}{\Delta t} \quad (12.0.34)$$

a označíme-li $\Delta E^{(0)} \equiv |E_f^{(0)} - E_i^{(0)}|$, dostaneme

$$\Delta E^{(0)} \Delta t \gtrsim 2\pi\hbar \quad (12.0.35)$$

Tento vztah se nazývá *relace neurčitosti mezi časem a energií*.

Pokud lze na okolí $E_i^{(0)}$ pohlížet jako na kontinuum hladin (jedná se o buď přechod do spojitě části spektra, nebo je v okolí $E_i^{(0)}$ velké množství diskrétních hladin), (12.0.32) přejde na *Fermiho zlaté pravidlo*

$$w_{i \rightarrow F}(t_0 \rightarrow t) \equiv \frac{\mathcal{P}_{i \rightarrow F}(t_0 \rightarrow t)}{\Delta t} = \frac{2\pi}{\hbar} |H_{Ifi}|^2 \rho_f(E) \Big|_{E \approx E_i^{(0)}} \quad (12.0.36)$$

⁴¹Občas budeme používat zjednodušené značení $H_{Ifi}(t) = \langle f | \hat{H}_I(t) | i \rangle$.

což je rychlost přechodu z počátečního stavu i do celého jeho okolí $f \in F$, na kterém je $|H_{Ifi}|^2$ přibližně konstantní.

Pro **harmonickou poruchu** o frekvenci ω

$$\hat{H}_I = \underbrace{\hat{h}^{(+)} e^{i\omega t}}_{\text{emise}} + \underbrace{\hat{h}^{(-)} e^{-i\omega t}}_{\text{absorpce}} \quad (12.0.37)$$

dostaneme užitím podobného postupu jako v případě konstantní poruchy vztah

$$\boxed{\omega_{fi} \simeq \pm\omega, \quad \text{tj. } E_f^{(0)} \simeq E_i^{(0)} \pm \hbar\omega} \quad (12.0.38)$$

platící za předpokladu, že porucha je zapnuta po dostatečně dlouhý čas.

Fermiho zlaté pravidlo v případě harmonické poruchy zní

$$\boxed{\begin{aligned} w_{i \rightarrow F}(t_0 \rightarrow t) &= \frac{2\pi}{\hbar} \left| h_{fi}^{(+)} \right|^2 \rho_f(E) \Big|_{E \simeq E_i^{(0)} - \hbar\omega} \quad (\text{stimulovaná emise}), \\ &= \frac{2\pi}{\hbar} \left| h_{fi}^{(-)} \right|^2 \rho_f(E) \Big|_{E \simeq E_i^{(0)} + \hbar\omega} \quad (\text{stimulovaná absorpce}). \end{aligned}} \quad (12.0.39)$$

Pokud máme periodickou poruchu, která není harmonická, můžeme ji pomocí Fourierovy transformace na periodickou rozložit a počítat pravděpodobnost přechodu pro každou složku zvlášť.

Díky rovnosti $\langle i | h^{(+)} | f \rangle = \langle f | h^{(-)} | i \rangle$, platí *princip detailní rovnováhy*, který se dá slovně vyjádřit jako

$$\frac{\text{rychlost emise } i \rightarrow [f]}{\text{ hustota kvantových stavů } [f]} = \frac{\text{ rychlost absorpce } f \rightarrow [i]}{\text{ hustota kvantových stavů } [i]}. \quad (12.0.40)$$

Poznámka: Diferenciální rovnici (12.0.19) můžeme také zkoušet v bázi $|\phi_m\rangle$ řešit přímo. Označíme-li

$$S_{fi}(t, t_0) \equiv \langle \phi_f | \hat{S}(t, t_0) | \phi_i \rangle, \quad (12.0.41)$$

pak dostaneme

$$i\hbar \frac{\partial S_{fi}(t, t_0)}{\partial t} = \sum_m \hat{H}_{Ifm}(t) e^{i\omega_{fm}t} S_{mi}(t, t_0) \quad S_{fi}(t_0, t_0) = \delta_{fi} \quad (12.0.42)$$

což je soustava vázaných obyčejných diferenciálních rovnic 1. řádu. Soustavu lze explicitně vyřešit například pro dvouhladinový systém, viz příklad ??.

12.1 Nabitý harmonický oscilátor

Jednorozměrný harmonický oscilátor s nábojem q , popsáný Hamiltoniánem

$$\hat{H}_0 = \frac{1}{2M} \hat{p}^2 + \frac{1}{2} M \Omega^2 \hat{x}^2, \quad (12.1.1)$$

vložíme do homogenního časově proměnného elektrického pole s intenzitou

$$E(t) = \frac{A}{\tau\sqrt{\pi}} e^{-(\frac{t}{\tau})^2} \quad (12.1.2)$$

(A, τ jsou reálné parametry).

1. Jak vypadá Hamiltonián interakce oscilátoru s elektrickým polem?
2. Určete hybnost, která se klasicky přeneseme mezi časy $t_i \rightarrow -\infty$ a $t_f \rightarrow \infty$.
3. Spočítejte pravděpodobnost přechodu ze základního stavu v čase $t_i \rightarrow -\infty$ do prvního excitovaného stavu v čase $t_f \rightarrow \infty$ v rámci 1. řádu nestacionární poruchové teorie.

Řešení:

1. Zadaná intenzita elektrického pole odpovídá potenciálu

$$V(x, t) = -qE(t)x, \quad (12.1.3)$$

takže operátor časově závislé opravy k Hamiltoniánu \hat{H}_0 je

$$\hat{H}_I(t) = -qE(t)\hat{x}. \quad (12.1.4)$$

2. Přenesená hybnost je dána časovým integrálem elektrické síly

$$P = \int_{t_i}^{t_f} F(t) dt = \int_{-\infty}^{\infty} \left[-\frac{\partial V(x, t)}{\partial x} \right] dt = \frac{qA}{\tau\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\left(\frac{t}{\tau}\right)^2} dt = qA. \quad (12.1.5)$$

3. Příslušné elementy S -matice jsou podle (12.0.28)

$$S_{10}^{(0)} = 0, \quad (12.1.6a)$$

$$\begin{aligned} S_{10}^{(1)} &= -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \langle 1 | [-qE(t)\hat{x}] | 0 \rangle e^{i\omega_{10}t_1} dt_1 = \left| \hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2M\Omega}} (\hat{a}^\dagger + \hat{a}) \right| \\ &= \frac{iqA}{\sqrt{2\pi\hbar M\Omega}} \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\left(\frac{t}{\tau}\right)^2 + i\Omega t} \frac{dt}{\tau}}_{\sqrt{\pi} e^{-\left(\frac{\Omega\tau}{2}\right)^2}} = \frac{iqA}{\sqrt{2\hbar M\Omega}} e^{-\left(\frac{\Omega\tau}{2}\right)^2}. \end{aligned} \quad (12.1.6b)$$

Pravděpodobnost přechodu je tedy do prvního řádu poruchové teorie rovna

$$\mathcal{P}_{0 \rightarrow 1} = |S_{10}^{(0)} + S_{11}^{(1)}|^2 = \frac{q^2 A^2}{2\hbar M\Omega} e^{-\frac{\Omega^2 \tau^2}{2}} = \frac{P^2}{2\hbar M\Omega} e^{-\frac{\Omega^2 \tau^2}{2}}. \quad (12.1.7)$$

Poznámka: Uvedená porucha v prvním řádu poruchové teorie způsobí přechod nanejvýš na sousední energetickou hladinu harmonického oscilátoru.

12.2 Vodík v elektrickém poli

Atom vodíku v základním stavu vložíme mezi desky kondenzátoru. V čase $t = 0$ přivedeme na desky kondenzátoru napětí tak, že intenzita elektrického pole v čase $t > 0$ mezi deskami bude

$$E(t) = E_0 e^{-\frac{t}{\tau}}. \quad (12.2.1)$$

Za předpokladu, že elektrické pole lze brát jako malou poruchu, spočítejte pravděpodobnost nalezení vodíku v prvním excitovaném stavu.

Řešení:

Mezi deskami kondenzátoru se vytvoří homogenní elektrické pole. V analogii s předchozím příkladem je tedy Hamiltonián časově závislé poruchy

$$\hat{H}_I(t) = -eE(t)\hat{z}, \quad (12.2.2)$$

přičemž vzhledem k tomu, že neporušený atom vodíku je ve stavu $1s$ ($n = 1, l = 0, m = 0$) se sféricky symetrickou vlnovou funkcí

$$\psi_{100}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} e^{-\frac{r}{a_0}}, \quad (12.2.3)$$

Lze souřadnou soustavu zvolit libovolně. Zvolme ji tak, že osa z bude mířit ve směru homogenního pole.

První excitovaný stav atomu vodíku je buď stav $2s$ ($n = 2, l = 0, m = 0$), jehož vlnová funkce má tvar

$$\psi_{200}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{2\sqrt{2\pi}a_0^3} \left(1 - \frac{r}{2a_0}\right) e^{-\frac{r}{2a_0}}, \quad (12.2.4)$$

nebo $2p$ ($n = 2, l = 1, m$) s vlnovou funkcí

$$\psi_{21m}(r, \theta, \phi) = R_{21}(r) Y_m^{(1)}(\theta, \phi), \quad (12.2.5a)$$

$$R_{21}(r) = \frac{1}{2\sqrt{6}a_0^3} \frac{r}{a_0} e^{-\frac{r}{2a_0}}, \quad (12.2.5b)$$

$$Y_{\pm 1}^{(1)}(\theta, \phi) = \mp \frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{2\pi}} \sin \theta e^{\pm i\phi}, \quad (12.2.5c)$$

$$Y_0^{(1)}(\theta, \phi) = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{\pi}} \cos \theta, \quad (12.2.5d)$$

kde $R_{21}(r)$ je radiální část a $Y_m^{(1)}(\theta, \phi)$ úhlová část daná kulovou funkcí. Konstanta a_0 je Bohrovův poloměr:

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{\gamma M}, \quad \gamma = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}. \quad (12.2.6)$$

Elementy S -matice jsou podle (12.0.28)

$$S_{2lm,100}^{(0)}(t) = 0, \quad (12.2.7a)$$

$$S_{2lm,100}^{(1)}(t) = -\frac{i}{\hbar} \int_0^t \langle 2, l, m | [-qE(t)\hat{z}] | 1, 0, 0 \rangle e^{i\omega_{21}t_1} dt_1, \quad (12.2.7b)$$

kde

$$\omega_{21} = \frac{E_2^{(0)} - E_1^{(0)}}{\hbar} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{2\hbar a_0} \left(-\frac{1}{4} + 1\right) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{3e^2}{8\hbar a_0}. \quad (12.2.8)$$

Maticové elementy v $S_{21m,100}$ jsou

$$\begin{aligned} \langle 2, 0, 0 | \hat{z} | 1, 0, 0 \rangle &= \frac{1}{2\sqrt{2\pi}a_0^3} \int_0^\infty r^2 dr \int_0^\pi \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} d\phi \left(1 - \frac{r}{2a_0}\right) e^{-\frac{3r}{2a_0}} r \cos \theta = \\ &= \frac{1}{2\sqrt{2\pi}a_0^3} \int_0^\infty r^3 \left(1 - \frac{r}{2a_0}\right) e^{-\frac{3r}{2a_0}} dr \underbrace{\int_0^\pi \sin \theta \cos \theta d\theta \int_0^{2\pi} d\phi}_{= -\frac{1}{2} [\cos^2 x]_0^\pi = 0} = 0, \end{aligned} \quad (12.2.9a)$$

$$\langle 2, 1, \pm 1 | \hat{z} | 1, 0, 0 \rangle = \pm \frac{1}{8\pi a_0^4} \int_0^\infty r^4 e^{-\frac{3r}{2a_0}} dr \underbrace{\int_0^\pi \sin^2 \theta \cos \theta d\theta \int_0^{2\pi} e^{\mp i\phi} d\phi}_{= \frac{1}{3} [\sin^3 x]_0^\pi = 0} = 0, \quad (12.2.9b)$$

$$\langle 2, 1, 0 | \hat{z} | 1, 0, 0 \rangle = \frac{1}{4\pi a_0^4 \sqrt{2}} \underbrace{\int_0^\infty r^4 e^{-\frac{3r}{2a_0}} dr}_{= (\frac{4}{3})^4 a_0^5} \underbrace{\int_0^\pi \sin \theta \cos^2 \theta d\theta}_{= -\frac{1}{3} [\cos^3 x]_0^\pi = \frac{2}{3}} \underbrace{\int_0^{2\pi} d\phi}_{= 2\pi} = \frac{4^4}{3^5 \sqrt{2}} a_0. \quad (12.2.9c)$$

V rámci 1. řádu nestacionární poruchové teorie je tedy možný pouze přechod do $2p$ stavu s projekcí orbitálního momentu hybnosti $m = 0$. Odpovídající element S -matice vychází z (12.2.7b)

$$\begin{aligned} S_{210,100}^{(1)}(t) &= -\frac{i}{\hbar} \frac{4^4 e E_0 a_0}{3^5 \sqrt{2}} \int_0^t e^{-\frac{t_1}{\tau} + i\omega_{21}t_1} dt_1 \\ &= -\frac{i}{\hbar} \frac{4^4 e E_0 a_0}{3^5 \sqrt{2}} \left[\frac{\tau}{i\omega_{21}\tau - 1} e^{-\frac{t_1}{\tau} + i\omega_{21}t_1} \right]_0^t \\ &= -\frac{i}{\hbar} \frac{4^4 e E_0 a_0}{3^5 \sqrt{2}} \frac{\tau}{i\omega_{21}\tau - 1} \left(e^{-\frac{t}{\tau} + i\omega_{21}t} - 1 \right). \end{aligned} \quad (12.2.10)$$

Hledaná pravděpodobnost přechodu je pak

$$\mathcal{P}_{100 \rightarrow 210}(t) = |S_{210,100}(t)|^2 = \frac{2^{15}}{3^{10}} \left(\frac{eE_0 a_0 \tau}{\hbar} \right)^2 \frac{1 - 2e^{-\frac{t}{\tau}} \cos \omega_{21} t + e^{-\frac{2t}{\tau}}}{\omega_{21}^2 \tau^2 + 1}. \quad (12.2.11)$$

V limitě velmi dlouhých časů $t \gg \tau$ vychází pravděpodobnost přechodu jako

$$\mathcal{P}_{100 \rightarrow 210}(t) \approx \frac{2^{15}}{3^{10}} \left(\frac{eE_0 a_0}{\hbar} \right)^2 \frac{\tau^2}{\omega_{21}^2 \tau^2 + 1}. \quad (12.2.12)$$

12.3 Fotoelektrický jev — plné řešení

Atom vodíku popsany Hamiltoniánem

$$\hat{H}_0 = \frac{1}{2m} \hat{\mathbf{p}}^2 - \frac{\gamma}{\hat{r}}, \quad (12.3.1)$$

je vystaven elektromagnetickému vlnění s vektorovým potenciálem

$$\mathbf{A}(\hat{\mathbf{r}}, t) = 2A_0 \boldsymbol{\epsilon} \cos(\boldsymbol{\kappa} \cdot \hat{\mathbf{r}} - \omega t) \quad (12.3.2)$$

(jednotkový vektor $\boldsymbol{\epsilon}$ určuje polarizaci vln, $\boldsymbol{\kappa} = n\boldsymbol{\omega}/c$ je vlnový vektor určující směr postupu vlny) a skalárním potenciálem

$$\Phi(\hat{\mathbf{r}}, t) = 0. \quad (12.3.3)$$

1. Nalezněte interakční Hamiltonián.
2. Nalezněte hustotu pravděpodobnosti vztaženou na jednotku času (rychlost přechodu) jevu, kdy kdy atom vodíku nacházející se v základním stavu emituje elektron do oblasti prostorového úhlu $(\Omega, \Omega + d\Omega)$ (fotoelektrický jev).
3. Určete diferenciální účinný průřez výše uvedeného jevu.

Řešení:

1. Interakční Hamiltonián

Hamiltonián atomu vodíku, popisující interakci jeho elektronu s elektromagnetickým polem, je

$$\hat{H}_{(H \leftrightarrow EM)} = \frac{1}{2m} \left(\hat{\mathbf{p}}^2 - e\mathbf{A}(\hat{\mathbf{r}}, t) \right)^2 + e\Phi(\hat{\mathbf{r}}) - \frac{\gamma}{\hat{r}}. \quad (12.3.4)$$

Ve speciální (Coulombické) kalibraci

$$\nabla \cdot \mathbf{A} = 0, \quad \Phi = 0. \quad (12.3.5)$$

lze Hamiltonián (12.3.4) přepsat do tvaru

$$\begin{aligned} \hat{H}_{(H \leftrightarrow EM)}(t) &= \hat{H}_0 - \frac{e}{m} \mathbf{A}(\hat{\mathbf{r}}, t) \cdot \hat{\mathbf{p}} + \frac{e^2}{m} \mathbf{A}(\hat{\mathbf{r}}, t) \cdot \mathbf{A}(\hat{\mathbf{r}}, t) \approx \\ &\approx \hat{H}_0 - \frac{e}{m} \mathbf{A}(\hat{\mathbf{r}}, t) \cdot \hat{\mathbf{p}}, \end{aligned} \quad (12.3.6)$$

kde se (jako obvykle) zanedbal člen úměrný $|\mathbf{A}(\hat{\mathbf{r}})|^2$. Interakční část Hamiltoniánu $\hat{H}_I(t) = -\frac{e}{m} \mathbf{A}(\hat{\mathbf{r}}, t) \cdot \hat{\mathbf{p}}$ po dosazení vektorového potenciálu (12.3.2) má tvar

$$\hat{H}_I(t) = -\frac{eA_0}{m} \left[e^{i(\boldsymbol{\kappa} \cdot \hat{\mathbf{r}} - \omega t)} + e^{-i(\boldsymbol{\kappa} \cdot \hat{\mathbf{r}} - \omega t)} \right] \boldsymbol{\epsilon} \cdot \hat{\mathbf{p}}. \quad (12.3.7)$$

Nás bude zajímat excitace, stačí tedy brát pouze část

$$\hat{H}_I(t) = \hat{h} e^{-i\omega t}, \quad (12.3.8)$$

$$\hat{h} = -\frac{eA_0}{m} e^{i\boldsymbol{\kappa} \cdot \mathbf{r}} \boldsymbol{\epsilon} \cdot \hat{\mathbf{p}}. \quad (12.3.9)$$

2. Rychlost přechodu

Vlnová funkce základního stavu atomu vodíku je⁴²

$$\psi_i(\mathbf{r}) = R_{10}(r)Y_{00}(\theta, \phi) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} e^{-\frac{r}{a_0}}, \quad (12.3.10)$$

kde a_0 je Bohrov poloměr. Vlnová funkce konečného stavu volného elektronu je ovlivněna Coulombickým polem jádra. Toto pole je však rychle odstíněno látkou, která se v okolí jádra vyskytuje. Lze tedy uvažovat, že elektron je volný, a jeho vlnová funkce má tudíž tvar rovinné vlny

$$\psi_f(\mathbf{r}) \equiv \langle \mathbf{r} | \mathbf{k} \rangle = \frac{1}{\sqrt{(2\pi\hbar)^3}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}, \quad (12.3.11)$$

kde \mathbf{k} je vlnový vektor elektronu s energií E_e ,

$$E_e = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}. \quad (12.3.12)$$

Výpočet přechodu mezi spojitou a diskrétní částí spektra se zjednoduší tím, že budeme považovat elektron nikoliv za zcela volný, ale za uzavřený v krabici (nekonečně hluboké potenciálové jámě) o objemu V . Předpokládá se, že krabice je tak velká, že neovlivní příliš spektrum atomu vodíku (přesněji stačí, aby neovlivnila základní stav, se kterým počítáme). Nakonec se provede limita $V \rightarrow \infty$.

Vlnová funkce elektronu v krabici zní

$$\psi'_f(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}, \quad (12.3.13)$$

kde \mathbf{k} je důsledkem konečných rozměrů krabice kvantovaná veličina,

$$E_n = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}, \quad \mathbf{k} = \frac{2\pi}{L} \mathbf{n}, \quad L = \sqrt[3]{V}, \quad \mathbf{n} = (n_1, n_2, n_3). \quad (12.3.14)$$

Pokud je však objem V dostatečně velký, lze s \mathbf{k} nadále počítat jako se spojitou veličinou.

Při výpočtu hustoty hladin volného elektronu se vyjde ze vztahů (2.0.1) a (2.0.2). Objem energetické nadplochy fázového prostoru klasicky se pohybujícího volného elektronu v krabici je podle nich

$$\begin{aligned} \Omega_{\text{PS}}(E) &= \int_V d^3\mathbf{x} \int \delta\left(E - \frac{1}{2m} \mathbf{p}^2\right) d^3\mathbf{p} = \\ &= V \int_{\Omega} d\Omega \int_0^{\infty} \delta\left(E - \frac{1}{2m} p^2\right) p^2 dp. \end{aligned} \quad (12.3.15)$$

„Diferenciální“ Hustota hladin pro elektron letící do směru daného elementem prostorového úhlu $d\Omega$ je

$$\begin{aligned} \frac{d\rho(E)}{d\Omega} &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \frac{d\Omega_{\text{PS}}(E)}{d\Omega} = \\ &= \frac{V}{(2\pi\hbar)^3} \int_0^{\infty} \delta\left(E - \frac{1}{2m} p^2\right) p^2 dp = \\ &= \frac{V}{(2\pi\hbar)^3} \frac{2m}{2\sqrt{2mE}} \int_0^{\infty} \delta\left(p - \sqrt{2mE}\right) p^2 dp = \\ &= \frac{V}{(2\pi\hbar)^3} \frac{2m}{2\sqrt{2mE}} 2mE = \\ &= \frac{V}{(2\pi\hbar)^3} m\sqrt{2mE}, \end{aligned} \quad (12.3.16)$$

nebo v závislosti na veličině k

$$\frac{d\rho(k)}{d\Omega} = \frac{V}{(2\pi\hbar)^3} \hbar k m. \quad (12.3.17)$$

⁴²Jedná se o radiální i úhlovou část vlnové funkce, viz (10.2.14) a s ní související poznámka.

K výpočtu pravděpodobnosti, resp. rychlosti přechodu se využije Fermiho zlaté pravidlo (12.0.39). V něm se objevuje maticový element

$$\begin{aligned}
 h_{fi} &= \langle f | \hat{H} | i \rangle = \\
 &= -\frac{eA_0}{m} \int \psi_f'^*(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \boldsymbol{\epsilon} \cdot \mathbf{p} \psi_i(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} = \\
 &= \frac{i\hbar e A_0}{m\sqrt{\pi a_0^3 V}} \boldsymbol{\epsilon} \cdot \int e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{r}} \nabla e^{-\frac{r}{a_0}} d^3\mathbf{r} = \\
 &= -\frac{i\hbar e A_0}{ma_0\sqrt{\pi a_0^3 V}} \boldsymbol{\epsilon} \cdot \int e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \frac{\mathbf{r}}{r} e^{-\frac{r}{a_0}} d^3\mathbf{r} = \\
 &= -\frac{i\hbar e A_0}{ma_0\sqrt{\pi a_0^3 V}} \boldsymbol{\epsilon} \cdot \mathbf{I}(\mathbf{q}), \tag{12.3.18}
 \end{aligned}$$

kde $\mathbf{q} \equiv \mathbf{k} - \mathbf{k}'$.

Integrál $\mathbf{I}(\mathbf{q})$ se vypočítá následující úvahou. Výsledkem integrace musí být vektor. Jediný vektor, na kterém integrand integrálu závisí, je \mathbf{q} . To znamená, že integrál musí být možné vyjádřit jako

$$\mathbf{I}(\mathbf{q}) = \mathbf{q} I(\mathbf{q}), \tag{12.3.19}$$

kde $I(\mathbf{q})$ je již skalární funkce. Počítejme tedy počítat výraz

$$\begin{aligned}
 q^2 I(\mathbf{q}) &= \int e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \frac{\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}{r} e^{-\frac{r}{a_0}} d^3\mathbf{r} = \\
 &= \left| \begin{array}{l} \text{Sférické souřadnice } (r, \theta, \phi) \\ \text{osa } z \text{ paralelní s vektorem } \mathbf{q} \end{array} \right| = \\
 &= \int_0^\infty r e^{-\frac{r}{a_0}} dr \int_0^\pi e^{iqr \cos \theta} qr \cos \theta \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} d\phi = \\
 &= \left| u = \cos \theta \quad du = -\sin \theta d\theta \right| = \\
 &= 2\pi q \int_0^\infty r e^{-\frac{r}{a_0}} dr \int_{-1}^1 e^{iqr u} u du \stackrel{\text{Per partes}}{=} \\
 &= 2\pi q \int_0^\infty r e^{-\frac{r}{a_0}} dr \left\{ \left[\frac{1}{iqr} e^{iqr u} u \right]_{-1}^1 - \frac{1}{iqr} \int_{-1}^1 e^{iqr u} du \right\} = \\
 &= -2\pi q i \int_0^\infty r e^{-\frac{r}{a_0}} dr \left\{ \frac{1}{qr} (e^{iqr} + e^{-iqr}) + \frac{i}{(qr)^2} (e^{iqr} - e^{-iqr}) \right\} = \\
 &= -2\pi i \int_0^\infty r \left\{ e^{-r(\frac{1}{a_0} + iq)} + e^{-r(\frac{1}{a_0} - iq)} \right\} dr - \\
 &\quad - \frac{2\pi}{q} \int_0^\infty \left\{ e^{-r(\frac{1}{a_0} + iq)} - e^{-r(\frac{1}{a_0} - iq)} \right\} dr = \\
 &= -2\pi i J_1 - \frac{2\pi}{q} J_2. \tag{12.3.20}
 \end{aligned}$$

Platí

$$\int_0^\infty e^{-\alpha r} dr = \frac{1}{\alpha}, \tag{12.3.21a}$$

$$\int_0^\infty r e^{-\alpha r} dr = \frac{1}{\alpha} \int_0^\infty e^{-\alpha r} dr = \frac{1}{\alpha^2} \tag{12.3.21b}$$

(pro $\alpha > 0$), takže

$$\begin{aligned} J_1 &= \frac{1}{\left(\frac{1}{a_0} + iq\right)^2} + \frac{1}{\left(\frac{1}{a_0} - iq\right)^2} = a_0^2 \frac{(1 - iq a_0)^2 + (1 + iq a_0)^2}{(1 + q^2 a_0^2)^2} = \\ &= 2a_0^2 \frac{1 - q^2 a_0^2}{(1 + q^2 a_0^2)^2}, \end{aligned} \quad (12.3.22)$$

$$\begin{aligned} J_2 &= \frac{1}{\frac{1}{a_0} + iq} - \frac{1}{\frac{1}{a_0} - iq} = a_0 \frac{1 - iq a_0 - 1 - iq a_0}{1 + q^2 a_0^2} = \\ &= -\frac{2iq a_0^2}{1 + q^2 a_0^2}, \end{aligned} \quad (12.3.23)$$

a po dosazení

$$\begin{aligned} q^2 I(q) &= -4\pi i a_0^2 \left[\frac{1 - a_0^2 q^2}{(1 + q^2 a_0^2)^2} - \frac{1}{1 + q^2 a_0^2} \right] = \\ &= -4\pi i a_0^2 \frac{1 - a_0^2 q^2 - 1 - a_0^2 q^2}{(1 + q^2 a_0^2)^2} = \\ &= \frac{8i\pi a_0^4 q^2}{(1 + q^2 a_0^2)^2}. \end{aligned} \quad (12.3.24)$$

Hledaný integrál má tedy tvar

$$I(q) = \frac{8i\pi a_0^4}{(1 + q^2 a_0^2)^2} q. \quad (12.3.25)$$

Maticový element je

$$\begin{aligned} h_{fi} &= \frac{i\hbar e A_0}{m a_0 \sqrt{\pi a_0^3 V}} \frac{8i\pi a_0^4}{(1 + q^2 a_0^2)^2} \boldsymbol{\epsilon} \cdot (\boldsymbol{\kappa} - \mathbf{k}) \\ &= -\frac{i\hbar e A_0}{m a_0 \sqrt{\pi a_0^3 V}} \frac{8i\pi a_0^4}{(1 + q^2 a_0^2)^2} \boldsymbol{\epsilon} \cdot \mathbf{k}, \end{aligned} \quad (12.3.26)$$

neboť $\boldsymbol{\epsilon} \cdot \boldsymbol{\kappa} = 0$, což plyne z vlastností Coulombické kalibrace.

Nyní již máme v rukou vše, co potřebujeme k použití Fermiho zlatého pravidla (12.0.39). Po dosazení do něj vychází

$$\begin{aligned} \frac{dw_{i \rightarrow f}}{d\Omega} &= \frac{2\pi}{\hbar} |h_{fi}|^2 \frac{d\rho}{d\Omega} = \\ &= \frac{2\pi}{\hbar} \left| \frac{i\hbar e A_0}{m a_0 \sqrt{\pi a_0^3 V}} \frac{8i\pi a_0^4}{(1 + q^2 a_0^2)^2} \boldsymbol{\epsilon} \cdot \mathbf{k} \right|^2 \frac{V}{(2\pi\hbar)^3} \hbar k m = \\ &= \frac{16}{\pi\hbar} \frac{(e A_0)^2}{m} \frac{(\boldsymbol{\epsilon} \cdot \mathbf{k})^2 k a_0^3}{(1 + q^2 a_0^2)^4} \end{aligned} \quad (12.3.27)$$

3. Účinný průřez

Účinný průřez procesu je definován jako počet procesů $i \rightarrow f$ za jednotku času dělenou celkovým tokem částic. V našem případě je to absorbovaná energie za jednotku času dělená tokem energie dopadajícího elektromagnetického záření.

Absorbovaná energie za jednotku času je dána součinem rychlosti přechodu (12.3.27) a energie, která se absorbuje a která je rovna $\hbar\omega$:

$$\mathcal{U}_{i \rightarrow f} = \hbar\omega \frac{dw_{i \rightarrow f}}{d\Omega} \quad (12.3.28)$$

Tok energie Φ je součin rychlosti přenosu energie c a střední hustoty energie

$$\langle w \rangle = \frac{\epsilon_0}{2} \left(\langle E^2 \rangle + c^2 \langle B^2 \rangle \right), \quad (12.3.29)$$

kde vektory elektrické intenzity a magnetické indukce jsou

$$\mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} = -2A_0\omega\boldsymbol{\epsilon} \sin(\boldsymbol{\kappa} \cdot \mathbf{r} - \omega t), \quad (12.3.30a)$$

$$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A} = -2A_0\boldsymbol{\epsilon} \times \boldsymbol{\kappa} \sin(\boldsymbol{\kappa} \cdot \mathbf{r} - \omega t), \quad (12.3.30b)$$

takže

$$\langle E^2 \rangle = 4|A_0|^2 \omega^2 \langle \sin^2(\boldsymbol{\kappa} \cdot \mathbf{r} - \omega t) \rangle = 2|A_0|^2 \omega^2, \quad (12.3.31a)$$

$$\langle B^2 \rangle = 2|A_0|^2 \kappa^2 = 2|A_0|^2 \frac{\omega^2}{c^2}. \quad (12.3.31b)$$

To dává

$$\langle w \rangle = 2\epsilon_0 |A_0|^2 \omega^2, \quad (12.3.32a)$$

$$\Phi = c \langle w \rangle = 2c\epsilon_0 |A_0|^2 \omega^2 \quad (12.3.32b)$$

a hledaný účinný průřez je po dosazení

$$\frac{d\sigma_{i \rightarrow f}}{d\Omega} = \frac{\mathcal{U}_{i \rightarrow f}}{\Phi} = \frac{\hbar\omega}{2c\epsilon_0\omega^2 |A_0|^2} \frac{dw_{i \rightarrow f}}{d\Omega} = \frac{32\gamma}{mc\omega} \frac{(\boldsymbol{\epsilon} \cdot \mathbf{k})^2 k a_0^3}{(1 + q^2 a_0^2)^4} = \frac{32\alpha\hbar}{m\omega} \frac{(\boldsymbol{\epsilon} \cdot \mathbf{k})^2 k a_0^3}{(1 + q^2 a_0^2)^4}, \quad (12.3.33)$$

kde $\alpha = \gamma/(\hbar c)$ je konstanta jemné struktury.

Zaved' me ještě speciální souřadnou soustavu tak, aby vektor polarizace $\boldsymbol{\epsilon}$ mířil do směru osy x a vlnový vektor dopadající vlny $\boldsymbol{\kappa}$ do směru osy z . Ve sférických souřadnicích pak bude

$$\boldsymbol{\epsilon} \cdot \mathbf{k} = k \sin \theta \cos \phi, \quad (12.3.34a)$$

$$q^2 = k^2 - 2\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\kappa} + \kappa^2 = k^2 - 2k \frac{\omega}{c} \cos \theta + \left(\frac{\omega}{c} \right)^2. \quad (12.3.34b)$$

Při výpočtu se potichu předpokládalo, že Coulombické pole neovlivní pohyb vyraženého elektronu a ten se tudíž pohybuje jako volný. To však platí pouze v případě, že $k \gg |E_0|$, kde E_0 je energie základního stavu atomu. Tuto aproximaci lze rozvést ještě dál. Energie, kterou získá vylétávající elektron, je díky tomuto přiblížení rovna přibližně energii dopadajících fotonů:

$$k = \frac{\sqrt{2mE_e}}{\hbar} = \sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}}. \quad (12.3.35)$$

Jelikož $\kappa = \omega/c$, platí

$$\frac{\kappa}{k} = k \frac{\kappa}{k^2} = \frac{\hbar k}{2mc} = \frac{p}{2mc} = \frac{v}{2c}, \quad (12.3.36)$$

a

$$q^2 \approx k^2 \left(1 - \frac{v}{c} \cos \theta \right), \quad (12.3.37)$$

kde v je rychlost vylétnuvšího elektronu. Tento výraz navíc pomůže zjednodušit jmenovatel diferenciálního účinného průřezu (12.3.33)

$$\begin{aligned} 1 + q^2 a_0^2 &\approx 1 + k^2 a_0^2 \left(1 - \frac{v}{c} \cos \theta \right) \approx \\ &\approx k^2 a_0^2 \left(1 - \frac{v}{c} \cos \theta \right). \end{aligned} \quad (12.3.38)$$

Diferenciální účinný průřez pak bude v této aproximaci

$$\frac{d\sigma_{i \rightarrow f}}{d\Omega} = \frac{32\alpha\hbar}{m\omega (ka_0)^5} \frac{\sin^2 \theta \cos^2 \phi}{\left(1 - \frac{v}{c} \cos \theta\right)^4}. \quad (12.3.39)$$

Tato funkce nabývá maxima pro $\phi = 0$, tj. v rovině polarizace dopadající elektromagnetické vlny, a pro θ dané rovnicí

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\theta} \frac{\sin^2 \theta}{\left(1 - \frac{v}{c} \cos \theta\right)^4} &= 0 \\ 2 \sin \theta \cos \theta \left(1 - \frac{v}{c} \cos \theta\right)^4 - 4 \frac{v}{c} \sin^2 \theta \sin \theta \left(1 - \frac{v}{c} \cos \theta\right)^3 &= 0 \\ \cos \theta - \frac{v}{c} \cos^2 \theta - 2 \frac{v}{c} \sin^2 \theta &= 0 \end{aligned} \quad (12.3.40)$$

tj.

$$\cos \theta = \frac{-1 \pm \sqrt{1 + 8 \left(\frac{v}{c}\right)^2}}{2 \frac{v}{c}} \approx \frac{c}{2v} \left[-1 \pm 1 \pm 4 \left(\frac{v}{c}\right)^2 \right] \approx \begin{cases} -\frac{c}{v} \\ 2 \frac{v}{c} \end{cases}. \quad (12.3.41)$$

První řešení nevyhovuje, neboť cosinus by musel být menší než -1, což pro reálné úhly θ nelze splnit. Maximální pravděpodobnost emise při fotoefektu tedy vychází do směru

$$\boxed{\theta = \frac{\pi}{2} - 2 \frac{v}{c}, \quad \phi = 0}. \quad (12.3.42)$$

Poznámka: Integrál (12.3.18) lze vypočítat také tak, že se operátor ∇ posouvá vlevo. Posunutí skrz člen $e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}$ lze provést přímo díky Coulombické kalibraci (směr šíření elektromagnetické vlny je kolmý na polarizaci). Posunutí skrz člen $e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}$ se provede pomocí integrace *per partes*: povrchový příspěvek je 0 a gradient po zapůsobení na tento člen dá pouze faktor $-i\mathbf{k}$, který je možné vytknout před integrál. Nakonec tedy stačí integrovat pouze

$$h_{fi} = -\frac{\hbar e A_0}{m c a_0 \sqrt{\pi a_0^3 V}} \boldsymbol{\epsilon} \cdot \mathbf{k} \int e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} e^{-\frac{r}{a_0}} d^3 \mathbf{r}, \quad (12.3.43)$$

což je vlastně Fourierova transformace vlnové funkce základního stavu atomu vodíku.

12.4 Fotoelektrický jev v dipólové aproximaci

Uvažujte stejný systém jako v předchozím příkladu 12.3

1. Nalezněte interakční Hamiltonián v dipólové (E1) aproximaci.
2. V této aproximaci spočítejte diferenciální rychlost přechodu a účinný průřez.
3. Určete, pro jakou energii vylétávajícího elektronu je rychlost přechodu (diferenciální účinný průřez) největší.
4. Srovnajte obecné řešení z předchozí úlohy a řešení v dipólové aproximaci.

Řešení:

1. *Interakční Hamiltonián v dipólové aproximaci*

Budeme aproximovat interakční Hamiltonián (12.3.7)

$$\hat{H}_I(t) = -\frac{e A_0}{m c} \left[e^{i(\mathbf{k} \cdot \hat{\mathbf{r}} - \omega t)} + e^{-i(\mathbf{k} \cdot \hat{\mathbf{r}} - \omega t)} \right] \boldsymbol{\epsilon} \cdot \hat{\mathbf{p}}. \quad (12.4.1)$$

Je-li vlnová délka vlny mnohem větší než rozměry atomu, z rozvoje exponenciály

$$e^{\pm i\mathbf{k} \cdot \hat{\mathbf{r}}} \approx 1 \pm i\mathbf{k} \cdot \hat{\mathbf{r}} + \dots \quad (12.4.2)$$

vezmeme jen první člen.

V 1. řádu nestacionární poruchové teorie se počítají amplitudy přechodu $\langle f | \hat{H}_I(t) | i \rangle$, kde $|i\rangle$ je počáteční stav a $|f\rangle$ koncový stav, přičemž oba jsou vlastní stavy neporušeného Hamiltoniánu \hat{H}_0 . Platí tedy

$$\begin{aligned} \langle f | \hat{H}_I(t) | i \rangle &= -\frac{eA_0}{m} \boldsymbol{\epsilon} \cdot \langle f | \hat{\mathbf{p}} | i \rangle (e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}) = \\ &= \left| \text{platí } [\hat{\mathbf{r}}, \hat{H}_0] = i\hbar \frac{\hat{\mathbf{p}}}{m} \right| = \\ &= -\frac{eA_0}{m} \boldsymbol{\epsilon} \cdot \left\langle f \left| \frac{m}{i\hbar} [\hat{\mathbf{r}}, \hat{H}_0] \right| i \right\rangle 2 \cos \omega t = \\ &= 2ieA_0 \frac{E_f^{(0)} - E_i^{(0)}}{\hbar} \boldsymbol{\epsilon} \cdot \langle f | \hat{\mathbf{r}} | i \rangle \cos \omega t = \\ &= \langle f | 2ieA_0 \omega_{fi} \cos \omega t \boldsymbol{\epsilon} \cdot \hat{\mathbf{r}} | i \rangle. \end{aligned} \quad (12.4.3)$$

Pro poruchu harmonicky závisující na čase s úhlovou frekvencí ω a pro dostatečně dlouhé časy platí podle (12.0.38)

$$\omega \simeq \pm \omega_{fi}, \quad (12.4.4)$$

takže

$$\hat{H}_I(t) = 2ieA_0\omega \boldsymbol{\epsilon} \cdot \hat{\mathbf{r}} \cos \omega t, \quad (12.4.5)$$

což se ještě přepíše pomocí intenzity elektrického pole

$$\mathbf{E}(t) = -\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} = 2A_0\omega \boldsymbol{\epsilon} \sin(\boldsymbol{\kappa} \cdot \mathbf{r} - \omega t) \approx -2E_0\boldsymbol{\epsilon} \sin \omega t \quad (12.4.6)$$

a vhodnou volbou fáze do tvaru

$$\hat{H}_I(t) = -\mathbf{E}(t) \cdot \hat{\mathbf{d}}, \quad (12.4.7)$$

kde $\hat{\mathbf{d}} = -e\hat{\mathbf{r}}$ je dipólový operátor. Takto zapsaný interační Hamiltonián pro harmonickou poruchu vyjadřuje interakci dipólu atomu vodíku s proměnným elektrickým polem. To objasňuje, proč se aproximace nazývá dipólová.

2. Rychlost přechodu

Kroky dalšího postupu jsou identické s předchozím příkladem — směřují k využití Fermiho zlatého pravidla (12.0.39).

Potřebný maticový element pro operátor $\hat{h} = eE_0\boldsymbol{\epsilon} \cdot \mathbf{r}$ je

$$\begin{aligned} h_{fi} &= \langle f | \hat{h} | i \rangle = \\ &= eE_0 \int \psi_f'^*(\mathbf{r}) \boldsymbol{\epsilon} \cdot \mathbf{r} \psi_i(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} = \\ &= eE_0 \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3 V}} \boldsymbol{\epsilon} \cdot \int e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \mathbf{r} e^{-\frac{r}{a_0}} d^3\mathbf{r} = \\ &= eE_0 \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3 V}} \boldsymbol{\epsilon} \cdot \mathbf{I}(\mathbf{k}), \end{aligned} \quad (12.4.8)$$

kde integrál $\hat{\mathbf{I}}(\mathbf{k})$ se vypočte stejnou úvahou jako dříve:

$$\begin{aligned} k^2 I(\mathbf{k}) &= \int e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \mathbf{k} \cdot \mathbf{r} e^{-\frac{r}{a_0}} d^3\mathbf{r} = \\ &= 2\pi i \int_0^\infty r^2 \left\{ e^{-r\left(\frac{1}{a_0} + ik\right)} + e^{-r\left(\frac{1}{a_0} - ik\right)} \right\} dr + \\ &\quad + \frac{2\pi}{k} \int_0^\infty r \left\{ e^{-r\left(\frac{1}{a_0} + ik\right)} - e^{-r\left(\frac{1}{a_0} - ik\right)} \right\} dr = \\ &= 2\pi i J_1 + \frac{2\pi}{k} J_2. \end{aligned} \quad (12.4.9)$$

Platí

$$\int_0^\infty r^2 e^{-\alpha r} dr = \frac{2}{\alpha} \int_0^\infty r e^{-\alpha r} dr = \frac{2}{\alpha^3}, \quad (12.4.10)$$

neboli

$$\begin{aligned} J_1 &= \frac{2}{\left(\frac{1}{a_0} + ik\right)^3} + \frac{2}{\left(\frac{1}{a_0} - ik\right)^3} = 2a_0^3 \frac{(1 - ika_0)^3 + (1 + ika_0)^3}{(1 + k^2 a_0^2)^3} = \\ &= 4a_0^3 \frac{1 - 3k^2 a_0^2}{(1 + k^2 a_0^2)^3}, \end{aligned} \quad (12.4.11a)$$

$$\begin{aligned} J_2 &= \frac{1}{\left(\frac{1}{a_0} + ik\right)^2} + \frac{1}{\left(\frac{1}{a_0} - ik\right)^2} = a_0^2 \frac{(1 - ika_0)^2 - (1 + ika_0)^2}{(1 + k^2 a_0^2)^2} = \\ &= -\frac{4ika_0^3}{(1 + k^2 a_0^2)^2}, \end{aligned} \quad (12.4.11b)$$

a po dosazení

$$k^2 I(\mathbf{k}) = 8\pi i a_0^3 \left[\frac{1 - 3a_0^2 k^2}{(1 + k^2 a_0^2)^3} - \frac{1}{(1 + k^2 a_0^2)^2} \right] = \quad (12.4.12)$$

$$= 8\pi i a_0^3 \frac{1 - 3a_0^2 k^2 - 1 - a_0^2 k^2}{(1 + k^2 a_0^2)^3} = \quad (12.4.13)$$

$$= -\frac{32i\pi a_0^5 k^2}{(1 + k^2 a_0^2)^3}. \quad (12.4.14)$$

Integrál je tedy

$$\mathbf{I}(\mathbf{k}) = -\frac{32i\pi a_0^5}{(1 + k^2 a_0^2)^3} \mathbf{k} \quad (12.4.15)$$

a hledaný maticový element

$$h_{fi} = -\frac{eE_0}{\sqrt{\pi a_0^3 V}} \frac{32i\pi a_0^5}{(1 + k^2 a_0^2)^3} \boldsymbol{\epsilon} \cdot \mathbf{k}. \quad (12.4.16)$$

Rychlost přechodu je podle Fermiho zlatého pravidla

$$\frac{dw_{i \rightarrow f}}{d\Omega} = \frac{2\pi}{\hbar} |h_{fi}|^2 \frac{d\rho}{d\Omega} = \quad (12.4.17)$$

$$= \frac{2\pi}{\hbar} \left| -\frac{eE_0}{\sqrt{\pi a_0^3 V}} \frac{32i\pi a_0^5}{(1 + k^2 a_0^2)^3} \boldsymbol{\epsilon} \cdot \mathbf{k} \right|^2 \frac{\hbar k m}{(2\pi\hbar)^3} = \quad (12.4.18)$$

$$= \frac{256ma_0^4 (eA_0\omega)^2 (\boldsymbol{\epsilon} \cdot \mathbf{k})^2 k a_0^3}{\pi\hbar^3 (1 + k^2 a_0^2)^6} \quad (12.4.19)$$

$$= \frac{1024\gamma\epsilon_0 m a_0^4 (A_0\omega)^2 (\boldsymbol{\epsilon} \cdot \mathbf{k})^2 k a_0^3}{\pi\hbar^3 (1 + k^2 a_0^2)^6} \quad (12.4.20)$$

$$(12.4.21)$$

a z ní vychází diferenciální účinný průřez jako

$$\frac{d\sigma_{i \rightarrow f}}{d\Omega} = \frac{512\gamma m a_0^4 \omega (\boldsymbol{\epsilon} \cdot \mathbf{k})^2 k a_0^3}{\pi\hbar^2 c (1 + k^2 a_0^2)^6} = \frac{512\alpha m a_0^4 \omega (\boldsymbol{\epsilon} \cdot \mathbf{k})^2 k a_0^3}{\pi\hbar (1 + k^2 a_0^2)^6}. \quad (12.4.22)$$

3. Extrémy rychlosti přechodu

Je vidět, že $dw_{i \rightarrow f}/d\Omega \sim (\epsilon \cdot k)^2$, což znamená, že elektrony jsou s největší pravděpodobností emitovány ve směru polarizace dopadající elektromagnetické vlny. Velikost vlnového vektoru, pro který je rychlost emise elektronu nejvyšší, se spočítá z rovnice

$$\begin{aligned} \frac{d}{dk} \left(\frac{dw_{i \rightarrow f}}{d\Omega} \right) &= 0 \\ 3k^2 \left(1 + k^2 a_0^2 \right)^6 - 6 \left(1 + k^2 a_0^2 \right)^5 2k a_0^2 k^3 &= 0 \\ 3k^2 \left(1 + k^2 a_0^2 \right) - 12a_0^2 k^4 &= 0 \\ 3 - 9k^2 a_0^2 &= 0, \end{aligned} \quad (12.4.23)$$

která nakonec dává

$$k_m = \frac{1}{\sqrt{3}} \frac{1}{a_0} = \frac{mc\alpha}{\hbar^2 \sqrt{3}}. \quad (12.4.24)$$

Energie je pro tuto hodnotu vlnového vektoru rovna

$$E_m = \frac{1}{6\hbar^2} mc^2 \alpha^2. \quad (12.4.25)$$

13 Rozptyl

Sférické Besselovy funkce

Sférické Besselovy funkce jsou dvě lineárně nezávislá řešení diferenciální rovnice 2. řádu (někdy nazývané Helmholtzova rovnice)

$$\left[\frac{d^2}{dz^2} + \frac{2}{z} \frac{d}{dz} + \left(1 - \frac{l(l+1)}{z^2} \right) \right] \frac{j_l(z)}{n_l(z)} = 0. \quad (13.0.1)$$

- $j_l(z)$ se nazývá *sférická Besselova funkce* nebo *sférická Besselova funkce 1. druhu*.
- $n_l(z)$ se nazývá *sférická Neumannova funkce* nebo *sférická Besselova funkce 2. druhu*.
- Definují se také *sférické Hankelovy funkce 1. a 2. druhu* vztahy

$$h_l^{(1)}(z) \equiv j_l(z) + i n_l(z), \quad (13.0.2a)$$

$$h_l^{(2)}(z) \equiv j_l(z) - i n_l(z). \quad (13.0.2b)$$

l je parametr (převážně celočíselný nezáporný, což budeme předpokládat v dalších výrazech, ale obecně může být reálný).

Poznámka: Sférické Besselovy funkce mají vztah k Besselovým (cyklindrickým) funkcím

$$j_l(z) = \sqrt{\frac{\pi}{2z}} J_{l+\frac{1}{2}}(z), \quad (13.0.3a)$$

$$n_l(z) = \sqrt{\frac{\pi}{2z}} N_{l+\frac{1}{2}}(z). \quad (13.0.3b)$$

Symetrie

$$j_l(z) = (-1)^l j_l(-z), \quad (13.0.4a)$$

$$n_l(z) = (-1)^{l+1} n_l(-z), \quad (13.0.4b)$$

$$h_l^{(1,2)}(z) = (-1)^l h_l^{(1,2)}(-z). \quad (13.0.4c)$$

Vztah Besselových a Neumannových funkcí

$$l_l(z) = (-1)^l n_{-l-1}(z) \quad (13.0.5a)$$

$$n_l(z) = (-1)^{l+1} j_{-l-1}(z). \quad (13.0.5b)$$

Vyjádření pomocí řady

$$j_l(z) = z^l \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n! (2l+2n+1)!!} \left(-\frac{z^2}{2} \right)^n \quad (13.0.6a)$$

$$n_l(z) = -\frac{1}{z^{l+1}} \left\{ \sum_{n=0}^{l-1} \frac{(2l-2n-1)!!}{n!} \left(-\frac{z^2}{2} \right)^n + \frac{1}{l!} \left(\frac{z^2}{2} \right)^l + (-1)^l \sum_{n=l+1}^{\infty} \frac{1}{n! (2n-2l-1)!!} \left(-\frac{z^2}{2} \right)^n \right\} \quad (13.0.6b)$$

Vyjádření pomocí goniometrických funkcí

$$j_l(z) = (-z)^l \left(\frac{1}{z} \frac{d}{dz} \right)^l \frac{\sin z}{z} \quad (13.0.7a)$$

$$n_l(z) = -(-z)^l \left(\frac{1}{z} \frac{d}{dz} \right)^l \frac{\cos z}{z} \quad (13.0.7b)$$

Asymptotika $z \rightarrow 0$

$$\boxed{\begin{aligned} j_l(z) &\xrightarrow{z \rightarrow 0} \frac{z^l}{(2l+1)!!} \\ n_l(z) &\xrightarrow{z \rightarrow 0} \begin{cases} -\frac{1}{z} & \text{pokud } l = 0 \\ -\frac{(2l-1)!!}{z^{l+1}} & \text{pokud } l > 0 \end{cases} \end{aligned}} \quad (13.0.8)$$

Za předpokladu $l \geq 0$ divergují sférické Neumannovy funkce pro $z \rightarrow 0$.

Asymptotika $z \rightarrow \infty$

$$\boxed{\begin{aligned} j_l(z) &\xrightarrow{z \rightarrow \infty} \frac{\sin(z - l\frac{\pi}{2})}{z} \\ n_l(z) &\xrightarrow{z \rightarrow \infty} -\frac{\cos(z - l\frac{\pi}{2})}{z} \end{aligned}} \quad (13.0.9)$$

Relace ortogonality

$$\int_0^\infty j_l(kr) j_l(k'r) r^2 dr = \frac{\pi}{2k^2} \delta(k - k') \quad (13.0.10)$$

Rozklad exponenciály

$$\begin{aligned} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} &= 4\pi \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l i^l j_l(kr) Y_{lm}^* \left(\frac{\mathbf{k}}{k} \right) Y_{lm} \left(\frac{\mathbf{r}}{r} \right) = \\ &= \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) j_l(kr) P_l(\cos \theta), \end{aligned} \quad (13.0.11)$$

kde P_l jsou Legendreovy polynomy a souřadná soustava je orientována tak, že osa z je rovnoběžná s vektorem \mathbf{r} ,

$$\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} = kr \cos \theta. \quad (13.0.12)$$

Explicitní vyjádření nejnižších Besselových funkcí

$$j_0(z) = \frac{\sin z}{z} \quad n_0(z) = -\frac{\cos z}{z} \quad (13.0.13a)$$

$$j_1(z) = \frac{\sin z}{z^2} - \frac{\cos z}{z} \quad n_1(z) = -\frac{\cos z}{z^2} - \frac{\sin z}{z} \quad (13.0.13b)$$

$$j_2(z) = \left(\frac{3}{z^3} - \frac{1}{z} \right) \sin z - \frac{3}{z^2} \cos z \quad n_2(z) = -\left(\frac{3}{z^3} - \frac{1}{z} \right) \cos z - \frac{3}{z^2} \sin z \quad (13.0.13c)$$

Stacionární stavy volné částice s ostrou hodnotou impulsmomentu

Vlnová funkce volné částice s velikostí vlnového vektoru k se vyjádří ve sférických souřadnicích pomocí radiální vlnové funkce a kulových funkcí

$$\psi_{klm}(r, \theta, \phi) = \langle \mathbf{r} | k l m \rangle = R_{klm}(r) Y_{lm}(\theta, \phi), \quad (13.0.14)$$

což je řešení Schrödingerovy rovnice

$$-\frac{\hbar^2}{2M} \Delta \psi_{klm}(r, \theta, \phi) = E \psi_{klm}(r, \theta, \phi), \quad (13.0.15)$$

kde Laplaceův operátor ve sférických souřadnicích je

$$\begin{aligned} \Delta &= \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \\ &= \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\mathbf{L}^2}{\hbar^2 r^2}, \end{aligned} \quad (13.0.16)$$

přičemž $E = \hbar^2 k^2 / 2M$. Po dosazení $\mathbf{L}^2 \psi_{klm}(r, \theta, \phi) = \hbar^2 l(l+1) \psi_{klm}(r, \theta, \phi)$

$$\begin{aligned} \left[\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \left(k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) \right] R_{kl}(r) &= 0 \\ \downarrow z = kr \\ \left[\frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{2}{z} \frac{\partial}{\partial z} + \left(1 - \frac{l(l+1)}{z^2} \right) \right] R_{kl}(z) &= 0, \end{aligned} \quad (13.0.17)$$

což je přesně Helmholtzova rovnice pro sférické Besselovy funkce (13.0.1). Obecné řešení pro radiální část tedy zní

$$R_{kl}(r) = a_l(k) j_l(kr) + b_l(k) n_l(kr). \quad (13.0.18)$$

Sférická Neumannova funkce podle asymptotiky (13.0.8) diverguje pro $r = 0$, ve výsledném řešení se tudíž nebude vyskytovat. Užitím relací ortogonality (13.0.10) dostáváme normovanou radiální část vlnové funkce volné částice

$$R_{kl}(r) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} k j_l(kr). \quad (13.0.19)$$

Rozvoj amplitudy rozptylu do parciálních vln

Asymptotická vlnová funkce částice rozptylující se na potenciálu $V(\mathbf{r})$ je dána superpozicí rovinné vlny s vlnovým vektorem \mathbf{k} a rozptýlené kulové vlny⁴³

$$\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r}) \equiv \langle \mathbf{r} | \psi_{\mathbf{k}}^{(+)} \rangle = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \left[e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} + f(\mathbf{k}', \mathbf{k}) \frac{e^{ikr}}{r} \right], \quad (13.0.20)$$

přičemž $k = k'$ a $\mathbf{k}' = k\mathbf{r}/r$. Amplituda rozptylu je

$$\begin{aligned} f(\mathbf{k}', \mathbf{k}) &= -\frac{1}{4\pi} \frac{2M}{\hbar^2} (2\pi)^3 \langle \mathbf{k}' | \hat{V} | \psi_{\mathbf{k}}^{(+)} \rangle \\ &\approx -\frac{4\pi^2 M}{\hbar^2} \langle \mathbf{k}' | \hat{V} | \mathbf{k} \rangle = \left[-\frac{M}{2\pi\hbar^2} \int e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \cdot \mathbf{r}} V(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} \right], \end{aligned} \quad (13.0.21)$$

⁴³Lippmann-Schwingerova rovnice v x reprezentaci.

kde poslední řádek je tzv. *Bornova aproximace* (1. člen Bornovy řady).⁴⁴ Diferenciální účinný průřez rozptylu je kvadrát absolutní hodnoty amplitudy rozptylu,

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\mathbf{k}', \mathbf{k})|^2. \quad (13.0.22)$$

Pro sféricky symetrický potenciál se amplituda rozptylu rozkládá do *parciálních vln*

$$f(\mathbf{k}', \mathbf{k}) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) f_l(k) P_l(\cos \psi) \quad (13.0.23)$$

kde $\cos \psi$ je úhel mezi směrem dopadající rovinné vlny daným vektorem \mathbf{k} a polohovým vektorem \mathbf{r}

$$\cos \psi = \frac{\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}{kr}, \quad (13.0.24)$$

P_l je Legendreův polynom a $f_l(k)$ je *amplituda rozptylu l -té parciální vlny*. Dosazením tohoto rozvoje do (13.0.20) a využitím asymptotiky a srovnání s volnou částicí vyjde vztah mezi $f_l(k)$ a fázovým posunutím $\delta_l(k)$,

$$\left. \begin{aligned} f_l(k) &= \frac{1}{k} \sin \delta_l(k) e^{i\delta_l(k)} \\ \delta_l(k) &= \frac{1}{2i} \ln [2ik f_l(k) + 1] \end{aligned} \right\}. \quad (13.0.25)$$

Amplituda rozptylu l -té parciální vlny se získá po přeintegrování plné amplitudy rozptylu (13.0.23) s l -tým Legendreovým polynomem

$$\begin{aligned} \int_{-1}^1 f(\mathbf{k}', \mathbf{k}) P_l(\cos \psi) d \cos \psi &= \sum_{m=0}^{\infty} (2m+1) f_m(k) \int_{-1}^1 P_l(\cos \psi) P_m(\cos \psi) d \cos \psi \\ &= \sum_{m=0}^{\infty} (2m+1) f_m(k) \frac{2}{2m+1} \delta_{ml} = 2f_l(k), \end{aligned} \quad (13.0.26)$$

kde se využilo relací ortogonalit Legendreových polynomů

$$\int_{-1}^1 P_m(x) P_l(x) dx = \frac{2}{2m+1} \delta_{ml}. \quad (13.0.27)$$

Parciální amplituda rozptylu se tedy vypočítá jako

$$f_l(k) = \frac{1}{2} \int_0^\pi f(\mathbf{k}', \mathbf{k}) P_l(\cos \psi) \sin \psi d\psi. \quad (13.0.28)$$

V první Bornově aproximaci se předpokládá, že je amplituda rozptylu malá. Logaritmus v (13.0.25) lze tudíž aproximovat pomocí prvního členu Taylorova rozvoje $\ln(1+x) \approx x$, platný pro $x \ll 1$, což vede na jednoduchý vztah pro fázové posunutí

$$\delta_l(k) = k f_l(k). \quad (13.0.29)$$

Přeintegrování vztahu pro diferenciální účinný průřez (13.0.22) dá vztah mezi účinným průřezem pro l -tou parciální vlnu a jejím fázovým posunutím

$$\sigma_l(k) = \frac{4\pi}{k^2} (2l+1) \sin^2 \delta_l(k). \quad (13.0.30)$$

Celkový účinný průřez je pak

$$\sigma(k) = \sum_{l=0}^{\infty} \sigma_l(k). \quad (13.0.31)$$

Fázové posunutí je kladné pro přitažlivé síly (záporný potenciál) a záporné pro odpudivé síly.⁴⁵

⁴⁴Jedná se vlastně o Fourierovu transformaci rozptylového potenciálu.

⁴⁵Srovnejte s jednoduchými 1D rozptylovými příklady 7.1 a 7.2.

13.1 Gaussovský potenciál

Interakce je určena sféricky symetrickým potenciálem

$$V(r) = v e^{-\mu r^2}, \quad (13.1.1)$$

kde v a μ jsou reálné konstanty, $\mu > 0$.

1. Určete v Bornově aproximaci amplitudu rozptylu a diferenciální účinný průřez rozptylu na tomto potenciálu.
2. Určete fázové posunutí pro s vlnu.
3. Určete fázové posunutí pro p vlnu.

Řešení:

Předně označíme $q = k - k'$ a úhel mezi vektory k a k' jako ψ . Pak (díky rovnosti velikostí vlnových vektorů $k = k'$)

$$q^2 = k^2 - 2k \cdot k' + k'^2 = 2k^2 (1 - \cos \psi) = 4k^2 \sin^2 \frac{\psi}{2}, \quad (13.1.2)$$

a tedy

$$q = 2k \sin \frac{\psi}{2}. \quad (13.1.3)$$

1. Amplituda rozptylu se spočítá přímočaře pomocí vzorce (13.0.21):

$$\begin{aligned} f(k', k) &= -\frac{Mv}{2\pi\hbar^2} \int e^{iq \cdot r} e^{-\mu r^2} d^3r = \left| \begin{array}{l} \text{sférické souřadnice,} \\ \text{osa } z \text{ paralelní s } q \\ q \cdot r = qr \cos \theta \end{array} \right| \\ &= -\frac{Mv}{2\pi\hbar^2} \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} e^{iqr \cos \theta} e^{-\mu r^2} r^2 \sin \theta dr d\theta d\phi = \left| \begin{array}{l} u = \cos \theta \\ du = -\sin \theta d\theta \end{array} \right| \\ &= -\frac{Mv}{\hbar^2} \int_0^\infty r^2 e^{-\mu r^2} dr \int_{-1}^1 e^{iqru} du \\ &= -\frac{Mv}{\hbar^2} \int_0^\infty r^2 e^{-\mu r^2} \left[\frac{e^{iqru}}{iqr} \right]_{-1}^1 dr = -\frac{Mv}{iq\hbar^2} \int_0^\infty (e^{-\mu r^2 + iqr} - e^{-\mu r^2 - iqr}) r dr \\ &= -\frac{Mv}{iq\hbar^2} e^{-\frac{q^2}{4\mu}} \int_0^\infty \left[e^{-\mu \left(r - \frac{iq}{2\mu}\right)^2} - e^{-\mu \left(r + \frac{iq}{2\mu}\right)^2} \right] r dr = \left| \begin{array}{l} x = r - a \\ y = r + a \\ a = \frac{iq}{2\mu} \end{array} \right| \\ &= -\frac{Mv}{iq\hbar^2} e^{-\frac{q^2}{4\mu}} \underbrace{\left[\int_{-a}^\infty (x+a) e^{-\mu x^2} dx - \int_a^\infty (y-a) e^{-\mu y^2} dy \right]}_I. \end{aligned} \quad (13.1.4)$$

Integrál je

$$\begin{aligned} I &= \int_{-a}^0 x e^{-\mu x^2} dx + a \int_{-a}^0 e^{-\mu x^2} dx + \int_0^\infty x e^{-\mu x^2} dx + a \int_0^\infty e^{-\mu x^2} dx \\ &\quad - \int_0^\infty x e^{-\mu x^2} dx + a \int_0^\infty e^{-\mu x^2} dx + \int_0^a x e^{-\mu x^2} dx - a \int_0^a e^{-\mu x^2} dx \\ &= 2a \int_0^\infty e^{-\mu x^2} dx + \underbrace{\int_{-a}^a x e^{-\mu x^2} dx}_{0 \text{ (lichá funkce)}} + \underbrace{\int_{-a}^a e^{-\mu x^2} dx}_{0 \text{ (sudá funkce)}} - a \int_0^a e^{-\mu x^2} dx \\ &= 2a \int_0^\infty e^{-\mu x^2} dx = a \sqrt{\frac{\pi}{\mu}}, \end{aligned} \quad (13.1.5)$$

takže amplituda rozptylu vychází

$$f(k', k) = -\frac{Mv}{2\mu\hbar^2} \sqrt{\frac{\pi}{\mu}} e^{-\frac{q^2}{4\mu}} \quad (13.1.6)$$

a z ní diferenciální účinný průřez dle (13.0.22)

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{\pi(Mv)^2}{4\hbar^4\mu^3} e^{-\frac{q^2}{2\mu}}. \quad (13.1.7)$$

2. Amplituda rozptylu s -vlny ($l = 0$) se vypočte pomocí vzorce (13.0.28):

$$\begin{aligned} f_0(k) &= -\frac{Mv}{4\mu\hbar^2} \sqrt{\frac{\pi}{\mu}} \int_{-1}^1 e^{-\frac{q^2}{4\mu}} \underbrace{P_0(\cos\psi)}_1 d\cos\psi \\ &= -\frac{Mv}{4\mu\hbar^2} \sqrt{\frac{\pi}{\mu}} \int_{-1}^1 e^{-\frac{k^2}{2\mu}(1-x)} dx \\ &= -\frac{Mv}{4\mu\hbar^2} \sqrt{\frac{\pi}{\mu}} \left[\frac{2\mu}{k^2} e^{-\frac{k^2}{2\mu}(1-x)} \right]_{-1}^1 \\ &= -\frac{Mv}{2\hbar^2 k^2} \sqrt{\frac{\pi}{\mu}} \left(1 - e^{-\frac{k^2}{\mu}} \right) = -\frac{Mv}{\hbar^2 k^2} \sqrt{\frac{\pi}{\mu}} e^{-\frac{k^2}{2\mu}} \sinh \frac{k^2}{2\mu}. \end{aligned} \quad (13.1.8)$$

Fázové posunutí je pak na základě přibližného vzorce (13.0.29) rovno

$$\delta_0(k) \approx -\frac{Mv}{\hbar^2 k} \sqrt{\frac{\pi}{\mu}} e^{-\frac{k^2}{2\mu}} \sinh \frac{k^2}{2\mu}. \quad (13.1.9)$$

3. Amplituda rozptylu a fázové posunutí p -vlny se určí analogicky jako v předchozím bodě:

$$\begin{aligned} f_1(k) &= -\frac{Mv}{4\mu\hbar^2} \sqrt{\frac{\pi}{\mu}} \int_{-1}^1 e^{-\frac{k^2}{2\mu}(1-x)} \underbrace{P_1(x)}_x dx = |\text{Per partes}| \\ &= -\frac{Mv}{4\mu\hbar^2} \sqrt{\frac{\pi}{\mu}} \left\{ \left[\frac{2\mu}{k^2} x e^{-\frac{k^2}{2\mu}(1-x)} \right]_{-1}^1 - \frac{2\mu}{k^2} \int_{-1}^1 e^{-\frac{k^2}{2\mu}(1-x)} dx \right\} \\ &= -\frac{Mv}{2\hbar^2 k^2} \sqrt{\frac{\pi}{\mu}} \left\{ 1 + e^{-\frac{k^2}{\mu}} - \frac{2\mu}{k^2} \left(1 - e^{-\frac{k^2}{\mu}} \right) \right\} \\ &= -\frac{Mv}{2\hbar^2 k^2} \sqrt{\frac{\pi}{\mu}} e^{-\frac{k^2}{2\mu}} \left\{ \left(e^{\frac{k^2}{2\mu}} + e^{-\frac{k^2}{2\mu}} \right) - \frac{2\mu}{k^2} \left(e^{\frac{k^2}{2\mu}} - e^{-\frac{k^2}{2\mu}} \right) \right\} \\ &= -\frac{Mv}{\hbar^2 k^2} \sqrt{\frac{\pi}{\mu}} e^{-\frac{k^2}{2\mu}} \left[\cosh \frac{k^2}{2\mu} - \frac{2\mu}{k^2} \sinh \frac{k^2}{2\mu} \right], \end{aligned} \quad (13.1.10)$$

$$\delta_1(k) = -\frac{Mv}{\hbar^2 k} \sqrt{\frac{\pi}{\mu}} e^{-\frac{k^2}{2\mu}} \left[\cosh \frac{k^2}{2\mu} - \frac{2\mu}{k^2} \sinh \frac{k^2}{2\mu} \right]. \quad (13.1.11)$$

Fázová posunutí pro s a p vlnu jsou znázorněna na obrázku 24.

13.2 Wronskián sférické Besselovy rovnice

Nalezněte, čemu se rovná Wronskián⁴⁶ sférických Besselových funkcí, tj. determinant

$$W_l(z) \equiv \det \begin{pmatrix} j_l(z) & n_l(z) \\ j'_l(z) & n'_l(z) \end{pmatrix} = j_l(z)n'_l(z) - j'_l(z)n_l(z). \quad (13.2.1)$$

⁴⁶Nenulovost Wronskiánu zaručuje lineární nezávislost zúčastněných funkcí.

Řešení:

Rovnice pro sférické Besselovy funkce (13.0.1) se vynásobí zleva sférickou Neumannovou funkcí a naopak. Poté se výsledné rovnice od sebe odečtou:

$$n_l(z) \left[\frac{d^2}{dz^2} + \frac{2}{z} \frac{d}{dz} + \left(1 + \frac{l(l+1)}{z^2} \right) \right] j_l(z) = 0 \quad (13.2.2a)$$

$$j_l(z) \left[\frac{d^2}{dz^2} + \frac{2}{z} \frac{d}{dz} + \left(1 + \frac{l(l+1)}{z^2} \right) \right] n_l(z) = 0 \quad (13.2.2b)$$

$$j_l''(z)n_l(z) - j_l(z)n_l''(z) + 2z(j_l'(z)n_l(z) - j_l(z)n_l'(z)) = 0 \quad (13.2.3a)$$

$$W_l'(z) + \frac{2}{z}W_l(z) = 0 \quad (13.2.3b)$$

Poslední rovnice je diferenciální rovnicí pro $W(z)$, jejíž řešení se hledá ve tvaru

$$W_l(z) = cz^\alpha. \quad (13.2.4)$$

Po dosazení vychází pro hledané řešení $\alpha = -2$. Pro určení konstanty c stačí vyčíslit hodnota Wronskiánu pro jedno konkrétní z . Lze využít například asymptotiky $z \rightarrow 0$ (13.0.8). Z ní pro $l \neq 0$ vychází

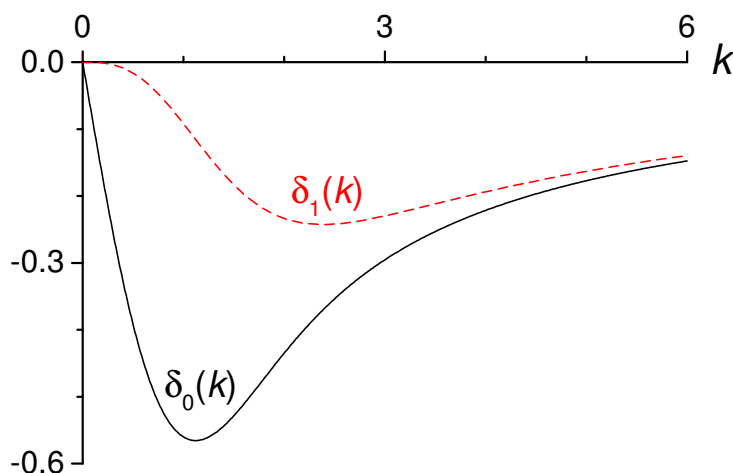
$$\begin{aligned} W_l(z \sim 0) &= \frac{z^l}{(2l+1)!!} \frac{d}{dz} \left(-\frac{(2l-1)!!}{z^{l+1}} \right) + \frac{(2l-1)!!}{z^{l+1}} \frac{d}{dz} \left(\frac{z^l}{(2l+1)!!} \right) \\ &= \frac{z^l}{(2l+1)!!} \frac{(l+1)(2l-1)!!}{z^{l+2}} + \frac{(2l-1)!!}{z^{l+1}} \frac{lz^{l-1}}{(2l+1)!!} \\ &= \frac{1}{z^2} \frac{l+1}{2l+1} + \frac{1}{z^2} \frac{l}{2l+1} = \frac{1}{z^2} \end{aligned} \quad (13.2.5a)$$

a pro $l = 0$

$$W_0(z \sim 0) = 1 \frac{d}{dz} \left(-\frac{1}{z} \right) + \frac{1}{z} \frac{d}{dz} 1 = \frac{1}{z^2}. \quad (13.2.5b)$$

Wronskián sférických Besselových funkcí tedy je

$$W_l(z) = j_l(z)n_l'(z) - j_l'(z)n_l(z) = \frac{1}{z^2}. \quad (13.2.6)$$



Obrázek 24: Fázová posunutí s a p parciální vlny pro rozptyl na Gaussovském potenciálu v 1. Bornově aproximaci. Hodnoty parametrů jsou $M = \hbar = v = \mu = 1$.

13.3 Sférická dutina obalená δ -slupkou

Částice se rozptyluje na potenciálu

$$V(r) = \frac{v}{a} \delta(r - a) \quad (13.3.1)$$

(dutina obalená nekonečně tenkou slupkou z δ -funkce).

- Nalezněte radiální část vlnové funkce $R_{kl}(r)$.
- Určete fázové posunutí l -té parciální vlny $\delta_l(k)$.
- Určete totální účinný průřez l -té parciální vlny $\sigma_l(k)$.

Řešení:

Až na oblast δ -slupky se jedná o pohyb volné částice. Radiální část její vlnové funkce bude mít obecný tvar daný lineární kombinací sférické Besselovy a Neumannovy funkce (13.0.18). Uvnitř koule pak musí být

$$R_{kl}(r < a) = A_l(k) j_l(kr) \quad (13.3.2)$$

(odůvodnění stejné jako v případě volné částice, vlnová funkce nesmí divergovat v počátku).

Řešení vně koule se zapíše jako

$$R_{kl}(r) = B_l(k) [\alpha_l(k) j_l(kr) + \beta_l(k) n_l(kr)] \quad (13.3.3)$$

což v asymptotice $r \rightarrow \infty$ (13.0.9) dává

$$R_{kl}(r \rightarrow \infty) \rightarrow B_l(k) \left[\alpha_l(k) \frac{\sin(kr - l\frac{\pi}{2})}{kr} - \beta_l(k) \frac{\cos(kr - l\frac{\pi}{2})}{kr} \right] \quad (13.3.4)$$

Asymptotika zcela volné částice, jejíž řešení je (13.0.18), zní

$$R_{kl}^{(0)}(r \rightarrow \infty) \rightarrow \frac{\sin(kr - l\frac{\pi}{2})}{kr}. \quad (13.3.5)$$

Potenciál δ -slupky tedy způsobí fázové posunutí oproti případu volné částice. To je dáno veličinou $\delta_l(k)$:

$$\begin{aligned} R_{kl}(r \rightarrow \infty) &\rightarrow \frac{\sin(kr - l\frac{\pi}{2} + \delta_l(k))}{kr} = \\ &= \cos \delta_l(k) \frac{\sin(kr - l\frac{\pi}{2})}{kr} + \sin \delta_l(k) \frac{\cos(kr - l\frac{\pi}{2})}{kr} \end{aligned} \quad (13.3.6)$$

Srovnáním s předchozím vyjádřením (13.3.5) vychází pro fázové posunutí

$$\alpha_l(k) = \cos \delta_l(k) \quad (13.3.7a)$$

$$\beta_l(k) = -\sin \delta_l(k) \quad (13.3.7b)$$

a vlnovou funkci lze zapsat ve tvaru

$$R_{kl}(r) = \begin{cases} A_l(k) j_l(kr) & \text{pro } r < a \\ B_l(k) [\cos \delta_l(k) j_l(kr) - \sin \delta_l(k) n_l(kr)] & \text{pro } r > a \end{cases}. \quad (13.3.8)$$

Fázové posunutí se dopočítá pomocí sešívacích podmínek na δ -slupce. Stejně jako v případě jednorozměrného potenciálu i zde musí platit dvě podmínky:

1. Vlnová funkce je spojitá,

$$A_l(k) j_l(ka) = B_l(k) [\cos \delta_l(k) j_l(ka) - \sin \delta_l(k) n_l(ka)]. \quad (13.3.9)$$

2. V derivaci je skok daný silou δ -funkce (7.1.6)

$$R'_{kl}(a+0) - R'_{kl}(a-0) = \frac{2M_V}{\hbar^2 a} R_{kl}(a), \quad (13.3.10)$$

což v našem případě dává (pozor, $R'_{kl} = \frac{d}{dr} R_{kl}$, tj. derivuje se jen podle r)

$$kB_l(k) [\cos \delta_l(k) j'_l(ka) - \sin \delta_l(k) n'_l(ka)] - kA_l(k) j'_l(ka) = \frac{Q}{a} A_l(k) j_l(ka), \quad (13.3.11)$$

kde se pro zjednodušení zápisu zavedlo $Q \equiv 2mv/\hbar^2$.

Dosazení z (13.3.9) do (13.3.11) vede na (argumenty funkcí již nejsou explicitně vypsaný)

$$\begin{aligned} j_l j'_l \cos \delta_l - j_l n'_l \sin \delta_l - j_l j'_l \cos \delta_l + j'_l n_l \sin \delta_l &= \frac{Q}{ka} j_l (j_l \cos \delta_l - n_l \sin \delta_l) \\ - (j_l n'_l - j'_l n_l) \sin \delta_l &= \frac{Q}{ka} j_l (j_l \cos \delta_l - n_l \sin \delta_l). \end{aligned} \quad (13.3.12)$$

Na levé straně se objevil Wronskián (13.2.6), za který se dosadí výsledek předchozího příkladu:

$$-\frac{1}{(ka)^2} \sin \delta_l = \frac{Q}{ka} j_l (j_l \cos \delta_l - n_l \sin \delta_l) \quad (13.3.13)$$

Explicitní výraz pro fázové posunutí tedy zní

$$\boxed{\operatorname{tg} \delta_l(k) = \frac{Q j_l^2(ka)}{Q j_l(ka) n_l(ka) - \frac{1}{ka}}}. \quad (13.3.14)$$

Z podmínky spojitosti (13.3.9) se dá určit koeficient průniku

$$P_l(k) \equiv \left| \frac{A_l(k)}{B_l(k)} \right|^2 = \frac{\cos \delta_l(k) j_l(ka) - \sin \delta_l(k) n_l(ka)}{j_l(ka)}, \quad (13.3.15)$$

kam je potřeba dosadit v tuto chvíli již známé fázové posunutí $\delta_l(k)$.

Jako poslední se určí účinný průřez pro l -tou parciální vlnu. K tomu se použije vztah (13.0.30). Mezi goniometrickými funkcemi platí identita

$$\sin^2 x = \frac{\operatorname{tg}^2 x}{1 + \operatorname{tg}^2 x}, \quad (13.3.16)$$

což v tomto případě dává

$$\begin{aligned} \sin^2 \delta_l(k) &= \frac{\operatorname{tg}^2 \delta_l(k)}{1 + \operatorname{tg}^2 \delta_l(k)} = \\ &= \frac{Q^2 j_l^4(ka)}{Q^2 j_l^4(ka) + [Q j_l(ka) n_l(ka) - \frac{1}{ka}]^2} \end{aligned} \quad (13.3.17)$$

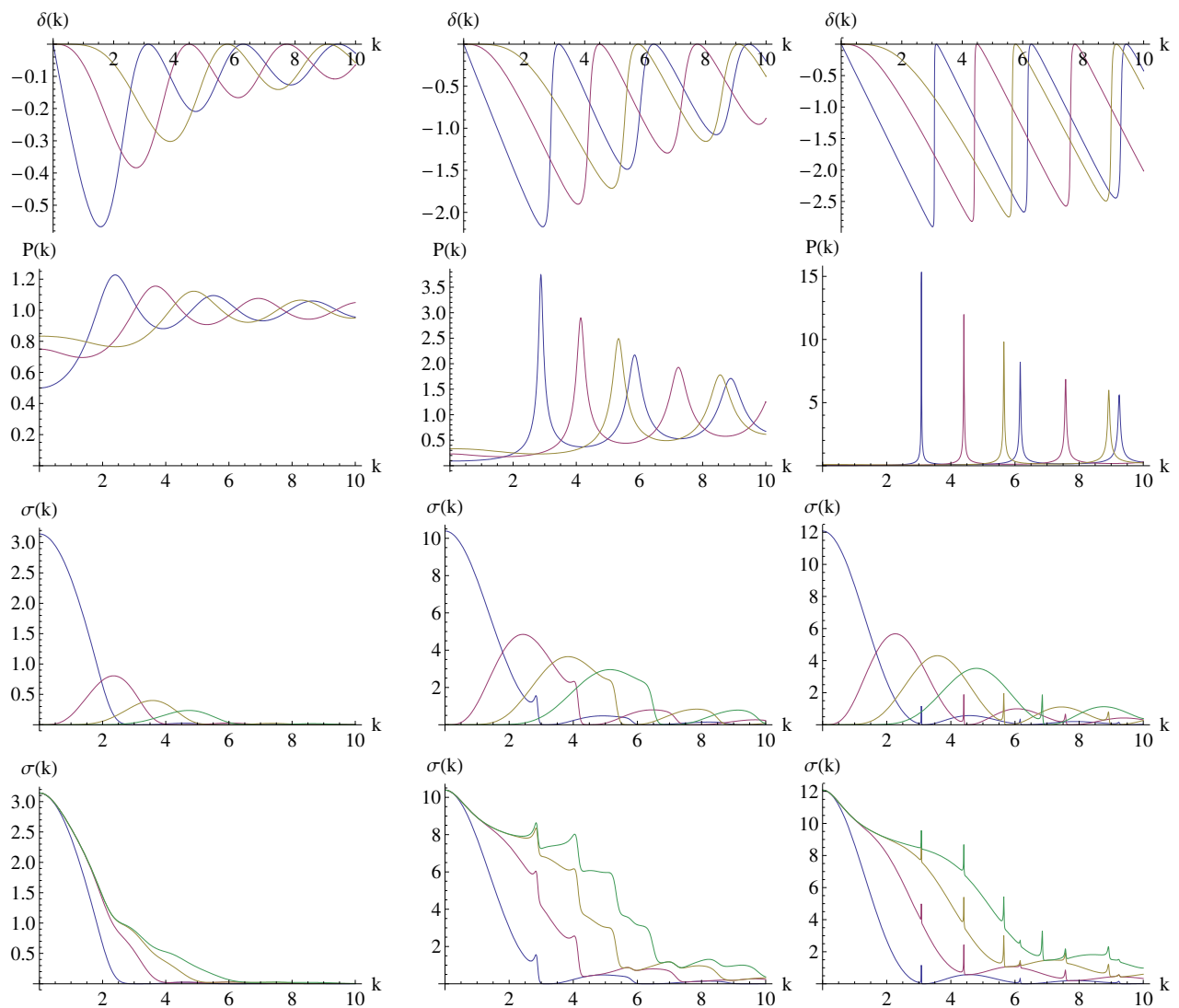
a účinný průřez je tedy

$$\boxed{\sigma_l(k) = \frac{4\pi}{k^2} (2l+1) \frac{Q^2 j_l^4(ka)}{Q^2 j_l^4(ka) + [Q j_l(ka) n_l(ka) - \frac{1}{ka}]^2}} \quad (13.3.18)$$

Hladina	1s	1p	1d	2s	1f	2p	1g	2d
ka	$\pi = 3.1$	4.5	5.8	$2\pi = 6.3$	7.0	7.7	8.2	9.1

Tabulka 2: Vázané stavy nekonečně hluboké sféricky symetrické jámy. Je užito spektroskopické značení $s(l=0)$, $p(l=1)$, $d(l=2)$, $f(l=3)$, $g(l=4)$.

Na obrázku 25 jsou znázorněny výsledky pro nejnižší parciální vlny a pro různé síly potenciálu dané velikostí parametru Q . Čím je Q větší (potenciál silnější), tím jsou výraznější a ostřejší maxima v



Obrázek 25: 1. řádek: Fázové posunutí l -té parciální vlny $\delta_l(k)$ podle (13.3.14) pro $l = 0$ (modře), $l = 1$ (fialově), $l = 2$ (béžově). 2. řádek: Koefficient průniku l -té parciální vlny $P_l(k)$ podle (13.3.15). 3. řádek: Účinný průřez l -té parciální vlny podle (13.3.18). 4. řádek: Součet účinných průřezů σ_0 (modře), $\sigma_0 + \sigma_1$ (fialově), $\sigma_0 + \sigma_1 + \sigma_2$ (béžově), $\sigma_0 + \sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3$ (zeleně). Vše je znázorněno pro různé hodnoty Q .

koeficientu průniku a v účinném průřezu. To je ukázka *rezonancí* (kvazivázaných stavů). Kdybychom spočítali vázané stavy nekonečné hluboké sférické dutiny s potenciálem

$$V(r) = \begin{cases} 0 & \text{pro } r < a \\ \infty & \text{pro } r > a \end{cases} \quad (13.3.19)$$

obdrželi bychom vázané stavy uvedené v tabulce 2. Jejich poloha dobře koresponduje s rezonančními maximy při velkých Q .

Z obrázku je také vidět, že pro malé hybnosti (energie) k přispívá k rozptylu prakticky jen s -vlna ($l = 0$).

13.4 Rozptyl na $\frac{1}{r^2}$ potenciálu

Uvažujte rozptyl částice o hmotnosti M na potenciálu

$$V(r) = \frac{v}{r^2}, \quad (13.4.1)$$

kde parametr v může být kladný (pro odpudivou sílu) nebo záporný (pro sílu přitažlivou).

1. Řešením Schrödingerovy rovnice nalezněte vlnovou funkci pro energii $E > 0$.
2. Spočítejte fázové posunutí $\delta_l(k)$ l -té parciální vlny a načrtněte jeho závislost na k (nebo na energii E).
3. Nalezněte totální účinný průřez pro l -tou parciální vlnu $\sigma_l(k)$. Diskutujte fyzikální příčinu skutečnosti, že pro $k \rightarrow 0$ účinný průřez diverguje.

Řešení:

1. Potenciál je sféricky symetrický, úhlová část vlnové funkce je tedy dána kulovými funkcemi. Schrödingerova rovnice pro radiální část vlnové funkce je

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} + k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{2Mv}{\hbar^2 r^2} \right] R_{kl}(r) = 0, \quad (13.4.2)$$

kde $k^2 = 2ME/\hbar^2$. Pokud $v = 0$, jedná se o rovnici pro volnou částici ve sférických souřadnicích, jejíž obecné řešení je dáno vztahem (13.0.19). Pro nenulové v se zavede substituce $\lambda = \lambda(l)$ daná rovnicí

$$\lambda(\lambda+1) = l(l+1) + \frac{2Mv}{\hbar^2}, \quad (13.4.3)$$

čímž rovnice 13.4.2 formálně přejde na rovnici pro volnou částici

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} + k^2 - \frac{\lambda(\lambda+1)}{r^2} \right] R_{kl}(r) = 0, \quad (13.4.4)$$

jejíž obecné řešení je dáno lineární kombinací sférické Besselovy a Neumannovy funkce

$$R_{kl}(r) = a_\lambda(k) j_\lambda(kr) + b_\lambda(k) n_\lambda(kr) \quad (13.4.5)$$

Kvadratická rovnice (13.4.3) má dvě řešení

$$\lambda_\pm = -\frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \sqrt{1 + 4l(l+1) + \frac{8Mv}{\hbar^2}}. \quad (13.4.6)$$

To, že nyní λ není přirozené číslo (obecně může být dokonce komplexní) vůbec nevadí, Besselova funkce to snese.

Nadále se omezíme na případ, kdy $\lambda_\pm \in \mathbb{R}$ (to nastává vždy v případě odpudivého potenciálu $v > 0$ a pro nepříliš silné přitažlivé potenciály). Jelikož platí, že

$$\lambda_+ + \lambda_- = -1, \quad (13.4.7)$$

je díky identitě (13.0.5) jedno, jestli se vybere λ_+ a sférickou Besselovu funkci, nebo λ_- a sférickou Neumannovu funkci. Zvolme kořen λ_+ .

Asymptotika v bodě $r = 0$ (vlnová funkce zde nesmí divergovat, aby byla normalizovatelná k δ funkci) navíc vyžaduje, aby $\lambda \geq 0$, tj.

$$\frac{\hbar^2}{2M}l(l+1) \geq -v, \quad (13.4.8)$$

Normalizovaná radiální část vlnové funkce je pak

$$R_{kl}(r) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} k j_{\lambda}(kr), \quad \lambda = -\frac{1}{2} + \frac{1}{2} \sqrt{1 + 4l(l+1) + \frac{8Mv}{\hbar^2}}. \quad (13.4.9)$$

2. Asymptotika radiální části vlnové funkce (sférické Besselovy funkce) pro $kr \rightarrow \infty$ je v případě volné částice (13.0.9)

$$j_l(kr) \sim \frac{\sin(kr - l\frac{\pi}{2})}{kr}. \quad (13.4.10)$$

Analogicky pro částici v potenciálu (13.4.1)

$$j_{\lambda}(kr) \sim \frac{\sin(kr - l\frac{\pi}{2})}{kr} = \frac{\sin(kr - l\frac{\pi}{2} + \delta_l)}{kr}, \quad (13.4.11)$$

kde

$$\delta_l = (l - \lambda)\frac{\pi}{2} \quad (13.4.12)$$

je hledaný fázový posuv (λ je dáno v rovnici (13.4.9)). Z výrazu je ihned vidět, že δ_l nezávisí na k , a tedy ani na energii. To souvisí se skutečností, že systém je škálově invariantní vůči přeškálování souřadnice a energie

$$r \mapsto ar, \quad k \mapsto k/a \quad (13.4.13)$$

(vlnová funkce závisí jen na součinu kr).

Fázový posuv je také možné počítat v 1. Bornově aproximaci. Výpočet je však celkem zdoluhavý a vede jen přibližné řešení. Navíc je zde diskutabilní platnost Bornovy aproximace (důvody plynou z diskuze v Poznámkách níže).

3. Stačí jen dosadit do vzorečku

$$\sigma_l(k) = \frac{4\pi}{k^2} (2l+1) \sin^2 \delta_l. \quad (13.4.14)$$

Poznámka: Ač potenciál (13.4.1) vypadá celkem nevinně, je to skrytá bestie. Problematické není jeho chování v $r \rightarrow \infty$ (potenciál není dlouhodobě ⁴⁷), nýbrž chování v bodě $r = 0$. Už v klasické fyzice je chování potenciálu divoké: pro přitažlivý potenciál $v < 0$ částice s energií $E < 0$ vždy spadne do středu, přičemž spadne do něj dokonce za konečný čas, avšak vykoná při tom nekonečně mnoho otáček okolo středu a dopadne s nekonečnou rychlostí (spočítejte si to, je to poučné). Potenciál totiž svou silou překoná i centrifugální bariéru. V kvantové fyzice je Hamiltonián pro $v < 0$ a $E < 0$ nesamosdružený. Kdybyste přesto počítali jeho spektrum, dospěli byste k výsledku, že energie systému není omezená zdola (základní stav by ležel v $-\infty$).

Patologie potenciálu se projeví i v rozptylu, a to právě tím, že pro malé energie účinný průřez diverguje. Divergence je způsobena chováním potenciálu v počátku. A to jsme tiše pominuli případ, kdy λ je komplexní číslo, což odpovídá případu, kdy centrifugální bariéra nestačí a částice se přes ni dostane k singularitě rozptylového centra.

Chceme-li s potenciálem (13.4.1) pracovat realisticky, je potřeba ho nějakým způsobem „regularizovat“. To je možné například tak, že částici nedovolíme přiblížit se k počátku a pro $r < \rho$ potenciál nahradíme bariérou $V(r) = \infty$.

Potenciál (13.4.1) popisuje například interakci bodového náboje s dipólem. Dipól však není bodová částice a je tedy jasné, že pro $r \approx 0$ model přestává platit a je potřeba uvažovat složitější tvar interakce.

O matematických vlastnostech potenciálu $\frac{1}{r^2}$ se dočtete více například v článcích [14] či [15].

⁴⁷Dlouhodobě je Coulombický potenciál, všechny rychleji klesající již jsou krátkodobě. Krátkodobost potenciálu (13.4.1) je patrná z toho, že částice ovlivněná tímto potenciálem se asymptoticky chová jako volná částice. To v případě Coulombického potenciálu není pravda.

14 Tenzorové operátory a Wigner-Eckartův teorém

Ireducibilní tenzorový operátor

Složky $\hat{T}_\mu^{(\lambda)}$ libovolného *ireducibilního*⁴⁸ *tenzorového operátoru*⁴⁹ $\hat{T}^{(\lambda)}$, $\lambda = 0, 1, \dots$ ⁵⁰, $\mu = -\lambda, \dots, \lambda$ splňují komutační relace

$$[\hat{J}_3, \hat{T}_\mu^{(\lambda)}] = \mu \hat{T}_\mu^{(\lambda)} \quad (14.0.3a)$$

$$[\hat{J}_\pm, \hat{T}_\mu^{(\lambda)}] = \alpha^{(\pm)}(\lambda, \mu) \hat{T}_{\mu \pm 1}^{(\lambda)}, \quad (14.0.3b)$$

kde $\hat{\mathbf{J}}$ je operátor impulsmomentu, $\hat{J}_\pm = \hat{J}_1 \pm i\hat{J}_2$ a

$$\alpha^{(\pm)}(\lambda, \mu) \equiv \sqrt{\lambda(\lambda+1) - \mu(\mu \pm 1)}. \quad (14.0.4)$$

Wigner-Eckartův teorém

$$\begin{aligned} \langle a, J M | \hat{T}_\mu^{(\lambda)} | b, j m \rangle &= \\ &= \frac{(-1)^{J+\lambda-j}}{\sqrt{2J+1}} C_{\lambda \mu j m}^{J M} \left(a, J \parallel \hat{T}^{(\lambda)} \parallel b, j \right) \\ &= (-1)^{J-M} \begin{pmatrix} J & \lambda & j \\ -M & \mu & m \end{pmatrix} \left(a, J \parallel \hat{T}^{(\lambda)} \parallel b, j \right) \end{aligned} \quad (14.0.5)$$

přičemž:

- Zlomek $\frac{(-1)^{J+\lambda-j}}{\sqrt{2J+1}}$ je jen záležitost konvence. Zde je použita stejná konvence jako např. v knize J. Formánka [10].
- $\left(a, J \parallel \hat{T}^{(\lambda)} \parallel b, j \right)$ je *redukovaný maticový element*.
- a, b označují další vlastní čísla (může jich být i více) operátoru (operátorů) $\hat{\mathbf{A}}$, které spolu s impulsmomentem $\hat{\mathbf{J}}$ tvoří úplnou množinu pozorovatelných:

$$[\hat{\mathbf{A}}, \hat{\mathbf{J}}] = 0. \quad (14.0.6)$$

⁴⁸Ireducibilního proto, že se transformuje podle příslušné ireducibilní reprezentace grupy SO(3) pomocí Wignerových D -funkcí

$$\hat{T}_\mu^{(\lambda)'} = \sum_{\mu'} D_{\mu' \mu}^\lambda(\phi, \theta, \psi) \hat{T}_{\mu'}^{(\lambda)}, \quad (14.0.1a)$$

$$D_{\mu' \mu}^\lambda(\phi, \theta, \psi) \equiv \langle \lambda \mu' | \hat{\mathcal{R}}_3(\psi) \hat{\mathcal{R}}_2(\theta) \hat{\mathcal{R}}_3(\phi) | \lambda \mu \rangle = e^{-i(\mu' \psi + \mu \phi)} d_{\mu' \mu}^\lambda(\theta), \quad (14.0.1b)$$

narozdíl např. od tenzoru vzniklého vzniklého dyadickým součinem dvou vektorů, který se transformuje běžnými rotačními maticemi

$$\hat{T}_{j' k' l' \dots} = \sum_{j k l \dots} \hat{R}_{j' j}(\psi, \theta, \phi) \hat{R}_{k' k}(\psi, \theta, \phi) \hat{R}_{l' l}(\psi, \theta, \phi) \hat{T}_{j k l \dots}. \quad (14.0.2)$$

Symbolsy ψ, θ, ϕ označují Eulerovy úhly.

⁴⁹Nazývá se také zkráceně sférický tenzor.

⁵⁰Formálně lze zavést i ireducibilní tenzorový operátor poločíselného řádu $\lambda = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \dots$. Jeho střední hodnota by však byla dvojznačná, a proto nemůže odpovídat žádné pozorovatelné.

- Mezi $3j$ symbolem a Clebsch-Gordanovými koeficienty platí relace

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} = (-1)^{j_2-j_3-m_1} \frac{C_{j_2 m_2 j_3 m_3}^{j_1 -m_1}}{\sqrt{2j_1+1}} \quad (14.0.7a)$$

$$= (-1)^{j_3-j_1-m_2} \frac{C_{j_3 m_3 j_1 m_1}^{j_2 -m_2}}{\sqrt{2j_2+1}} \quad (14.0.7b)$$

$$= (-1)^{j_1-j_2-m_3} \frac{C_{j_1 m_1 j_2 m_2}^{j_3 -m_3}}{\sqrt{2j_3+1}}, \quad (14.0.7c)$$

přičemž uvedené tři rovnosti plynou ze symetrie $3j$ symbolů:

$$\begin{pmatrix} j_{\sigma_1} & j_{\sigma_2} & j_{\sigma_3} \\ m_{\sigma_1} & m_{\sigma_2} & m_{\sigma_3} \end{pmatrix} = \begin{cases} (-1)^{j_1+j_2+j_3} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} & \text{sign } \sigma = -1 \\ \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} & \text{sign } \sigma = 1 \end{cases} \quad (14.0.8a)$$

Další symetrie $3j$ symbolů:

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ -m_1 & -m_2 & -m_3 \end{pmatrix} = (-1)^{j_1+j_2+j_3} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix}. \quad (14.0.8b)$$

Wigner-Eckartův teorém je užitečný zejména proto, že k výpočtu všech $n = (2J+1)(2\lambda+1)(2j+1)$ maticových elementů stačí znát jediný z nich, zbytek se dopočte pomocí běžně tabulovaných Clebsch-Gordanových koeficientů. Z oněch n elementů jsou navíc všechny, které nesplňují výběrová pravidla pro hodnoty J, M, λ, μ, j, m , tj.

$$\boxed{\begin{aligned} m + \mu &= M \\ |j - \lambda| &\leq J \leq j + \lambda \quad (\text{trojúhelníková nerovnost}) \end{aligned}} \quad (14.0.9)$$

nulové.

Tenzorový součin

Tenzorový součin dvou ireducibilních tenzorových operátorů

$$\hat{W}^{(\lambda)} = [\hat{U}^{(\lambda_1)} \otimes \hat{V}^{(\lambda_2)}]^{(\lambda)} \quad (14.0.10)$$

je definován vztahem pro komponenty

$$\boxed{\hat{W}_{\mu}^{(\lambda)} = \sum_{\mu_1, \mu_2} C_{\lambda_1 \mu_1 \lambda_2 \mu_2}^{\lambda \mu} \hat{U}_{\mu_1}^{(\lambda_1)} \hat{V}_{\mu_2}^{(\lambda_2)}}. \quad (14.0.11)$$

Pro tenzor nultého řádu pak vyplývá

$$\begin{aligned} \hat{W}_0^{(0)} &= \sum_{\mu_1, \mu_2} C_{\lambda_1 \mu_1 \lambda_2 \mu_2}^{00} \hat{U}_{\mu_1}^{(\lambda_1)} \hat{V}_{\mu_2}^{(\lambda_2)} \\ &= \frac{(-1)^{\lambda_1}}{\sqrt{2\lambda_1+1}} \sum_{\mu_1} (-1)^{\mu_1} \hat{U}_{\mu_1}^{(\lambda_1)} \hat{V}_{-\mu_1}^{(\lambda_1)} \end{aligned} \quad (14.0.12)$$

a na základě této rovnosti se definuje *skalární součin* ireducibilních tenzorových operátorů

$$\boxed{\hat{U}^{(\lambda)} \cdot \hat{V}^{(\lambda)} \equiv (-1)^{-\lambda} \sqrt{2\lambda+1} \hat{W}_0^{(0)} = \sum_{\mu} (-1)^{\mu} \hat{U}_{\mu}^{(\lambda)} \hat{V}_{-\mu}^{(\lambda)}}. \quad (14.0.13)$$

14.1 Vektorový operátor jako ireducibilní tenzor

Ukažte, že libovolnému vektorovému operátoru $\hat{\mathbf{V}}$ s kartézskými složkami $(\hat{V}_1, \hat{V}_2, \hat{V}_3)$ se dá přiřadit ireducibilní tenzorový operátor 1. řádu pomocí předpisu

$$\begin{aligned}\hat{V}_{-1}^{(1)} &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{V}_1 - i\hat{V}_2) \\ \hat{V}_0^{(1)} &= \hat{V}_3 \\ \hat{V}_1^{(1)} &= -\frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{V}_1 + i\hat{V}_2)\end{aligned}\tag{14.1.1}$$

$(\hat{V}_\mu^{(1)})$ jsou sférické složky vektoru).

Řešení:

Libovolný vektorový operátor $\hat{\mathbf{V}}$ splňuje komutační relace s operátorem momentu hybnosti⁵¹

$$[\hat{V}_j, \hat{J}_k] = i\epsilon_{jkl}\hat{V}_l.\tag{14.1.2}$$

Důkaz transformačních vztahů (14.1.1) se provede přímým dosazením do vztahů (14.0.3):

$$\begin{aligned}[\hat{J}_3, \hat{V}_{-1}^{(1)}] &= -\left[\frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{V}_x - i\hat{V}_y), \hat{J}_3\right] = -\frac{1}{\sqrt{2}}(-i\hat{V}_y + \hat{V}_x) = -\hat{V}_{-1}^{(1)}, \\ [\hat{J}_3, \hat{V}_0^{(1)}] &= -[\hat{V}_3, \hat{J}_3] = 0, \\ [\hat{J}_3, \hat{V}_1^{(1)}] &= \left[\frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{V}_x + i\hat{V}_y), \hat{J}_3\right] = \frac{1}{\sqrt{2}}(-i\hat{V}_y - \hat{V}_x) = +\hat{V}_1^{(1)}, \\ [\hat{J}_\pm, \hat{V}_{-1}^{(1)}] &= -\frac{1}{\sqrt{2}}[\hat{V}_1 - i\hat{V}_2, \hat{J}_1 \pm i\hat{J}_2] = -\frac{1}{\sqrt{2}}(\mp\hat{V}_3 - \hat{V}_3) = \begin{cases} \alpha^+(1, -1)\hat{V}_0^{(1)} \\ 0 \end{cases}, \\ [\hat{J}_\pm, \hat{V}_0^{(1)}] &= -[\hat{V}_3, \hat{J}_1 \pm i\hat{J}_2] = \pm\hat{J}_1 - i\hat{J}_2 = \alpha^\pm(1, 0)\hat{V}_{\pm 1}^{(1)}, \\ [\hat{J}_\pm, \hat{V}_1^{(1)}] &= \frac{1}{\sqrt{2}}[\hat{V}_1 + i\hat{V}_2, \hat{J}_1 \pm i\hat{J}_2] = \frac{1}{\sqrt{2}}(\mp\hat{V}_3 + \hat{V}_3) = \begin{cases} 0 \\ \alpha^-(1, 1)\hat{V}_0^{(1)} \end{cases}.\end{aligned}$$

14.2 Skalární součin vektorových operátorů

Ukažte, že definice skalárního součinu dvou tenzorových operátorů 1. řádu je identická se skalárním součinem vektorového operátoru vyjádřeného v kartézských komponentách:

$$\hat{\mathbf{U}}^{(1)} \cdot \hat{\mathbf{V}}^{(1)} = \hat{\mathbf{U}} \cdot \hat{\mathbf{V}} = \sum_{j=1}^3 \hat{U}_j \hat{V}_j.\tag{14.2.1}$$

Řešení:

Důkaz se provede přímým dosazením (14.1.1) do definice skalárního součinu tenzorových operátorů:

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{U}}^{(1)} \cdot \hat{\mathbf{V}}^{(1)} &= \sum_{\mu} (-1)^\mu \hat{U}_\mu^{(1)} \hat{V}_{-\mu}^{(1)} = -\hat{U}_{-1}^{(1)} \hat{V}_1^{(1)} + \hat{U}_0^{(1)} \hat{V}_0^{(1)} - \hat{U}_1^{(1)} \hat{V}_{-1}^{(1)} \\ &= \frac{1}{2} \underbrace{(\hat{U}_1 - i\hat{U}_2)(\hat{V}_1 + i\hat{V}_2)}_{\hat{U}_1\hat{U}_2 + i(\hat{U}_1\hat{V}_2 - \hat{U}_2\hat{V}_1) + \hat{U}_2\hat{V}_2} + \hat{U}_3\hat{V}_3 + \frac{1}{2} \underbrace{(\hat{U}_1 + i\hat{U}_2)(\hat{V}_1 - i\hat{V}_2)}_{\hat{U}_1\hat{U}_2 + i(-\hat{U}_1\hat{V}_2 + \hat{U}_2\hat{V}_1) + \hat{U}_2\hat{V}_2} \\ &= \hat{U}_1\hat{V}_1 + \hat{U}_2\hat{V}_2 + \hat{U}_3\hat{V}_3 = \hat{\mathbf{U}} \cdot \hat{\mathbf{V}}.\end{aligned}$$

⁵¹Jsou to například operátory $\hat{\mathbf{X}}, \hat{\mathbf{P}}, \hat{\mathbf{L}}, \dots$

14.3 Využití symetrií 3j symbolů

Pomocí symetrií 3j symbolů a znalosti Clebsch-Gordanova koeficientu

$$C_{jm00}^{JM} = \delta_{jJ} \delta_{mM} \quad (14.3.1)$$

(plyne z volby $|j_1 j_1\rangle |00\rangle = |j_1 j_1 0 j_1\rangle$, což je vlastně Condon-Shortleyova fázová konvence) spočítejte Clebsch-Gordanovy koeficienty

$$C_{00jm}^{JM} \quad \text{a} \quad C_{j_1 m_1 j_2 m_2}^{00}. \quad (14.3.2)$$

Řešení:

Speciální případ vztahu mezi Clebsch-Gordanovými koeficienty a 3j symboly (14.0.7) dá

$$\begin{pmatrix} j & 0 & J \\ m & 0 & -M \end{pmatrix} = \frac{(-1)^{j+M}}{\sqrt{2J+1}} C_{jm00}^{JM}, \quad (14.3.3)$$

přičemž z výběrových pravidel pro skládání momentů hybnosti (6.0.7) navíc plyne, že jediné nenulové koeficienty jsou ty s $j = J$ a $m = -M$. Z permutačních symetrií 3j symbolů (14.0.8a) pak vyplývá

$$\begin{pmatrix} j & 0 & J \\ m & 0 & -M \end{pmatrix} = (-1)^{j+J} \begin{pmatrix} 0 & j & J \\ 0 & m & -M \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} J & j & 0 \\ -M & m & 0 \end{pmatrix}, \quad (14.3.4)$$

což zpětně převedeno na Clebsch-Gordanovy koeficienty definičním vztahem (14.0.7) je

$$\begin{aligned} (-1)^{j+J} \begin{pmatrix} 0 & j & J \\ 0 & m & -M \end{pmatrix} &= \frac{(-1)^{J+M}}{\sqrt{2J+1}} C_{00jm}^{JM}, \\ \begin{pmatrix} J & j & 0 \\ -M & m & 0 \end{pmatrix} &= (-1)^{J-j} C_{J-Mjm}^{00}, \end{aligned}$$

a tedy

$$C_{00jm}^{JM} = C_{jm00}^{JM} = \delta_{jJ} \delta_{mM}, \quad (14.3.5a)$$

$$C_{J-Mjm}^{00} = (-1)^{J-j} \frac{(-1)^{j+M}}{\sqrt{2J+1}} C_{00jm}^{JM} = \frac{(-1)^{J+M}}{\sqrt{2J+1}} \delta_{jJ} \delta_{mM}. \quad (14.3.5b)$$

Druhý vztah po přeznačení $J \mapsto j_1, -M \mapsto m_1, j \mapsto j_2, m \mapsto m_2$ vede na hledaný Clebsch-Gordanův koeficient

$$C_{j_1 m_1 j_2 m_2}^{00} = \frac{(-1)^{j_1-m_1}}{\sqrt{2j_1+1}} \delta_{j_1 j_2} \delta_{m_1 -m_2}. \quad (14.3.6)$$

14.4 Redukovaný maticový element skalárního operátoru

Určete redukovaný maticový element operátoru $\hat{S}^{(0)}$.

Řešení:

Z Wigner-Eckartova teorému (14.0.5) vyplývá

$$\langle a, JM | \hat{S}_0^{(0)} | b, jm \rangle = \frac{(-1)^{J-j}}{\sqrt{2J+1}} \underbrace{C_{00jm}^{JM}}_{\delta_{jJ} \delta_{mM} \text{ podle výsledku předchozí úlohy}} \left(a, J \left\| \hat{S}^{(0)} \right\| b, j \right). \quad (14.4.1)$$

Skalární operátor komutuje s $\hat{\mathbf{J}}$, takže na levé straně rovnosti dostaneme

$$\langle a, JM | \hat{\mathbf{S}}_0^{(0)} | b, jm \rangle = f(a, b) \delta_{Jj} \delta_{mM}, \quad (14.4.2)$$

kde $f(a, b) \equiv \langle a | \hat{\mathbf{S}}_0^{(0)} | b \rangle$ je funkce „nerotačních“ kvantových čísel a, b . Srovnáním obou rovností dostaneme

$$\boxed{\langle a, JM | \hat{\mathbf{S}}_0^{(0)} | b, j \rangle = f(a, b) \delta_{Jj} \sqrt{2J+1}.} \quad (14.4.3)$$

14.5 Redukovaný maticový element skalárního součinu

Nalezněte vztah mezi redukovaným maticovým elementem skalárního součinu $\langle a, JM | \hat{\mathbf{U}}^{(\lambda)} \cdot \hat{\mathbf{V}}^{(\lambda)} | b, j \rangle$ a redukovanými maticovými elementy jednotlivých činitelů $\langle a, JM | \hat{\mathbf{U}}^{(\lambda)} | b, j \rangle$ a $\langle a, JM | \hat{\mathbf{V}}^{(\lambda)} | b, j \rangle$.

Řešení:

Wigner-Eckartův teorém (14.0.5) na jednu stranu dává

$$\begin{aligned} \langle a, JM | \hat{\mathbf{U}}^{(\lambda)} \cdot \hat{\mathbf{V}}^{(\lambda)} | b, jm \rangle &= \frac{1}{\sqrt{2J+1}} C_{00}^{JM} \langle a, JM | \hat{\mathbf{U}}^{(\lambda)} \cdot \hat{\mathbf{V}}^{(\lambda)} | b, j \rangle \\ &= \frac{\delta_{Jj} \delta_{Mm}}{\sqrt{2J+1}} \langle a, JM | \hat{\mathbf{U}}^{(\lambda)} \cdot \hat{\mathbf{V}}^{(\lambda)} | b, j \rangle, \end{aligned} \quad (14.5.1)$$

($\hat{\mathbf{U}}^{(\lambda)} \cdot \hat{\mathbf{V}}^{(\lambda)}$ je skalární operátor).

V dalším stačí počítat jen maticový element diagonální v J, M , ostatní budou nulové. Rozepsáním skalárního součinu podle definičního vztahu (14.0.13)

$$\begin{aligned} \langle a, JM | \hat{\mathbf{U}}^{(\lambda)} \cdot \hat{\mathbf{V}}^{(\lambda)} | b, JM \rangle &= \langle a, JM | \sum_{\mu} (-1)^{\mu} \hat{\mathbf{U}}_{\mu}^{(\lambda)} \hat{\mathbf{V}}_{-\mu}^{(\lambda)} | b, JM \rangle \\ &= \sum_{\mu c j' m'} (-1)^{\mu} \underbrace{\langle a, JM | \hat{\mathbf{U}}_{\mu}^{(\lambda)} | c, j' m' \rangle}_{(-1)^{J-M} \begin{pmatrix} J & \lambda & j' \\ -M & \mu & m' \end{pmatrix} \langle a, JM | \hat{\mathbf{U}}^{(\lambda)} | c, j' \rangle} \underbrace{\langle c, j' m' | \hat{\mathbf{V}}_{-\mu}^{(\lambda)} | b, JM \rangle}_{(-1)^{j'-m'} \begin{pmatrix} j' & \lambda & J \\ -m' & -\mu & M \end{pmatrix} \langle c, j' | \hat{\mathbf{V}}^{(\lambda)} | b, J \rangle}. \end{aligned} \quad (14.5.2)$$

V druhém $3j$ symbolu se prohodí první a třetí sloupec pomocí permutačních vztahů (14.0.8a) a zároveň vyměníme znaménka v druhé řádce u projekcí pomocí vztahu (14.0.8b):

$$\begin{pmatrix} j' & \lambda & J \\ -m' & -\mu & M \end{pmatrix} = \underbrace{(-1)^{2(j'+\lambda+J)}}_1 \begin{pmatrix} J & \lambda & j' \\ -M & \mu & m' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} J & \lambda & j' \\ -M & \mu & m' \end{pmatrix}. \quad (14.5.3)$$

Co se týče znaménka $-$, v upravovaném výrazu se objevuje

$$(-1)^{\mu+J-M+j'-m'} = (-1)^{J+j'+\mu-M-m'}. \quad (14.5.4)$$

Na základě výběrových pravidel (14.0.9) je $m' + \mu = M$, takže zbývá vypořádat se s

$$(-1)^{J+j'} (-1)^{-2m'}. \quad (14.5.5)$$

Faktor $-2m'$ je vždy sudý, pokud m' je celé číslo, a vždy lichý, pokud m' je polocelé číslo, takže lze nahradit $(-1)^{-2m'} \mapsto (-1)^{-2j'}$ a toto znaménko neovlivní sumu přes m' . Dále se využijí relace ortogonality pro $3j$ symboly

$$\boxed{\sum_{m_2 m_3} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j'_1 & j_2 & j_3 \\ m'_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} = \frac{1}{2j_1+1} \delta_{j_1 j'_1} \delta_{m_1 m'_1} \delta(j_1, j_2, j_3)}, \quad (14.5.6)$$

kde $\delta(j_1, j_2, j_3) = 1$, pokud j_1, j_2, j_3 splňují trojúhelníkovou nerovnost $|j_1 - j_2| \leq j_3 \leq j_1 + j_2$, a 0 v opačném případě.

Pro 3j symboly v úloze dají relace ortogonalit

$$\sum_{\mu m'} \begin{pmatrix} J & \lambda & j' \\ -M & \mu & m' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} J & \lambda & j' \\ -M & \mu & m' \end{pmatrix} = \frac{1}{2J+1} \delta(J, \lambda, j'), \quad (14.5.7)$$

takže

$$\begin{aligned} \langle a, JM | \hat{U}^{(\lambda)} \cdot \hat{V}^{(\lambda)} | b, JM \rangle \\ = \frac{(-1)^J}{2J+1} \sum_c (-1)^{-j'} \left(a, J \left\| \hat{U}^{(\lambda)} \right\| c, j' \right) \left(c, j' \left\| \hat{V}^{(\lambda)} \right\| b, J \right) \end{aligned} \quad (14.5.8)$$

$|J - \lambda| \leq j' \leq J + \lambda$

a srovnáním s výrazem (14.5.1) dostaneme

$$\begin{aligned} \left(a, J \left\| \hat{U}^{(\lambda)} \cdot \hat{V}^{(\lambda)} \right\| b, j \right) = \\ = \delta_{Jj} (-1)^J \frac{1}{\sqrt{2J+1}} \sum_c (-1)^{-j'} \left(a, J \left\| \hat{U}^{(\lambda)} \right\| c, j' \right) \left(c, j' \left\| \hat{V}^{(\lambda)} \right\| b, j \right). \end{aligned} \quad (14.5.9)$$

$c \quad |J - \lambda| \leq j' \leq J + \lambda$

Poznámka: V získaném výrazu probíhá sčítání přes j' jen přes konečný počet vyznačených hodnot. Suma přes c' je však obecně nekonečná.

14.6 Redukovaný maticový element impulsmomentu

Nalezněte redukovaný maticový element operátoru impulsmomentu $\hat{\mathbf{J}}$.

Řešení:

Redukovaný maticový element stačí počítat pro jednu sférickou komponentu tenzoru $\hat{\mathbf{J}}^{(1)}$. Je výhodné zvolit si $\hat{\mathbf{J}}_0^{(1)} = \hat{\mathbf{J}}_z$. Pak

$$\langle a, JM | \hat{\mathbf{J}}_3 | b, jm \rangle = m f(a, b) \delta_{Jj} \delta_{Mm}. \quad (14.6.1)$$

Na druhou stranu (s omezením se na $J = j$)

$$\begin{aligned} \langle a, JM | \hat{\mathbf{J}}_3 | b, JM \rangle &= \frac{(-1)^{J+1-J}}{\sqrt{2J+1}} C_{10JM}^{JM} \left(a, J \left\| \hat{\mathbf{J}}^{(1)} \right\| b, J \right) = \\ &= \delta_{Mm} \frac{1}{\sqrt{J(J+1)(2J+1)}} \left(a, J \left\| \hat{\mathbf{J}}^{(1)} \right\| b, J \right), \end{aligned} \quad (14.6.2)$$

neboť

$$C_{10JM}^{JM} = -\frac{M}{\sqrt{J(J+1)}} \delta_{Mm}, \quad (14.6.3)$$

viz například [10].

Srovnání těchto dvou výrazů dá hledaný redukovaný maticový element

$$\left(a, J \left\| \hat{\mathbf{J}}^{(1)} \right\| b, j \right) = f(a, b) \delta_{Jj} \sqrt{J(J+1)(2J+1)}, \quad (14.6.4)$$

kde $f(a, b) = \langle a | b \rangle$.

Poznámka: Vektor $\hat{\mathbf{J}}$ lze pro spin $s = \frac{1}{2}$ realizovat pomocí Pauliho σ matic

$$\hat{\mathbf{s}} = \frac{\boldsymbol{\sigma}}{2}. \quad (14.6.5)$$

Redukovaný maticový element pro Pauliho vektor je tedy

$$\left(\frac{1}{2}\left\|\sigma\right\|\frac{1}{2}\right) = 2\left(\frac{1}{2}\left\|\hat{s}^{(1)}\right\|\frac{1}{2}\right) = 2\sqrt{\frac{1}{2}\left(\frac{1}{2}+1\right)\left(2\times\frac{1}{2}+1\right)} = \sqrt{6}. \quad (14.6.6)$$

14.7 Projekce vektoru na impulsmoment

Nalezněte redukovaný maticový element skalárního součinu libovolného vektorového operátoru $\hat{\mathbf{V}}$ s impulsmomentem $\hat{\mathbf{J}}$.

Řešení:

Řešení spočívá v přímočarém využití vztahu pro skalární součin tenzorových operátorů (14.5.9):

$$\begin{aligned} \left(a, J\left\|\hat{\mathbf{J}} \cdot \hat{\mathbf{V}}\right\|b, j\right) &= \left(a, J\left\|\hat{\mathbf{J}}^{(1)} \cdot \hat{\mathbf{V}}^{(1)}\right\|b, j\right) = \\ &= \frac{(-1)^J \delta_{Jj}}{\sqrt{2J+1}} \sum_{c, j'} (-1)^{-j'} \left(a, J\left\|\hat{\mathbf{J}}^{(1)}\right\|c, j'\right) \left(c, j'\left\|\hat{\mathbf{V}}^{(1)}\right\|b, J\right) = \\ &= \frac{(-1)^J \delta_{Jj}}{\sqrt{2J+1}} (-1)^{-J} \sqrt{J(J+1)(2J+1)} \sum_c \underbrace{\langle a|c\rangle \left(c, J\left\|\hat{\mathbf{V}}^{(1)}\right\|b, J\right)}_{\langle c|(J\|\hat{\mathbf{V}}^{(1)}\|J)|b\rangle} = \\ &= \frac{\delta_{Jj}}{\sqrt{2J+1}} \sqrt{J(J+1)(2J+1)} \left(a, J\left\|\hat{\mathbf{V}}^{(1)}\right\|b, J\right) = \\ &= \delta_{Jj} \sqrt{J(J+1)} \left(a, J\left\|\hat{\mathbf{V}}^{(1)}\right\|b, J\right). \end{aligned} \quad (14.7.1)$$

14.8 Projekční teorém

Dokažte, že pro maticové elementy diagonální v J a pro libovolný vektorový operátor $\hat{\mathbf{V}}$ platí rovnost

$$\left\langle a, J M \left| \hat{\mathbf{V}} \right| b, J m \right\rangle = \left\langle a, J M \left| \frac{\hat{\mathbf{J}} \cdot \hat{\mathbf{V}}}{\hat{\mathbf{J}}^2} \hat{\mathbf{J}} \right| b, J m \right\rangle. \quad (14.8.1)$$

Řešení:

Na obou stranách jsou maticové elementy tenzorových operátorů, lze tedy využít Wigner-Eckartův teorém a tvrzení dokázat jen pro jednu komponentu operátorů.

Levá strana [za využití znalosti Clebsch-Gordanova koeficientu (14.6.3)]:

$$\begin{aligned} \left\langle a, J M \left| \hat{\mathbf{V}}_3 \right| b, J m \right\rangle &= \\ &= \delta_{Mm} \frac{(-1)^{J+1-J}}{\sqrt{2J+1}} C_{10 J M}^{J M} \left(a, J\left\|\hat{\mathbf{V}}^{(1)}\right\|b, J\right) = \\ &= \delta_{Mm} \frac{M}{\sqrt{J(J+1)(2J+1)}} \left(a, J\left\|\hat{\mathbf{V}}^{(1)}\right\|b, J\right) \end{aligned} \quad (14.8.2)$$

Pravá strana (využitím výsledku předchozího příkladu):

$$\begin{aligned}
 \left\langle a, J M \left| \frac{\hat{\mathbf{J}} \cdot \hat{\mathbf{V}}}{\hat{\mathbf{J}}^2} \hat{\mathbf{J}}_3 \right| b, J m \right\rangle &= \\
 &= \delta_{Mm} \frac{M}{J(J+1)} \langle a, J M | \hat{\mathbf{J}} \cdot \hat{\mathbf{V}} | b, J M \rangle = \\
 &= \delta_{Mm} \frac{M}{J(J+1)} (-1)^{J+0-J} \frac{C_{00JM}^{JM}}{\sqrt{2J+1}} \left(a, J \left\| \hat{\mathbf{V}}^{(1)} \cdot \hat{\mathbf{J}}^{(1)} \right\| b, J \right) = \\
 &= \delta_{Mm} \frac{M}{J(J+1)\sqrt{2J+1}} \sqrt{J(J+1)} \left(a, J \left\| \hat{\mathbf{V}}^{(1)} \right\| b, J \right) = \\
 &= \delta_{Mm} \frac{M}{\sqrt{J(J+1)(2J+1)}} \left(a, J \left\| \hat{\mathbf{V}}^{(1)} \right\| b, J \right). \tag{14.8.3}
 \end{aligned}$$

Obě strany se rovnají.

14.9 Magnetický moment

Dva nezávislé impulsmomenty $\hat{\mathbf{L}}$ (například orbitální moment hybnosti) a $\hat{\mathbf{S}}$ (vnitřní spin systému) splňující $[\hat{\mathbf{L}}, \hat{\mathbf{S}}] = 0$ se složí na celkový impulsmoment

$$\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{L}} + \hat{\mathbf{S}}. \tag{14.9.1}$$

Stavem $|(ls)jm\rangle$ označme vlastní vektory operátorů $\hat{\mathbf{L}}^2, \hat{\mathbf{S}}^2, \hat{\mathbf{J}}^2, \hat{\mathbf{J}}_3$:

$$\hat{\mathbf{L}}^2 |(ls)jm\rangle = l(l+1) |(ls)jm\rangle, \tag{14.9.2a}$$

$$\hat{\mathbf{S}}^2 |(ls)jm\rangle = s(s+1) |(ls)jm\rangle, \tag{14.9.2b}$$

$$\hat{\mathbf{J}}^2 |(ls)jm\rangle = j(j+1) |(ls)jm\rangle, \tag{14.9.2c}$$

$$\hat{\mathbf{J}}_3 |(ls)jm\rangle = m |(ls)jm\rangle. \tag{14.9.2d}$$

Definujme operátor magnetického momentu⁵²

$$\hat{\boldsymbol{\mu}} = g_L \hat{\mathbf{L}} + g_S \hat{\mathbf{S}}, \tag{14.9.4}$$

přičemž g_L, g_S jsou reálné parametry, které se nazývají gyromagnetické faktory (g-faktory).⁵³

Spočítejte diagonální maticový element⁵⁴

$$\langle (ls)jm | \hat{\boldsymbol{\mu}} | (ls)jm \rangle. \tag{14.9.10}$$

⁵²Magnetický moment je vyjádřen v jednotkách Bohrova (jaderného) magnetonu

$$\mu_0 = \frac{e\hbar}{2M}, \tag{14.9.3}$$

kde e je elementární náboj, M je hmotnost elektronu (nukleonu). Uvedený výraz platí v jednotkách SI, v Gaussovských elektromagnetických jednotkách se objevuje ještě rychlost světla c ve jmenovateli.

⁵³Jejich číselné hodnoty jsou

$$g_{\text{elektron}} = -2.00231930419922 \approx 2 \tag{14.9.5}$$

$$g_{\text{mion}} = -2.0023318414 \approx 2 \tag{14.9.6}$$

$$g_{\text{neutron}} = -3.82608545 \tag{14.9.7}$$

$$g_{\text{proton}} = 5.585694702 \tag{14.9.8}$$

(znaménka $g_{L,S}$ a μ_0 bývají občas definována obráceně).

⁵⁴Veličina s největší projekcí $j = m$ se nazývá *magnetický moment částice*,

$$\mu \equiv \langle (ls)jj | \mu_z | (ls)jj \rangle. \tag{14.9.9}$$

Řešení:

Předně z výběrových pravidel pro projekci impulsmomentu Wigner-Eckartova teorému vyplývá, že

$$\langle (ls)jm | \hat{\mu}_x | (ls)jm \rangle = \langle (ls)jm | \hat{\mu}_y | (ls)jm \rangle = 0, \quad (14.9.11)$$

neboť $\hat{\mu}_{x,y}$ jsou zapsané ve sférických komponentách pomocí lineární kombinace $\hat{\mu}_{\pm 1}^{(1)}$ a $m \pm 1 \neq m$.

K výpočtu maticového elementu $\hat{\mu}_z$ se využije projekční teorém (14.8.1):

$$\begin{aligned} \langle (ls)jm | \hat{\mu}_z | (ls)jm \rangle &= \\ &= \left\langle (ls)jm \left| \frac{\hat{\mathbf{J}} \cdot \hat{\boldsymbol{\mu}}}{\hat{\mathbf{J}}^2} \hat{\mathbf{J}}_z \right| (ls)jm \right\rangle = \\ &= \frac{m}{j(j+1)} \langle (ls)jm | \hat{\mathbf{J}} \cdot \hat{\boldsymbol{\mu}} | (ls)jm \rangle \end{aligned} \quad (14.9.12)$$

Dále

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{J}} \cdot \hat{\boldsymbol{\mu}} &= (\hat{\mathbf{L}} + \hat{\mathbf{S}}) \cdot (g_L \hat{\mathbf{L}} + g_S \hat{\mathbf{S}}) = \\ &= g_L \hat{\mathbf{L}}^2 + g_S \hat{\mathbf{S}}^2 + (g_L + g_S) \hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{S}} \end{aligned} \quad (14.9.13)$$

a k vyjádření $\hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{S}}$ využijeme standardní trik (spin-orbitální vazba)

$$\hat{\mathbf{J}}^2 = (\hat{\mathbf{L}} + \hat{\mathbf{S}}) \cdot (\hat{\mathbf{L}} + \hat{\mathbf{S}}) = \hat{\mathbf{L}}^2 + \hat{\mathbf{S}}^2 + 2 \hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{S}}, \quad (14.9.14)$$

takže

$$\hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{S}} = \frac{1}{2} (\hat{\mathbf{J}}^2 - \hat{\mathbf{L}}^2 - \hat{\mathbf{S}}^2). \quad (14.9.15)$$

Po dosazení a využití relací (14.9.2) vychází

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{J}} \cdot \hat{\boldsymbol{\mu}} &= g_L \hat{\mathbf{L}}^2 + g_S \hat{\mathbf{S}}^2 + \frac{1}{2} (g_L + g_S) (\hat{\mathbf{J}}^2 - \hat{\mathbf{L}}^2 - \hat{\mathbf{S}}^2) \\ &= \frac{1}{2} (g_L + g_S) \hat{\mathbf{J}}^2 + \frac{1}{2} (g_L \hat{\mathbf{L}}^2 + g_S \hat{\mathbf{S}}^2 - g_L \hat{\mathbf{S}}^2 - g_S \hat{\mathbf{L}}^2) \\ &= \frac{1}{2} (g_L + g_S) \hat{\mathbf{J}}^2 + \frac{1}{2} (g_L - g_S) (\hat{\mathbf{L}}^2 - \hat{\mathbf{S}}^2), \end{aligned} \quad (14.9.16)$$

a tedy konečný výsledek je

$$\langle (ls)jm | \hat{\mu}_z | (ls)jm \rangle = \frac{m}{2} \left\{ g_L + g_S + \frac{g_L - g_S}{j(j+1)} [l(l+1) - s(s+1)] \right\} \equiv g_J m, \quad (14.9.17)$$

kde g_J se nazývá Landéův g -faktor.

14.10 Sférické komponenty tenzoru

Jsou zadány dva libovolné vektorové operátory $\hat{\mathbf{R}}, \hat{\mathbf{S}}$ s kartézskými komponentami \hat{R}_j, \hat{S}_k . Kartézské složky tenzoru vzniklého jejich dyadickým součinem označíme $\hat{\mathbf{T}}_{jk} = \hat{R}_j \hat{S}_k$.

1. Pomocí vztahu pro tenzorový součin tenzorových operátorů

$$\hat{\mathbf{T}}_{\mu}^{(\lambda)} \equiv \sum_{\mu_1, \mu_2} C_{\lambda_1 \mu_1 \lambda_2 \mu_2}^{\lambda \mu} \hat{R}_{\mu_1}^{(\lambda_1)} \hat{S}_{\mu_2}^{(\lambda_2)}$$

nalezněte sférické komponenty tenzorů $\hat{\mathbf{T}}^{(0)}, \hat{\mathbf{T}}^{(1)}, \hat{\mathbf{T}}^{(2)}$ a vyjádřete je pomocí $\hat{\mathbf{T}}_{jk}$.

2. Ukažte, že rozepíšeme-li kartézské komponenty tenzoru $\hat{\mathbf{T}}_{jk}$ (což je libovolný tenzor 2. řádu) jako

$$\hat{\mathbf{T}}_{jk} = \hat{\mathbf{J}}_{jk} + \hat{\mathbf{A}}_{jk} + \hat{\mathbf{B}}_{jk},$$

kde

$$\hat{\mathbf{J}}_{jk} \equiv \frac{1}{3}(\hat{\mathbf{T}}_{11} + \hat{\mathbf{T}}_{22} + \hat{\mathbf{T}}_{33})\delta_{jk}$$

$$\hat{\mathbf{A}}_{jk} \equiv \frac{1}{2}(\hat{\mathbf{T}}_{jk} - \hat{\mathbf{T}}_{kj})$$

$$\hat{\mathbf{B}}_{jk} \equiv \frac{1}{2}(\hat{\mathbf{T}}_{jk} + \hat{\mathbf{T}}_{kj}) - \hat{\mathbf{J}}_{jk}$$

($\hat{\mathbf{J}}$ je násobek jednotkového tenzoru, $\hat{\mathbf{A}}$ je antisymetrický tenzor a $\hat{\mathbf{B}}$ je symetrický tenzor s nulovou stopou), pak $\hat{\mathbf{J}}$, $\hat{\mathbf{A}}$, resp. $\hat{\mathbf{B}}$ tvoří právě kartézské komponenty tenzorového operátoru nultého řádu $\hat{\mathbf{T}}^{(0)}$, prvního řádu $\hat{\mathbf{T}}^{(1)}$, resp. druhého řádu $\hat{\mathbf{T}}^{(2)}$.

15 Nerozlišitelné částice

Pro složené soustavy nerozlišitelných částic je výhodný popis pomocí kreačních a anihilačních operátorů $\hat{a}_k^\dagger, \hat{a}_k$, které působí na *Fockově prostoru*

$$\mathcal{F} = \mathcal{H}^{(0)} \oplus \mathcal{H}^{(1)} \oplus \mathcal{H}^{(2)} \oplus \dots \quad (15.0.1)$$

($\mathcal{H}^{(n)}$ označuje Hilbertův prostor soustavy n částic, $\mathcal{H}^{(0)}$ obsahuje pouze jeden stav $|0\rangle$, který se běžně nazývá *vakuum*). Normované báze vektory prostoru $\mathcal{H}^{(n)}$ budeme značit

$$|N_1, N_2, \dots; N\rangle, \quad \text{kde} \quad \sum_{k=1}^{\infty} N_k = N \quad (15.0.2)$$

je celkový počet částic (N_1 je počet částic v jednočásticovém stavu (orbitalu) $|\phi_k\rangle$), a dají se vytvořit pomocí kreačních operátorů

$$|N_1, N_2, \dots; N\rangle = \frac{1}{\sqrt{N_1! N_2! \dots}} \left(\hat{a}_1^\dagger\right)^{N_1} \left(\hat{a}_2^\dagger\right)^{N_2} \dots |0\rangle. \quad (15.0.3)$$

Schematicky můžeme tedy psát

$$\mathcal{F} = |0\rangle \oplus \hat{a}_j^\dagger |0\rangle \oplus \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_k^\dagger |0\rangle \oplus \dots \quad (15.0.4)$$

Kreační operátory přidávají částici, anihilační ubírají:

$$\hat{a}_k^\dagger |N_1, \dots, N_k, \dots; N\rangle = \sqrt{N_k + 1} |N_1, \dots, N_k + 1, \dots; N + 1\rangle, \quad (15.0.5a)$$

$$\hat{a}_k |N_1, \dots, N_k, \dots; N\rangle = \sqrt{N_k} |N_1, \dots, N_k - 1, \dots; N - 1\rangle \quad (15.0.5b)$$

(odmocninové koeficienty plynou z normalizace vektorů). Působení anihilačního operátoru na vakuum dá 0:

$$\hat{a}_k |0\rangle = 0. \quad (15.0.6)$$

Vlnové funkce soustavy částic musí být symetrické vůči záměně libovolných dvou nerozlišitelných bosonů (částic s celočíselným spinem) a antisymetrické vůči záměně dvou nerozlišitelných fermionů (částic s poločíselným spinem). Toho lze docílit tím, že kreační operátory splňují komutační (bosony) nebo antikomutační (fermiony) relace.

Bosonové kreační a anihilační operátory označíme $\hat{b}_k^\dagger, \hat{b}_k$. Komutační relace mezi nimi zní

$$[\hat{b}_j, \hat{b}_k^\dagger] = \delta_{jk}, \quad [\hat{b}_j, \hat{b}_k] = [\hat{b}_j^\dagger, \hat{b}_k^\dagger] = 0. \quad (15.0.7)$$

Operátor počtu částic ve stavu $|\phi_k\rangle$ a operátor celkového počtu částic jsou

$$\hat{N}_k = \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k, \quad (15.0.8a)$$

$$\hat{N} = \sum_k \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k. \quad (15.0.8b)$$

15.1 Gaussovská porucha bosonového systému

Dva nerozlišitelné bosony se pohybují v poli jednorozměrného harmonického oscilátoru

$$\hat{H}_0 = \frac{1}{2M} (\hat{p}_1^2 + \hat{p}_2^2) + \frac{1}{2} M \Omega^2 (\hat{x}_1^2 + \hat{x}_2^2). \quad (15.1.1)$$

Jejich vzájemná interakce je popsána Gaussovským Hamiltoniánem

$$\hat{H}_I = v e^{-\alpha(\hat{x}_1 - \hat{x}_2)^2}, \quad (15.1.2)$$

kde $v, \alpha > 0$ jsou reálné parametry.

Uvažujte interakci za malou poruchu a spočítejte do prvního řádu poruchové teorie opravu k energii základního stavu.

Řešení:

Úlohu budeme řešit v x -reprezentaci. Jednočásticová vlnová funkce základního stavu je

$$\phi_0(x) = \sqrt{\frac{M\Omega}{2\pi\hbar}} e^{-\frac{M\Omega}{2\hbar}x^2} \quad (15.1.3)$$

V případě dvou bosonů musí být vlnová funkce symetrická vůči záměně dvou částic. To splňuje jednoduchý součin

$$\psi_0^B(x_1, x_2) = \phi_0(x_1)\phi_0(x_2) = \sqrt{\frac{M\Omega}{2\pi\hbar}} e^{-\frac{M\Omega}{2\hbar}(x_1^2+x_2^2)} \quad (15.1.4)$$

Neporušená energie základního stavu soustavy dvou bosonů je

$$E_0^{B(0)} = 2\hbar\Omega \left(0 + \frac{1}{2}\right) = \hbar\Omega \quad (15.1.5)$$

Oprava k energii základního stavu podle poruchové teorie (10.0.5) je⁵⁵

$$\begin{aligned} E_0^{B(1)} &= \iint \psi_0^{B*}(x_1, x_2) \hat{H}_I \psi_0^B(x_1, x_2) dx_1 dx_2 = \\ &= v \frac{M\Omega}{2\pi\hbar} \iint e^{-\frac{M\Omega}{\hbar}(x_1^2+x_2^2)} e^{-\alpha(x_1-x_2)^2} dx_1 dx_2 = \\ &= v \frac{M\Omega}{2\pi\hbar} \iint e^{-\frac{M\Omega}{2\hbar}[(x_1+x_2)^2+(x_1-x_2)^2]} e^{-\alpha(x_1-x_2)^2} dx_1 dx_2 = \\ &= \left| \begin{array}{l} X = \frac{x_1+x_2}{2} \\ x = x_1 - x_2 \end{array} \right. \text{Jakobián} \left. \begin{array}{l} \text{transformace je } 1 \end{array} \right| = \\ &= v \frac{M\Omega}{2\pi\hbar} \int e^{-\frac{2M\Omega}{\hbar}X^2} dX \int e^{-(\frac{M\Omega}{2\hbar}+\alpha)x^2} dx = \\ &= v \frac{M\Omega}{2\pi\hbar} \sqrt{\frac{\pi\hbar}{2M\Omega}} \sqrt{\frac{\pi}{\frac{M\Omega}{2\hbar}+\alpha}} = \\ &= \frac{v}{2} \sqrt{\frac{M\Omega}{M\Omega+2\hbar\alpha}}. \end{aligned} \quad (15.1.7)$$

15.2 Gaussovská porucha fermionového systému

Zadání je stejné jako v předchozím příkladu 15.1, avšak nyní jsou částice fermiony se spinem $\frac{1}{2}$. Spočítejte v prvním řádu poruchové teorie opravu k energii základního stavu pro singletní i tripletní spinový stav.

Řešení:

Vlnová funkce dvou stejných fermionů je

$$\psi^F(x_1, x_2) = \phi^F(x_1, x_2) \Sigma_{S\xi} \quad (15.2.1)$$

kde $\phi^F(x_1, x_2)$ je prostorová část, $\Sigma_{S\xi}$ část spinová. Dva spiny o velikosti $\frac{1}{2}$ se složí buď na celkový spin $S = 1$ — tripletní stav —, který je symetrický vůči záměně částic $1 \leftrightarrow 2$, nebo na spin $S = 0$ — singletní stav —, který je vůči záměně antisymetrický. Vlnová funkce fermionového systému musí být antisymetrická. Z toho vyplývá, že její prostorová část musí být

⁵⁵Transformace k proměnným X, x je speciálním případem přechodu k *Jacobiho souřadnicím* oddělujícím těžišťový a relativní pohyb. Pro tři částice tato transformace zní

$$y_{12} = x_1 - x_2 \quad (15.1.6a)$$

$$y_{123} = \frac{x_1 + x_2}{2} - x_3 \quad (15.1.6b)$$

$$Y = \frac{x_1 + x_2 + x_3}{3} \quad (15.1.6c)$$

- *symetrická* pro singletní stav
- *antisymetrická* pro tripletní stav.

Prostorová část vlnové funkce pro singletní stav tudíž vypadá stejně jako v případě bosonů (15.1.4),

$$\phi_{0,S=0}^F(x_1, x_2) = \phi_0(x_1)\phi_0(x_2) = \sqrt{\frac{M\Omega}{2\pi\hbar}} e^{-\frac{M\Omega}{2\hbar}(x_1^2+x_2^2)}, \quad (15.2.2)$$

a tím pádem také oprava k energii vyjde stejně:

$$E_{0,S=0}^{F(1)} = \frac{\nu}{2} \sqrt{\frac{M\Omega}{M\Omega + 2\hbar\alpha}} \quad (15.2.3)$$

U prostorové části vlnové funkce stavu tripletního si již nelze vystačit s jednočásticovou vlnovou funkcí ψ_0 . Antisymetrizovat se dá pouze součin rozdílných jednočásticových vlnových funkcí. Jedna z částic se tedy musí nacházet v prvním vzbuzeném energetickém stavu $\phi_1(x)$,

$$\phi_{0,S=1}^F(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\phi_0(x_1)\phi_1(x_2) - \phi_1(x_1)\phi_0(x_2)], \quad (15.2.4)$$

přičemž stav $\phi_1(x)$ se určí například aplikováním posunovacího operátoru \hat{a}^\dagger (4.2.17) na vlnovou funkci $\phi_0(x)$:

$$\begin{aligned} \phi_1(x) &= \sqrt{\frac{M\Omega}{2\hbar}} \left(x - \frac{\hbar}{M\Omega} \frac{\partial}{\partial x} \right) \sqrt{\frac{M\Omega}{2\pi\hbar}} e^{-\frac{M\Omega}{2\hbar}x^2} = \\ &= \phi_0(x) \sqrt{\frac{M\Omega}{2\hbar}} \left(x + \frac{\hbar}{M\Omega} \frac{M\Omega}{\hbar} x \right) \\ &= x\phi_0(x) \sqrt{\frac{2M\Omega}{\hbar}}. \end{aligned} \quad (15.2.5)$$

Celková vlnová funkce tedy má tvar

$$\begin{aligned} \phi_{0,S=1}^F(x_1, x_2) &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\phi_0(x_1)x_2\phi_0(x_2)\sqrt{\frac{2M\Omega}{\hbar}} - x_1\phi_0(x_1)\sqrt{\frac{2M\Omega}{\hbar}}\phi_0(x_2) \right] \\ &= \sqrt{\frac{M\Omega}{\hbar}} (x_2 - x_1) \phi_0(x_1)\phi_0(x_2). \end{aligned} \quad (15.2.6)$$

Neporušená hodnota energie je v tomto stavu

$$E_{0,S=1}^{F(0)} = \hbar\omega \left(0 + \frac{1}{2} \right) + \hbar\omega \left(1 + \frac{1}{2} \right) = 2\hbar\omega \quad (15.2.7)$$

a příspěvek 1. řádu poruchové teorie zní

$$\begin{aligned} E_{0,S=1}^{F(1)} &= \iint \psi_{0,S=1}^{F*}(x_1, x_2) \hat{H}_I \psi_{0,S=1}^F(x_1, x_2) dx_1 dx_2 = \\ &= \nu \frac{M\Omega}{\hbar} \frac{M\Omega}{2\pi\hbar} \iint (x_1 - x_2)^2 e^{-\frac{M\Omega}{\hbar}(x_1^2+x_2^2)} e^{-\alpha(x_1-x_2)^2} dx_1 dx_2 = \\ &= \frac{\nu}{2\pi} \left(\frac{M\Omega}{\hbar} \right)^2 \iint (x_1 - x_2)^2 e^{-\frac{M\Omega}{\hbar}(x_1^2+x_2^2)} e^{-\alpha(x_1-x_2)^2} dx_1 dx_2 = \\ &= \frac{\nu}{2\pi} \left(\frac{M\Omega}{\hbar} \right)^2 \int e^{-\frac{2M\Omega}{\hbar}X^2} dX \int x^2 e^{-(\frac{M\Omega}{2\hbar}+\alpha)x^2} dx = \\ &= \frac{\nu}{2\pi} \left(\frac{M\Omega}{\hbar} \right)^2 \sqrt{\frac{\pi\hbar}{2M\Omega}} \frac{1}{2} \frac{\pi}{\frac{M\Omega}{2\hbar} + \alpha} \sqrt{\frac{\pi}{\frac{M\Omega}{2\hbar} + \alpha}} = \\ &= \frac{\nu}{2} \left(\frac{M\Omega}{M\Omega + 2\hbar\alpha} \right)^{3/2}. \end{aligned} \quad (15.2.8)$$

15.3 Kondenzátová střední hodnota

Je zadán bosonový N -částicový kondenzát⁵⁶

$$|B; N\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{N!}} (\hat{B}^\dagger)^N |0\rangle \quad (15.3.1)$$

kde operátor \hat{B}^\dagger je vyjádřen lineární kombinací

$$\hat{B}^\dagger \equiv \sum_k z_k \hat{b}_k^\dagger \quad (15.3.2)$$

a \hat{b}_k^\dagger bosonové operátory, splňující komutační relace (15.0.7). Komplexní čísla z_k jsou normována:

$$|z|^2 \equiv \sum_k z_k^* z_k = 1 \quad (15.3.3)$$

Spočítejte střední hodnotu $\langle B; N | \hat{H} | B; N \rangle$, kde operátor \hat{H} je složen z jednočásticové a dvoučásticové části

$$\hat{H} = \sum_{ij} \epsilon_{ij} \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_j + \frac{1}{2} \sum_{klmn} v_{klmn} \hat{b}_k^\dagger \hat{b}_l^\dagger \hat{b}_n \hat{b}_m, \quad (15.3.4)$$

přičemž ϵ_{ij} , v_{klmn} jsou komplexní čísla.

Řešení:

Pokud se prokomutují všechny anihilační operátory napravo skrz kreační operátory kondenzátu, dá jejich působení na stav vakua nulový příspěvek.

Komutace skrz jeden operátor \hat{B}^\dagger vede na

$$\hat{K}_1 \equiv [\hat{b}_j, \hat{B}^\dagger] = \sum_k z_k [\hat{b}_j, \hat{b}_k^\dagger] = \sum_k z_k \delta_{jk} = z_j. \quad (15.3.5)$$

Indukcí se pak dostane

$$\begin{aligned} \hat{K}_N &\equiv [\hat{b}_j, (\hat{B}^\dagger)^N] = \\ &= [\hat{b}_j, \hat{B}^\dagger] (\hat{B}^\dagger)^{N-1} + \hat{B}^\dagger [\hat{b}_j, (\hat{B}^\dagger)^{N-1}] = \\ &= z_j (\hat{B}^\dagger)^{N-1} + \hat{B}^\dagger \hat{K}_{N-1}, \end{aligned} \quad (15.3.6)$$

neboli

$$\begin{aligned} \hat{K}_2 &= z_j \hat{B}^\dagger + \hat{B}^\dagger z_j = 2z_j \hat{B}^\dagger \\ \hat{K}_3 &= z_j (\hat{B}^\dagger)^2 + \hat{B}^\dagger (2z_j \hat{B}^\dagger) = 3z_j (\hat{B}^\dagger)^2 \\ &\vdots \\ \hat{K}_N^\dagger &= N z_j (\hat{B}^\dagger)^{N-1}. \end{aligned}$$

Působení anihilačního operátoru \hat{b}_j na kondenzát dává

$$\hat{b}_j |B; N\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \hat{b}_j (\hat{B}^\dagger)^N |0\rangle = \quad (15.3.7)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{N!}} N z_j (\hat{B}^\dagger)^{N-1} |0\rangle + \frac{1}{\sqrt{N!}} (\hat{B}^\dagger)^N \hat{b}_j |0\rangle = \quad (15.3.8)$$

$$= \frac{N}{\sqrt{N}} z_j \frac{1}{\sqrt{(N-1)!}} (\hat{B}^\dagger)^{N-1} |0\rangle = \quad (15.3.9)$$

$$= z_j \sqrt{N} |B; N-1\rangle. \quad (15.3.10)$$

⁵⁶Tento příklad je vyřešen a diskutován v učebnici [12].

Střední hodnota Hamiltoniánu v kondenzátovém stavu tedy je

$$\langle B; N | \hat{H} | B; N \rangle = N \sum_{ij} \epsilon_{ij} z_i^* z_j + \frac{N(N-1)}{2} \sum_{klmn} v_{klmn} z_k^* z_l^* z_m z_n \quad (15.3.11)$$

Podobně lze postupovat při výpočtu kondenzátové střední hodnoty vícečásticových operátorů.

15.4 Evoluce bosonového kondenzátu

Soustava N bosonů se nachází ve stavu kondenzátu

$$|\psi_0; N\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{N!}} (\hat{b}_0^\dagger)^N |0\rangle. \quad (15.4.1)$$

a systém je popsán jednočásticovým Hamiltoniánem

$$\hat{H} = \mathcal{E} (\hat{B}^\dagger \hat{b}_0 + \hat{b}_0^\dagger \hat{B}), \quad (15.4.2)$$

ve kterém \mathcal{E} je reálný parametr udávající škálu energie a

$$\hat{B}^\dagger \equiv \sum_{k>0} z_k \hat{b}_k^\dagger \quad (15.4.3)$$

(komplexní parametry z_k nyní nemusí být narozdíl od předchozího příkladu normovány). Operátory $\hat{b}_k, \hat{b}_k^\dagger$ splňují bosonové komutační relace (15.0.7).

Nalezněte časový vývoj stavu $|\psi_0(t); N\rangle$.

Řešení:

Hledaný stav je časovou evolucí počátečního stavu,

$$|\psi_0(t); N\rangle = \hat{U}(t) |\psi_0; N\rangle, \quad (15.4.4)$$

kde

$$\hat{U}(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t}. \quad (15.4.5)$$

Začneme s jedním bosonem v kondenzátu a postupně budeme přidávat další.

- $N = 1$:

$$|\psi_0(t); 1\rangle = e^{\overbrace{-\frac{i}{\hbar} \mathcal{E} t}^{\alpha} \overbrace{(\hat{B}^\dagger \hat{b}_0 + \hat{b}_0^\dagger \hat{B})}^{\hat{X}}} \hat{b}_0^\dagger |0\rangle. \quad (15.4.6)$$

Podle BCH formule (1.4.2) vyjádřené v operátorech $\hat{X}, \hat{b}_0^\dagger$,

$$e^{\alpha \hat{X}} \hat{b}_0^\dagger e^{-\alpha \hat{X}} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\alpha^k}{k!} \hat{K}_k, \quad \hat{K}_0 = \hat{b}_0^\dagger, \\ \hat{K}_{k+1} = [\hat{X}, \hat{K}_k],$$

vychází

$$|\psi_0(t); 1\rangle = \underbrace{\left(\hat{b}_0^\dagger + \alpha [\hat{X}, \hat{b}_0^\dagger] + \frac{\alpha^2}{2!} [\hat{X}, [\hat{X}, \hat{b}_0^\dagger]] + \frac{\alpha^3}{3!} \dots \right)}_{\hat{Z}} \underbrace{e^{\alpha \hat{X}} |0\rangle}_{|0\rangle}. \quad (15.4.7)$$

Jednotlivé členy přispějí následujícím způsobem:

$$[\hat{X}, \hat{b}_0^\dagger] = [\hat{B}^\dagger \hat{b}_0 + \hat{b}_0^\dagger \hat{B}, \hat{b}_0^\dagger] = [\hat{B}^\dagger \hat{b}_0, \hat{b}_0^\dagger] = \hat{B}^\dagger [\hat{b}_0, \hat{b}_0^\dagger] = \hat{B}^\dagger, \quad (15.4.8a)$$

$$[\hat{X}, [\hat{X}, \hat{b}_0^\dagger]] = [\hat{B}^\dagger \hat{b}_0 + \hat{b}_0^\dagger \hat{B}, \hat{B}^\dagger] = \hat{b}_0^\dagger [\hat{B}, \hat{B}^\dagger] = |z|^2 \hat{b}_0^\dagger, \quad (15.4.8b)$$

$$[\hat{X}, [\hat{X}, [\hat{X}, \hat{b}_0^\dagger]]] = [\hat{B}^\dagger \hat{b}_0 + \hat{b}_0^\dagger \hat{B}, |z|^2 \hat{b}_0^\dagger] = |z|^2 \hat{B}^\dagger, \quad (15.4.8c)$$

$$\dots \quad (15.4.8d)$$

Po dosazení tedy vychází

$$\begin{aligned}
 |\psi_0(t); 1\rangle &= \left(\hat{b}_0^\dagger + \alpha \hat{B}^\dagger + \alpha^2 \frac{|z|^2}{2!} \hat{b}_0^\dagger + \alpha^3 \frac{|z|^2}{3!} \hat{B}^\dagger + \alpha^4 \frac{|z|^4}{4!} \hat{b}_0^\dagger + \dots \right) |0\rangle \\
 &= \left[\underbrace{\left(1 + \alpha^2 \frac{|z|^2}{2!} + \alpha^4 \frac{|z|^4}{4!} + \dots \right)}_{\cosh \alpha |z|} \hat{b}_0^\dagger + \underbrace{\left(\alpha + \alpha^3 \frac{|z|^2}{3!} + \alpha^5 \frac{|z|^4}{4!} + \dots \right)}_{\frac{1}{|z|} \sinh \alpha |z|} \hat{B}^\dagger \right] |0\rangle \\
 &= \left[\hat{b}_0^\dagger \cosh \alpha |z| + \hat{B}^\dagger \frac{\sinh \alpha |z|}{|z|} \right] |0\rangle. \tag{15.4.9}
 \end{aligned}$$

- $N = 2$:

$$\begin{aligned}
 |\psi_0(t); 2\rangle &= e^{\alpha \hat{X}} \frac{(\hat{b}_0^\dagger)^2}{2!} |0\rangle = \frac{\hat{Z}}{2} e^{\alpha \hat{X}} \hat{b}_0^\dagger |0\rangle = \frac{\hat{Z}^2}{2} e^{\alpha \hat{X}} |0\rangle = \frac{\hat{Z}^2}{2} |0\rangle \\
 &= \frac{1}{2} \left[\hat{b}_0^\dagger \cosh \alpha |z| + \hat{B}^\dagger \frac{\sinh \alpha |z|}{|z|} \right]^2 |0\rangle. \tag{15.4.10}
 \end{aligned}$$

- N obecné: Pomocí BCH formule se komutuje N -krát. Indukcí vychází

$$\begin{aligned}
 |\psi_0(t); N\rangle &= \frac{1}{\sqrt{N!}} \left[\hat{b}_0^\dagger \cosh \alpha |z| + \hat{B}^\dagger \frac{\sinh \alpha |z|}{|z|} \right]^N |0\rangle \\
 &= \frac{1}{\sqrt{N!}} \left[\hat{b}_0^\dagger \cos \frac{\mathcal{E}t |z|}{\hbar} + i \frac{\hat{B}^\dagger}{|z|} \sin \frac{\mathcal{E}t |z|}{\hbar} \right]^N |0\rangle. \tag{15.4.11}
 \end{aligned}$$

Stavový vektor tedy rotuje v komplexní rovině s frekvencí

$$\omega \equiv \frac{\mathcal{E}}{\hbar} |z|. \tag{15.4.12}$$

Poznámka: O kondenzátorových koherentních stavech a jejich aplikacích se lze dočíst více v článku [16].

15.5 Atom helia

Hamiltonián popisující atom helia zní

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_I, \tag{15.5.1a}$$

$$\hat{H}_0 = \frac{\hat{\mathbf{p}}_1^2}{2M} + \frac{\hat{\mathbf{p}}_2^2}{2M} - \frac{2\gamma}{\hat{r}_1} - \frac{2\gamma}{\hat{r}_2}, \tag{15.5.1b}$$

$$\hat{H}_I = \frac{\gamma}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}, \tag{15.5.1c}$$

kde \hat{H}_0 popisuje interakci jednotlivých elektronů v obalu s atomovým jádrem a \hat{H}_I elektrostatické odpuzování mezi oběma elektrony. Elektrony v obalu jsou nerozlišitelné fermiony. Jádro je bráno za bodovou částici, spin-orbitální interakci a jaderné pohyby zanedbáváme.

1. Určete základní stav a první excitovaný stav atomu helia, pokud zanedbáme vzájemnou interakci obou elektronů.
2. Za předpokladu, že \hat{H}_I lze chápat jako poruchu, spočítejte opravu k energii základního stavu.
3. Spočítejte korekci k degenerovanému excitovanému 1s2s stavu a určete vzdálenost rozštěpených hladin, které je způsobeno odpuzováním elektronů.

4. Helium vložíme do homogenního magnetického pole $\mathbf{B} = (0, 0, B)$ mířícího ve směru osy z . Spočítejte, o kolik se změní energie základního stavu. Jaké znaménko bude mít tato změna a co to fyzikálně znamená?
5. Předpokládejte, že v čase $t = 0$ je jeden elektron atomu helia ve stavu $1s$ se spinem mířícím nahoru a druhý elektron ve stavu $2s$ se spinem mířícím dolů. Jaký bude stav systému v čase $t > 0$? Odpuzování elektronů berte jako malou poruchu a spočítejte čas T , ve kterém se oba spiny „prohodí“. Diskutujte platnost tohoto výpočtu.

15.6 Rozptyl dvou částic se spinem

Interakce dvou *rozlišitelných* částic o hmotnosti M se spinem $\frac{1}{2}$ je popsána potenciálem

$$V = V_0(r) + V_s(r) \boldsymbol{\sigma}^{(1)} \cdot \boldsymbol{\sigma}^{(2)} \quad (15.6.1)$$

kde r je vzájemná vzdálenost obou částic,

$$\boldsymbol{\sigma}^{(1)} \equiv \boldsymbol{\sigma} \otimes 1, \quad (15.6.2a)$$

$$\boldsymbol{\sigma}^{(2)} \equiv 1 \otimes \boldsymbol{\sigma} \quad (15.6.2b)$$

jsou operátory na Hilbertově prostoru $\mathcal{H} = \mathcal{H}^{(1)} \otimes \mathcal{H}^{(2)}$ a $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3)$ jsou Pauliho matice. Potenciály $V_0(r)$, $V_s(r)$ nejsou blíže specifikovány, předpokládejte pouze, že interakce jsou krátkodosahové, takže integrály

$$v_0(\mathbf{q}) = \int e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} V_0(r) d^3\mathbf{r} = \frac{4\pi}{q} \int_0^\infty r V_0(r) \sin qr dr, \quad (15.6.3a)$$

$$v_s(\mathbf{q}) = \int e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} V_s(r) d^3\mathbf{r} = \frac{4\pi}{q} \int_0^\infty r V_s(r) \sin qr dr, \quad (15.6.3b)$$

kde $\mathbf{q} = \mathbf{k} - \mathbf{k}'$, existují a jsou konečné.

1. V rámci 1. Bornovy aproximace vyjádřete amplitudy rozptylu

$$\begin{array}{ll} f_{\uparrow\uparrow \rightarrow \uparrow\uparrow}(\theta) & f_{\downarrow\downarrow \rightarrow \downarrow\downarrow}(\theta) \\ f_{\uparrow\downarrow \rightarrow \uparrow\downarrow}(\theta) & f_{\uparrow\downarrow \rightarrow \downarrow\uparrow}(\theta) \end{array}$$

a příslušné diferenciální účinné průřezy $\frac{d\sigma}{d\Omega}$. θ označuje úhel mezi vektory \mathbf{k} a \mathbf{k}' a šipky udávají orientace jednotlivých spinů před interakcí a po interakci (poslední amplituda rozptylu udává případ, kdy si jednotlivé částice prohodí spin).

2. Jak se změní diferenciální účinné průřezy, pokud obě částice budou *nerozlišitelné fermiony*?
3. Uvažujte speciální případ Gaussovske interakce

$$V_0(r) = V_s(r) = v e^{-\mu r^2} \quad (15.6.4)$$

Nalezněte, pro jaké úhly θ budou diferenciální účinné průřezy

$$\left. \frac{d\sigma}{d\Omega} \right|_{\uparrow\uparrow \rightarrow \uparrow\uparrow} \quad \left. \frac{d\sigma}{d\Omega} \right|_{\uparrow\downarrow \rightarrow \uparrow\downarrow} \quad \left. \frac{d\sigma}{d\Omega} \right|_{\uparrow\downarrow \rightarrow \downarrow\uparrow} \quad (15.6.5)$$

maximální, a to jak v případě rozlišitelných částic, tak v případě částic nerozlišitelných.

15.7 Bogoljubovova transformace

Systém je popsáný Hamiltoniánem

$$\hat{H} = \sum_k \left(E_k \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k + \lambda_k \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k^\dagger + \lambda_k^* \hat{a}_k \hat{a}_k \right), \quad (15.7.1)$$

kde $\hat{a}_k, \hat{a}_k^\dagger$ jsou *bosonové* operátory splňující bosonové komutační relace

$$[\hat{a}_j, \hat{a}_k^\dagger] = \delta_{jk}, \quad (15.7.2a)$$

$$[\hat{a}_j, \hat{a}_k] = [\hat{a}_j^\dagger, \hat{a}_k^\dagger] = 0, \quad (15.7.2b)$$

$E_k \in \mathbb{R}$, $\lambda_k \in \mathbb{C}$ a λ_k^* je číslo komplexně sdružené k λ_k .

1. Vyjádřete podmínku, za které operátory $\hat{b}_k, \hat{b}_k^\dagger$ získané transformací

$$\hat{b}_k = u_k \hat{a}_k^\dagger + v_k \hat{a}_k, \quad (15.7.3a)$$

$$\hat{b}_k^\dagger = v_k^* \hat{a}_k^\dagger + u_k^* \hat{a}_k, \quad (15.7.3b)$$

kde $u_k, v_k \in \mathbb{C}$, budou splňovat bosonové komutační relace

$$[\hat{b}_j, \hat{b}_k^\dagger] = \delta_{jk}, \quad (15.7.4a)$$

$$[\hat{b}_j, \hat{b}_k] = [\hat{b}_j^\dagger, \hat{b}_k^\dagger] = 0. \quad (15.7.4b)$$

2. Pomocí této lineární transformace převed'te Hamiltonián na diagonální tvar

$$\hat{H} = \sum_k \epsilon_k \hat{b}_k^\dagger \hat{b}_k + C \quad (15.7.5)$$

a vyjádřete čísla ϵ_k a C pomocí E_k a λ_k . Za jaké podmínky lze transformaci provést?

3. Jaké je energetické spektrum systému popsáného Hamiltoniánem \hat{H} ?
4. Jak se změní spektrum, pokud $\hat{a}_k, \hat{a}_k^\dagger$ budou *fermionové* operátory?

16 Hartree-Fokova metoda

Systém N nerozlišitelných částic interagujících nanejvýš dvoučásticovými interakcemi je popsán Hamiltoniánem

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V}^{(1)} + \hat{V}^{(2)}, \quad (16.0.1)$$

kde

$$\hat{T} = \sum_{j=1}^N \hat{t}_j = \sum_{j=1}^N \frac{\hat{\mathbf{p}}_j^2}{2M}, \quad \hat{V}^{(1)} = \sum_{j=1}^N \hat{v}_j^{(1)}, \quad \hat{V}^{(2)} = \sum_{j < k} \hat{v}_{jk}^{(2)}, \quad (16.0.2)$$

jsou jednočásticové operátory kinetické energie a interakce s vnějším polem a dvoučásticový operátor popisující vzájemnou interakci mezi konstituenty.

Základní stav se hledá ve tvaru

$$|\Psi\rangle = \hat{a}_N^\dagger \cdots \hat{a}_1^\dagger |0\rangle. \quad (16.0.3)$$

variační metodou. To vede na *Hartree-Fokovu rovnici* pro jednočásticové stavy $|\phi_n\rangle \equiv \hat{a}_n^\dagger |0\rangle$ a jednočásticové energie ϵ_n systému nerozlišitelných fermionů

$$(\hat{t} + \hat{V}^{(1)} + \hat{V}^{\text{HF}}) |\phi_n\rangle = \epsilon_n |\phi_n\rangle, \quad (16.0.4)$$

kde \hat{V}^{HF} je operátor Hartree-Fokova středního pole, pro který platí

$$\langle \phi_m | \hat{V}^{\text{HF}} | \phi_n \rangle = \sum_{k=1}^N \left[\langle \phi_k \phi_m | \hat{V}^{(2)} | \phi_k \phi_n \rangle - \langle \phi_m \phi_k | \hat{V}^{(2)} | \phi_k \phi_n \rangle \right]. \quad (16.0.5)$$

Energie $\epsilon_F \equiv \epsilon_N$ se nazývá Fermiho energie.

Vyřešením rovnice (16.0.4) se získá aproximace energie základního stavu,

$$E_0^{\text{HF}} = \langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle = \sum_{k=1}^N \langle \phi_k | \hat{t} + \hat{V}^{(1)} | \phi_k \rangle + \frac{1}{2} \sum_{k,l=1}^N \left[\langle \phi_k \phi_l | \hat{V}^{(2)} | \phi_k \phi_l \rangle - \langle \phi_l \phi_k | \hat{V}^{(2)} | \phi_k \phi_l \rangle \right]. \quad (16.0.6)$$

Řešení v zadané bázi

Pokud jednotlivé jednočásticové stavy vyjádříme v jednočásticové bázi $\mathcal{B} \equiv \{|d\rangle\}$

$$|\phi_n\rangle = \sum_d C_{nd} |d\rangle, \quad (16.0.7)$$

kde d probíhá přes všechny kombinace všech použitých kvantových čísel a $C_{nd} \in \mathbb{C}$ jsou koeficienty rozvoje tvořící komponenty matice dimenze $N_{\mathcal{B}} = \dim \mathcal{B}$, dostaneme z (16.0.5)⁵⁷

$$\sum_{ac} \langle a | C_{ma}^* \hat{V}^{\text{HF}} C_{nc} | c \rangle = \sum_{k=1}^N \sum_{ac} \sum_{bd} \left[\langle ba | C_{kb}^* C_{ma}^* \hat{V}^{(2)} C_{kd} C_{nc} | dc \rangle - \langle ab | C_{ma}^* C_{kb}^* \hat{V}^{(2)} C_{kd} C_{nc} | dc \rangle \right], \quad (16.0.8)$$

neboli pro jednotlivé elementy sumy

$$\begin{aligned} v_{ac}^{\text{HF}} &\equiv \langle a | \hat{V}^{\text{HF}} | c \rangle = \sum_{k=1}^N \sum_{bd} C_{kb}^* C_{kd} \left[\langle ba | \hat{V}^{(2)} | dc \rangle - \langle ab | \hat{V}^{(2)} | dc \rangle \right] \\ &= \sum_{k=1}^N \sum_{bd} C_{kb}^* C_{kd} \left[\langle ab | \hat{V}^{(2)} | cd \rangle - \langle ba | \hat{V}^{(2)} | cd \rangle \right], \end{aligned} \quad (16.0.9)$$

⁵⁷ $|dc\rangle$ je zkratka pro $|d\rangle^{(1)} \otimes |c\rangle^{(2)}$, takže $|dc\rangle \neq |cd\rangle$.

neboť díky nerozlišitelnosti částic musí platit

$$\langle ab | \hat{v}^{(2)} | cd \rangle = \langle ba | \hat{v}^{(2)} | dc \rangle. \quad (16.0.10)$$

Hartree-Fokovu rovnici (16.0.4) lze tedy přepsat do tvaru

$$\sum_c \langle a | (\hat{t} + \hat{v}^{(1)} + \hat{v}^{\text{HF}}) C_{nc} | c \rangle = \sum_c \epsilon_n C_{nc} \langle a | c \rangle = \epsilon_n C_{na} \quad (16.0.11)$$

$$\boxed{\sum_c \left(t_{ac} + v_{ac}^{(1)} + v_{ac}^{\text{HF}} \right) C_{nc} = \epsilon_n C_{na},} \quad (16.0.12)$$

což je (maticová) Hartree-Fokova rovnice v bázi \mathcal{B} . Za tuto bázi se nejčastěji volí báze harmonického oscilátoru nebo báze atomu vodíku. V molekulové fyzice se také s oblibou používají aproximace vlnových funkcí pomocí součtu Gaussovských funkcí, protože s nimi se velmi dobře pracuje a je snadné pro ně počítat maticové elementy $\langle ab | \hat{v}^{(2)} | cd \rangle$, i když jsou jednotlivé jednočásticové vlnové funkce vůči sobě posunuté (odpovídají různým atomům).⁵⁸ Hledaná energie základního stavu pak z (16.0.6) vychází

$$\boxed{E_0^{\text{HF}} = \sum_{k=1}^N \sum_{ac} C_{ka}^* C_{kc} \langle a | \hat{t} + \hat{v}^{(1)} | c \rangle + \frac{1}{2} \sum_{k,l=1}^N \sum_{abcd} C_{ka}^* C_{lb}^* C_{kc} C_{ld} \left[\langle ab | \hat{v}^{(2)} | cd \rangle - \langle ba | \hat{v}^{(2)} | cd \rangle \right].} \quad (16.0.13)$$

Hartree-Fokova rovnice (16.0.12) se řeší iterativní cestou.

1. Začne se s nějakým nástřelem matice C_{nc} .
2. Z matice C_{nc} se napočte Hartree-Fokovo pole v_{ac}^{HF} podle vztahu (16.0.9) následně matice Hamiltoniánu

$$h_{ac} = t_{ac} + v_{ac}^{(1)} + v_{ac}^{\text{HF}}, \quad a, c = 1, \dots, N_{\mathcal{B}}, \quad (16.0.14)$$

kde $N_{\mathcal{B}}$ je počet báзовých prvků použité báze \mathcal{B} .

3. Diagonalizací matice h_{ac} získáme novou matici vlastních vektorů C_{nc} a odpovídajících jednočásticových energií ϵ_n .
4. Jednočásticové vlastní stavy seřadíme vzestupně podle jejich energií.
5. Spočítáme aproximovanou energii základního stavu E_0^{HF} podle (16.0.13) a porovnáme ji s hodnotou z předchozí iterace. Pokud se tyto hodnoty liší o méně než zadané δ , výpočet ukončíme.
6. Vrátime se k bodu 2, přičemž novou matici C_{nc} použijeme jako vstup pro výpočet nového Hartree-Fokova pole.

Tato iterativní metoda obvykle rychle konverguje.

⁵⁸Tato báze se označuje STO-nG, což je zkratka pro Slater-type orbital, n je počet Gaussovek, které se pro vlnovou funkci používají, a G znamená Gaussovka.

16.1 Základní stavy lehkých prvků

Hamiltonián atomu s protonovým číslem Z je

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V}^{(1)} + \hat{V}^{(2)}, \quad (16.1.1a)$$

$$\hat{T} = \sum_{j=1}^Z \hat{t}_j = \sum_{j=1}^Z \frac{\hat{\mathbf{p}}_j^2}{2M}, \quad (16.1.1b)$$

$$\hat{V}^{(1)} = \sum_{j=1}^Z \hat{v}_j^{(1)} = -Z\gamma \sum_{j=1}^Z \frac{1}{\hat{r}_j}, \quad (16.1.1c)$$

$$\hat{V}^{(2)} = \sum_{j < k} \hat{v}_{jk}^{(2)} = \gamma \sum_{j < k} \frac{1}{|\hat{\mathbf{r}}_j - \hat{\mathbf{r}}_k|}, \quad (16.1.1d)$$

kde \hat{T} je kinetická energie elektronů v atomovém obalu, $\hat{V}^{(1)}$ popisuje interakci elektronů s atomovým jádrem a $\hat{V}^{(2)}$ vzájemnou elektrostatickou interakci mezi elektrony. Uvažujte jen elektronové stupně volnosti, pohyb jádra zanedbejte.

Počítejte v bezrozměrných atomových jednotkách $\hbar = \gamma = M = 1$. Jednotka energie pak je $2E_0$, kde $E_0 = 13,6 \text{ eV}$ je ionizační energie atomu vodíku.

Za jednočásticovou bázi $|a\rangle$ zvolte bázi vodíkupodobného atomu s nábojem jádra Z , kde $a = \{n, l, m, s\}$ (hlavní, orbitální a magnetické kvantové číslo a projekce spinu elektronu $s = \pm \frac{1}{2}$). V ní je jednočásticová část Hartree-Fokovy rovnice diagonální,

$$\langle a | \hat{t}_j + \hat{v}_j^{(1)} | c \rangle = -\frac{Z^2}{2n^2} \delta_{ac}. \quad (16.1.2)$$

Pro dvoučásticovou část je potřeba vyjádřit maticové elementy

$$\langle ab | \hat{V}^{(2)} | cd \rangle = \left\langle ab \left| \frac{1}{|\hat{\mathbf{r}}_1 - \hat{\mathbf{r}}_2|} \right| cd \right\rangle = \int d^3 r_1 d^3 r_2 \psi_a^*(\mathbf{r}_1) \psi_b^*(\mathbf{r}_2) \frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \psi_c(\mathbf{r}_1) \psi_d(\mathbf{r}_2), \quad (16.1.3)$$

kde

$$\psi_a(\mathbf{r}) \equiv \psi_{nlm}(\mathbf{r}) \chi_s = R_{nl}(r) Y_m^{(l)}(\theta, \phi) \chi_s \quad (16.1.4)$$

Provedeme následující zanedbání:

- Omezíme se na s -orbitály, tj. na orbitály $l = 0$.
- Omezíme počet bázevých vektorů na $n \leq n_{\max} = 4$.
- Zanedbáváme spin-orbitální vazbu.

Bázevých funkce budou tedy dány jen radiální částí vlnové funkce,

$$\psi_{as}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} R_{a0}(r) |s\rangle \quad (16.1.5)$$

(poloměr je vyjádřen v jednotkách Bohrova poloměru, hlavní kvantové číslo jsme označili přímo a , $1/\sqrt{4\pi}$ je příslušná kulová funkce $Y_0^{(0)}$). Tato aproximace bude fungovat nejlépe pro atomy helia a beryllia, jejichž zaplněné orbitály jsou $1s$, respektive $1s2s$. Jednočásticová báze tedy bude mít $n_B = 8$ ortonormálních stavů (pro každé $a \leq 4$ dva spinové stavy).

1. Napočítejte maticové elementy $\langle ab | \hat{V}^{(2)} | cd \rangle$, tedy integrály součinů čtyř vlnových funkcí násobených interakcí $1/|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$. Počet maticových elementů v zadané bázi bude $4^4 = 256$.
2. Vytvořte počítačový program, který vypočítá základní stav atomů He ($Z = 2$), Be ($Z = 4$) a O ($Z = 6$). Postupujte podle následujícího itineráře, který kopíruje postup popsany v teoretickém úvodu.

- (a) Předpokládejte, že znáte matici C_{nc} , a vytvořte rutinu pro výpočet matice v_{ac}^{HF} podle vztahu (16.0.9).
- (b) Napočítejte matici jednočásticového hamiltoniánu

$$h_{ac} = t_{ac} + v_{ac}^{(1)} + v_{ac}^{\text{HF}}. \quad (16.1.6)$$

- (c) Tuto matici zdiagonalizujte, tj. vyřešte rovnici (16.0.12). Obdržíte n_B jednočásticových energií a odpovídající vlastní stavy. Vlastní stavy seřaďte vzestupně podle jejich energií. Získáte tak novou verzi matice C_{nc} .
- (d) Spočítejte odhad energie základního stavu E_0^{HF} podle (16.0.13) na základě jednočásticových stavů z předchozího kroku.
- (e) Výpočet opakujte od bodu (a), přičemž za matici C_{nc} vezměte tu spočítanou v bodě (d).
- (f) Výpočet ukončete ve chvíli, kdy se ve dvou po sobě jdoucích iteracích budou energie E_0^{HF} od sebe lišit o méně než $\delta = 10^{-6}$.

Matici C_{nc} můžete na počátku volit jednotkovou, nulovou, vyplněnou náhodnými čísly nebo něčím úplně jiným číselného charakteru. **Při psaní programu nezapomeňte na spinový stupeň volnosti.** (Díky tomu, že zanedbáváme spin-orbitální vazbu, budou všechny jednočásticové stavy dvakrát degenerované.)

3. Porovnejte získané energie s přesnými hodnotami (v atomových jednotkách)

$$E_0[\text{He}] = -2.904, \quad E_0[\text{Be}] = -14.67, \quad E_0[\text{C}] = -37.88$$

a s hodnotou vypočtenou pro helium v příkladu 15.5 po započtení poruchy způsobené interakcí elektronů,

$$E_{11}[\text{He}] = -4 + \frac{5}{4} = -\frac{11}{4}.$$

Výsledek podle Hartreeho a Foka by neměl být moc mimo.

Toto je esence Hartree-Fokovy metody, která se používá v jaderné, atomové i molekulové fyzice. Jediný rozdíl je v použitých bázevých funkcích a interakcích.

Řešení:

Radiální část vlnové funkce je

$$R_{a0}(r) = 2 \left(\frac{Z}{a} \right)^{\frac{3}{2}} L_{a-1}^1 \left(\frac{2Zr}{a} \right) e^{-\frac{Zr}{a}}, \quad (16.1.7)$$

kde $L_n^m(x)$ je přidružený Laguerrův polynom. Integrál pro maticový element (16.1.3) vychází

$$\langle ab | \hat{V}^2 | cd \rangle = \frac{1}{4\pi} \int_0^\infty r_1^2 dr_1 \int_0^\infty r_2^2 dr_2 R_{a0}(r_1) R_{b0}(r_2) I(r_1, r_2) R_{c0}(r_1) R_{d0}(r_2), \quad (16.1.8)$$

kde integrál přes úhlové proměnné je

$$I(r_1, r_2) = \int d\Omega_1 \int d\Omega_2 \frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \quad (16.1.9)$$

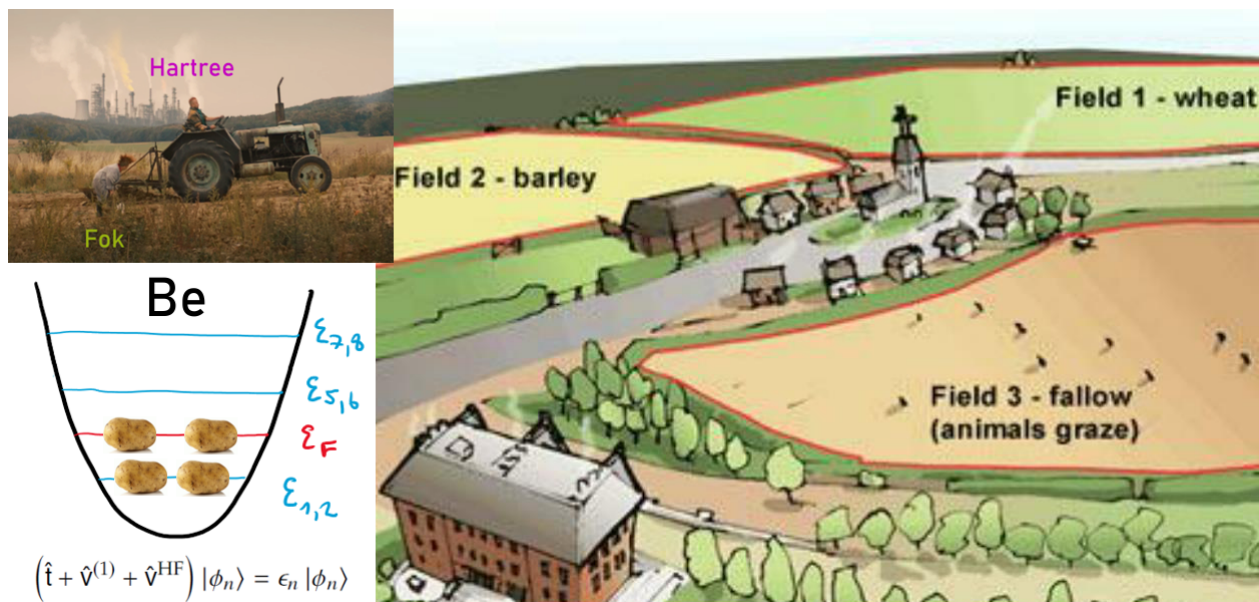
$$= 4\pi \int_0^{2\pi} d\phi_2 \int_0^\pi \sin \theta d\theta \frac{1}{\sqrt{r_1^2 + r_2^2 - 2r_1 r_2 \cos \theta}} \quad (16.1.10)$$

$$= \frac{8\pi^2}{r_1 r_2} (r_1 + r_2 - |r_1 - r_2|) \quad (16.1.11)$$

(souřadná soustava je při výpočtu tohoto dvojnásobného integrálu orientována tak, že osa z_1 míří do směru vektoru \mathbf{r}_2).

Pro explicitní výpočet maticových elementů $\langle ab|\hat{V}^{(2)}|cd\rangle$ lze využít například program Mathematica. Použitý kód je na adrese <http://pavelstransky.cz/cvicenikt2/RadialIntegral.nb>, výsledné maticové elementy jsou uloženy v souboru <http://pavelstransky.cz/cvicenikt2/radial.txt>. V řádcích jsou po řadě hodnoty hlavních kvantových čísel $a, b, c, d \leq n_{\max}$ a hodnota odpovídajícího maticového elementu. **Důležité!** Maticové elementy jsou počítané pro vodík $Z = 1$. Pro atom s protonovým číslem Z je nutné je tímto číslem vynásobit.

Kód napsaný v jazyce Python počítající energii základního stavu najdete na adrese <http://pavelstransky.cz/cvicenikt2/hf.py>



A WKB aproximace

WKB⁵⁹ je kvaziklasická aproximace jednorozměrné Schrödingerovy rovnice

$$-\frac{\hbar^2}{2M}\psi''(x) + V(x)\psi(x) = E\psi(x). \quad (1.0.1)$$

Rovnice se přepíše do tvaru

$$\psi''(x) = -\frac{p^2}{\hbar^2}\psi(x), \quad (1.0.2)$$

kde

$$p = \pm\sqrt{2M[E - V(x)]} \quad (1.0.3)$$

je klasická hybnost částice. Vlnová funkce se následně hledá ve tvaru

$$\psi(x) = A(x)e^{\frac{i}{\hbar}S(x)}, \quad (1.0.4)$$

kde obě funkce $A(x)$, $S(x)$ jsou reálné; udávají tedy amplitudu a fázi. Dosazení do Schrödingerovy rovnice (1.0.2) vede na dvě rovnice (jednu pro reálnou a druhou pro imaginární část)

$$\hbar^2 \frac{A''(x)}{A(x)} - [S'(x)]^2 = -p^2, \quad (1.0.5a)$$

$$2A'(x)S'(x) + A(x)S''(x) = 0. \quad (1.0.5b)$$

Řešení druhé rovnice je

$$[A^2(x)S'(x)]' = 0 \quad \Rightarrow \quad A(x) = \frac{C}{S'(x)}. \quad (1.0.6)$$

V první rovnici se zanedbá člen \hbar^2 a navíc se předpokládá, že „oscilace“ amplitudy $A(x)$ jsou mnohem menší než amplituda sama. Tím se rovnice zjednoduší a funkci $S(x)$ lze nalézt integrováním

$$[S'(x)]^2 = p^2 \quad \Rightarrow \quad S'(x) = \pm |p(x)| \quad \Rightarrow \quad S(x) = \pm \int_{x_0}^x |p(x')| dx', \quad (1.0.7)$$

což je výraz pro klasickou akci.

WKB vlnová funkce má tedy tvar

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{|p(x)|}} \left[\mathcal{A}_+ e^{\frac{i}{\hbar} \int_{x_0}^x |p(x')| dx'} + \mathcal{A}_- e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{x_0}^x |p(x')| dx'} \right], \quad (1.0.8)$$

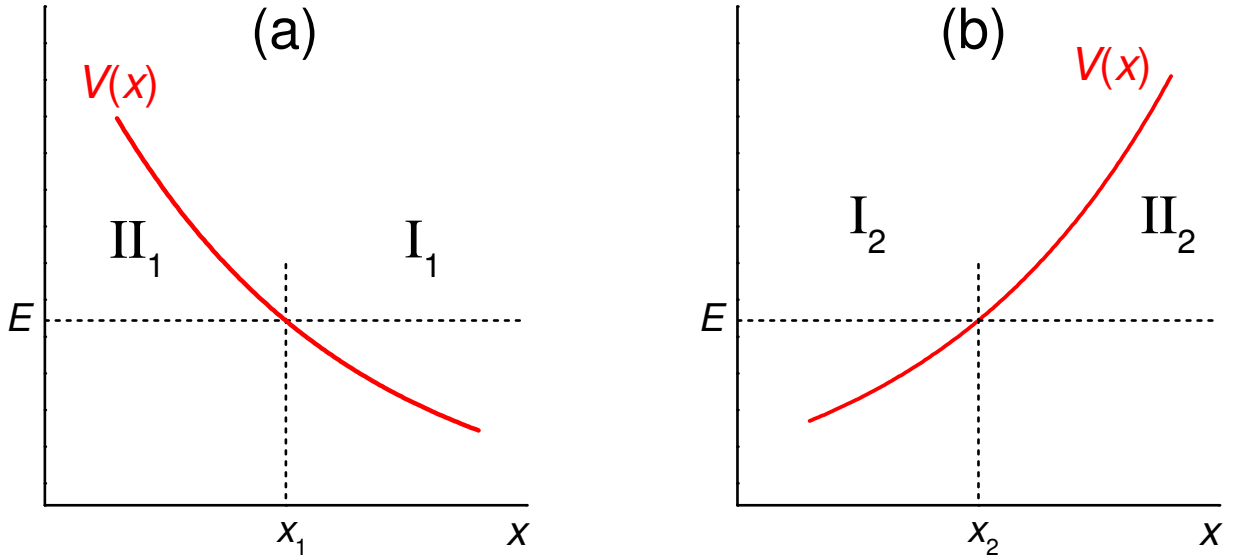
kde x_0 je libovolný bod, od kterého se integruje (změna integrační meze x_0 pouze změní fázi vlnové funkce) a \mathcal{A}_\pm jsou amplitudy obou komponent odpovídajícím vlně pohybující se podél osy x a proti ose x (amplitudy mohou být komplexní).

V kinematicky nedostupné oblasti, ve které je $E < V(x)$, vlnová funkce přejde od oscilujícího řešení k exponenciálně ubývajícím řešením

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{|p(x)|}} \left[\mathcal{B}_+ e^{\frac{1}{\hbar} \int_{x_0}^x |p(x')| dx'} + \mathcal{B}_- e^{-\frac{1}{\hbar} \int_{x_0}^x |p(x')| dx'} \right]. \quad (1.0.9)$$

Lineární navazovací podmínky

V bodech obratu $p(x_{1,2}) = 0$, které ohraničují kinematicky dostupnou oblast, vlnová funkce WKB aproximace diverguje. Vlnová funkce je přitom nenulová vně i uvnitř kinematicky dostupné oblasti, a je proto nutné ji přes bod obratu správně navázat. To lze provést buď přes komplexní rozšíření souřadnice [12], nebo přes aproximaci potenciálu v okolí bodu obratu. Pokud $p'(x_{1,2}) \neq 0$ a zároveň



Obrázek 26: Body obratu pro navazování WKB vlnových funkcí.

$p'(x)$ je spojitá v bodech $x_{1,2}$, pak se potenciál v okolí bodů obratu aproximuje lineární funkcí, pro kterou je známo přesné řešení Schrödingerovy rovnice ve tvaru Airyho funkcí [10].

- V bodě obratu x_1 , ve kterém potenciál klesá, $V'(x_1) < 0$, viz obrázek 26(a), se mění fáze vlnové funkce o $\frac{\pi}{4}$ a zdvojnásobuje se amplituda u sinové části:

$$\psi_{II_1}(x) = \frac{\mathcal{A}_-}{\sqrt{|p(x)|}} e^{-\frac{1}{\hbar} \int_x^{x_1} |p(x')| dx'}, \quad (1.0.10a)$$

$$\psi_{I_1}(x) = \frac{2\mathcal{A}_-}{\sqrt{|p(x)|}} \sin \left[\frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^x p(x') dx' + \frac{\pi}{4} \right] \quad (1.0.10b)$$

a

$$\psi_{II_1}(x) = \frac{\mathcal{A}_+}{\sqrt{|p(x)|}} e^{\frac{1}{\hbar} \int_x^{x_1} |p(x')| dx'}, \quad (1.0.11a)$$

$$\psi_{I_1}(x) = \frac{\mathcal{A}_+}{\sqrt{|p(x)|}} \cos \left[\frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^x p(x') dx' + \frac{\pi}{4} \right], \quad (1.0.11b)$$

kde oblast II_1 odpovídá $x < x_1$ a oblast I_1 odpovídá $x > x_1$. Integrační meze v integrálech jsou zvoleny tak, aby spodní mez byla vždy menší než horní mez, a tedy integrace probíhala postupně zleva doprava.

- V bodě obratu x_2 , ve kterém potenciál roste, $V'(x_2) > 0$, viz obrázek 26(b), je analogicky⁶⁰

$$\psi_{I_2}(x) = \frac{2\mathcal{B}_-}{\sqrt{|p(x)|}} \sin \left[\frac{1}{\hbar} \int_x^{x_2} p(x') dx' + \frac{\pi}{4} \right], \quad (1.0.12a)$$

$$\psi_{II_2}(x) = \frac{\mathcal{B}_-}{\sqrt{|p(x)|}} e^{-\frac{1}{\hbar} \int_{x_2}^x |p(x')| dx'}, \quad (1.0.12b)$$

⁵⁹Metodu rozpracovali fyzici Gregor Wentzel, Hendrik Kramers, Léon Brillouin (1926) a paralelně matematik Harold Jeffreys (1923), někdy se proto též nazývá JWKB nebo WKBJ metoda. Poprvé ji však popsali o století dříve Joseph Liouville a George Green (1837) a v některých zdrojích se tudíž uvádí jako LG metoda. Přínos autorů WKBJ byl v zavedení navazovacích podmínek v bodech obratu.

⁶⁰Navazovací podmínky (1.0.12)–(1.0.13) jsou samozřejmě zcela ekvivalentní podmínkám (1.0.10)–(1.0.11) a zde jsou vypsaný jen pro úplnost a pro rychlejší referenci v příkladech.

nebo

$$\psi_{I_2}(x) = \frac{\mathcal{B}_+}{\sqrt{|p(x)|}} \cos \left[\frac{1}{\hbar} \int_x^{x_2} p(x') dx' + \frac{\pi}{4} \right], \quad (1.0.13a)$$

$$\psi_{II_2}(x) = \frac{\mathcal{B}_+}{\sqrt{|p(x)|}} e^{\frac{1}{\hbar} \int_{x_2}^x |p(x')| dx'}, \quad (1.0.13b)$$

kde oblast I_2 odpovídá $x < x_2$ a oblast II_2 odpovídá $x > x_2$.

Kvadratické navazovací podmínky

V případě kvadratické bariéry lze navazující podmínky před a po bariéře vyjádřit například v tomto tvaru [17]:

$$\psi_I(x) = C \frac{e^{-\pi\epsilon}}{\sqrt{p(x)}} e^{\pm \frac{i}{\hbar} \int_x^a p(x') dx' \mp i \frac{\pi}{4}} + C \frac{\sqrt{1 + e^{-2\pi\epsilon}}}{\sqrt{p(x)}} e^{\mp \frac{i}{\hbar} \int_x^a p(x') dx' \pm i \frac{\pi}{4}} e^{\pm i\phi(\epsilon)}, \quad (1.0.14a)$$

$$\psi_{II}(x) = \frac{C}{\sqrt{p(x)}} e^{\pm \frac{i}{\hbar} \int_b^x p(x') dx' \pm i \frac{\pi}{4}}, \quad (1.0.14b)$$

přičemž v případě horních znamének odpovídá první vlna odražené vlně, druhá vlna dopadající vlně a třetí vlna prošlé vlně. Dodatečný fázový posun má vyjádření

$$\phi(\epsilon) = \epsilon + \arg \Gamma \left(\frac{1}{2} + i\epsilon \right) - \epsilon \ln |\epsilon|. \quad (1.0.15)$$

Uvedený vztah platí pod i nad bariérou, kdy se do integrálů akce dosadí c namísto a a b .

Bohrovo-Sommerfeldovo kvantování

Omezme se nyní na vázané stavy, tj. na stavy, jejichž vlnová funkce $\psi(x \pm \infty) = 0$. Vyskytují-li se na zadané energii jen dva body obratu, pak musí platit $\psi_{I_1}(x) = \psi_{I_2}(x)$, což je splněno, pokud

- $\mathcal{A}_- = \mathcal{B}_-$ a zároveň

$$\sin \left[\frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^x p(x') dx' + \frac{\pi}{4} \right] = \sin \left[\frac{1}{\hbar} \int_x^{x_2} p(x') dx' + \frac{\pi}{4} \right], \quad (1.0.16)$$

neboli

$$\frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^x p(x') dx' + \frac{\pi}{4} + n\pi = \frac{1}{\hbar} \int_x^{x_2} p(x') dx' + \frac{\pi}{4}, \quad (1.0.17)$$

nebo vhodněji pokud

- $\mathcal{A}_- = -\mathcal{A}_+$ a zároveň

$$\sin \left[\frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^x p(x') dx' + \frac{\pi}{4} \right] = -\sin \left[\frac{1}{\hbar} \int_x^{x_2} p(x') dx' + \frac{\pi}{4} \right], \quad (1.0.18)$$

neboli

$$\frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^x p(x') dx' + \frac{\pi}{4} + n\pi = -\frac{1}{\hbar} \int_x^{x_2} p(x') dx' - \frac{\pi}{4}. \quad (1.0.19)$$

Z poslední rovnosti plyne *Bohrova-Sommerfeldova kvantovací podmínka*

$$\oint p(x') dx' = 2 \int_{x_1}^{x_2} p(x') dx' = 2\pi\hbar \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad (1.0.20)$$

kde $n \in \mathbb{N}_0$. Tento výraz platí jen pro „měkké“ body obratu. Za každý „tvrdý“ bod obratu (odraz o nekonečně vysokou bariéru) je nutné do závorky přidat ještě $\frac{1}{4}$.

Značení: Pro zjednodušení notace se v následujícím textu budou využívat substitute

$$\lambda(x) \equiv \frac{\mathcal{A}}{\sqrt{|p(x)|}}, \quad (1.0.21a)$$

$$I_a^b \equiv \frac{1}{\hbar} \int_a^b |p(x')| dx'. \quad (1.0.21b)$$

Například navazovací podmínky (1.0.10) se pak kompaktně zapíší jako

$$\psi_{\text{II}}(x) = \lambda(x) e^{-I_x^{x_1}}, \quad (1.0.22a)$$

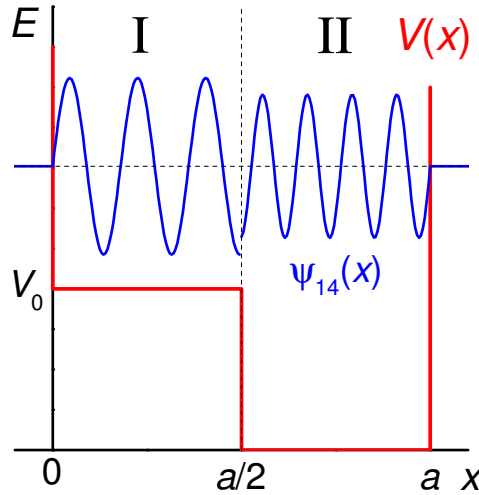
$$\psi_{\text{I}}(x) = 2\lambda(x) \sin \left[I_{x_1}^x + \frac{\pi}{4} \right]. \quad (1.0.22b)$$

A.1 Nekonečně hluboká pravoúhlá jáma se schodem

Částice o hmotnosti M se pohybuje v potenciálu

$$V(x) = \begin{cases} \infty & x < 0 \\ V_0 & 0 < x < \frac{a}{2} \\ 0 & \frac{a}{2} < x < a \\ \infty & x > a \end{cases} \quad (1.1.1)$$

viz obrázek 27. Nalezněte WKB vlnovou funkci a spektrum pro $E > V_0$.



Obrázek 27: Nekonečně hluboká pravoúhlá jáma se schodem. Potenciál červeně. Modře zobrazena 14. vlnová funkce pro hodnoty parametrů $a = V_0 = 2$, $M = 1$, $\hbar = 0.1$. Příslušná energie je $E_{14} = 3,52$.

Řešení:

Kinematicky dostupné oblasti označíme

$$\text{I: } 0 < x < \frac{a}{2},$$

$$\text{II: } \frac{a}{2} < x < a.$$

Klasická hybnost v těchto oblastech pak je

$$p_{\text{I}} = \sqrt{2M(E - V_0)}, \quad (1.1.2a)$$

$$p_{\text{II}} = \sqrt{2ME} \quad (1.1.2b)$$

(hybnost je v uvedených intervalech konstantní, nezávisí na souřadnici). Zintegrování v mezích $(0, x)$ dá akci

$$S_I(x) = \int_0^x p_I dx' = x p_I, \quad (1.1.3a)$$

$$S_{II}(x) = \int_0^{\frac{a}{2}} p_I dx' + \int_{\frac{a}{2}}^x p_{II} dx' = \frac{a}{2} p_I + \left(x - \frac{a}{2}\right) p_{II}. \quad (1.1.3b)$$

Vlnová funkce v jednotlivých oblastech má tedy vyjádření

$$\psi_I(x) = \frac{1}{\sqrt{|p_I|}} \left[\mathcal{A}_I \sin \frac{S_I(x)}{\hbar} + \mathcal{B}_I \cos \frac{S_I(x)}{\hbar} \right], \quad (1.1.4a)$$

$$\psi_{II}(x) = \frac{1}{\sqrt{|p_{II}|}} \left[\mathcal{A}_{II} \sin \frac{S_{II}(x)}{\hbar} + \mathcal{B}_{II} \cos \frac{S_{II}(x)}{\hbar} \right] \quad (1.1.4b)$$

(komplexní exponenciály byly rozepsány pomocí funkcí \sin, \cos). Díky tomu, že se obě akce počítají od stejného počátečního bodu $x_0 = 0$, jsou konstanty \mathcal{A}, \mathcal{B} pro vlnové funkce v obou oblastech stejné,

$$\mathcal{A}_I = \mathcal{A}_{II} \equiv \mathcal{A}, \quad (1.1.5a)$$

$$\mathcal{B}_I = \mathcal{B}_{II} \equiv \mathcal{B}. \quad (1.1.5b)$$

V dalším kroku se aplikují okrajové podmínky:

$$\psi_I(0) = 0 \quad \implies \quad \mathcal{B} = 0, \quad (1.1.6a)$$

$$\psi_{II}(a) = 0 \quad \implies \quad \sin \frac{S_{II}(x)}{\hbar} = 0. \quad (1.1.6b)$$

Z druhé rovnice vyplývá postupně

$$\begin{aligned} S_{II}(x) &= \pi n \\ \frac{a}{2\hbar} \left[\sqrt{2M(E - V_0)} + \sqrt{2ME} \right] &= \pi n \\ E - \frac{V_0}{2} + \sqrt{E(E - V_0)} &= 2 \underbrace{\frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2Ma^2}}_{E_n^{(0)}} \\ E_n^{(0)} - E + \frac{V_0}{2} &= \sqrt{E(E - V_0)} \\ E_n &\equiv E = E_n^{(0)} + \frac{V_0}{2} + \frac{V_0^2}{16E_n^{(0)}}, \end{aligned} \quad (1.1.7)$$

kde $E_n^{(0)}, n \in \mathbb{N}$ označuje n -tou hladinu nekonečně hluboké pravoúhlé jámy. Pro energie dostatečně vysoko nad V_0 vymizí poslední člen, což znamená, že částice se pohybuje, jako kdyby se schod rozprostřel po celé šířce jámy a dno jámy se tak zvedlo o $V_0/2$.

Explicitně vyjádřená vlnová funkce je

$$\psi_{I,n}(x) = \frac{C}{\sqrt[4]{2M(E_n - V_0)}} \sin \left\{ \frac{\sqrt{2M(E_n - V_0)}}{\hbar} x \right\}, \quad (1.1.8a)$$

$$\psi_{II,n}(x) = \frac{C}{\sqrt[4]{2ME_n}} \sin \left\{ \frac{\sqrt{2M(E_n - V_0)}}{\hbar} \frac{a}{2} + \frac{\sqrt{2ME_n}}{\hbar} \left(x - \frac{1}{2}\right) \right\}, \quad (1.1.8b)$$

kde energie jsou dány vzorcem (1.1.7) a C je normovací konstanta.

WKB vlnová funkce *není spojitá* v bodě $x = \frac{a}{2}$, což je patrné z příkladu na obrázku 27.

A.2 Harmonický oscilátor

1. Použitím WKB metody nalezněte spektrum a odpovídající vlnové funkce jednorozměrného harmonického oscilátoru popsaného (již známým) Hamiltoniánem

$$\hat{H} = \frac{1}{2M} \hat{p}^2 + \frac{1}{2} M \Omega^2 \hat{x}^2 \quad (1.2.1)$$

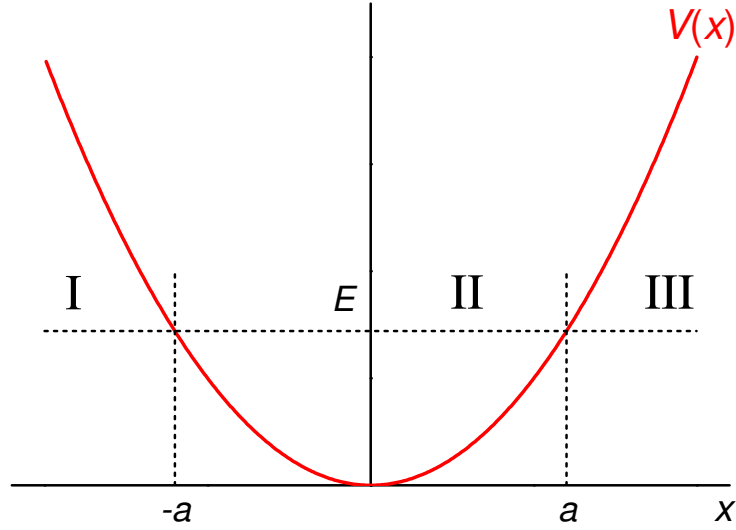
(M je hmotnost částice, která se v potenciálu pohybuje, Ω úhlová frekvence kmitů).

2. Nakreslete graf vlnové funkce pro dvacátou energetickou hladinu ($n = 20$) a porovnejte s přesnou vlnovou funkcí, která je řešením Schrödingerovy rovnice a která je určena Hermitovými polynomy

$$\phi_n(x) = \sqrt{\frac{M\Omega}{\pi\hbar}} \frac{1}{\sqrt{n!2^n}} H_n(\xi) e^{-\xi^2/2}, \quad \xi = \sqrt{\frac{M\Omega}{\hbar}} x. \quad (1.2.2)$$

3. Na základě tohoto srovnání diskutujte přesnost WKB metody.

Řešení:



Obrázek 28: Potenciál harmonického oscilátoru s vyznačenými oblastmi pro WKB řešení.

Potenciál harmonického oscilátoru je znázorněn na obrázku 28. Body obratu jsou $\pm a$, kde

$$a = \sqrt{\frac{2E}{M\Omega^2}}. \quad (1.2.3)$$

Vlnová funkce v oblasti I (III) musí být WKB vlna, která ubývá pro $x \rightarrow -\infty$ ($x \rightarrow \infty$), takže

$$\psi_I(x) = \frac{\mathcal{A}_-}{\sqrt{|p(x)|}} e^{-\frac{1}{\hbar} \int_x^{-a} |p(x')| dx'} \equiv \lambda e^{-I_x^-}, \quad (1.2.4a)$$

$$\psi_{III}(x) = \lambda' e^{-I_x^a}, \quad (1.2.4b)$$

kde se používá značení (1.0.21b). Klasická hybnost je

$$p(x) = \sqrt{2M \left(E - \frac{1}{2} M \Omega^2 x^2 \right)}. \quad (1.2.5)$$

Pomocí sešívacích vztahů (1.0.10) se napojí vlnová funkce v oblasti II:

$$\psi_{II}(x) = 2\lambda \sin \left[I_{-a}^x + \frac{\pi}{4} \right] = 2\lambda' \sin \left[I_x^a + \frac{\pi}{4} \right]. \quad (1.2.6)$$

Vychází tedy $\lambda = -\lambda'$ a

$$I_{-a}^a = \pi \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad (1.2.7)$$

což je Bohrova-Sommerfeldova kvantovací podmínka.

Zbývá spočítat integrál

$$\begin{aligned}
 I_{x_1}^{x_2} &= \frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} p(x) dx = \frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2M \left(E - \frac{1}{2} M \Omega^2 x^2 \right)} dx \\
 &= \frac{\sqrt{2ME}}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{1 - \underbrace{\frac{M\Omega^2}{2E} x^2}_{\frac{1}{a^2}}} dx = \left| \begin{array}{l} y = \frac{x}{a} \\ dx = a dy \end{array} \right| \\
 &= \frac{2E}{\hbar\Omega} \int_{\frac{x_1}{a}}^{\frac{x_2}{a}} \sqrt{1 - y^2} dy.
 \end{aligned} \tag{1.2.8}$$

Primitivní funkce k poslednímu integrálu je

$$\begin{aligned}
 \int \sqrt{1 - y^2} dy &= \left| \begin{array}{l} y = \sin z \\ dy = \cos z dz \end{array} \right| = \int \sqrt{1 - \sin^2 z} \cos z dz \\
 &= \int \cos^2 z dz = \int \frac{1 + \cos 2z}{2} dz = \frac{1}{2} \left(z + \frac{1}{2} \sin 2z \right) \\
 &= \frac{1}{2} (z + \sin z \cos z) = \frac{1}{2} \left(\arcsin y + y \sqrt{1 - y^2} \right),
 \end{aligned} \tag{1.2.9}$$

takže

$$I_{x_1}^{x_2} = \frac{E}{\hbar\Omega} \left[\arcsin y + y \sqrt{1 - y^2} \right]_{\frac{x_1}{a}}^{\frac{x_2}{a}}. \tag{1.2.10}$$

Po dosazení vyjádření tohoto integrálu do kvantovacích podmínek (1.2.7) vychází

$$I_{-a}^a = \frac{E}{\hbar\Omega} \pi = \pi \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad \Rightarrow \quad E_n = \hbar\Omega \left(n + \frac{1}{2} \right), \tag{1.2.11}$$

což je rovné přesnému spektru harmonického oscilátoru.

Jak vypadají vlnové funkce ve WKB aproximaci? V oblasti II je

$$\begin{aligned}
 \psi_{II}(x) &= 2\lambda \sin \left\{ \frac{E}{\hbar\Omega} \left[\arcsin y + y \sqrt{1 - y^2} \right]_{\frac{x}{a}}^{\frac{a}{a}=1} + \frac{\pi}{4} \right\} \\
 &= 2\lambda \sin \left[\frac{E}{\hbar\Omega} \left(\underbrace{\frac{\pi}{2} - \arcsin \frac{x}{a}}_{\arccos \frac{x}{a}} - \frac{x}{a} \sqrt{1 - \frac{x^2}{a^2}} \right) + \frac{\pi}{4} \right] \\
 &= \frac{2\mathcal{A}}{\sqrt{p(x)}} \sin \left[\frac{E}{\hbar\Omega} \left(\arccos \frac{x}{a} - \frac{x}{a} \sqrt{1 - \frac{x^2}{a^2}} \right) + \frac{\pi}{4} \right].
 \end{aligned} \tag{1.2.12}$$

Naopak v klasicky zakázaných oblastech I a III vychází integrál

$$\begin{aligned}
 I_{x_1}^{x_2} &= \frac{2E}{\hbar\Omega} \int_{\frac{x_1}{a}}^{\frac{x_2}{a}} \sqrt{y^2 - 1} dy = \frac{E}{\hbar\Omega} \left[-\operatorname{arccosh} y + y \sqrt{y^2 - 1} \right]_{\frac{x_1}{a}}^{\frac{x_2}{a}} \\
 &= \frac{E}{\hbar\Omega} \left[-\ln \left(y + \sqrt{y^2 - 1} \right) + y \sqrt{y^2 - 1} \right]_{\frac{x_1}{a}}^{\frac{x_2}{a}},
 \end{aligned} \tag{1.2.13}$$

takže

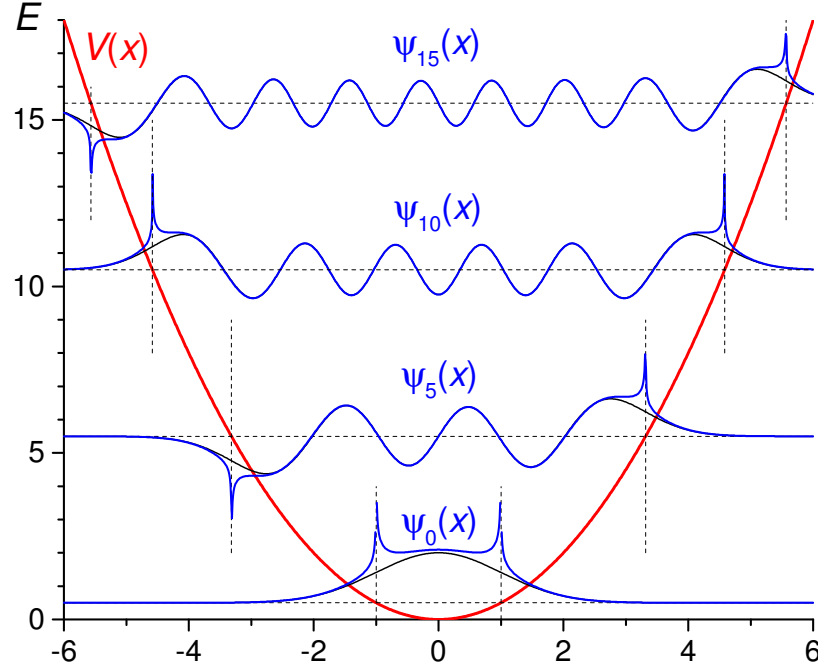
$$\begin{aligned}
 \psi_I(x) &= (-1)^n \lambda \exp \left\{ -\frac{E}{\hbar\Omega} \left[\underbrace{-\ln \left(y + \sqrt{y^2 - 1} \right)}_{\ln(-z) = \ln|z| + i\pi} + y \sqrt{y^2 - 1} \right]_{\frac{x}{a}}^{-1} \right\} \\
 &= (-1)^n \frac{\mathcal{A}}{\sqrt{|p(x)|}} e^{\frac{E}{\hbar\Omega} \left[\ln \left(-\frac{x}{a} + \sqrt{\frac{x^2}{a^2} - 1} \right) + \frac{x}{a} \sqrt{\frac{x^2}{a^2} - 1} \right]}
 \end{aligned} \tag{1.2.14}$$

a

$$\psi_{\text{III}}(x) = \lambda e^{-\frac{E}{\hbar\Omega} \left[-\text{arccosh } y + x\sqrt{y^2-1} \right]_1^{\frac{x}{a}}} = \frac{\mathcal{A}}{\sqrt{|p(x)|}} e^{-\frac{E}{\hbar\Omega} \left[-\text{arccosh } \frac{x}{a} + \frac{x}{a} \sqrt{\frac{x^2}{a^2}-1} \right]}. \quad (1.2.15)$$

Konstanta \mathcal{A} se určí z normalizace, přičemž pro n velké a $\hbar = \Omega = M = 1$ konverguje k hodnotě

$$\mathcal{A}_- \xrightarrow{n \gg 1} \frac{1}{\sqrt{2\pi}}. \quad (1.2.16)$$



Obrázek 29: Vlnové funkce harmonického oscilátoru s $\Omega = M = \hbar = 1$ pro energie $E_0 = \frac{1}{2}$, $E_5 = \frac{11}{2}$, $E_{10} = \frac{21}{2}$, $E_{15} = \frac{31}{2}$. Přesné vlnové funkce dané Hermitovými polynomy jsou zobrazeny černými plnými čarami, odpovídající WKB aproximace jsou zobrazeny modrými plnými čarami. WKB vlnové funkce divergují v klasických bodech obratu, tj. v bodech, kde $E_n = V(x)$. WKB vlnové funkce jsou normalizované faktorem (1.2.16).

Několik vlnových funkcí je znázorněno na obrázku 29. Je vidět, že kromě bodu obratu WKB vlnová funkce velmi přesně aproximuje přesnou vlnovou funkci harmonickému oscilátoru.

A.3 α rozpad

Rozpad α , například rozpad radia na radon⁶¹

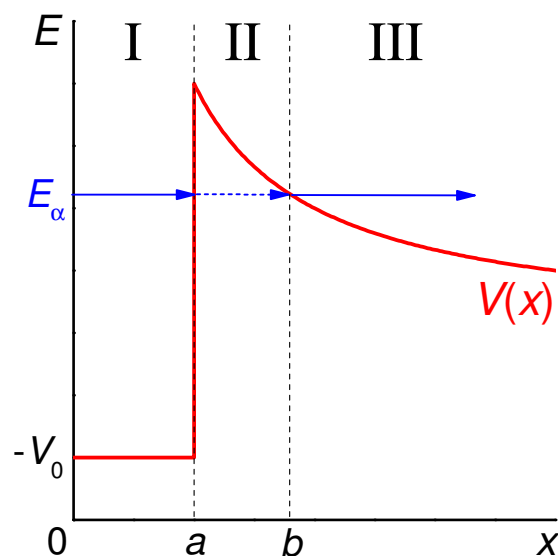


lze popsat modelem založeným na WKB aproximaci, který i přes svoji jednoduchost dává předpovědi, které kvalitativně souhlasí s experimentem. Představme si, že α částice vázaná v jádře tuneluje Coulombickou bariérou. Celý problém popíšeme jednorozměrným potenciálem (viz obrázek 30)

$$V(x) = \begin{cases} -V_0 & \text{pro } |x| < a \\ \frac{Z_\alpha Z_\gamma}{x} & \text{pro } |x| > a, \end{cases} \quad (1.3.2)$$

kde Z je protonové číslo jádra, $Z_\alpha = 2$ protonové číslo α částice, V_0 je kladný parametr, $\gamma = \alpha \hbar c = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}$ a α je konstanta jemné struktury.

⁶¹Použitá notace je ${}_Z^AX$, kde $A = N + Z$ je celkový počet nukleonů nuklidu X (nukleonové nebo hmotnostní číslo), N je počet neutronů (neutronové číslo) a Z počet protonů (protonové číslo) = náboj jádra.



Obrázek 30: Tunelování α částice o energii E_α z jádra přes Coulombickou bariéru.

1. Ve WKB přiblížení odvod'te tzv. *Gamovův koeficient průchodu*

$$T = \exp \left[-\frac{2}{\hbar} \int_a^b |p(x)| dx \right], \quad (1.3.3)$$

kde $|p(x)|$ je absolutní hodnota „hybnosti“ částice v klasicky nedostupné oblasti vymezené body a, b , které ohraňují bariéru.

2. Nalezněte T pro uvažovaný model α rozpadu.
3. Střední dobu života lze aproximovat vztahem $\tau = \frac{1}{P_\alpha R T}$, kde P_α je pravděpodobnost, že se v jádře vydělí α částice (budeme předpokládat, že tato pravděpodobnost bude pro uvažovaná jádra ≈ 1) a R je počet „narázů“ α částice na bariéru za sekundu. Odhadněte R a spočítejte τ a poločas rozpadu $T_{1/2}$.

Pro poloměr atomu použijte přibližný vztah $a = a_0 \sqrt[3]{A}$, kde A je atomové číslo a $a_0 \doteq 1,2$ fm.

4. Porovnejte číselně s hodnotami tří izotopů s poločasy rozpadu

izotop	E (MeV)	$T_{1/2}$
$^{144}_{60}\text{Nd}$	1.8	$2 \cdot 10^{15}$ let
$^{224}_{88}\text{Ra}$	5.7	3.6 dne
$^{212}_{84}\text{Po}$	8.8	$0.3 \mu\text{s}$

5. Určete de Broglieovy vlnové délky α částic v jádrech z tabulky a porovnejte je s rozměry jádra. Je WKB aproximace oprávněná?

Poznámka: Podrobná diskuze různých přístupů k α rozpadu včetně WKB aproximace je v [18].

Řešení:

1. Proces tunelování se rozdělí na tři oblasti:

- Oblast I: $x < a$, $E > V(x)$, vnitřek jádra.
- Oblast II: $a < x < b$, $E < V(x)$, Coulombická bariéra.
- Oblast III: $b < x$, $E > V(x)$, oblast vně jádra.

V oblasti III vně jádra je nenulová jen ta část vlnové funkce, která odpovídá prošlé částici vzdalující se od atomu,

$$\begin{aligned}\psi_{\text{III}}(x) &= \frac{C}{\sqrt{|p(x)|}} e^{\frac{i}{\hbar} \int_b^x |p(x')| dx' + i\frac{\pi}{4}} = \lambda e^{i(I_b^x + \frac{\pi}{4})} \\ &= \lambda \cos \left[I_b^x + \frac{\pi}{4} \right] + i\lambda \sin \left[I_b^x + \frac{\pi}{4} \right],\end{aligned}\quad (1.3.4)$$

kde je využito značení (1.0.21b). Do výrazu byla navíc přidána fáze $\pi/4$, což usnadní následné navazování vlnové funkce. Vlnová funkce v oblasti II se určí pomocí navazovacích vztahů (1.0.10)—(1.0.11),

$$\psi_{\text{II}}(x) = \lambda e^{I_x^b} + \frac{i}{2} \lambda e^{-I_x^b}. \quad (1.3.5)$$

Pomocí rozepsání integrálu

$$\int_x^b = \int_a^b - \int_a^x \quad \Longleftrightarrow \quad I_x^b = I_a^b - I_a^x \quad (1.3.6)$$

a zkráceného označení

$$F \equiv e^{-I_a^b} = e^{-\frac{1}{\hbar} \int_a^b |p(x)| dx}, \quad (1.3.7)$$

přejde vlnová funkce do tvaru

$$\psi_{\text{II}}(x) = \frac{\lambda}{F} e^{-I_a^x} + \frac{i}{2} \lambda F e^{I_a^x}. \quad (1.3.8)$$

Do oblasti I se následně naváže pomocí sešívacích podmínek (1.0.12)—(1.0.13):

$$\begin{aligned}\psi_{\text{I}}(x) &= \frac{2\lambda}{F} \sin \left[I_x^a + \frac{\pi}{4} \right] + \frac{i}{2} \lambda F \cos \left[I_x^a + \frac{\pi}{4} \right] \\ &= \underbrace{-iC \left(\frac{1}{F} - \frac{F}{4} \right) e^{i\frac{\pi}{4}} \frac{1}{\sqrt{|p(x)|}} e^{iI_x^a}}_{\mathcal{A}} + \underbrace{iC \left(\frac{1}{F} + \frac{F}{4} \right) e^{-i\frac{\pi}{4}} \frac{1}{\sqrt{|p(x)|}} e^{-iI_x^a}}_{\mathcal{B}}.\end{aligned}\quad (1.3.9)$$

Transmisní koeficient tedy vychází

$$T = \left| \frac{C}{\mathcal{A}} \right|^2 = \frac{1}{\left(\frac{1}{F} - \frac{F}{4} \right)^2} \approx F^2, \quad (1.3.10)$$

přičemž poslední rovnost platí za předpokladu $F \ll 1$, což musí být splněno, aby bylo vůbec možné pro tento typ úlohy WKB aproximaci použít. Dosazení za F dá hledaný Gamovův faktor (1.3.3).

- Do právě odvozeného Gamovova vztahu pro pravděpodobnost průniku bariérou se dosadí modelový potenciál (1.3.2). Klasická hybnost α částice o energii E_α v oblasti Coulombické části potenciálu je

$$p(x) = \sqrt{2M \left(E_\alpha - \frac{Z_\alpha Z_\gamma}{x} \right)}. \quad (1.3.11)$$

První bod obratu a odpovídá poloměru jádra, druhý bod obratu se vypočítá z rovnice

$$V(x) = E_\alpha \quad \Rightarrow \quad b = \frac{Z_\alpha Z_\gamma}{E_\alpha}, \quad (1.3.12)$$

takže

$$\begin{aligned}I_a^b &= \frac{1}{\hbar} \int_a^b |p(x)| dx = \frac{\sqrt{2ME_\alpha}}{\hbar} \int_a^b \sqrt{\frac{Z_\alpha Z_\gamma}{E_\alpha x} - 1} dx = \left| \frac{u = \frac{x}{b}}{dx = b du} \right| \\ &= \frac{Z_\alpha Z_\gamma}{\hbar} \sqrt{\frac{2M}{E_\alpha}} \int_{x=a}^{x=b} \sqrt{\frac{1}{u} - 1} du = \left| \frac{u = y^2}{du = 2y dy} \right| \\ &= \underbrace{\frac{\kappa}{2}}_{\kappa} \int_{x=a}^{x=b} \sqrt{1 - y^2} dy, \quad (1.3.13)\end{aligned}$$

což je tentýž integrál jako u WKB řešení harmonického oscilátoru (1.2.9) s primitivní funkcí

$$\begin{aligned} I_a^b &= \kappa \left[y \sqrt{1 - y^2} + \arcsin y \right]_{x=a}^{y=b} \\ &= \kappa \left[\sqrt{u} \sqrt{1 - u} + \arcsin \sqrt{u} \right]_{u=\frac{a}{b}}^1 = \\ &= \kappa \left[\arccos \sqrt{\frac{a}{b}} - \sqrt{\frac{a}{b} \left(1 - \frac{a}{b} \right)} \right]. \end{aligned} \quad (1.3.14)$$

Pravděpodobnost průniku tedy vychází

$$T = \exp \left\{ \frac{2Z_\alpha Z_Y}{\hbar} \sqrt{\frac{2M}{E_\alpha}} \left[\arccos \sqrt{\frac{a}{b}} - \sqrt{\frac{a}{b} \left(1 - \frac{a}{b} \right)} \right] \right\} \quad (1.3.15)$$

kde b je dáno vzorcem (1.3.12) a a je poloměr jádra spočtený pomocí vztahu uvedeného v zadání příkladu.

3. Počet „nárazů“ α částice na bariéru se odhadne jako

$$R = \frac{v_\alpha}{2a}, \quad (1.3.16)$$

kde v_α je rychlost α částice v jádře. Tu určíme z kinetické energie. Stačí počítat pomocí nerelativistických vztahů, protože rychlost vylétávajících α částic je malá ve srovnání s rychlostí světla, jak se lze přesvědčit z tabulky níže:

$$E_\alpha = v_\alpha^2 / 2M, \quad (1.3.17)$$

přičemž energie je dána jako rozdíl klidové hmotnosti M_{Z^X} jádra vstupujícího do reakce a klidové hmotnosti produktů (jádro $M_{Z-2}^{A-4}Y$ + jádro helia $M_2^4\text{He}$)

$$E_\alpha = \frac{1}{c^2} \left(M_{Z^X} - M_{Z-2}^{A-4}Y - M_2^4\text{He} \right). \quad (1.3.18)$$

Rychlost tedy vychází

$$v_\alpha = \sqrt{\frac{2(E_\alpha + V_0)}{M}} \quad (1.3.19)$$

a z ní střední doba života

$$\tau = \frac{2a}{T} \sqrt{\frac{M}{2(E_\alpha + V_0)}}. \quad (1.3.20)$$

Poločas rozpadu je $T_{1/2} = \tau \ln 2$.

4. Výsledky pro zadané izotopy jsou v následující tabulce:

izotop	E_α (MeV)	a (fm)	b (fm)	$\frac{v_\alpha}{c}$	I_a^b	T	$T_{1/2}$ (s)	$T_{1/2}$
$^{144}_{60}\text{Nd}$	1.8	6.3	96	0.17	120	$7.2 \cdot 10^{-53}$	$2.4 \cdot 10^{30}$	$7.6 \cdot 10^{22}$ let
$^{224}_{88}\text{Ra}$	5.7	7.3	45	0.17	73	$2.3 \cdot 10^{-32}$	$8.5 \cdot 10^9$	98000 dní
$^{212}_{84}\text{Po}$	8.8	7.2	28	0.18	43	$3.1 \cdot 10^{-19}$	$5.9 \cdot 10^{-4}$	590 μs

Tento velmi zjednodušený výpočet tedy dává o několik řádů delší poločasy rozpadu, než jsou naměřené hodnoty ze zadání příkladu. Mnohem lepší shody se dosáhne, pokud se uvažuje $a_0 = 1.6$ fm, což se dá fyzikálně interpretovat jako započtení difuzivity jaderného povrchu.

5. De Broglieovy vlnové délky α částic jsou

$$\lambda_\alpha = \frac{p_\alpha}{\hbar} = \frac{M v_\alpha}{\hbar}. \quad (1.3.21)$$

Číselně

izotop	λ_α (fm)
$^{144}_{60}\text{Nd}$	0.32
$^{224}_{88}\text{Ra}$	0.31
$^{212}_{84}\text{Po}$	0.30

tedy asi 40 krát menší než je rozměr jádra.

Poznámka: Pro $a \ll b$ lze aproximovat

$$\arccos \sqrt{\frac{a}{b}} - \sqrt{\frac{a}{b} - \frac{a^2}{b^2}} \approx \frac{\pi}{2} - \sqrt{\frac{a}{b}} - \sqrt{\frac{a}{b}} = \frac{\pi}{2} - 2\sqrt{\frac{a}{b}}. \quad (1.3.22)$$

Pak

$$\begin{aligned} \ln \tau &= \ln \frac{2a}{v_\alpha} + 2I_a^b \\ &= \ln \frac{2a_0 \sqrt[3]{A}}{\sqrt{2(E_\alpha + V_0)M}} + \frac{2Z_\alpha Z \gamma}{\hbar} \sqrt{\frac{2M}{E_\alpha}} \left[\frac{\pi}{2} - 2\sqrt{\frac{a_0}{Z_\alpha \gamma}} \sqrt{E_\alpha} A^{\frac{1}{6}} Z^{-\frac{1}{2}} \right] \end{aligned} \quad (1.3.23)$$

a pro těžká jádra, pro která platí $A \approx 2Z$, dostaneme

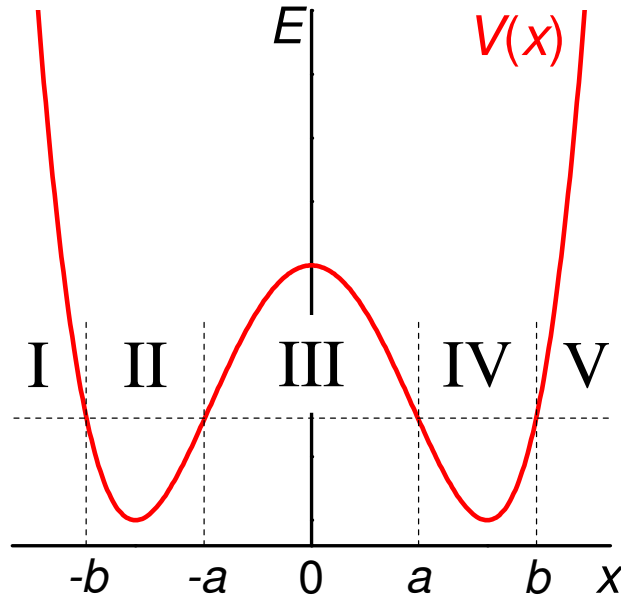
$$\ln \tau = \frac{1}{3} \ln Z + \frac{1}{3} \ln 2 + \ln \frac{2a_0}{\sqrt{2(E_\alpha + V_0)M}} + \frac{2Z_\alpha \gamma \sqrt{2M}}{\hbar} \frac{\pi}{2} \frac{Z}{\sqrt{E}} - 4 \frac{\sqrt{2Z_\alpha \gamma a_0 M}}{\hbar} \sqrt[3]{2Z^{\frac{2}{3}}} \quad (1.3.24)$$

To je v souladu s experimentálně pozorovanou závislostí

$$(\ln \tau)_{\text{exp}} = C_1 \left(\frac{Z}{\sqrt{E_\alpha}} - \zeta Z^{\frac{2}{3}} \right) - C_2, \quad (1.3.25)$$

která se nazývá *Geigerův-Nuttallův zákon* a ve které se konstanty $C_{1,2}$ a ζ fitují z dostupných experimentálních dat [19].

A.4 Dvojitá symetrická jáma



Obrázek 31: Potenciál dvojitě symetrické jámy.

Částice o hmotnosti M se pohybuje v sudém dvoujárovém potenciálu $V(x) = V(-x)$, viz obrázek 31. Kdyby byly obě jámy oddělené nekonečně vysokou bariérou, všechny energetické hladiny by byly dvakrát degenerované a odpovídající vlnové funkce by byly sudé a liché. Důsledkem nenulové pravděpodobnosti tunelování přes bariéru, která je v obrázku označena jako oblast III, však dojde k interakci mezi hladinami a rozštěpení těchto degenerovaných dubletů.

1. Nalezněte vztah pro vzdálenost ΔE mezi hladinami v dubletu pro obecný symetrický dvoujámový potenciál.
2. Určete tuto vzdálenost pro speciální potenciál ve tvaru

$$V(x) = \frac{g^2}{8} (x^2 - x_0^2)^2, \quad (1.4.1)$$

kde x_0 určuje x -ové souřadnice minim, g je konstanta. Předpokládejte, že energie je dostatečně hluboko v jamách, kde lze potenciál $V(x)$ aproximovat potenciálem harmonického oscilátoru.

3. Srovnajte číselně s výsledkem příkladu 4.6.

Řešení:

1. Tunelující systém se rozdělí na pět oblastí podle obrázku 31. Všechny výpočty budou ve zkrácené notaci (1.0.21b). Využívat se budou navazovací podmínky (1.0.10)–(1.0.13).

- V oblasti I musí vlnová funkce exponenciálně ubývat pro $x \rightarrow -\infty$, takže

$$\psi_I(x) = \frac{\mathcal{A}_-}{\sqrt{|p(x)|}} e^{-\frac{1}{\hbar} \int_x^{-b} |p(x')| dx'} = \lambda e^{-I_x^{-b}}. \quad (1.4.2)$$

- Do oblasti II se vlnovou funkcí napojí pomocí vztahů (1.0.10)–(1.0.11):

$$\psi_{II}(x) = 2\lambda \sin \left[I_{-b}^x + \frac{\pi}{4} \right]. \quad (1.4.3)$$

Vlnovou funkci je nyní potřeba upravit do takové formy, aby bylo možné pro navázání do oblasti III použít vztahů (1.0.12)–(1.0.13). K tomu se budou využívat součtové vztahy a další identity pro goniometrické funkce:

$$\begin{aligned} \psi_{II}(x) &= 2\lambda \underbrace{\sin \left[I_{-b}^{-a} - I_x^{-a} + \frac{\pi}{4} \right]}_{\sin(a+b) = \sin a \cos b + \cos a \sin b} \\ &= 2\lambda \left\{ \underbrace{\sin I_{-b}^{-a}}_S \cos \left[-I_x^{-a} + \frac{\pi}{4} \right] + \underbrace{\cos I_{-b}^{-a}}_C \sin \left[-\int_x^{-a} + \frac{\pi}{4} \right] \right\} \end{aligned} \quad (1.4.4)$$

Je nutné ošetřit i znaménko – před integrály v argumentech sinu a cosinu:

$$\begin{aligned} \cos \left[-I + \frac{\pi}{4} \right] &\stackrel{\text{sudá}}{=} \cos \left[I - \frac{\pi}{4} \right] = \underbrace{\cos \left[I + \frac{\pi}{4} - \frac{\pi}{2} \right]}_{\cos(a+b) = \cos a \cos b - \sin a \sin b} \\ &= \cos \left[I + \frac{\pi}{4} \right] \underbrace{\cos \left(-\frac{\pi}{2} \right)}_0 - \sin \left[I + \frac{\pi}{4} \right] \underbrace{\sin \left(-\frac{\pi}{2} \right)}_{-1} \\ &= \sin \left[I + \frac{\pi}{4} \right] \end{aligned} \quad (1.4.5)$$

a analogicky

$$\sin \left[-I + \frac{\pi}{4} \right] = \cos \left[I + \frac{\pi}{4} \right]. \quad (1.4.6)$$

Vlnovou funkci v oblasti II lze tedy zapsat ve tvaru

$$\psi_{II}(x) = 2\lambda \left\{ S \sin \left[I_x^{-a} + \frac{\pi}{4} \right] + C \cos \left[I_x^{-a} + \frac{\pi}{4} \right] \right\}. \quad (1.4.7)$$

- Do oblasti III se přejde pomocí sešívacích vztahů (1.0.12)–(1.0.13). Vlnová funkce se následně hned upraví pro navázání do oblasti IV:

$$\begin{aligned}
 \psi_{\text{III}}(x) &= \lambda S e^{-I_a^x} + 2\lambda C e^{I_a^x} \\
 &= \lambda S \underbrace{e^{-I_a^x} e^{I_a^x}}_F + 2\lambda C e^{I_a^x} e^{-I_a^x} \\
 &= \lambda S F e^{I_a^x} + \frac{2\lambda C}{F} e^{-I_a^x}
 \end{aligned} \tag{1.4.8}$$

- V navazování se pokračuje dále do oblasti IV pomocí vztahů (1.0.10)–(1.0.11):

$$\begin{aligned}
 \psi_{\text{IV}}(x) &= \lambda S F \cos \left[I_a^x + \frac{\pi}{4} \right] + \frac{4\lambda C}{F} \sin \left[I_a^x + \frac{\pi}{4} \right] \\
 &= \lambda S F \cos \left[I_a^b - I_x^b + \frac{\pi}{4} \right] + \frac{4\lambda C}{F} \sin \left[I_a^b - I_x^b + \frac{\pi}{4} \right] \\
 &= \lambda S F \left\{ C \sin \left[I_x^b + \frac{\pi}{4} \right] - S \cos \left[I_x^b + \frac{\pi}{4} \right] \right\} \\
 &\quad + \frac{4\lambda C}{F} \left\{ S \sin \left[I_x^b + \frac{\pi}{4} \right] + C \cos \left[I_x^b + \frac{\pi}{4} \right] \right\} \\
 &= \lambda S C \left(F + \frac{4}{F} \right) \sin \left[I_x^b + \frac{\pi}{4} \right] + \lambda \left(-S^2 F + \frac{4C^2}{F} \right) \cos \left[I_x^b + \frac{\pi}{4} \right].
 \end{aligned} \tag{1.4.9}$$

Využívá se zde sudosti potenciálu, díky níž

$$V(x) = V(-x) \quad \implies \quad p(x) = p(-x) \quad \implies \quad I_{-b}^a = I_a^b. \tag{1.4.10}$$

- Poslední navazování do oblasti V se provede opět pomocí vztahů (1.0.12)–(1.0.13):

$$\psi_{\text{V}}(x) = \frac{\lambda S C}{2} \left(F + \frac{4}{F} \right) e^{-I_b^x} + \underbrace{\lambda \left(-S^2 F + \frac{4C^2}{F} \right)}_Z e^{I_b^x} \tag{1.4.11}$$

Celková vlnová funkce musí být normovatelná (kvadraticky integrovatelná), tj. nesmí divergovat pro $x \rightarrow \infty$. Musí být tedy splněno $Z = 0$, tj.

$$\begin{aligned}
 \lambda \left(-S^2 F + \frac{4C^2}{F} \right) &= 0 \\
 S^2 &= \frac{4C^2}{F^2} \\
 \frac{C}{S} &= \pm \frac{1}{2} F
 \end{aligned} \tag{1.4.12}$$

To po dosazení za S , C a F vede na rovnici

$$\cotg \frac{1}{\hbar} \int_a^b p(x) dx = \pm \frac{1}{2} e^{-\frac{1}{\hbar} \int_{-a}^a |p(x)| dx}. \tag{1.4.13}$$

Následovat bude několik aproximací. Předně se bude předpokládat, že prostupnost bariéry III je malá, takže $F \approx 0$ a lze psát

$$\pm \frac{1}{2} F \approx \cotg \left[\mp \frac{1}{2} F + \pi \left(n + \frac{1}{2} \right) \right], \tag{1.4.14}$$

kde $n \in \mathbb{N}_0$. To vede k rovnici (kvantovací podmínce)

$$\frac{1}{\hbar} \int_a^b p(x) dx = \pi \left(n + \frac{1}{2} \right) \pm \frac{1}{2} e^{-\frac{1}{\hbar} \int_{-a}^a |p(x)| dx} \tag{1.4.15}$$

Kdyby nebylo tunelování mezi dvěma jamami, spektrum $E_n^{(0)}$ by na základě Bohrova-Sommerfeldova kvantování (1.0.20) bylo dáno rovnicí

$$\int_a^b \sqrt{2M \left[E_n^{(0)} - V(x) \right]} dx = \pi \hbar \left(n + \frac{1}{2} \right). \tag{1.4.16}$$

Ve skutečnosti však dochází k tunelování a spektrum je určeno rovnicí (1.4.15). Budeme předpokládat, že hladina E_n se nachází blízko hladiny $E_n^{(0)}$, tj.

$$E_n = E_n^{(0)} + \epsilon, \quad (1.4.17)$$

kde $\epsilon \ll E_n^{(0)}$, a rozvineme levou stranu rovnice (1.4.15) okolo $E_n^{(0)}$:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\hbar} \int_a^b \underbrace{\sqrt{2M [E_n - V(x)]}}_{p(x; E_n)} dx &= \frac{1}{\hbar} \int_a^b p(x; E_n^{(0)}) dx + \frac{\epsilon}{\hbar} \int_a^b \frac{\partial p}{\partial E}(x; E_n^{(0)}) dx + \dots \\ &\approx \pi \left(n + \frac{1}{2} \right) + \underbrace{\frac{\epsilon}{\hbar} 2M \int_a^b \frac{dx}{\sqrt{2M [E_n^{(0)} - V(x)]}}}_{\int_a^b \frac{dx}{v(x)} = \frac{1}{2} \oint \frac{dx}{v(x)} = \frac{T}{2}}, \end{aligned} \quad (1.4.18)$$

kde T odpovídá periodě klasické trajektorie na energii $E_n^{(0)}$ (úhlová frekvence je $\Omega = 2\pi/T$). Dosazení do (1.4.15) vede k jednoduchému vztahu

$$\epsilon = \pm \frac{\hbar \Omega}{2\pi} E \quad (1.4.19)$$

z něhož lze určit rozštěpení hladin jako

$$\Delta E_n = \frac{\hbar \Omega}{\pi} e^{-\frac{1}{\hbar} \int_{-a}^a |p(x)| dx}. \quad (1.4.20)$$

2. Za předpokladu, že se částice nachází na energii dostatečně blízko dnu jámy, lze potenciál (1.4.1) rozvinout okolo x_0 :

$$\begin{aligned} V(x) &= \frac{g^2}{8} (x + x_0)^2 \underbrace{(x - x_0)^2}_y = \frac{g^2}{8} (y + 2x_0)^2 y^2 \\ &\approx \frac{1}{2} g^2 x_0^2 y^2 = \frac{1}{2} M \Omega^2 y^2, \end{aligned} \quad (1.4.21)$$

takže pohyb hluboko v jámě přibližně odpovídá periodickému pohybu harmonického oscilátoru s frekvencí

$$\Omega = \frac{gx_0}{\sqrt{M}} \quad (1.4.22)$$

a spektrem

$$E_n = \hbar \Omega \left(n + \frac{1}{2} \right). \quad (1.4.23)$$

Body obratu (řešení rovnice $V(x) = E_n$) pak jsou

$$\begin{aligned} a \\ b \end{aligned} = x_0 \mp \sqrt{\frac{\hbar}{M \Omega} \left(n + \frac{1}{2} \right)} \quad (1.4.24)$$

a speciálně pro základní stav $n = 0$

$$a = x_0 - \sqrt{\frac{\hbar}{M \Omega}}, \quad (1.4.25a)$$

$$b = x_0 + \sqrt{\frac{\hbar}{M \Omega}}. \quad (1.4.25b)$$

Integrál z kvantovací podmínky (1.4.15) je

$$\begin{aligned}
 \hbar I_{-a}^a &= 2\hbar I_0^a = 2 \int_0^a \sqrt{2M \left[\frac{g^2}{8} (x_0^2 - x^2)^2 - \frac{1}{2} \hbar \Omega \right]} dx \\
 &= \int_0^a \underbrace{g}_{\frac{\Omega}{x_0} \sqrt{M}} \sqrt{M} (x_0^2 - x^2) \sqrt{1 - \frac{4\hbar\Omega}{g^2 (x_0^2 - x^2)^2}} dx \\
 &\approx \int_0^a \frac{M\Omega (x_0^2 - x^2)}{x_0} dx - 2 \int_0^a \frac{\hbar x_0}{x_0^2 - x^2} dx \\
 &= \int_0^a \left[M\Omega x_0^2 - \frac{M\Omega x^2}{x_0} - \frac{\hbar}{x_0 - x} - \frac{\hbar}{x_0 + x} \right] dx \\
 &= \left[M\Omega x_0^2 x - \frac{M\Omega x^3}{3x_0} + \hbar \ln(x_0 - x) - \hbar \ln(x_0 + x) \right]_0^a \\
 &= M\Omega x_0 \left(x_0 - \sqrt{\frac{\hbar}{M\Omega}} \right) - \frac{M\Omega}{3x_0} \left(x_0 - \sqrt{\frac{\hbar}{M\Omega}} \right)^3 + \hbar \ln \sqrt{\frac{\hbar}{M\Omega}} \\
 &\quad \approx \frac{M\Omega x_0^2}{3} \left(1 - \frac{3}{x_0} \sqrt{\frac{\hbar}{M\Omega}} + \frac{3}{x_0^2} \frac{\hbar}{M\Omega} \right) \hbar \ln x_0 + \hbar \ln \frac{1}{x_0} \sqrt{\frac{\hbar}{M\Omega}} \\
 &\quad - \hbar \ln \left(2x_0 - \sqrt{\frac{\hbar}{M\Omega}} \right) \\
 &\quad \hbar \ln x_0 + \hbar \ln \left(2 - \frac{1}{x_0} \sqrt{\frac{\hbar}{M\Omega}} \right) \\
 &\approx \frac{2M\Omega x_0^2}{3} - \hbar + \hbar \ln \sqrt{\frac{\hbar}{4M\Omega x_0^2}} + O(\hbar^{\frac{2}{3}}), \tag{1.4.26}
 \end{aligned}$$

za předpokladu, že Planckova konstanta \hbar je oproti ostatním veličinám malý parametr.

Po dosazení do (1.4.20) vychází pro vzdálenost hladin v dubletech

$$\Delta E_0 = \frac{\Omega \hbar}{\pi} e^{-I_{-a}^a} \approx \frac{\Omega \hbar}{\pi} \sqrt{\frac{4M\Omega x_0^2}{\hbar}} e^{-\frac{2M\Omega x_0^2}{3\hbar} + 1} = \frac{2}{\pi} \sqrt{\frac{\hbar g^3 x_0^5}{M}} e^{-\frac{2\sqrt{M} g x_0^3}{3\hbar} + 1}. \tag{1.4.27}$$

Poznámka: Sbírka [8] uvádí výsledek odlišně

$$\Delta E'_0 = 2 \sqrt{\frac{\hbar g^3 x_0^5}{M}} e^{-\frac{2\sqrt{M} g x_0^3}{3\hbar}}, \tag{1.4.28}$$

a to i přesto, že integrál I_{-a}^a v ní vychází stejně jako zde. Tento výraz $\Delta E'_0$ nicméně lépe souhlasí s přesnějšími metodami, viz např. následující bod.

3. Dvojitá symetrická jáma, se kterým budeme nyní získaný výsledek srovnávat, má tvar

$$V(x) = -\frac{1}{2}x^2 + x^4 = \left(x^2 - \frac{1}{4}\right)^2 - \frac{1}{16}, \tag{1.4.29}$$

viz (4.6.4), takže se jedná o potenciál (1.4.1) s

$$g = 2\sqrt{2}, \quad x_0 = \frac{1}{2}, \tag{1.4.30}$$

přičemž spektrum Hamiltoniánu bude navíc posunuté o $\frac{1}{16}$ energetické jednotky dolů.

Pro dostatečně malé hodnoty \hbar (v příkladu 4.6 se počítá s $\hbar = 0.02$) vychází pro základní stav

$$\begin{aligned}
 \Omega &= \frac{g x_0}{\sqrt{M}} = \sqrt{2} \approx 1.4142 \\
 E_0 &= \frac{1}{2} \hbar \Omega - \frac{1}{16} \approx -0.0484 \\
 \Delta E'_0 &= 1.81 \cdot 10^{-6} \tag{1.4.31}
 \end{aligned}$$

Naproti tomu na základě numerické diagonalizace matice v příkladu 4.6 je energie základního stavu a rozštěpení prvního dubletu

$$E_0 = -0.0489 \quad \Delta E = 1.86 \cdot 10^{-6}. \quad (1.4.32)$$

Pro menší hodnoty \hbar bychom dostali lepší shodu obou přístupů.

A.5 Coulombické pole

WKB metodu lze aplikovat také na problémy se sféricky symetrickým polem. Schrödingerova rovnice pro radiální část vlnové funkce $R(r)$ obecného sféricky symetrického problému má tvar

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} r^2 \frac{d}{dr} R(r) + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V_{\text{ef}}(r)) R(r) = 0, \quad (1.5.1)$$

kde

$$V_{\text{ef}}(r) \equiv V(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} \quad (1.5.2)$$

je efektivní potenciál, zahrnující v sobě centrifugální člen.

Zavedením substituce $R(r) = u(r)/r$ dostaneme rovnici

$$\frac{d^2}{dr^2} u(r) + k^2(r) u(r) = 0, \quad (1.5.3)$$

kde $k^2(r) = 2m/\hbar^2 (E - V_{\text{ef}})$.

WKB metoda pro sféricky symetrické potenciály dává dobré výsledky jedině v případě, aplikujeme-li tzv. *Langerovu korekci*⁶², která spočívá v nahrazení

$$l(l+1) \rightarrow \left(l + \frac{1}{2}\right)^2 \quad (1.5.4)$$

. Vázané stavy lze pak nalézt z rovnice ekvivalentní Bohrově-Sommerfeldově kvantovací podmínce

$$\int_{r_1}^{r_2} k'(r) dr = \left(n_r + \frac{1}{2}\right) \pi, \quad (1.5.5)$$

přičemž $k'(r)$ zahrnuje Langerovu korekci, $n_r = 0, 1, \dots$ je radiální kvantové číslo a $r_{1,2}$ jsou body obratu klasické trajektorie s hybností $p'(r) = \hbar k'(r)$.

Uvažujte konkrétní případ pohybu částice v Coulombickém poli

$$V(r) = -\frac{\gamma}{r}. \quad (1.5.6)$$

kde $\gamma = e^2/(4\pi\epsilon_0)$.

1. Nalezněte body obratu $r_{1,2}$ trajektorie s energií E (počítejte s Langerovou korekcí).
2. Pomocí WKB přiblížení nalezněte diskrétní spektrum, tj. stavy s energií $E < 0$.
3. Porovnejte toto spektrum se spektrem získaným přesným řešením Schrödingerovy rovnice.

Řešení:

Řešení formou hry naleznete na následujících odkazech: [Linux](#), [Windows](#).

⁶²Langerova korekce odvozuje z asymptotiky vlnových funkcí [20].

A.6 Homogenní pole

Částice o hmotnosti M (hopík) skáče v homogenním (např. gravitačním) poli, přičemž od podložky se odráží bez ztráty energie. Potenciál se tedy dá vyjádřit jako

$$V(z) = \begin{cases} mgz & z > 0 \\ \infty & z < 0 \end{cases} \quad (1.6.1)$$

1. Řešení pomocí WKB metody:

- Nalezněte body obratu, má-li částice energii E .
- Pomocí WKB přiblížení vypočítejte energetické spektrum.
- Nalezněte WKB vlnové funkce v klasicky dostupné i nedostupné oblasti. Vlnové funkce nemusíte normovat.

2. Hledání základního stavu variační metodou:

- Podle chování potenciálu navrhnete vhodnou testovací funkci s jedním parametrem (dodatečný parametr bude fixovat normalizaci).
- Nalezněte optimální hodnotu parametru a jemu odpovídající přibližnou energii základního stavu.

3. Srovnáním energií základního stavu získaných oběma metodami určete, která metoda dává základní stav přesněji.

B Hustota kvantových hladin

Hladkou část hustoty kvantových hladin $\rho(E)$ systému s f stupni volnosti lze vyjádřit jako podíl objemu energetické nadplochy fázového prostoru

$$\Omega(E) = \int \delta(E - H(\mathbf{p}, \mathbf{q})) d^f \mathbf{p} d^f \mathbf{q} \quad (2.0.1)$$

$[H(\mathbf{p}, \mathbf{q})]$ je klasická Hamiltonova funkce systému) ku objemu elementární kvantové buňky:

$$\rho(E) = \frac{\Omega(E)}{h^f} = \frac{\Omega(E)}{(2\pi\hbar)^f}. \quad (2.0.2)$$

Pro praktické výpočty se více hodí vztah, kdy Diracovu δ funkci nahradíme derivací Heavisideovy Θ funkce:⁶³

$$\rho(E) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^f} \frac{\partial}{\partial E} \int \Theta(E - H(\mathbf{p}, \mathbf{q})) d^f \mathbf{p} d^f \mathbf{q} = \frac{1}{(2\pi\hbar)^f} \frac{\partial}{\partial E} \int_{H(\mathbf{p}, \mathbf{q}) \leq E} d^f \mathbf{p} d^f \mathbf{q}, \quad (2.0.3)$$

kde poslední integrál je vlastně *Lesbagueova míra* („objem“) energetické nadplochy fázového prostoru.

V případě Hamiltoniánu se standardním kinetickým členem a potenciálem závislejícím jen na souřadnici,

$$H(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = \frac{1}{2M} \mathbf{p}^2 + V(\mathbf{q}), \quad (2.0.4)$$

lze vztah (2.0.3) dále upravit. Integraci přes souřadnice a přes hybnosti lze provést nezávisle,

$$\begin{aligned} \rho(E) &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^f} \frac{\partial}{\partial E} \int_{E > V(\mathbf{q})} d^f \mathbf{q} \underbrace{\int_0^{\sqrt{2M[E-V(\mathbf{q})]}} p^{f-1} d\Omega_f dp}_{\text{objem } f\text{-rozměrné koule}} \\ &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^f} \frac{\partial}{\partial E} \int_{E > V(\mathbf{q})} \left[\frac{\pi^{\frac{f}{2}}}{\Gamma\left(\frac{f}{2} + 1\right)} p^f \right]_0^{\sqrt{2M[E-V(\mathbf{q})]}} d\mathbf{q} \\ &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^f} \frac{(2\pi M)^{\frac{f}{2}}}{\Gamma\left(\frac{f}{2} + 1\right)} \int_{E > V(\mathbf{q})} \frac{\partial}{\partial E} [E - V(\mathbf{q})]^{\frac{f}{2}} d\mathbf{q} \\ &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^f} \frac{(2\pi M)^{\frac{f}{2}}}{\Gamma\left(\frac{f}{2}\right)} \int_{E > V(\mathbf{q})} [E - V(\mathbf{q})]^{\frac{f}{2}-1} d\mathbf{q}. \end{aligned} \quad (2.0.5)$$

Pro speciální případ $f = 1$ platí

$$\begin{aligned} \rho(E) &= \frac{1}{2\pi\hbar} \frac{\sqrt{2\pi M}}{\sqrt{\pi}} \int_{E > V(q)} \frac{1}{\sqrt{E - V(q)}} dq \\ &= \frac{1}{2\pi\hbar} \oint \frac{dq}{v} \\ &= \frac{T}{2\pi\hbar}, \end{aligned} \quad (2.0.6)$$

kde T je perioda trajektorie s energií E .

⁶³Tento vztah se někdy nazývá Weylova formule a má použití i mimo kvantovou mechaniku, například při studiu spektra bicích nástrojů [21].

Fanoušci δ funkce mohou poslední vztah odvodit jinak. Pro speciální případ $f = 1$ se využije vztahu pro složenou δ funkci

$$\delta(f(x)) = \sum_{x_j} \frac{1}{|f'(x_j)|} \delta(x - x_j) \quad (2.0.7a)$$

$$f(x_j) = 0 \quad (x_j \text{ jsou všechny jednoduché kořeny}) \quad (2.0.7b)$$

a v rovnici (2.0.1) se provede integrace přes hybnost:

$$\begin{aligned} \Omega(E) &= \int \delta\left(E - \frac{1}{2M}p^2 - V(q)\right) dq dp \\ &= \int \left| \delta\left(E - \frac{1}{2M}p^2 - V(q)\right) \right| \frac{M}{P(q)} [\delta(p - P(q)) + \delta(p + P(q))] \\ &\quad \left| P(q) = \sqrt{2M[E - V(q)]} \right| \\ &= 2M \int_{E > V(q)} \frac{1}{\sqrt{2M[E - V(q)]}} dq \\ &= \sqrt{2M} \int_{E > V(q)} \frac{1}{\sqrt{E - V(q)}} dq. \end{aligned} \quad (2.0.8)$$

Integruje se přes veškerá dostupná q (například v případě systému se dvěma body obratu jsou integrační meze $\int_{q_{\min}}^{q_{\max}}$ řešením rovnice $V(q_{\min, \max}) = E$).

B.1 Hustota hladin jednorozměrného harmonického oscilátoru

Spočítejte hustotu hladin jednorozměrného harmonického oscilátoru.

Řešení:

Klasická Hamiltonova funkce harmonického oscilátoru je

$$H(p, q) = \frac{1}{2M}p^2 + \frac{1}{2}kq^2. \quad (2.1.1)$$

Objem enegetické nadplochy klasického fázového prostoru podle (2.0.1) bude

$$\begin{aligned} \Omega(E) &= \int \delta\left(E - \frac{1}{2M}p^2 - \frac{1}{2}kq^2\right) dq dp \\ &= \sqrt{\frac{4M}{k}} \int \delta(E - \pi^2 - \xi^2) d\xi d\pi \\ &= \frac{2}{\omega} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\infty \delta(E - r^2) r dr \\ &= \frac{2\pi}{\omega\sqrt{E}} \int_0^\infty [\delta(r - \sqrt{E}) + \delta(r + \sqrt{E})] r dr \\ &= \frac{2\pi}{\omega}, \end{aligned} \quad \begin{aligned} &\left| \begin{array}{l} \pi = \sqrt{\frac{1}{2M}} p \quad dp = \sqrt{2M} d\pi \\ \xi = \sqrt{\frac{k}{2}} q \quad dq = \sqrt{\frac{2}{k}} d\xi \end{array} \right| \\ &\left| \begin{array}{l} \text{Polární souřadnice} \\ r^2 = \pi^2 + \xi^2 \\ d\xi d\pi = r dr d\varphi \end{array} \right| \\ &\left| \delta(E - r^2) = \frac{1}{2\sqrt{E}} (\delta(r - \sqrt{E}) + \delta(r + \sqrt{E})) \right| \end{aligned} \quad (2.1.2)$$

přičemž se využily vlastnosti δ funkce (2.0.7) a označení $\omega = \sqrt{\frac{k}{M}}$.

Hustota kvantových hladin tedy je konstantní, nezávisí na energii:

$$\rho(E) = \frac{2\pi}{h\omega} = \frac{1}{h\omega} \quad (2.1.3)$$

Získaný výsledek je v souladu se známou skutečností, že jednorozměrný harmonický oscilátor má ekvidistantní spektrum.

Jiný způsob řešení:

Vyjde se z relací (2.0.8)). Body obratu jsou

$$q_{\min} = -\sqrt{\frac{2E}{k}}, \quad q_{\max} = \sqrt{\frac{2E}{k}}, \quad (2.1.4)$$

takže

$$\begin{aligned} \Omega(E) &= \sqrt{2M} \int_{-\sqrt{\frac{2E}{k}}}^{\sqrt{\frac{2E}{k}}} \frac{1}{\sqrt{E - \frac{1}{2}kq^2}} dq & \left| a = \sqrt{\frac{k}{2E}} q \quad da = \sqrt{\frac{k}{2E}} dq \right| \\ &= \sqrt{\frac{4M}{k}} \int_{-1}^1 \frac{1}{\sqrt{1-a^2}} da \\ &= \frac{2}{\omega} [\arcsin a]_{-1}^1 \\ &= \frac{2\pi}{\omega}. \end{aligned} \quad (2.1.5)$$

To je ve shodě s řešením (2.1.2).

Jiný způsob řešení:

Vyjde se vztahu (2.0.3),

$$\Omega(E) = \frac{\partial}{\partial E} \int \Theta(E - H(p, q)) dp dq. \quad (2.1.6)$$

V případě 1D harmonického oscilátoru dává integrál povrch elipsy $S = \pi ab$ s poloosami

$$a = \sqrt{\frac{2E}{k}}, \quad b = \sqrt{2ME}, \quad (2.1.7)$$

takže po dosazení

$$\Omega(E) = \frac{\partial}{\partial E} \left(\pi \sqrt{\frac{4M}{k}} E \right) = \frac{2\pi}{\omega}, \quad (2.1.8)$$

což je opět ve shodě s (2.1.2)).

Ještě jiný způsob řešení:

Využije se Fourierova transformace δ -funkce:

$$\delta(q) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\kappa q} d\kappa \quad (2.1.9)$$

Po dosazení do vztahu (2.0.1) vychází pro zadaný jednorozměrný harmonický oscilátor

$$\begin{aligned} \Omega(E) &= \frac{1}{2\pi} \iiint e^{i\kappa(E - \frac{1}{2M}p^2 - \frac{1}{2}kq^2)} d\kappa dp dq \\ &= \frac{1}{2\pi} \int e^{-i\kappa \frac{p^2}{2M}} dp \int e^{-i\kappa \frac{kq^2}{2M}} dq \int e^{i\kappa E} d\kappa \\ &= \frac{1}{2\pi} \int \left(\sqrt{\frac{2\pi M}{i\kappa}} \right) \left(\sqrt{\frac{2\pi}{i\kappa k}} \right) e^{i\kappa E} d\kappa \\ &= \frac{1}{\omega} \int \frac{e^{i\kappa E}}{i\kappa} d\kappa \\ &= \frac{2\pi}{\omega}. \end{aligned} \quad (2.1.10)$$

Žádné překvapení se nekoná.

B.2 Obrácený oscilátor v jámě

Uvažujte jednorozměrný potenciál daný předpisem

$$V(q) = \begin{cases} -\frac{1}{2}kq^2 & -a \leq q \leq a \\ \infty & |q| > a \end{cases} \quad (2.2.1)$$

(obrácený harmonický oscilátor v nekonečně hluboké pravoúhlé jámě, viz obrázek 32(a)). Spočítejte hustotu kvantových hladin.

Řešení:

Při výpočtu se vyjde ze vztahu (2.0.8).

1. $E < 0$: V tomto případě je (díky sudosti potenciálu stačí počítat jen v oblasti $x > 0$ a výsledek zdvojnásobit):

$$\begin{aligned} \Omega(E) &= 2\sqrt{2m} \int_{\sqrt{\frac{2|E|}{k}}}^a \frac{1}{\sqrt{-|E| + \frac{1}{2}kq^2}} dq \\ &= 2\sqrt{\frac{2m}{|E|}} \int_{\sqrt{\frac{2|E|}{k}}}^a \frac{1}{\sqrt{\frac{k}{2|E|}q^2 - 1}} dq & \left| b = \sqrt{\frac{k}{2|E|}} q \quad dq = \sqrt{\frac{2|E|}{k}} db \right| \\ &= \frac{4}{\omega} \int_1^{\sqrt{\frac{k}{2|E|}} a} \frac{1}{\sqrt{b^2 - 1}} db & \left| b = \cosh z \quad db = \sinh z dz \right| \\ &= \frac{4}{\omega} \int_0^{\operatorname{arccosh}\left(\sqrt{\frac{k}{2|E|}} a\right)} \frac{\sinh z}{\sqrt{\cosh^2 z - 1}} dz \\ &= \frac{4}{\omega} \operatorname{arccosh}\left(\sqrt{\frac{k}{2|E|}} a\right), \end{aligned}$$

kde $-\frac{1}{2}ka^2 \leq E \leq 0$ a $\omega = \sqrt{k/m}$.

Hustota hladin je tedy

$$\rho(E) = \frac{2}{\pi\hbar\omega} \operatorname{arccosh}\left(\sqrt{\frac{k}{2|E|}} a\right).$$

2. $E > 0$

Analogickým postupem jako v případě záporné energie se dostane

$$\rho(E) = \frac{2}{\pi\hbar\omega} \operatorname{arcsinh}\left(\sqrt{\frac{k}{2|E|}} a\right).$$

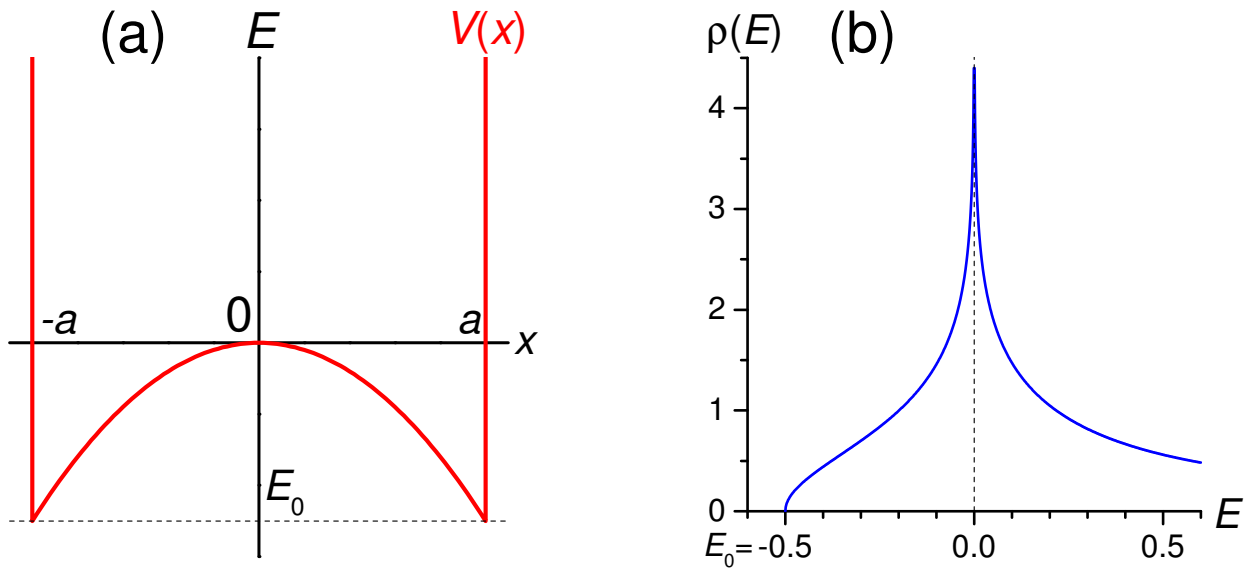
Výsledná hustota hladin je znázorněna na obrázku 32(b). Je vidět, že pro $E = 0$ hustota diverguje. To je důsledek skutečnosti, že v klasickém případě je bod obratu při této energii v bodě $q = 0$ patologický, $V''(q = 0) = 0$, a patologická je i jediná možná trajektorie při této energii (její perioda je nekonečná).

B.3 Hustota hladin f -rozměrného oscilátoru

1. Spočítejte hustotu hladin $\rho_0(E)$ izotropního f -rozměrného harmonického oscilátoru.
2. Částice se pohybuje v potenciálu podle obrázku: jedná se o dvě f -rozměrné izotropní kvadratické jámy, jejichž minima se nacházejí na souřadnicích

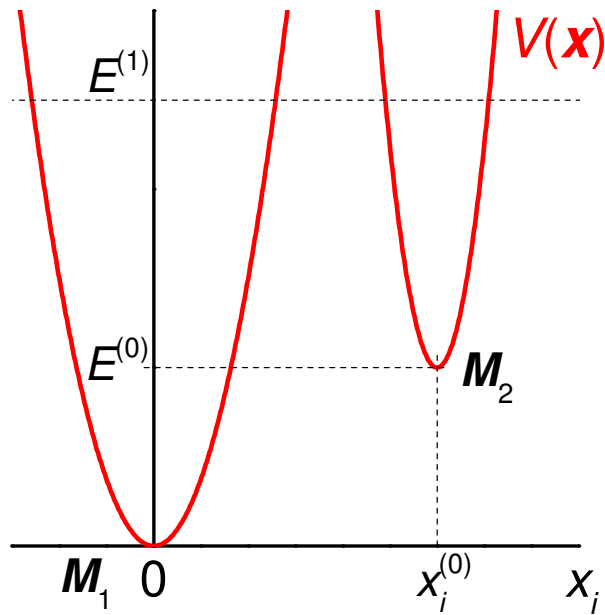
$$\mathbf{M}_1 = (\mathbf{q} = \mathbf{0}, E = 0), \quad \mathbf{M}_2 = (\mathbf{q} = \mathbf{q}^{(0)}, E = E^{(0)}), \quad E^{(0)} > 0.$$

Určete hustotu hladin $\rho(E)$ v intervalu energií $E \in (0; E^{(1)})$, přičemž předpokládejte, že $E^{(1)} > E^{(0)}$ a že obě jámy jsou pod energií $E^{(1)}$ oddělené.



Obrázek 32: (a) Schéma potenciálu (2.2.1). (b) Hustota kvantových hladin při volbě $a = \hbar = m = k = 1$.

3. Funkce $\rho(E)$ bude neanalytická v bodě $E^{(0)}$. Určete, v kolikáté její derivaci se poprvé neanalytičnost projeví jako nespojitost.



Obrázek 33: Dvoujámový potenciál: řez podél jedné ze souřadných os $q_i, i \in \{1, 2, \dots, f\}$.

C Hypergeometrické funkce

Hypergeometrická funkce

Hypergeometrická funkce je řešením obyčejné homogenní diferenciální rovnice 2. řádu⁶⁴

$$z(1-z)\frac{d^2w}{dz^2} + [c - (a+b+1)z]\frac{dw}{dz} - abw = 0, \quad (3.0.2)$$

kde $w = w(z)$, $z \in \mathbb{C}$ je nezávisle proměnná a $a, b, c \in \mathbb{C}$ jsou číselné parametry. Tato rovnice má 3 regulární singulární body $(0, 1, \infty)$. Každá homogenní diferenciální rovnice 2. řádu se třemi regulárními singulárními body se dá vhodnými substitucemi převést na tvar (3.0.2).

Dvě lineárně nezávislá řešení rovnice (3.0.2) v okolí počátku $z = 0$ s poloměrem konvergence 1,⁶⁵ tj. $|z| < 1$, jsou až na speciální případy⁶⁶

$$w_1(z) = {}_2F_1(a, b, c; z), \quad (3.0.4a)$$

$$w_2(z) = z^{1-c} {}_2F_1(a-c+1, b-c+1, 2-c; z), \quad (3.0.4b)$$

kde ${}_2F_1(a, b, c; z)$ je *hypergeometrická funkce* daná řadou

$${}_2F_1(a, b, c; z) = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{\zeta_m}{m!} z^m, \quad (3.0.5)$$

s koeficienty rozvoje⁶⁷

$$\zeta_m = \frac{a(a+1) \cdots (a+m-1) b(b+1) \cdots (b+m-1)}{c(c+1) \cdots (c+m-1)} = \frac{(a)_m (b)_m}{(c)_m}, \quad (3.0.6)$$

kde $(\bullet)_m$ je tzv. *Pochhammerův symbol* (nebo *stoupající faktoriál*) definovaný jako

$$(\bullet)_m = \begin{cases} 1 & m = 0, \\ \bullet(\bullet+1) \cdots (\bullet+m-1) & m > 0. \end{cases} \quad (3.0.7)$$

Důležitá vlastnost je, že pokud a nebo b je nekladné číslo $-n$, $n \in \mathbb{N}_0$, vynulují se všechny koeficienty $\zeta_m = 0$ pro $m \geq n$. Hypergeometrická funkce se tak redukuje na polynom stupně n , tzv. *Jacobiho*

⁶⁴Jiné ekvivalentní způsoby zápisu jsou

$$\left(z \frac{d}{dz} + a\right) \left(z \frac{d}{dz} + b\right) w = \left(z \frac{d}{dz} + c\right) \frac{dw}{dz}, \quad (3.0.1a)$$

$$\frac{d^2w}{dz^2} + \frac{-c + (1+a+b)}{z(z-1)} \frac{dw}{dz} + \frac{ab}{z(z-1)} w = 0. \quad (3.0.1b)$$

⁶⁵Funkci lze ovšem analyticky prodloužit do celé komplexní roviny s řezem probíhajícím podél reálné osy v intervalu $z \in (1, \infty)$.

⁶⁶Je-li $1-c \in \mathbb{N}$, pak jsou dvě lineárně nezávislá řešení

$$w_1(z) = {}_2F_1(a, b, c; z), \quad (3.0.3a)$$

$$w_2(z) = G(a, b, c; z) + w_1(z) \ln z, \quad (3.0.3b)$$

$$G(a, b, c; z) = z^{1-c} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{\xi_m}{m!} z^m, \quad (3.0.3c)$$

přičemž funkci $G(a, b, c; z)$ je třeba hledat zvlášť.

⁶⁷Označení ${}_2F_1$ zavedl Pochhammer a je zakotveno ve tvaru koeficientů ζ_m . Obecněji se zavede *hypergeometrická funkce* ${}_rF_s$, která má $r+s$ parametrů, přičemž stoupající faktoriály r parametrů se nacházejí v čitateli a stoupající faktoriály s parametrů ve jmenovateli zlomku ζ_m . Kromě hypergeometrické funkce ${}_2F_1$ se nejčastěji setkáme s *degenerovanými hyperbolickými funkcemi* ${}_1F_1$, které budou popsány níže.

polynom, který se zavádí ve tvaru⁶⁸

$$P_n^{(\alpha, \beta)}(z) \equiv \frac{(\alpha+1)_n}{n!} {}_2F_1\left(-n, \alpha + \beta + n + 1, \alpha + 1; \frac{1}{2}(1-z)\right), \quad (3.0.9)$$

splňující relace ortogonality

$$\int_{-1}^1 (1-z)^\alpha (1+z)^\beta P_m^{(\alpha, \beta)}(z) P_n^{(\alpha, \beta)}(z) dz = N_n^{(\alpha, \beta)} \delta_{mn}, \quad (3.0.10)$$

kde

$$N_n^{(\alpha, \beta)} = \frac{2^{\alpha+\beta+1}}{2n + \alpha + \beta + 1} \frac{\Gamma(n + \alpha + 1) \Gamma(n + \beta + 1)}{\Gamma(n + \alpha + \beta + 1) n!} \quad (3.0.11)$$

je normalizační koeficient. Z Jacobiho polynomů lze zkonstruovat Wignerovy d -funkce⁶⁹

$$d_{m'm}^j(\theta) = \sqrt{\frac{(j+m)!(j-m)!}{(j+m')!(j-m')!}} \sin^{m-m'} \frac{\theta}{2} \cos^{m+m'} \frac{\theta}{2} P_j^{(m-m', m+m')}(\cos \theta), \quad \theta \in (0, 4\pi). \quad (3.0.12)$$

Užitečné identity

Pro hypergeometrickou funkci je známo tisíce identit, které lze najít například na stránkách [Wolfram](#) nebo [Digital Library of Mathematical Functions](#). Pro následující příklady jsou nejdůležitější identity tyto,

$$\begin{aligned} {}_2F_1(a, b, c; z) &= \frac{\Gamma(c)\Gamma(c-a-b)}{\Gamma(c-a)\Gamma(c-b)} {}_2F_1(a, b, a+b-c+1; 1-z) \\ &+ \frac{\Gamma(c)\Gamma(a+b-c)}{\Gamma(a)\Gamma(b)} (1-z)^{c-a-b} {}_2F_1(c-a, c-b, c-a-b+1; 1-z), \quad c-a-b \notin \mathbb{Z}, \end{aligned} \quad (3.0.13a)$$

$$\begin{aligned} {}_2F_1(a, b, c; z) &= \frac{\Gamma(c)\Gamma(b-a)}{\Gamma(b)\Gamma(c-a)} (-z)^{-a} {}_2F_1\left(a, a-c+1, a-b+1; \frac{1}{z}\right) \\ &+ \frac{\Gamma(c)\Gamma(a-b)}{\Gamma(a)\Gamma(c-b)} (-z)^{-b} {}_2F_1\left(b, b-c+1, b-a+1; \frac{1}{z}\right), \quad a-b \notin \mathbb{Z}, z \notin (0, 1), \end{aligned} \quad (3.0.13b)$$

$${}_2F_1(a, b, c; z) = (1-z)^{-a} {}_2F_1\left(a, c-b, c; \frac{z}{z-1}\right), \quad z \notin (1, \infty), \quad (3.0.13c)$$

přičemž první dvě mohou sloužit k prodlužování řešení hypergeometrické funkce za konvergenční oblast $|z| < 1$. Druhá formule navíc určuje asymptotiku hypergeometrické funkce v nekonečnu,

$${}_2F_1(a, b, c; z \rightarrow \infty) \rightarrow \frac{\Gamma(c)\Gamma(b-a)}{\Gamma(b)\Gamma(c-a)} (-z)^{-a} + \frac{\Gamma(c)\Gamma(a-b)}{\Gamma(a)\Gamma(c-b)} (-z)^{-b} \quad a-b \notin \mathbb{Z}. \quad (3.0.14)$$

Speciální případy

$$\ln(1-z) = z {}_2F_1(1, 1, 2; z), \quad (3.0.15a)$$

$$(1-z)^{-a} = {}_2F_1(a, b, b; z), \quad (3.0.15b)$$

$$\arcsin z = z {}_2F_1\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{3}{2}; z^2\right), \quad (3.0.15c)$$

$$\arctan z = z {}_2F_1\left(\frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}; -z^2\right). \quad (3.0.15d)$$

⁶⁸Bližší vztah k hypergeometrické funkci má posunutý Jacobiho polynom

$$J_n(p, q; z) \equiv {}_2F_1(-n, p+n, q; z) = \frac{n!}{(q)_n} P_n^{(q-1, p-q)}(2z-1). \quad (3.0.8)$$

⁶⁹Viz příklad D.3.

Degenerovaná hypergeometrická funkce

Degenerovaná hypergeometrická funkce je řešením *Kummerovy rovnice*

$$x \frac{d^2 w}{dx^2} + (c - x) \frac{dw}{dx} - aw = 0, \quad (3.0.16)$$

kde $w = w(x)$, $x \in \mathbb{C}$ a $a, c \in \mathbb{C}$ jsou parametry. Tato rovnici se formálně získá z rovnice (3.0.2) limitou $b \rightarrow \infty$, $z = x/b$. Rovnice má regulární singulární bod $x = 0$ a neregulární singulární bod $x = \infty$, který vznikne splnutím dvou regulárních singulárních bodů $z = 1$ a $z = \infty$ rovnice (3.0.2).

Dvě lineárně nezávislá řešení Kummerovy rovnice jsou

$$u_1(x) = {}_1F_1(a, c; x), \quad (3.0.17a)$$

$$u_2(x) = z^{1-c} {}_1F_1(a - c + 1, 2 - c; x), \quad (3.0.17b)$$

kde ${}_1F_1(a, c; z)$ je *degenerovaná hypergeometrická funkce* (nebo *konfluentní hypergeometrická funkce*) daná řadou

$${}_1F_1(a, c; x) = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(a)_m}{(c)_m} \frac{x^m}{m!} \quad (3.0.18)$$

Pokud $1 - c = n \in \mathbb{N}$, řada (3.0.18) není definována. Řešení Kummerovy rovnice je v tom případě

$$u(x) = \lim_{c \rightarrow -n} \frac{{}_1F_1(a, c; x)}{\Gamma(c)} = \frac{\Gamma(a + n + 1)}{\Gamma(a)} \frac{x^{n+1}}{(n+1)!} {}_1F_1(a + n + 1, n + 2; x). \quad (3.0.19)$$

Asymptotické chování degenerované hypergeometrické funkce je

$${}_1F_1(a, c; x \rightarrow \infty) \rightarrow e^{-i\pi a} \frac{\Gamma(c)}{\Gamma(c-a)} x^{-a} + \frac{\Gamma(c)}{\Gamma(a)} e^x x^{a-c}. \quad (3.0.20)$$

Tato rovnice platí za předpokladu, že $1 - a \notin \mathbb{N}$.

Speciální polynomy

Je-li $a = -n$, $n \in \mathbb{N}_0$, degenerovaná hypergeometrická funkce se redukuje na polynom řádu n . Z možných polynomů jsou nejdůležitější *Hermitovy polynomy*

$$H_{2n}(x) = (-1)^n \frac{(2n)!}{n!} {}_1F_1\left(-n, \frac{1}{2}; x^2\right), \quad (3.0.21a)$$

$$H_{2n+1}(x) = (-1)^n \frac{(2n+1)!}{n!} 2x {}_1F_1\left(-n, \frac{3}{2}; x^2\right) \quad (3.0.21b)$$

a *Laguerrovy polynomy*

$$L_n^m(x) = \frac{(n+m)!}{n!m!} {}_1F_1(-n, m+1; x). \quad (3.0.22)$$

C.1 Pöschl-Tellerův potenciál

Částice o hmotnosti M se pohybuje v jednorozměrné konečně hluboké potenciálové jámě popsané funkcí

$$V(x) = \frac{V_0}{\cosh^2 \frac{x}{d}}, \quad (3.1.1)$$

kde $V_0 < 0$ udává hloubku jámy a $d > 0$ její šířku (viz obrázek 34). Určete energetické spektrum.

Řešení:

Prvním krokem bude převést Schrödingerovu rovnici pro vlnovou funkci $\psi = \psi(x)$,

$$-\frac{\hbar^2}{2M}\psi_{xx} + [V(x) - E]\psi = 0 \quad (3.1.2)$$

($\psi_x \equiv d\psi/dx$ je zkrácený symbol pro derivaci), do tvaru rovnice pro hypergeometrickou funkci (3.0.2). K tomu je nutné provést postupně několik substitucí.

1. Předně je výhodné přejít k bezrozměrným veličinám pro souřadnici

$$\xi \equiv \frac{x}{d} \quad (3.1.3)$$

a energii

$$\epsilon \equiv -\frac{\hbar^2}{2Md^2}, \quad e \equiv \frac{E}{\epsilon} > 0, \quad v_0 \equiv \frac{V_0}{\epsilon} > 0, \quad v(\xi) \equiv \frac{V(\xi)}{\epsilon} = \frac{v_0}{\cosh^2 \xi} \quad (3.1.4)$$

(faktor ϵ byl zvolen záporný, aby parametry e a v_0 byly kladné) ve kterých Schrödingerova rovnice (3.1.2) zní

$$\psi_{\xi\xi} + [v(\xi) - e]\psi = 0. \quad (3.1.5)$$

2. Vlnovou funkci budeme hledat ve tvaru

$$\psi(\xi) = u(\xi) \cosh^{-\alpha} \xi, \quad (3.1.6)$$

kde $\alpha > 0$ je prozatím volný parametr, jehož hodnota bude zafixována později. Faktor $\cosh^{-\alpha} \xi$ zajistí správnou asymptotiku vlnové funkce pro $x \rightarrow \pm\infty$.

První a druhá derivace funkce $\psi(\xi)$ jsou

$$\psi_{\xi} = u_{\xi} c^{-\alpha} - \alpha u c^{-\alpha-1} s, \quad (3.1.7a)$$

$$\begin{aligned} \psi_{\xi\xi} &= u_{\xi\xi} c^{-\alpha} - 2\alpha u_{\xi} c^{-\alpha-1} s + \alpha(\alpha+1) u c^{-\alpha-2} \underbrace{s^2}_{c^2-1} - \alpha u c^{-\alpha-1} c \\ &= u_{\xi\xi} c^{-\alpha} - 2\alpha u_{\xi} c^{-\alpha-1} s + \alpha^2 u c^{-\alpha} - \alpha(\alpha+1) u c^{-\alpha-2}, \end{aligned} \quad (3.1.7b)$$

kde se pro zestručnění zápisu používají zkratky pro hyperbolické funkce

$$s \equiv \sinh \xi, \quad c \equiv \cosh \xi. \quad (3.1.8)$$

Dosazení do (3.1.5) a vynásobení rovnice výrazem c^{α} vede na Schrödingerovu rovnici pro funkci $u(\xi)$,

$$u_{\xi\xi} - 2\alpha u_{\xi} \frac{s}{c} + (\alpha^2 - e)u - [\alpha(\alpha+1) - v_0] u c^{-2} = 0. \quad (3.1.9)$$

3. Poslední člen Schrödingerovy rovnice lze vynulovat vhodnou volbou do této chvíle volného parametru α . Podmínka získaná řešením kvadratické rovnice

$$\alpha(\alpha+1) - v_0 = 0 \quad (3.1.10)$$

je

$$\alpha = \frac{1}{2} \left(-1 \pm \sqrt{1 + 4v_0} \right). \quad (3.1.11)$$

Pro dobré asymptotické chování vlnové funkce ψ je nutné, aby $\alpha > 0$, což splňuje pouze kořen se znaménkem +.

Schrödingerova rovnice (3.1.9) pro toto konkrétní α zní

$$u_{\xi\xi} + 2\alpha u_{\xi} \frac{s}{c} + (\alpha^2 - e)u = 0. \quad (3.1.12)$$

4. Poslední substitucí je zavedení nové nezávisle proměnné

$$z \equiv -\sinh^2 \xi. \quad (3.1.13)$$

Platí

$$u_\xi \equiv \frac{du}{d\xi} = \frac{du}{dz} \frac{dz}{d\xi} = u_z z_\xi, \quad (3.1.14a)$$

$$u_{\xi\xi} \equiv \frac{d^2u}{d\xi^2} = \frac{d^2u}{dz^2} \left(\frac{dz}{d\xi} \right)^2 + \frac{du}{dz} \frac{d^2z}{d\xi^2} = u_{zz} z_\xi^2 + u_z z_{\xi\xi} \quad (3.1.14b)$$

a dále pro substituční funkci

$$z_\xi = -2sc, \quad (3.1.15a)$$

$$z_{\xi\xi} = -2(c^2 + s^2). \quad (3.1.15b)$$

Dosazení do Schrödingerovy rovnice dá

$$4 \underbrace{s^2}_{-z} \underbrace{c^2}_{1-z} u_{zz} - 2(c^2 + s^2) u_z + 4\alpha s^2 u_z + (\alpha^2 - e) u = 0 \quad (3.1.16)$$

a po vynásobení obou stran výrazem $-\frac{1}{4}$ a úpravě

$$z(1-z)u_{zz} + \left[\frac{1}{2} - (1-\alpha)z \right] u_z - \frac{1}{4}(\alpha^2 - e)u = 0. \quad (3.1.17)$$

5. Finální rovnice (3.1.17) má tvar rovnice pro hypergeometrické funkce (3.0.2) s hodnotami parametrů (a, b, c) danými vztahy

$$a + b + 1 = 1 - \alpha, \quad (3.1.18a)$$

$$ab = \frac{1}{4}(\alpha^2 - e), \quad (3.1.18b)$$

$$c = \frac{1}{2}. \quad (3.1.18c)$$

Řešení prvních dvou rovnic dá⁷⁰

$$a = \frac{1}{2}(-\alpha + \sqrt{e}), \quad (3.1.20a)$$

$$b = \frac{1}{2}(-\alpha - \sqrt{e}). \quad (3.1.20b)$$

6. Schrödingerova rovnice (3.1.17) má dvě lineárně nezávislá řešení daná hypergeometrickými funkcemi

$$u_1(z) = {}_2F_1\left(\frac{1}{2}(-\alpha + \sqrt{e}), \frac{1}{2}(-\alpha - \sqrt{e}), \frac{1}{2}; z\right), \quad (3.1.21)$$

$$u_2(z) = \sqrt{z} {}_2F_1\left(\frac{1}{2}(-\alpha + \sqrt{e} + 1), \frac{1}{2}(-\alpha - \sqrt{e} + 1), \frac{3}{2}; z\right). \quad (3.1.22)$$

7. Vlnová funkce musí vymizet v asymptotické oblasti $x \rightarrow \pm\infty$ ($z \rightarrow -\infty$). K prozkoumání chování v nekonečnu se aplikuje vztah (3.0.14). Za předpokladu

$$a - b \notin \mathbb{Z} \quad \Leftrightarrow \quad \sqrt{e} \notin \mathbb{Z} \quad (3.1.23)$$

⁷⁰Druhé možné řešení této soustavy rovnic je

$$a = \frac{1}{2}(-\alpha - \sqrt{e}), \quad (3.1.19a)$$

$$b = \frac{1}{2}(-\alpha + \sqrt{e}), \quad (3.1.19b)$$

které však díky symetrii hypergeometrických funkcí vůči záměně prvního a druhého argumentu, ${}_2F_1(a, b, c; z) = {}_2F_1(b, a, c; z)$ vede na totožné řešení diferenciální rovnice (3.1.17).

lze vztah použít. Limita $\xi \rightarrow \infty$

$$\begin{aligned}
 \psi_1(\xi) &\rightarrow \cosh^{-\alpha} \xi \left\{ \underbrace{\frac{\Gamma\left(\frac{1}{2}\right) \Gamma(-\sqrt{e})}{\Gamma\left[\frac{1}{2}(-\alpha - \sqrt{e})\right] \Gamma\left[\frac{1}{2}(1 + \alpha - \sqrt{e})\right]}}_{\gamma_1} \sinh^{-(\alpha + \sqrt{e})} \xi \right. \\
 &\quad \left. + \underbrace{\frac{\Gamma\left(\frac{1}{2}\right) \Gamma(\sqrt{e})}{\Gamma\left[\frac{1}{2}(-\alpha + \sqrt{e})\right] \Gamma\left[\frac{1}{2}(1 + \alpha + \sqrt{e})\right]}}_{\gamma_2} \sinh^{-(\alpha - \sqrt{e})} \xi \right\} \\
 &\sim \frac{1}{2} e^{-\alpha \xi} \left\{ \frac{\gamma_1}{2} e^{(\alpha - \sqrt{e}) \xi} + \frac{\gamma_2}{2} e^{(\alpha + \sqrt{e}) \xi} \right\} \\
 &\sim \frac{\gamma_1}{4} e^{-\sqrt{e} \xi} + \frac{\gamma_2}{4} e^{\sqrt{e} \xi} \rightarrow \infty
 \end{aligned} \tag{3.1.24}$$

diverguje. Řešení u_1 je tedy nutné omezit na polynom podmínkou $a = -n$ nebo $b = -n$, $n \in \mathbb{N}_0$. Tyto podmínky vedou na

$$\frac{1}{2}(-\alpha + \sqrt{e}) = -n \quad \longrightarrow \quad \alpha = 2n + \sqrt{e} \tag{3.1.25a}$$

$$\frac{1}{2}(-\alpha - \sqrt{e}) = -n \quad \longrightarrow \quad \alpha = 2n - \sqrt{e}. \tag{3.1.25b}$$

Jelikož $e > 0$, vede druhá podmínka na divergující řešení s $\alpha < 0$. První podmínka dá možné diskrétní energetické hladiny (kvantovací podmínka)

$$\begin{aligned}
 \sqrt{e_{1,n}} &= \alpha - 2n \\
 e_{1,n} &= (\alpha - 2n)^2 \\
 E_{1,n} &= -\frac{\hbar^2}{8Md^2} \left[\sqrt{1 - \frac{8MV_0d^2}{\hbar^2}} - 1 - 4n \right]^2,
 \end{aligned} \tag{3.1.26}$$

přičemž první řádek vede na dodatečné omezení počtu kvantových hladin: pravá strana totiž musí být kladná, tj. musí být splněno

$$n < \frac{\alpha}{2} = \frac{1}{4} \left[\sqrt{1 - \frac{8MV_0d^2}{\hbar^2}} - 1 \right] \tag{3.1.27}$$

Pro druhé řešení ψ_2 se postupuje zcela analogicky. Kvantovací podmínka vyjde

$$\alpha = 2n + \sqrt{e} + 1, \tag{3.1.28}$$

takže

$$E_{2,n} = -\frac{\hbar^2}{8Md^2} \left[\sqrt{1 - \frac{8MV_0d^2}{\hbar^2}} - 3 - 4n \right]^2. \tag{3.1.29}$$

a n je mezeno shora nerovností

$$n < \frac{\alpha}{2} - \frac{1}{2} = \frac{1}{4} \left[\sqrt{1 - \frac{8MV_0d^2}{\hbar^2}} - 3 \right] \tag{3.1.30}$$

Obě řešení $E_{1,n}$ a $E_{2,n}$ lze zapsat jedním výrazem

$$E_n = -\frac{\hbar^2}{8Md^2} \left[\sqrt{1 - \frac{8MV_0d^2}{\hbar^2}} - (2n + 1) \right]^2 \tag{3.1.31}$$

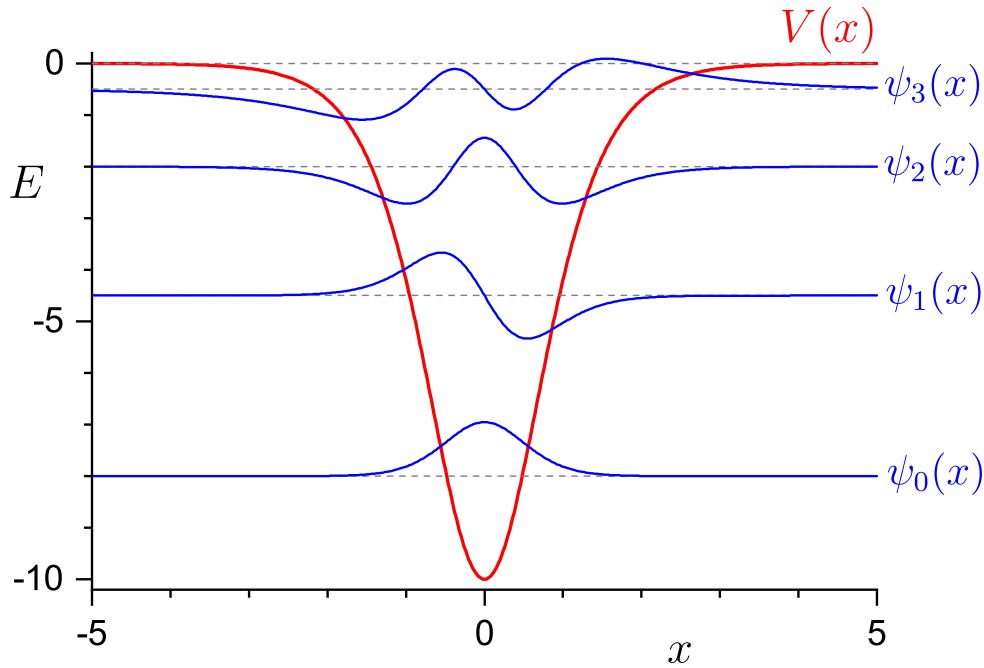
za podmínky

$$n < \frac{1}{2} \left[\sqrt{1 - \frac{8MV_0d^2}{\hbar^2}} - 1 \right]. \quad (3.1.32)$$

Odpovídající (nenormalizované) vlnové funkce jsou

$$\psi_n(x) = \begin{cases} \cosh^{-\alpha} \left(\frac{x}{d} \right) {}_2F_1 \left(-\frac{n}{2}, \frac{n}{2} - \alpha, \frac{1}{2}; -\sinh^2 \left(\frac{x}{d} \right) \right), & n \text{ liché,} \\ -\cosh^{-\alpha} \left(\frac{x}{d} \right) \sinh \left(\frac{x}{d} \right) {}_2F_1 \left(-\frac{n+1}{2}, \frac{n+1}{2} - \alpha, \frac{3}{2}; -\sinh^2 \left(\frac{x}{d} \right) \right), & n \text{ sudé,} \end{cases} \quad (3.1.33)$$

kde α je dáno vztahem (3.1.11).



Obrázek 34: Pöschl-Tellerův potenciál a všechny diskrétní energetické hladiny, které systém pro $M = \hbar = 1$ a $V = 10$ má. Vlnové funkce jsou normované a posunuté na místo odpovídající energetické hladiny. Hladina ψ_4 s energií $E = 0$ již není normalizovatelná.

Několik hladin a příslušné vlnové funkce jsou zobrazeny na obrázku 34.

C.2 Nekonečně hluboká nepravoúhlá jáma

Určete energetické spektrum částice o hmotnosti M nacházející se v jednorozměrném potenciálu

$$V(x) = \frac{V_0}{\tan^2 \frac{\pi x}{a}}, \quad 0 < x < a, \quad (3.2.1)$$

kde parametr $V_0 > 0$ určuje strmost a $a > 0$ šířku jámy. Nalezněte energii základního stavu a normalizovanou vlnovou funkci.

Řešení:

Cílem je převést Schrödingerovu rovnici pro vlnovou funkci $\psi = \psi(x)$

$$-\frac{\hbar^2}{2M} \psi_{xx} + [V(x) - E] \psi = 0 \quad (3.2.2)$$

(značíme zde $\psi_x \equiv d\psi/dx$) do tvaru pro hypergeometrickou funkci (3.0.2). K tomu je třeba provést postupně několik substitucí.

1. Nejprve zavedeme bezrozměrnou proměnnou souřadnice

$$\xi \equiv \frac{\pi x}{a} \quad (3.2.3)$$

a energie

$$\epsilon \equiv \frac{\pi^2 \hbar^2}{2Ma^2}, \quad e \equiv \frac{E}{\epsilon}, \quad v_0 \equiv \frac{V_0}{\epsilon}, \quad v(\xi) \equiv \frac{V(\xi)}{\epsilon} = \frac{v_0}{\tan^2 \xi}, \quad (3.2.4)$$

čímž převedeme Schrödingerovu rovnici (3.2.2) na tvar

$$\psi_{\xi\xi} + [e - v(\xi)] \psi = 0. \quad (3.2.5)$$

2. Vlnovou funkci budeme hledat ve tvaru

$$\psi(\xi) = u(\xi) \sin^\alpha \xi, \quad (3.2.6)$$

kde α bude prozatím volný parametr. Zavedeme zjednodušené označení

$$s \equiv \sin \xi, \quad c \equiv \cos \xi. \quad (3.2.7)$$

První a druhá derivace vlnové funkce pak jsou

$$\psi_\xi = u_\xi s^\alpha + \alpha u s^{\alpha-1} c, \quad (3.2.8a)$$

$$\begin{aligned} \psi_{\xi\xi} &= u_{\xi\xi} s^\alpha + 2\alpha u_\xi s^{\alpha-1} c + \alpha(\alpha-1) u s^{\alpha-2} \underbrace{c^2}_{1-s^2} - \alpha u s^\alpha \\ &= u_{\xi\xi} s^\alpha + 2\alpha u_\xi s^{\alpha-1} c + \alpha(\alpha-1) u s^{\alpha-2} - \alpha^2 u s^\alpha. \end{aligned} \quad (3.2.8b)$$

Potenciál rozepíšeme jako

$$v(x) = v_0 \frac{c^2}{s^2} = v_0 \frac{1-s^2}{s^2} = \frac{v_0}{s^2} - v_0. \quad (3.2.9)$$

Schrödingerova rovnice (3.2.5) pak zní

$$u_{\xi\xi} s^\alpha + 2\alpha u_\xi s^{\alpha-1} c - \alpha^2 u s^\alpha + \underbrace{(e + v_0)}_{v^2} u s^\alpha + [\alpha(\alpha-1) - v_0] u s^\alpha - v_0 u s^{\alpha-2} = 0, \quad (3.2.10)$$

a po vydělení výrazem s^α a po přerovnání členů dostaneme

$$u_{\xi\xi} + 2\alpha u_x \frac{c}{s} + \left(v^2 - \alpha^2\right) u + [\alpha(\alpha-1) - v_0] u s^{-2} = 0. \quad (3.2.11)$$

Konstanta α byla doposud libovolné číslo. Nyní ji zvolíme tak, aby vynulovala člen úměrný s^{-2} . Řešíme tedy rovnici

$$\alpha(\alpha-1) = v_0, \quad (3.2.12)$$

jejíž kořeny jsou

$$\alpha_\pm = \frac{1}{2} \left(1 \pm \sqrt{4v_0 + 1}\right). \quad (3.2.13)$$

V následujícím výpočtu budeme uvažovat pouze kořen $\alpha \equiv \alpha_- < 0$.

V této fázi dostáváme tedy Schrödingerovu rovnici ve tvaru

$$u_{\xi\xi} + 2\alpha u_x \frac{c}{s} + \left(v^2 - \alpha^2\right) u = 0. \quad (3.2.14)$$

3. Zavedeme novou nezávislou proměnnou⁷¹

$$z = \cos^2 \xi = c^2, \quad (3.2.16)$$

⁷¹Správně bychom měli psát substituci ve tvaru

$$\sqrt{z} = \cos \xi, \quad (3.2.15)$$

což je narozdíl od (3.2.16) prosté zobrazení převádějící $\xi \in (0, \pi)$ na $\sqrt{z} \in (-1, 1)$.

Jelikož

$$u_\xi \equiv \frac{du}{d\xi} = \frac{du}{dz} \frac{dz}{d\xi} = u_z z_\xi, \quad (3.2.17a)$$

$$u_{\xi\xi} \equiv \frac{d^2u}{d\xi^2} = \frac{d^2u}{dz^2} \left(\frac{dz}{d\xi} \right)^2 + \frac{du}{dz} \frac{d^2z}{d\xi^2} = u_{zz} z_\xi^2 + u_z z_{\xi\xi} \quad (3.2.17b)$$

a

$$z_\xi = -2sc, \quad (3.2.18a)$$

$$z_{\xi\xi} = -2(c^2 - s^2), \quad (3.2.18b)$$

dostaneme Schrödingerovu rovnici (3.2.14) do tvaru

$$4u_{zz} \underbrace{s^2}_{1-z} \underbrace{c^2}_z - 2u_z \underbrace{(c^2 - s^2)}_{2z-1} - 4\alpha u_z \underbrace{c^2}_z + (v^2 - \alpha^2)u = 0, \quad (3.2.19)$$

$$z(1-z)u_{zz} + \left[\frac{1}{2} - (1+\alpha)z \right] u_z + \frac{1}{4}(v^2 - \alpha^2)u = 0. \quad (3.2.20)$$

Toto je rovnice pro hypergeometrické funkce (3.0.2) s hodnotami parametrů

$$a + b = \alpha, \quad (3.2.21a)$$

$$ab = \frac{1}{4}(v^2 - \alpha^2), \quad (3.2.21b)$$

$$c = \frac{1}{2}, \quad (3.2.21c)$$

kde z prvních dvou rovnic obdržíme⁷²

$$a = \frac{1}{2}(\alpha - \nu), \quad (3.2.23a)$$

$$b = \frac{1}{2}(\alpha + \nu). \quad (3.2.23b)$$

Dvě lineárně nezávislá řešení diferenciální rovnice (3.2.20) jsou dány hypergeometrickými funkcemi

$$u_1(z) = {}_2F_1\left(\frac{1}{2}(\alpha - \nu), \frac{1}{2}(\alpha + \nu), \frac{1}{2}; z\right), \quad (3.2.24a)$$

$$u_2(z) = \sqrt{z} {}_2F_1\left(\frac{1}{2}(\alpha - \nu + 1), \frac{1}{2}(\alpha + \nu + 1), \frac{3}{2}; z\right). \quad (3.2.24b)$$

Nyní budeme studovat konvergenci řešení. Požadujeme, aby v bodě $z = 1$, který odpovídá $x = a$, byla vlnová funkce ψ nulová. K tomu využijeme identitu (3.0.13c) postupně na obě dvě lineárně nezávislá řešení.

- Řešení u_1 :

$$u_1(z) = (1-z)^{\frac{1}{2}(\nu-\alpha)} {}_2F_1\left(\frac{1}{2}(\alpha - \nu), \frac{1}{2}(1 - \alpha - \nu), \frac{1}{2}; \frac{z}{z-1}\right). \quad (3.2.25)$$

⁷²Druhé možné řešení této soustavy rovnic je

$$a = \frac{1}{2}(\alpha + \nu), \quad (3.2.22a)$$

$$b = \frac{1}{2}(\alpha - \nu), \quad (3.2.22b)$$

které však s ohledem na symetrii hypergeometrických funkcí vůči záměně prvního a druhého argumentu dá totožné řešení diferenciální rovnice (3.2.20).

Po uvážení substitucí (3.2.6) a (3.2.16)

$$\begin{aligned}\psi_1 &= s^\alpha s^{\nu-\alpha} {}_2F_1\left(\frac{1}{2}(\alpha-\nu), \frac{1}{2}(1-\alpha-\nu), \frac{1}{2}; \frac{c^2}{-s^2}\right) \\ &= s^\nu \sum_{m=0}^{\infty} (-1)^m \frac{c_m}{m!} \frac{c^{2m}}{s^{2m}}.\end{aligned}\quad (3.2.26)$$

Pokud nemá řada konečný počet členů, diverguje v bodě $x = 0$ a $x = a$. Abychom divergenci zabránili, musí být buď první, nebo druhý argument hypergeometrické funkce rovný nekladnému celému číslu. Pokud

$$\frac{1}{2}(\alpha-\nu) = -n, \quad n \in \mathbb{N}_0 \quad \implies \quad \nu = 2n + \alpha < 2n \quad (3.2.27)$$

(zvolili jsme $\alpha < 0$) takže v tomto případě vlnová funkce konvergovat nebude (v konečné řadě bude vždy víc členů s funkcí $\sin \xi$ ve jmenovateli, než kolik je mocnina v prefaktoru). Naopak pokud uvážíme druhý argument hypergeometrické funkce,

$$\frac{1}{2}(1-\alpha-\nu) = -n, \quad n \in \mathbb{N}_0 \quad \implies \quad \nu = 2n - \alpha + 1 > 2n, \quad (3.2.28)$$

dostaneme dobře konvergující řešení.

Dosadíme-li nyní za $\nu = \sqrt{e + v_0}$, můžeme vyjádřit energii jako

$$E_{n,1} = \epsilon \left[(2n+1)^2 - 2\alpha(2n+1) + \alpha \right], \quad n \in \mathbb{N}_0, \quad (3.2.29)$$

kde α je záporný kořen (3.2.13)⁷³ a ϵ je energetická škála (3.2.4). Odpovídající nenormovaná vlnová funkce v proměnné x zní

$$\psi_{n,1}(x) = \sin^\alpha \frac{\pi x}{a} {}_2F_1\left(\alpha - n - \frac{1}{2}, n + \frac{1}{2}, \frac{1}{2}; \cos^2 \frac{\pi x}{a}\right). \quad (3.2.30)$$

- Řešení u_2 :

Postupujeme analogicky jako u u_1 . Aplikací identity (3.0.13c) postupně dostaneme

$$u_2(z) = \sqrt{z}(1-z)^{\frac{1}{2}(\nu-\alpha-1)} {}_2F_1\left(\frac{1}{2}(\alpha-\nu+1), 1 - \frac{1}{2}(\alpha+\nu), \frac{3}{2}; \frac{z}{z-1}\right), \quad (3.2.31)$$

$$\begin{aligned}\psi_2 &= s^\alpha c s^{\nu-\alpha-1} {}_2F_1\left(\frac{1}{2}(\alpha-\nu+1), 1 - \frac{1}{2}(\alpha+\nu), \frac{3}{2}; \frac{c^2}{-s^2}\right) \\ &= c s^{\nu-1} \sum_{m=0}^{\infty} (-1)^m \frac{c_m}{m!} \frac{c^{2m}}{s^{2m}},\end{aligned}\quad (3.2.32)$$

kde ukončení řady pomocí druhého parametru hypergeometrické funkce vede k řešení s požadovanými okrajovými podmínkami,

$$1 - \frac{1}{2}(\alpha+\nu) = -n, \quad n \in \mathbb{N}_0 \quad \implies \quad \nu = 2n + 2 - \alpha, \quad (3.2.33)$$

což vede na kvantovací podmínku pro energie

$$E_{n,2} = \epsilon \left[(2n+2)^2 - 2\alpha(2n+2) + \alpha \right], \quad n \in \mathbb{N}_0 \quad (3.2.34)$$

a vlnové funkce ve tvaru

$$\psi_{n,2}(x) = \sin^\alpha \frac{\pi x}{a} \cos \frac{\pi x}{a} {}_2F_1\left(\alpha - n - \frac{1}{2}, n + \frac{3}{2}, \frac{3}{2}; \cos^2 \frac{\pi x}{a}\right). \quad (3.2.35)$$

⁷³Pokud bychom zvolili kladný kořen (3.2.13), $\alpha_+ = 1 - \alpha_-$, dobře se chovající řešení by bylo dáno z prvního argumentu hypergeometrické funkce, avšak spektrum bychom dostali zcela stejné (a rovněž i vlnovou funkci).

Řešení (3.2.29) a (3.2.34) lze zkombinovat dohromady do

$$E_m = \epsilon [m^2 - 2\alpha m + \alpha], \quad m \in \mathbb{N}, \quad (3.2.36)$$

přičemž pro m liché je vlnová funkce ve tvaru $\psi_{n=(m-1)/2,1}(x)$ a pro m sudé $\psi_{n=m/2-1,2}(x)$.
Energie základního stavu je

$$E_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{4Ma^2} \left(1 - \sqrt{\frac{8Ma^2V_0}{\pi^2 \hbar^2} + 1} \right) \quad (3.2.37)$$

a odpovídající vlnová funkce

$$\begin{aligned} \psi_1(x) \equiv \psi_{0,1}(x) &= N_1 \sin^\alpha \frac{\pi x}{a} \underbrace{{}_2F_1\left(\alpha - \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}; z\right)}_{(1-z)^{\frac{1}{2}-\alpha}} \\ &= N_1 \sin^{1-\alpha} \frac{\pi x}{a}, \end{aligned} \quad (3.2.38)$$

kde jsme využili znalosti (3.0.15b). Normalizační faktor N_1 získáme integrací

$$N_1 = \frac{1}{\sqrt{\int_0^a \sin^{2-2\alpha} \frac{\pi x}{a} dx}} = \sqrt{\frac{\pi}{a} \frac{\Gamma(1-\alpha)}{\Gamma\left(\frac{1}{2}\right) \Gamma\left(\frac{3}{2}-\alpha\right)}}. \quad (3.2.39)$$

Poznámka: Pokud $V_0 \rightarrow 0$, dostaneme $\alpha \rightarrow 0$ a výraz pro energie se zjednoduší na

$$E_m = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2Ma^2} m^2, \quad m \in \mathbb{N}, \quad (3.2.40)$$

což jsou energie pravoúhlé jámy.

Naopak pro $V_0 \rightarrow \infty$ je $\alpha \rightarrow -\infty$ a v tom případě dostaneme

$$E_m = \hbar \Omega \left(m - \frac{1}{2} \right), \quad \Omega \equiv \frac{\pi}{a} \sqrt{\frac{2V_0}{M}}, \quad (3.2.41)$$

energie harmonického oscilátoru aproximující dno jámy.

D Křivočaré souřadnice

Báze

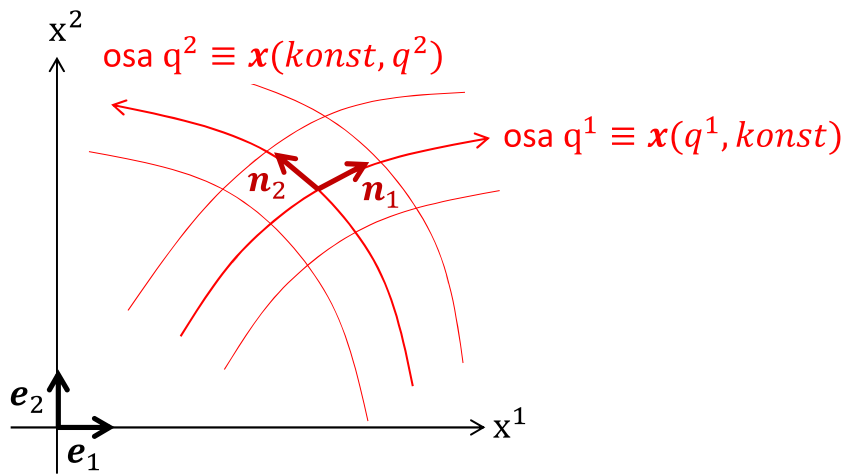
V d -rozměrném prostoru jsou křivočaré souřadnice v bodě $\mathbf{x} = (x^1, x^2, \dots, x^d)$ zadány funkcemi

$$q^i = q^i(\mathbf{x}), \quad (4.0.1)$$

kde $i = 1, \dots, d$ a x^1, x^2, \dots, x^d jsou (lokálně definované) kartézské souřadnice. Bázi (kovariantní) v kartézském systému označíme $\mathbf{e}_{(i)}$, takže lze psát⁷⁴

$$\mathbf{x} = x^i \mathbf{e}_{(i)}, \quad (4.0.3)$$

kde x^i jsou kontravariantní složky vektoru \mathbf{x} .



Obrázek 35: Ilustrace souřadnicového systému a lokální báze v křivočarých souřadnicích (q^1, q^2) .

Za předpokladu, že transformace (4.0.1) je invertibilní, tj. že existuje inverzní transformace

$$x^i = x^i(\mathbf{q}), \quad (4.0.4)$$

lze v bodě \mathbf{x} zavést novou bázi ve směru tečen k jednotlivým souřadnicovým čarám q^i , viz obrázek 35⁷⁵:

$$\mathbf{n}_{(i)} = \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial q^i} = \frac{\partial x^j}{\partial q^i} \mathbf{e}_{(j)}; \quad (4.0.5)$$

jednotlivé složky báзовých vektorů $\mathbf{n}_{(i)}$ tedy jsou

$$n_{(i)}^j = \frac{\partial x^j}{\partial q^i}. \quad (4.0.6)$$

Je třeba mít na paměti, že zatímco báзовé vektory $\mathbf{e}_{(i)}$ jsou konstantní, báзовé vektory $\mathbf{n}_{(i)}$ obecně závisí na místě v prostoru: $\mathbf{n}_{(i)} = \mathbf{n}_{(i)}(\mathbf{q})$.

⁷⁴Einsteinova sčítací konvence: Pokud se ve vzorci vyskytnou dva stejně označené indexy, z nichž jeden je nahoře a druhý dole, přes indexy se sčítá:

$$x^i \mathbf{e}_{(i)} \equiv \sum_{i=1}^d x^i \mathbf{e}_{(i)}. \quad (4.0.2)$$

⁷⁵Souřadnicová čára q^i procházející bodem $\mathbf{Q} = (Q^1, Q^2, \dots, Q^d)$ je definována jako čára $q^i \equiv \mathbf{x}(q^1 = Q^1, \dots, q^i, \dots, q^d = Q^d)$ (tento zápis vyjadřuje, že se mění pouze souřadnice q^i , ostatní souřadnice zůstávají konstantní).

Jakobián

Přechod mezi jednotlivými souřadnými systémy \mathbf{x} a \mathbf{q} je dán *Jacobiho maticí*

$$\mathbf{J} = \left(\frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \mathbf{q}} \right) = \left(\frac{\partial (x^1, x^2, \dots, x^d)}{\partial (q^1, q^2, \dots, q^d)} \right) = \begin{pmatrix} \frac{\partial x^1}{\partial q^1} & \frac{\partial x^1}{\partial q^2} & \frac{\partial x^1}{\partial q^3} & \dots \\ \frac{\partial x^2}{\partial q^1} & \frac{\partial x^2}{\partial q^2} & \frac{\partial x^2}{\partial q^3} & \dots \\ \frac{\partial x^3}{\partial q^1} & \frac{\partial x^3}{\partial q^2} & \frac{\partial x^3}{\partial q^3} & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \quad (4.0.7)$$

či ve složkách

$$J_i^j = \frac{\partial x^j}{\partial q^i} \equiv n_{(i)}^j. \quad (4.0.8)$$

(Jacobiho matice má tedy ve sloupcích kovariantní bázevé vektory $\mathbf{n}_{(i)}$.) Podmínka invertovatelnosti (4.0.4) souvisí s nesingularitou Jacobiho matice,

$$\det \mathbf{J} \neq 0 \quad (4.0.9)$$

($\det \mathbf{J}$ se nazývá *Jakobián*).

Duální báze

K bázi \mathbf{e}_i se zavádí duální (kontravariantní) báze $\mathbf{e}^{(j)}$ vztahy ortogonalit

$$\mathbf{e}_{(i)} \cdot \mathbf{e}^{(j)} = \delta_i^j, \quad (4.0.10)$$

kde symbol \cdot udává skalární součin:

$$\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} = a^i b_i = \left(\sum_{i=1}^d a^i b_i \right). \quad (4.0.11)$$

Pro křivočaré souřadnice je duální báze dána vektory kolmými k plochám $q^i = \text{const}$, tj. je určena gradientem

$$\mathbf{n}^{(i)} = \nabla q^i = \frac{\partial q^i}{\partial x^j} \mathbf{e}^{(j)}. \quad (4.0.12)$$

Vektory kovariantní a kontravariantní báze jsou na sebe kolmé,

$$\boxed{\mathbf{n}_{(i)} \cdot \mathbf{n}^{(j)} = \delta_i^j}, \quad (4.0.13)$$

což vyplývá ze zavedení obou bází:

$$\mathbf{n}_{(i)} \cdot \mathbf{n}^{(j)} = \frac{\partial x^k}{\partial q^i} \mathbf{e}_{(k)} \cdot \frac{\partial q^j}{\partial x^l} \mathbf{e}^{(l)} = \frac{\partial x^k}{\partial q^i} \frac{\partial q^j}{\partial x^l} \delta_l^k = \frac{\partial q^j}{\partial q^i} = \delta_i^j. \quad (4.0.14)$$

Metrický tenzor

Metrický tenzor se nazývá matice \mathbf{g} s elementy

$$\boxed{g_{ij} = \mathbf{n}_{(i)} \cdot \mathbf{n}_{(j)} = \sum_{k=1}^n \frac{\partial x^k}{\partial q^i} \frac{\partial x^k}{\partial q^j}}. \quad (4.0.15)$$

Z definice vyplývá, že matice \mathbf{g} je symetrická:

$$g_{ij} = g_{ji}. \quad (4.0.16)$$

Pomocí metrického tenzoru lze spouštět indexy u kontravariantních komponent. Působení g na složky libovolného vektoru $\mathbf{a} = a^j \mathbf{n}_{(j)} = a_i \mathbf{n}^{(i)}$ dá

$$g_{ij} a^j = \mathbf{n}_{(i)} \cdot \mathbf{n}_{(j)} a^j = \mathbf{n}_{(i)} \cdot \mathbf{n}^{(j)} a_j = \delta_i^j a_j = a_i \quad (4.0.17)$$

(ve třetí rovnosti jsme využili vztahu (4.0.13)).

K matici g se zavádí inverzní matice g^{-1} se složkami g^{jk} ,

$$g_{ij} g^{jk} = \delta_i^k. \quad (4.0.18)$$

Tento inverzní metrický tenzor slouží ke zvedání indexů kovariantních komponent.

Metrický tenzor (4.0.15) lze získat z Jacobiho matice (4.0.8)

$$\boxed{\mathbf{g} = \mathbf{J}^T \mathbf{J}}. \quad (4.0.19)$$

Gradient

Gradient skalárního pole v křivočarých souřadnicích $f = f(\mathbf{q})$ je vektor

$$\text{grad } f = \nabla f = \frac{\partial f}{\partial q^i} \mathbf{n}^{(i)}. \quad (4.0.20)$$

Kovariantní derivace

Je zadáno vektorové pole v křivočarých souřadnicích $\mathbf{F} = \mathbf{F}(\mathbf{q}) = F^k(\mathbf{q}) \mathbf{n}_{(k)}$. Derivování podle i -té složky vede na

$$\frac{\partial \mathbf{F}}{\partial q^i} = \frac{\partial}{\partial q^i} (F^k \mathbf{n}_{(k)}) = \frac{\partial F^k}{\partial q^i} \mathbf{n}_{(k)} + \underbrace{\frac{\partial \mathbf{n}_{(k)}}{\partial q^i} F^k}_{\frac{\partial \mathbf{n}_{(j)}}{\partial q^i} F^j} = \frac{\partial F^k}{\partial q^i} \mathbf{n}_{(k)} + \Gamma_{ij}^k F^j \mathbf{n}_{(k)}, \quad (4.0.21)$$

kde poslední rovnost plyne z toho, že $\partial \mathbf{n}_{(j)} / \partial q^i$ je vektor, a dá se tudíž vyjádřit v bázi $\mathbf{n}_{(k)}$ pomocí koeficientů Γ_{ij}^k ,

$$\frac{\partial \mathbf{n}_{(j)}}{\partial q^i} = \Gamma_{ij}^k \mathbf{n}_{(k)}. \quad (4.0.22)$$

Koeficienty Γ_{ij}^k se nazývají *Christoffelovy symboly* (2. druhu). Jsou symetrické vůči záměně dolních indexů⁷⁶

$$\Gamma_{ij}^k = \Gamma_{ji}^k \quad (4.0.24)$$

a dají se vyjádřit pomocí derivací metrického tenzoru⁷⁷

$$\boxed{\Gamma_{ij}^k = \frac{1}{2} g^{kl} \left(\frac{\partial g_{il}}{\partial q^j} + \frac{\partial g_{jl}}{\partial q^i} - \frac{\partial g_{ij}}{\partial q^l} \right)}. \quad (4.0.25)$$

Rovnice (4.0.21) zapsaná ve složkách zní

$$\boxed{F^k{}_{;i} = \frac{\partial F^k}{\partial q^i} + \Gamma_{ij}^k F^j} \quad (4.0.26)$$

⁷⁶Je vidět z (4.0.5) a (4.0.22):

$$\frac{\partial \mathbf{n}_{(j)}}{\partial q^i} = \frac{\partial^2 \mathbf{x}}{\partial q_j \partial q^i} = \frac{\partial \mathbf{n}_{(i)}}{\partial q^j}. \quad (4.0.23)$$

⁷⁷Odvození spočívá v derivování (4.0.15) s různě označenými indexy.

a nazývá se *kovariantní derivace*⁷⁸.

Divergence

Divergenci v křivočarých souřadnicích odvodíme z kovariantní derivace:

$$\operatorname{div} \mathbf{F} = F^k{}_{;k} = \frac{\partial F^k}{\partial q^k} + \Gamma_{kj}^k F^j. \quad (4.0.28)$$

Zúžený Christoffelův symbol je

$$\Gamma_{kj}^k = \frac{1}{2} g^{kl} \left(\frac{\partial g_{kl}}{\partial q^j} + \underbrace{\frac{\partial g_{jl}}{\partial q^k} - \frac{\partial g_{kj}}{\partial q^l}}_0 \right) = \frac{1}{2} g^{kl} \frac{\partial g_{kl}}{\partial q^j} = \frac{1}{2} \operatorname{Tr} \mathbf{g}^{-1} \frac{\partial \mathbf{g}}{\partial q^j} \quad (4.0.29)$$

(druhý a třetí člen závorky jsou antisymetrické vůči záměně $k \leftrightarrow l$, takže při násobení symetrickou maticí g^{kl} dají nulu) a použití vztahu (4.1.2) dá

$$\Gamma_{kj}^k = \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial q^j} \ln \det \mathbf{g} = \frac{1}{2 \det \mathbf{g}} \frac{\partial}{\partial q^j} \det \mathbf{g} \left(= \frac{\partial}{\partial q^j} \ln \sqrt{\det \mathbf{g}} \right), \quad (4.0.30)$$

takže

$$\operatorname{div} \mathbf{F} = \frac{\partial F^k}{\partial q^k} + \left(\frac{1}{2 \det \mathbf{g}} \frac{\partial}{\partial q^j} \det \mathbf{g} \right) F^j = \frac{1}{\sqrt{\det \mathbf{g}}} \frac{\partial}{\partial q^k} \sqrt{\det \mathbf{g}} F^k, \quad (4.0.31)$$

přičemž poslední rovnost se dokáže rozderivováním součinu (jak $\det \mathbf{g}$, tak F^k závisejí na q).

Laplace

Laplaceův operátor $\Delta \equiv \operatorname{div} \operatorname{grad}$ získáme zkombinováním (4.0.20) a (4.0.31):

$$\Delta f = \frac{1}{\sqrt{\det \mathbf{g}}} \frac{\partial}{\partial q^k} \sqrt{\det \mathbf{g}} g^{kl} \frac{\partial f}{\partial q^l}, \quad (4.0.32)$$

takže samotný diferenciální operátor je

$$\Delta = \frac{1}{\sqrt{\det \mathbf{g}}} \frac{\partial}{\partial q^k} \sqrt{\det \mathbf{g}} g^{kl} \frac{\partial}{\partial q^l}. \quad (4.0.33)$$

Lagranžian a Hamiltonián

Lagranžian se v obecných křivočarých souřadnicích zapisuje jako

$$L(\dot{q}, q) = T(\dot{q}, q) - V(q) = \frac{1}{2} M_{gkl}(q) \dot{q}^k \dot{q}^l - V(q), \quad (4.0.34)$$

kde předpokládáme, že kinetický člen systému lze zapsat jako kvadratickou formu v rychlostech \dot{q} . K Hamiltoniánu přejdeme zavedením zobecněných hybností

$$p_k = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}^k} = M_{gkl} \dot{q}^l, \quad (4.0.35)$$

takže

$$H(p, q) = T(p, q) + V(q) = \frac{1}{2M} g^{kl}(q) p_k p_l + V(q). \quad (4.0.36)$$

Nuance zavedení kvantového Hamiltoniánu jsou diskutovány v práci [22].

⁷⁸Kovariantní derivace podle i -té složky se značí středníkem následovaným indexem i . Obyčejná derivace se značí čárkou následovanou indexem i . Rovnici (4.0.26) lze tedy zapsat jako

$$F^k{}_{;i} = F^k{}_{,i} + \Gamma_{ij}^k F^j. \quad (4.0.27)$$

Schrödingerova rovnice v křivočarých souřadnicích

Schrödingerova rovnice v operátorové formě zní

$$\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle \quad (4.0.37)$$

$$\left(\frac{1}{2M}\hat{\mathbf{p}}^2 + \hat{V}\right)|\psi\rangle = E|\psi\rangle, \quad (4.0.38)$$

což v x -reprezentaci a v křivočarých souřadnicích \mathbf{q} vede na

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2M}\Delta + V(\mathbf{q})\right)\psi(\mathbf{q}) = E\psi(\mathbf{q}), \quad (4.0.39)$$

kde se za Laplaceův operátor Δ dosadí (4.0.33).

Poznámka: Hmotnost, či obecněji *tenzor zobecněné hmotnosti*⁷⁹ lze zahrnout do metrického tenzoru, potažmo formálně do definice křivočarých souřadnic. Vztahy (4.0.34)–(4.0.39) pak přejdou na

$$\begin{aligned} L(\dot{\mathbf{q}}, \mathbf{q}) &= \frac{1}{2}g_{kl}(\mathbf{q})\dot{q}^k\dot{q}^l - V(\mathbf{q}), \\ p_k &= g_{kl}\dot{q}^l, \\ H(\dot{\mathbf{q}}, \mathbf{q}) &= \frac{1}{2}g^{kl}(\mathbf{q})p_k p_l + V(\mathbf{q}), \\ \left(-\frac{\hbar^2}{2}\Delta + V(\mathbf{q})\right)\psi(\mathbf{q}) &= E\psi(\mathbf{q}). \end{aligned} \quad (4.0.40)$$

V případě sférických souřadnic (r, θ, ϕ) to znamená zavést křivočaré souřadnice jako

$$\begin{aligned} x &= r\sqrt{M}\sin\theta\cos\phi \\ y &= r\sqrt{M}\sin\theta\sin\phi \\ z &= r\sqrt{M}\cos\theta. \end{aligned}$$

Skalární součin vlnových funkcí

Vlnová funkce v křivočarých souřadnicích $\psi(\mathbf{q}) \equiv \langle \mathbf{q} | \psi \rangle$ je normalizovaná ke skalárnímu součinu

$$\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle = \int \psi_1^*(\mathbf{q})\psi_2(\mathbf{q}) |\det \mathbf{J}| d\mathbf{q} = \int \psi_1^*(\mathbf{q})\psi_2(\mathbf{q}) \sqrt{\det \mathbf{g}} d\mathbf{q}. \quad (4.0.41)$$

Poznámka: Kvantování v křivočarých souřadnicích se dále věnují práce [23–26].

D.1 Determinant a stopa

1. Dokažte, že pro diagonalizovatelnou matici \mathbf{A} platí vztah

$$\det \mathbf{e}^{\mathbf{A}} = \mathbf{e}^{\text{Tr} \mathbf{A}}. \quad (4.1.1)$$

2. Na základě předchozího vztahu ukažte, že pokud je matice \mathbf{B} funkcí zobecněných souřadnic, $\mathbf{B} = \mathbf{B}(\mathbf{q})$, platí

$$\frac{\partial}{\partial q^i} \ln \det \mathbf{B}(\mathbf{q}) = \text{Tr} \mathbf{B}^{-1}(\mathbf{q}) \frac{\partial}{\partial q^i} \mathbf{B}(\mathbf{q}), \quad (4.1.2)$$

kde $\mathbf{B}^{-1}(\mathbf{q})$ je matice inverzní k matici $\mathbf{B}(\mathbf{q})$.

⁷⁹Zobecněné proto, že nemusí mít rozměr hmotnosti, a tenzor proto, že může být v různých směrech různá, např. v případě rotací a tenzoru setrvačnosti, viz příklad D.3.

Řešení:

1. Matici A lze zdiagonalizovat a vyjádřit ve tvaru

$$A = CDC^{-1}, \quad (4.1.3)$$

kde D je diagonální matice. Dosazením do (4.1.1) dostaneme na levé a pravé straně

$$\begin{aligned} \det e^A &= \det e^{CDC^{-1}} = \det C e^D C^{-1} = \det C \det e^D \frac{1}{\det C} \\ &= \det D = \prod_j e^{D_{jj}}, \end{aligned} \quad (4.1.4)$$

$$e^{\text{Tr} A} = e^{\text{Tr} CDC^{-1}} = e^{\text{Tr} D} = e^{\sum_j D_{jj}} = \prod_j e^{D_{jj}}, \quad (4.1.5)$$

čímž je (4.1.1) dokázáno.

2. Označme $B(q) = e^{A(q)}$, takže $A(q) = \ln B(q)$. Dosadíme-li do (4.1.1), dostaneme

$$\det B(q) = e^{\text{Tr} \ln B(q)}, \quad (4.1.6)$$

po zlogaritmování

$$\ln \det B(q) = \text{Tr} \ln B(q) \quad (4.1.7)$$

a zderivování

$$\frac{\partial}{\partial q^i} \ln \det B(q) = \text{Tr} \frac{\partial}{\partial q^i} \ln B(q) = \text{Tr} \frac{1}{B(q)} \frac{\partial}{\partial q^i} B(q). \quad (4.1.8)$$

Tím je důkaz hotov.

D.2 Sférické souřadnice

Pro sférické souřadnice $(q^1, q^2, q^3) \equiv (r, \theta, \phi)$ definované běžným způsobem jako

$$\begin{aligned} x &= r \sin \theta \cos \phi \\ y &= r \sin \theta \sin \phi \\ z &= r \cos \theta \end{aligned} \quad (4.2.1)$$

vypočítejte:

1. Jacobiho matici $J \equiv \frac{\partial(x,y,z)}{\partial(r,\theta,\phi)}$.
2. Determinant Jacobiho matice $\det J$.
3. Metrický tenzor g .
4. Inverzní metrický tenzor g^{-1} .
5. Determinant metrického tenzoru $\det g$.
6. Lagranžián a Hamiltonián klasického systému bez potenciálu.
7. Laplaceův operátor Δ .

Řešení:

1. Jacobiho matice podle definičního vztahu (4.0.8):

$$\mathbf{J} = \begin{pmatrix} \sin \theta \cos \phi & r \cos \theta \cos \phi & -r \sin \theta \sin \phi \\ \sin \theta \sin \phi & r \cos \theta \sin \phi & r \sin \theta \cos \phi \\ \cos \theta & -r \sin \theta & 0 \end{pmatrix}. \quad (4.2.2)$$

2. Jakobián

$$\begin{aligned} \det \mathbf{J} &= r^2 \sin \theta \cos^2 \theta \cos^2 \phi + r^2 \sin^3 \theta \sin^2 \phi \\ &\quad + r^2 \sin \theta \cos^2 \theta \sin^2 \phi + r^2 \sin^3 \theta \cos^2 \phi \\ &= r^2 \sin \theta \cos^2 \theta + r^2 \sin^3 \theta \\ &= r^2 \sin \theta. \end{aligned} \quad (4.2.3)$$

3. Složky metrického tenzoru na základě (4.0.19):

$$g_{11} = \sin^2 \theta \cos^2 \phi + \sin^2 \theta \cos^2 \phi + \cos^2 \theta = \sin^2 \theta + \cos^2 \theta = 1, \quad (4.2.4a)$$

$$g_{12} = r \sin \theta \cos \theta \cos^2 \phi + r \sin \theta \cos \theta \sin^2 \phi - r \sin \theta \cos \theta = 0, \quad (4.2.4b)$$

$$g_{13} = -r \sin^2 \theta \sin \phi \cos \phi + r \sin^2 \theta \sin \phi \cos \phi = 0, \quad (4.2.4c)$$

$$g_{21} = g_{12} = 0, \quad (4.2.4d)$$

$$g_{22} = r^2 \cos^2 \theta \cos^2 \phi + r^2 \cos^2 \theta \sin^2 \phi + r^2 \sin^2 \theta = r^2, \quad (4.2.4e)$$

$$g_{23} = r^2 \sin \theta \cos \theta \sin \phi \cos \phi - r^2 \sin \theta \cos \theta \sin \phi \cos \phi = 0, \quad (4.2.4f)$$

$$g_{31} = g_{13} = 0, \quad (4.2.4g)$$

$$g_{32} = g_{23} = 0, \quad (4.2.4h)$$

$$g_{33} = r^2 \sin^2 \theta \sin^2 \phi + r^2 \sin^2 \theta \cos^2 \phi = r^2 \sin^2 \theta. \quad (4.2.4i)$$

V maticovém zápisu

$$\mathbf{g} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & r^2 & 0 \\ 0 & 0 & r^2 \sin^2 \theta \end{pmatrix}. \quad (4.2.5)$$

4. Metrický tenzor je diagonální⁸⁰, takže inverzní matice je dána prostou inverzí diagonálních elementů,

$$\mathbf{g}^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{r^2} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \end{pmatrix}. \quad (4.2.6)$$

5. Determinant diagonální matice = součin členů na diagonále

$$\det \mathbf{g} = r^4 \sin^2 \theta. \quad (4.2.7)$$

6. Lagranžián je dán vztahem (4.0.34)

$$L = \frac{1}{2} M \left(\dot{r}^2 + \dot{\theta}^2 r^2 + \dot{\phi}^2 r^2 \sin^2 \theta \right) \quad (4.2.8)$$

a Hamiltonián (4.0.36)

$$H = \frac{1}{2M} \left(p_r^2 + \frac{1}{r^2} p_\theta^2 + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} p_\phi^2 \right). \quad (4.2.9)$$

7. Laplaceův operátor je dán vztah (4.0.33):

$$\begin{aligned} \Delta &= \frac{1}{r^2 \sin \theta} \left[\frac{\partial}{\partial r} r^2 \sin \theta \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial}{\partial \theta} r^2 \sin \theta \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\partial}{\partial \phi} r^2 \sin \theta \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \right] \\ &= \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2}. \end{aligned} \quad (4.2.10)$$

⁸⁰Je-li metrický tenzor diagonální, znamená to, že zobecněné souřadnice jsou v každém místě prostoru ortogonální.

8. Srovnání posledních dvou výrazů vede na vyjádření komponent hybnosti [27],

$$p_r = -i\hbar \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r, \quad (4.2.11a)$$

$$p_\theta = -i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{2} \cot \theta \right), \quad (4.2.11b)$$

$$p_\phi = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi}. \quad (4.2.11c)$$

D.3 Volná rotace axiálně symetrického tělesa

V prostoru volně rotuje axiálně symetrické těleso s momenty setrvačnosti I vůči ose symetrie a J vůči všem ostatním osám kolmým na osu symetrie a procházejícím těžištěm. Natočení tělesa popsáno třemi Eulerovými úhly (ϕ, θ, ψ) , přičemž $\phi \in \langle 0; 2\pi \rangle$ se nazývá *precesní úhel* (popisuje otáčivý osy Z spojené s tělesem vůči ose z pevné v prostoru), $\theta \in \langle 0; \pi \rangle$ je *nutační úhel* (popisuje úhel, který mezi sebou svírají osy Z a z) a $\psi \in \langle 0; 2\pi \rangle$ je *rotační úhel* (popisuje natočení tělesa vůči ose Z), viz obrázek 36⁸¹. Vektor úhlové rychlosti rotace vzhledem k souřadnému systému spojenému s tělesem je

$$\mathbf{\Omega} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \dot{\psi} \end{pmatrix} + \underbrace{\mathbf{R}_3(\psi)}_{\begin{pmatrix} \cos \psi & \sin \psi & 0 \\ -\sin \psi & \cos \psi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}} \begin{pmatrix} \dot{\theta} \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} + \underbrace{\mathbf{R}_1(\theta)}_{\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \theta & \sin \theta \\ 0 & -\sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix}} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \dot{\phi} \end{pmatrix}, \quad (4.3.1)$$

kde $\mathbf{R}_3(\psi)$ přenesou uzlovou přímku, která udává osu otáčení pro úhel θ , na osu X , a $\mathbf{R}_1(\theta)$ natočí osu z podél uzlové přímky do směru osy Z . Rozepsáním dostaneme *Eulerovy kinematické rovnice*

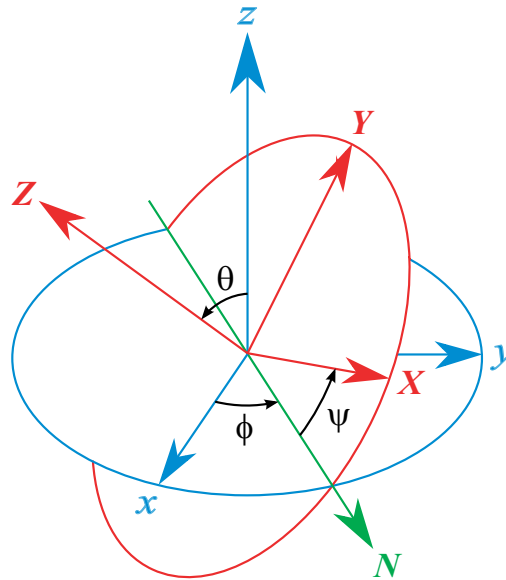
$$\begin{pmatrix} \Omega_1 \\ \Omega_2 \\ \Omega_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sin \theta \sin \psi & \cos \psi & 0 \\ \sin \theta \cos \psi & -\sin \psi & 0 \\ \cos \theta & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \dot{\phi} \\ \dot{\theta} \\ \dot{\psi} \end{pmatrix}. \quad (4.3.2)$$

1. Napište Lagranžian za předpokladu, že osa symetrie tělesa je totožná s osou Z a počátek souřadné soustavy tělesa se nachází v jeho těžišti.
2. Nalezněte metrický tenzor \mathbf{g} , jeho determinant a inverzní metrický tenzor \mathbf{g}^{-1} .
3. Určete Laplaceův operátor tohoto systému.
4. Napište Schrödingerovu rovnici pro část závislou na úhlu θ . Využijte toho, že řešení Schrödingerovy rovnice lze separovat užitím substituce

$$u(\phi, \theta, \psi) = f(\theta) e^{i(M\phi + K\psi)}, \quad (4.3.3)$$

kde M, K jsou celá čísla.

⁸¹V praxi se souřadné systémy zavádějí tak, že osa Z koinciduje s nějakým směrem významným v tělese, např. s osou symetrie, zatímco osa z koinciduje se směrem významným v prostoru, např. se směrem magnetického pole.



Obrázek 36: Eulerovy úhly. Souřadná soustava (x, y, z) pevná v prostoru (laboratorní soustava) je označena modře, souřadná soustava (X, Y, Z) spojená s tělesem (těžišťová soustava) je označena červeně. Průsečnice rovin (x, y) a (X, Y) , tzv. *uzlová přímka*, je označena zeleně.

Řešení:

1. Pro pohyb volného tělesa je Lagranžián rovný kinetickému členu

$$\begin{aligned}
 L &= \frac{1}{2} I \Omega_3^2 + \frac{1}{2} J (\Omega_1^2 + \Omega_2^2) \\
 &= \frac{1}{2} I (\dot{\phi} \cos \theta + \dot{\psi})^2 + \frac{1}{2} J \left[(\dot{\phi} \sin \theta \sin \psi + \dot{\theta} \cos \psi)^2 + (\dot{\phi} \sin \theta \cos \psi + \dot{\theta} \sin \psi)^2 \right] \\
 &= \frac{1}{2} I (\dot{\phi} \cos \theta + \dot{\psi})^2 + \frac{1}{2} J (\dot{\phi}^2 \sin^2 \theta + \dot{\theta}^2).
 \end{aligned} \tag{4.3.4}$$

2. V případě rotace tuhého tělesa, kdy zobecněné hmotnosti (momenty setrvačnosti) mohou být obecně v různých směrech různé, využijeme konvence (4.0.40). V našem případě je $(q^1, q^2, q^3) = (\phi, \theta, \psi)$ a z (4.3.4) plyne, že

$$g = \begin{pmatrix} I \cos^2 \theta + J \sin^2 \theta & 0 & I \cos \theta \\ 0 & J & 0 \\ I \cos \theta & 0 & I \end{pmatrix}, \tag{4.3.5}$$

$$\det g = (I \cos^2 \theta + J \sin^2 \theta) J I - J I^2 \cos^2 \theta = I J^2 \sin^2 \theta. \tag{4.3.6}$$

K výpočtu inverzního metrického tenzoru využijeme vztahu

$$g^{kl} = (-1)^{k+l} \frac{\det G_{ji}}{\det g}, \tag{4.3.7}$$

kde matici $G_{(ji)}$ získáme z matice g vypuštěním j -tého řádku a i -tého sloupce.

$$g^{-1} = \begin{pmatrix} \frac{1}{J \sin^2 \theta} & 0 & -\frac{\cos \theta}{J \sin^2 \theta} \\ 0 & \frac{1}{J} & 0 \\ -\frac{\cos \theta}{J \sin^2 \theta} & 0 & \frac{1}{I} + \frac{\cos^2 \theta}{J \sin^2 \theta} \end{pmatrix}. \tag{4.3.8}$$

3. Laplaceův operátor je podle (4.0.33)

$$\begin{aligned}\Delta &= \frac{1}{J\sqrt{I}\sin\theta} \left\{ \frac{\partial}{\partial\phi} J\sqrt{I}\sin\theta \left(\frac{1}{J\sin^2\theta} \frac{\partial}{\partial\phi} - \frac{\cos\theta}{J\sin^2\theta} \frac{\partial}{\partial\psi} \right) \right. \\ &\quad + \frac{\partial}{\partial\theta} J\sqrt{I}\sin\theta \frac{1}{J} \frac{\partial}{\partial\theta} \\ &\quad \left. + \frac{\partial}{\partial\psi} J\sqrt{I}\sin\theta \left[-\frac{\cos\theta}{J\sin^2\theta} \frac{\partial}{\partial\phi} + \left(\frac{1}{I} + \frac{\cos^2\theta}{J\sin^2\theta} \right) \frac{\partial}{\partial\psi} \right] \right\} \\ &= \frac{1}{J\sin^2\theta} \left[\frac{\partial^2}{\partial\phi^2} + \sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta} \sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta} - 2\cos\theta \frac{\partial^2}{\partial\phi\partial\psi} + \left(\frac{J}{I} \sin^2\theta + \cos^2\theta \right) \frac{\partial^2}{\partial\psi^2} \right].\end{aligned}\quad (4.3.9)$$

4. Schödingerova rovnice pro vlnovou funkci (4.3.3) zní

$$-\frac{\hbar^2}{2}\Delta u(\phi, \theta, \psi) = Eu(\phi, \theta, \psi), \quad (4.3.10)$$

$$\begin{aligned}&\left[-M^2 + \sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta} \sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta} + 2MK\cos\theta - K^2 \left(\frac{J}{I} \sin^2\theta + \cos^2\theta \right) \right] f(\theta) e^{i(M\phi + K\psi)} \\ &= -\frac{2J^2 \sin^2\theta}{\hbar^2} E f(\theta) e^{i(M\phi + K\psi)}\end{aligned}\quad (4.3.11)$$

Separace na část $f(\theta)$ a exponenciálu v úhlech ϕ a ψ je možná, jelikož Laplaceův operátor závisí na těchto úhlech jen přes derivace. Vlnová funkce musí dávat stejnou hodnotu po zvýšení ϕ a ψ o úhel 2π ,

$$u(\phi + 2\pi, \theta, \psi) = u(\phi, \theta, \psi), \quad (4.3.12a)$$

$$u(\phi, \theta, \psi + 2\pi) = u(\phi, \theta, \psi), \quad (4.3.12b)$$

takže $M, K \in \mathbb{Z}$. Dá se nahlédnout, že tato vlastní čísla přísluší operátorům souvisejícím s natočením okolo laboratorní osy z , respektive okolo osy spjaté s tělesem Z :

$$\hat{M}u(\phi, \theta, \psi) = -i \frac{\partial}{\partial\phi} u(\phi, \theta, \psi) = Mu(\phi, \theta, \psi), \quad (4.3.13a)$$

$$\hat{K}u(\phi, \theta, \psi) = -i \frac{\partial}{\partial\psi} u(\phi, \theta, \psi) = Ku(\phi, \theta, \psi). \quad (4.3.13b)$$

Rovnici (4.3.11) převedeme na tvar

$$\frac{d^2 f}{d\theta^2} + \frac{\cos\theta}{\sin\theta} \frac{df}{d\theta} - \frac{(M - K\cos\theta)^2}{\sin^2\theta} f + \sigma f = 0, \quad (4.3.14)$$

kde

$$\sigma = \frac{2EJ}{\hbar^2} - \frac{J}{I} K^2. \quad (4.3.15)$$

V pokračování výpočtu postupujeme podle článku [28]. Zavedeme substituce

$$\lambda_1 = \frac{1}{2} |K + M| \quad \lambda_2 = \frac{1}{2} |K - M| \quad \lambda_3 = \frac{1}{2} + \sqrt{\frac{1}{4} + \sigma + K^2} \quad (4.3.16a)$$

$$\mu_1 = -\frac{1}{2} |K + M| \quad \mu_2 = -\frac{1}{2} |K - M| \quad \mu_3 = \frac{1}{2} - \sqrt{\frac{1}{4} + \sigma + K^2} \quad (4.3.16b)$$

$$t = \frac{1}{2} (\cos\theta + 1)$$

$$F(t) = \frac{f(t)}{t^{\lambda_1} (t-1)^{\lambda_2}} \quad (4.3.16c)$$

a po dosazení do (4.3.14) dostaneme rovnici pro hypergeometrické funkce

$$t(1-t) \frac{d^2 F}{dt^2} + [\gamma - (\alpha + \beta + 1)t] \frac{dF}{dt} - \alpha\beta F = 0, \quad (4.3.17)$$

kde

$$\alpha = \lambda_1 + \lambda_2 + \lambda_3 \quad (4.3.18a)$$

$$\beta = \lambda_1 + \lambda_2 + \mu_3 \quad (4.3.18b)$$

$$\gamma = 2\lambda_1 - 1. \quad (4.3.18c)$$

Řešení s dobrou asymptotikou dostaneme, pokud β je nekladné celé číslo, tj. $j = -\mu_3$ je nezáporné celé číslo. Dostáváme

$$\begin{aligned} \left(j + \frac{1}{2}\right)^2 &= \frac{1}{4} + \sigma + K^2 \\ j(j+1) &= \sigma + K^2 \\ \sigma &= j(j+1) - K^2, \end{aligned}$$

kde

$$j = (\lambda_1 + \lambda_2), (\lambda_1 + \lambda_2 + 1), \dots \quad (4.3.19)$$

Výsledné řešení včetně podmínek na kvantová čísla j, K, M zní

$$E_{jK} = \frac{\hbar^2}{2} \left[\frac{j(j+1)}{J} + K^2 \left(\frac{1}{I} - \frac{1}{J} \right) \right] \quad j \in \mathbb{N}_0, \quad |M| \leq j, \quad |K| \leq j. \quad (4.3.20)$$

Poznámka: Spektrum volného axiálně symetrického tělesa bylo poprvé vyřešeno v práci [28].

Poznámka: Operátor celkového momentu hybnosti vůči soustavě spojené s tělesem a jeho třetí komponenta jsou dány výrazy

$$\hat{\mathcal{P}}^2 = -\frac{1}{\sin^2 \theta} \left[\frac{\partial^2}{\partial \phi^2} + \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} - 2 \cos \theta \frac{\partial^2}{\partial \phi \partial \psi} + \frac{\partial^2}{\partial \psi^2} \right] \quad (4.3.21a)$$

$$\hat{\mathcal{P}}_3 = -i \frac{\partial}{\partial \psi}. \quad (4.3.21b)$$

Srovnáním s (4.3.9) dostaneme

$$\Delta = -\frac{\hat{\mathcal{P}}^2}{J} - \hat{\mathcal{P}}_3^2 \left(\frac{1}{I} - \frac{1}{J} \right) \quad (4.3.22)$$

a Schrödingerova rovnice má tvar

$$\frac{1}{2} \left[\frac{\hat{\mathcal{P}}^2}{J} - \hat{\mathcal{P}}_3^2 \left(\frac{1}{I} - \frac{1}{J} \right) \right] u(\phi, \theta, \psi) = E u(\phi, \theta, \psi). \quad (4.3.23)$$

Vlastní funkce operátoru $\hat{\mathcal{P}}^2$ jsou komplexně sdružené Wignerovy D -funkce⁸²

$$\hat{\mathcal{P}}^2 D_{MK}^{j*}(\phi, \theta, \psi) = \hbar^2 j(j+1) D_{MK}^{j*}(\phi, \theta, \psi) \quad (4.3.27)$$

a působení $\hat{\mathcal{P}}_3$ na D -funkce je dáno výrazem

$$\hat{\mathcal{P}}_3 D_{MK}^{j*}(\phi, \theta, \psi) = K D_{MK}^{j*}(\phi, \theta, \psi). \quad (4.3.28)$$

⁸²Wignerovy D -funkce (D -matice) jsou maticové elementy operátoru rotace

$$\hat{\mathcal{R}}(\phi, \theta, \psi) = e^{-i\psi \hat{J}_3} e^{-i\theta \hat{J}_2} e^{-i\phi \hat{J}_3} \quad (4.3.24)$$

mezi vlastními stavy $|jM\rangle$ operátoru impulsmomentu a jeho třetí komponenty

$$\hat{J}^2 |jM\rangle = j(j+1) |jM\rangle \quad (4.3.25a)$$

$$\hat{J}_3 |jM\rangle = M |jM\rangle \quad (4.3.25b)$$

$$D_{MK}^j(\phi, \theta, \psi) \equiv \langle jM | \hat{\mathcal{R}}(\phi, \theta, \psi) | jK \rangle = e^{-iM\psi} d_{MK}^j(\theta) e^{-iK\phi}. \quad (4.3.26)$$

Po dosazení do (4.3.23) dostaneme spektrum (4.3.20) a jako vlastní funkce komplexně sdružené Wignerovy D -funkce

$$u_{jMK}(\phi, \theta, \psi) = D_{MK}^{j*}(\phi, \theta, \psi). \quad (4.3.29)$$

Poznámka: Spektrum tuhého tělesa lze „uhodnout“ na pár řádcích. Hamiltonián tuhého tělesa se dá napsat jako

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \frac{1}{2J} (\hat{P}_x^2 + \hat{P}_y^2) + \frac{1}{2I} \hat{P}_z^2 \\ &= \frac{1}{2J} (\hat{P}^2 - \hat{P}_z^2) + \frac{1}{2I} \hat{P}_z^2 \\ &= \frac{1}{2J} \hat{P}^2 + \frac{1}{2} \left(\frac{1}{I} - \frac{1}{J} \right) \hat{P}_z^2, \end{aligned} \quad (4.3.30)$$

kde $\hat{P} = (\hat{P}_x, \hat{P}_y, \hat{P}_z)$ je operátor vektoru momentu hybnosti. Pokud předpokládáme, že jeho vlastní vektory jsou

$$\hat{P} |jK\rangle = \hbar^2 j(j+1) |jK\rangle, \quad (4.3.31a)$$

$$\hat{P}_z |jK\rangle = \hbar K |jK\rangle, \quad (4.3.31b)$$

dostaneme výraz (4.3.20).

D.4 Hypersférické souřadnice

Pro hypersférické souřadnice v prostoru o dimenzi d definované vztahy

$$\begin{aligned} x_1 &= r \cos \theta_1 \\ x_2 &= r \sin \theta_1 \cos \theta_2 \\ x_3 &= r \sin \theta_1 \sin \theta_2 \cos \theta_3 \\ &\vdots \\ x_{d-2} &= r \sin \theta_1 \sin \theta_2 \cdots \cos \theta_{d-2} \\ x_{d-1} &= r \sin \theta_1 \sin \theta_2 \cdots \sin \theta_{d-2} \cos \theta_{d-1} \\ x_d &= r \sin \theta_1 \sin \theta_2 \cdots \sin \theta_{d-2} \sin \theta_{d-1} \end{aligned} \quad (4.4.1)$$

kde $0 < r < \infty$, $0 \leq \theta_j < \pi$, $j = 1, \dots, d-2$ a $0 \leq \theta_{d-1} < 2\pi$, vyjádřete:

- elementy metrického tenzoru g_{ij} ,
- determinant metrického tenzoru $\det \mathbf{g}$,
- Laplaceův operátor Δ .

Ukažte, že Laplaceův operátor Δ lze rozložit na součet radiální části (závisí jen na souřadnici r) a části $-\frac{L_d^2}{\hbar^2 r^2}$ (centrifugální člen), kde L_d^2 je velikost zobecněného impulsmomentu. Vlastí hodnoty L_d^2 jsou $\lambda_d = \hbar^2 l_d(l_d + d - 2)$, kde $l_d = 0, 1, \dots$.

- Vyjádřete Schrödingerovu rovnici pro radiální část vlnové funkce $R_{l_d}(r)$ pro sféricky symetrický potenciál $V(r)$ v d dimenzích.
- Vyjádřete Schrödingerovu rovnici pro radiální část vlnové funkce $u_{l_d}(r)$ po substituci

$$R_{l_d}(r) = r^{\frac{1-d}{2}} u_{l_d}(r) \quad (4.4.2)$$

a ukažte, že její tvar je shodný pro všechny dimenze d a jediný rozdíl je jen ve velikosti centrifugálního členu.

Ukažte, že získané vztahy pro obecnou dimenzi d jsou v souladu se známými vztahy pro $d = 3$. Hypersférické souřadnice a vícerozměrný Coulombický problém jsou diskutovány v práci [29].

E Grupy a symetrie

E.1 Vlastnosti grupy $U(n)$

Grupa $U(n)$ je grupou všech unitárních matic (matic U , pro které platí $U^{-1} = U^\dagger$) rozměru $n \times n$. Tyto matice zachovávají normu komplexního vektoru:

$$z' = Ux, \quad |z'|^2 = \sum_{j=1}^n z_j'^* z_j' = \sum_{j=1}^n z_j^* z_j = |z|^2, \quad z_i \in \mathbb{C}. \quad (5.1.1)$$

1. Nalezněte počet nezávislých reálných složek unitární matice U rozměru $n \times n$.

2. Ověřte, že generující matice (5.1.2) splňují komutační relace

$$[G^{(jk)}, G^{(lm)}] = G^{(jm)} \delta_{kl} - G^{(lk)} \delta_{jm}. \quad (5.1.2)$$

Tyto komutační relace udávají strukturní koeficienty grupy $U(n)$.

Jelikož jsou strukturní koeficienty nezávislé na realizaci grupy, lze opustit realizaci maticovou a brát za generátory libovolné operátory \hat{G}_{jk} z nějakého Hilbertova prostoru \mathcal{H} , které splňují komutační relace (5.1.2).

3. Nalezněte generátory \hat{G}_{jk}^f funkční realizace působící na prostoru kvadraticky integrovatelných funkcí $\mathcal{H} = \mathcal{L}^2(\mathbb{C}^n)$, která je definována takto:

$$f'(z) \equiv \hat{U}^f f(z) = f(U^{-1}z), \quad (5.1.3)$$

kde $f(z) \in \mathcal{L}^2(\mathbb{C}^n)$, $z \in \mathbb{C}^n$ a U je unitární matice rozměru $n \times n$. Generátory hledejte pomocí infinitezimální transformace

$$U^{-1} \approx \mathbb{1} - i\epsilon H \quad (5.1.4)$$

kde H je Hermitovská matice a ϵ malé reálné číslo.

4. Ukažte, že \hat{G}_{jk}^f splňují komutační relace (5.1.2), a jsou tudíž generátory grupy $U(n)$.

5. Ukažte, že také operátory $\hat{G}_{jk}^a = \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_k$, $j, k = 1, \dots, n$, kde

$$[\hat{a}_j^\dagger, \hat{a}_k] = \delta_{jk} \quad [\hat{a}_j, \hat{a}_k] = [\hat{a}_j^\dagger, \hat{a}_k^\dagger] = 0, \quad (5.1.5)$$

splňují komutační relace (5.1.2). Tato realizace grupy $U(n)$ se nazývá *bosonová realizace*. Operátory \hat{a}_j^\dagger , \hat{a}_j jsou posunovací operátory lineárního harmonického oscilátoru nebo kreační a anihilační operátory bosonových excitací.

6. Dokažte pomocí Bakery-Campbellový-Hausdorffovy formule (1.4.2), že posunovací operátory bosonové realizace lze transformovat

$$\hat{U}^{-1} \hat{a}_k^\dagger \hat{U} = \sum_j (\exp c)_{jk} \hat{a}_j^\dagger, \quad (5.1.6)$$

kde $\hat{U} = \exp \left(-i \sum_{jk} c_{jk} \hat{G}_{jk}^a \right)$ a koeficienty c_{jk} tvoří Hermitovskou matici c , takže matice $\exp c$ je unitární.

7. Rank grupy $U(n)$ je n , a tedy každá realizace této grupy obsahuje celkem n nezávislých Casimirových operátorů, což jsou operátory, které komutují se všemi generátory. Ukažte, že první dva Casimirovy operátory (lineární a kvadratický Casimirov operátor) jsou

$$\begin{aligned} \hat{C}_1[U(n)] &= \sum_{j=1}^n \hat{G}_{jj}, \\ \hat{C}_2[U(n)] &= \sum_{j,k=1}^n \hat{G}_{jk} \hat{G}_{kj}, \end{aligned} \quad (5.1.7)$$

tj. dokažte, že tyto operátory komutují se všemi generátory.

Řešení:

1. Každá unitární matice U se dá vyjádřit pomocí exponenciály

$$U = e^{i \sum_{jk} c_{jk} G^{(jk)}}, \quad (5.1.8)$$

kde $G^{(jk)}$ je n^2 lineárně nezávislých matic rozměru $n \times n$ ($G_{\alpha\beta}^{(jk)}$, kde $\alpha, \beta = 1, \dots, n$, jsou jejich složky), c_{jk} je n^2 parametrů a součet $\sum_{jk} c_{jk} G^{(jk)}$ je hermitovská matice. Hermiticity lze dosáhnout například těmito dvěma způsoby:

- Budeme-li chápat koeficienty c_{jk} jako složky matice c a tato matice bude hermitovská, pak stačí, aby $G^{(jk)\dagger} = G^{(kj)}$, což splňují reálné matice

$$G_{\alpha\beta}^{(jk)} = \delta_{j\alpha} \delta_{k\beta} \quad (5.1.9)$$

(matice, které mají pouze jednu jedničku na pozici j, k , zatímco ostatní jejich elementy jsou nulové).

- Budou-li koeficienty c_{jk} reálné a matice $G^{(jk)}$ hermitovské.

Oba způsoby vedou na n^2 nezávislých reálných parametrů a n^2 generujících matic $G^{(jk)}$, $j, k = 1, \dots, n$.

E.2 Vlastnosti grupy SU(n)

Grupa SU(n) je grupou všech unitárních unimodulárních matic, tj. matic U , které mají jednotkový determinant, $\det U = 1$.

1. Nalezněte počet nezávislých reálných složek matic této grupy a rozmyslete, jak musejí vypadat její generující matice.
2. Přesvědčte se, že každou matici $U \in U(n)$ lze vyjádřit pomocí matice $V \in SU(n)$ a reálného parametru m jako součin

$$U = e^{im} V. \quad (5.2.1)$$

Jelikož $e^{im} \in U(1)$, znamená tento vztah matematicky, že grupa $U(n)$ se dá vyjádřit jako direktní součin

$$U(n) = SU(n) \otimes U(1). \quad (5.2.2)$$

E.3 Vlastnosti grupy O(n)

Grupa O(n) je grupou ortogonálních transformací, které udávají všechna natočení v n -rozměrném prostoru,

$$x'_j = \sum_{k=1}^n R_{jk} x_k, \quad (5.3.1)$$

kde $R_{jk} \in \mathbb{R}$ jsou elementy matice rotace R , $x_j \in \mathbb{R}$ jsou elementy vektoru x .

1. Dokažte, že při natočení vektoru se jeho délka nemění:

$$|x'|^2 = \sum_{j=1}^n x_j'^2 = \sum_{j=1}^n x_j^2 = |x|^2. \quad (5.3.2)$$

Na základě této vlastnosti ukažte, že matice R musejí být ortogonální, tj. $R^T = R^{-1}$ a že $\det R = \pm 1$.

2. Ukažte, že grupa O(n) je uzavřená, tj. že matice $R_3 = R_1 R_2$ (součin dvou ortogonálních matic) je ortogonální.

3. Nalezněte počet nezávislých elementů ortogonální matice rozměru $n \times n$.

Nadále uvažujte jen *vlastní rotace*, které splňují $\det R = 1$. Ty tvoří grupu $SO(n)$. Matice s $\det R = -1$ zahrnují totiž kromě otočení ještě prostorovou inverzi.

4. Ukažte, že generátory rotací v maticové realizaci $L^{(jk)}$ lze zapsat jako hermitovské matice

$$L_{\alpha\beta}^{(jk)} = i(\delta_{j\beta}\delta_{k\alpha} - \delta_{j\alpha}\delta_{k\beta}) \quad (5.3.3)$$

($\alpha, \beta = 1, \dots, n$ určují složky matic $L^{(jk)}$), tj. ukažte, že matice

$$R = \exp\left(i \sum_{j < k} a_{jk} L^{(jk)}\right) \quad (5.3.4)$$

jsou ortogonální a a_{jk} jsou reálné parametry.

Přesvědčte se, že počet takto vytvořených generátorů je stejný jako počet nezávislých elementů ortogonálních matic rozměru n . To znamená, že každou ortogonální matici lze jednoznačně zadat pomocí parametrů a_{jk} .

5. Nalezněte strukturní koeficienty grupy $SO(n)$, tj. spočítejte komutátor

$$[L^{(jk)}, L^{(lm)}]. \quad (5.3.5)$$

Tento komutátor musí být stejný pro jakoukoliv (nejen maticovou) realizaci grupy. Nadále budeme tedy uvažovat, že generátory L_{jk} jsou operátory nad obecným Hilbertovým prostorem \mathcal{H} , které splňují tyto komutační relace.

6. Ukažte, že lineární Casimirův operátor

$$\hat{C}_1[SO(n)] \equiv \sum_{j=1}^n \hat{L}_{jj} \quad (5.3.6)$$

je identicky nulový. Nenulový je až kvadratický Casimirův operátor

$$\hat{C}_2[SO(n)] \equiv \sum_{j,k=1}^n \hat{L}_{jk} \hat{L}_{kj}. \quad (5.3.7)$$

Přesvědčte se, že komutuje se všemi generátory \hat{L}_{jk} .

7. Ukažte, že operátory impulsmomentu v n -rozměrném prostoru, definované vztahem

$$\hat{L}_{jk} = \hat{x}_j \hat{p}_k - \hat{x}_k \hat{p}_j, \quad j, k = 1, \dots, n, \quad (5.3.8)$$

(mezi operátorem souřadnice a hybnosti platí standardní komutační relace $[\hat{x}_j, \hat{p}_k] = i\hbar\delta_{jk}$, $[\hat{x}_j, \hat{x}_k] = [\hat{p}_j, \hat{p}_k] = 0$) splňují (až na konstantu \hbar) stejné komutační relace jako výše vypočtené matice $L^{(jk)}$, a tvoří tedy generátory grupy $SO(n)$. Napište vyjádření operátorů \hat{L}_{jk} v x -reprezentaci, tj. dosad'te $\hat{p}_j = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_j}$.

8. V třírozměrném prostoru dokažte, že platí

$$R^{(12)} = e^{(i\phi L^{(12)})} = \begin{pmatrix} \cos \phi & \sin \phi & 0 \\ -\sin \phi & \cos \phi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (5.3.9)$$

(matice $L^{(12)}$ je definována výše). Jedná se tedy o matici rotace okolo osy 3 o úhel ϕ . K výpočtu můžete použít rozvoj exponenciály do Taylorovy řady.

Poznámka: V třírozměrném prostoru platí mezi složkami vektoru impulsmomentu \hat{L}_j a mezi výše definovanými operátory \hat{L}_{kl} vztah

$$\hat{L}_j = \frac{1}{2} \epsilon_{jkl} \hat{L}_{kl}. \quad (5.3.10)$$

Složky \hat{L}_j splňují komutační relace

$$[\hat{L}_j, \hat{L}_k] = i\hbar \epsilon_{jkl} \hat{L}_l \quad (5.3.11)$$

a jsou jen jiným vyjádřením generujících operátorů grupy SO(3).

E.4 Algebraické řešení atomu vodíku

Klasický Hamiltonián částice o hmotnosti M pohybující se v Coulombickém poli má tvar

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2M} - \frac{\gamma}{r}, \quad (5.4.1)$$

kde $r = \sqrt{x_1^2 + x_2^2 + x_3^2}$ a $\gamma = e^2/(4\pi\epsilon_0)$. Kromě impulsmomentu \mathbf{L} existuje ještě jeden integrál pohybu, tzv. *Runge-Lenzův vektor*

$$\mathbf{R} = \frac{1}{M} (\mathbf{p} \times \mathbf{L}) - \gamma \frac{\mathbf{x}}{r}, \quad (5.4.2)$$

který směřuje vždy ve směru hlavní poloosy pohybu. Jeho neměnnost v Coulombickém (případně gravitačním) poli souvisí s dodatečnou symetrií systému a důsledkem je, že trajektorie pro $E < 0$ jsou uzavřené elipsy a nedochází k jejich precesi.

V kvantovém případě musí být operátor Runge-Lenzova vektoru hermitovský, čehož se docílí rozepsáním

$$\mathbf{p} \times \mathbf{L} \mapsto \frac{1}{2} (\hat{\mathbf{p}} \times \hat{\mathbf{L}} - \hat{\mathbf{L}} \times \hat{\mathbf{p}}), \quad (5.4.3)$$

kde $\hat{\mathbf{L}} = \hat{\mathbf{x}} \times \hat{\mathbf{p}}$.

1. Ukažte, že operátor Runge-Lenzova vektoru

$$\hat{\mathbf{R}} = \frac{1}{2M} (\hat{\mathbf{p}} \times \hat{\mathbf{L}} - \hat{\mathbf{L}} \times \hat{\mathbf{p}}) - \gamma \frac{\hat{\mathbf{x}}}{\hat{r}} \quad (5.4.4)$$

je samosdružený (označili jsme $\hat{r} = |\hat{\mathbf{x}}| = \sqrt{\hat{x}_1^2 + \hat{x}_2^2 + \hat{x}_3^2}$).

2. V úloze 1.3 bylo dokázáno, že $[f(\hat{\mathbf{x}}), \hat{\mathbf{p}}] = i\hbar \nabla f(\hat{\mathbf{x}})$. To lze zobecnit pro operátor souřadnice ve 3D prostoru:

$$[f(\hat{\mathbf{x}}), \hat{\mathbf{p}}] = i\hbar \nabla f(\hat{\mathbf{x}}). \quad (5.4.5)$$

Odvod'te, čemu se rovnají komutátory

$$[\hat{L}_k, f(\hat{r})] \quad \text{a} \quad \left[\frac{\hat{x}_j}{\hat{r}}, \hat{p}_k \right]. \quad (5.4.6)$$

3. Ukažte, že $\hat{\mathbf{R}}$ je integrálem pohybu, tj. že $[\hat{H}, \hat{\mathbf{R}}] = 0$.
4. Ukažte, že $\hat{\mathbf{R}} \cdot \hat{\mathbf{L}} = \hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{R}} = 0$.
5. Nalezněte, čemu se rovná $\hat{\mathbf{R}}^2$, a vyjádřete tento operátor jen pomocí operátorů \hat{H} , $\hat{\mathbf{L}}$ a konstant.
6. Spočítejte komutátory $[\hat{L}_j, \hat{R}_k]$ a $[\hat{R}_j, \hat{R}_k]$.

Uvažujte nadále jen vázané stavy, tj. stavy s $E < 0$. Jelikož

$$\hat{H} |E\alpha\rangle = E |E\alpha\rangle, \quad (5.4.7)$$

kde E jsou energie a α další indexy číslující vlastní vektory, lze ve všech výrazech nahrazovat $\hat{H} \mapsto E$.

7. Ukažte, že operátory $\hat{\mathbf{L}}$ a $\hat{\mathbf{Q}}$, kde

$$\hat{\mathbf{Q}} = \sqrt{\frac{M}{-2E}} \hat{\mathbf{R}}, \quad (5.4.8)$$

splňují komutační relace

$$[\hat{L}_j, \hat{L}_k] = i\hbar\epsilon_{jkl}L_l, \quad (5.4.9a)$$

$$[\hat{L}_j, \hat{Q}_k] = [\hat{Q}_j, \hat{L}_k] = i\hbar\epsilon_{jkl}Q_l, \quad (5.4.9b)$$

$$[\hat{Q}_j, \hat{Q}_k] = i\hbar\epsilon_{jkl}L_l. \quad (5.4.9c)$$

Tyto komutační relace jsou relace pro generátory grupy $SO(4)$.

8. Ukažte, že složky operátorů

$$\hat{\mathbf{A}} = \frac{1}{2} (\hat{\mathbf{L}} + \hat{\mathbf{Q}}), \quad (5.4.10a)$$

$$\hat{\mathbf{B}} = \frac{1}{2} (\hat{\mathbf{L}} - \hat{\mathbf{Q}}) \quad (5.4.10b)$$

splňují

$$[\hat{A}_j, \hat{A}_k] = i\hbar\epsilon_{jkl}A_l, \quad (5.4.11a)$$

$$[\hat{B}_j, \hat{B}_k] = i\hbar\epsilon_{jkl}B_l, \quad (5.4.11b)$$

$$[\hat{A}_j, \hat{B}_k] = 0, \quad (5.4.11c)$$

což jsou komutační relace pro dva nezávislé impulsmomenty—generátory grupy $SU(2)$ ⁸³. Díky těmto komutačním relacím můžeme hledat vlastní stavy ve tvaru

$$\hat{\mathbf{A}}^2 |Eab\rangle = \hbar^2 a(a+1) |Eab\rangle \quad (5.4.12a)$$

$$\hat{\mathbf{B}}^2 |Eab\rangle = \hbar^2 b(b+1) |Eab\rangle, \quad (5.4.12b)$$

kde $a, b = 0, \frac{1}{2}, 1, \dots$ jsou kladná polocelá čísla.

9. Ukažte, že Casimirovy operátory grupy $SO(4)$ se dají vyjádřit jako

$$\hat{C}_1[SO(4)] = \hat{\mathbf{A}}^2 + \hat{\mathbf{B}}^2 = -\frac{1}{2} - \frac{M\gamma^2}{2\hbar^2 E}, \quad (5.4.13a)$$

$$\hat{C}_2[SO(4)] = \frac{1}{2\hbar^2} \sqrt{\frac{M}{-2E}} (\hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{R}} + \hat{\mathbf{R}} \cdot \hat{\mathbf{L}}) = 0 \quad (5.4.13b)$$

přičemž identická nulovost \hat{C}_2 plyne z výše zmíněné ortogonalilty vektorů $\hat{\mathbf{L}}$ a $\hat{\mathbf{R}}$.

10. Jelikož $\hat{C}_2 = 0$, dokažte, že $a = b$.

⁸³Vztah mezi operátory $(\hat{\mathbf{L}}, \hat{\mathbf{Q}})$ a $(\hat{\mathbf{A}}, \hat{\mathbf{B}})$ souvisí se skutečností, že grupu $SO(4)$ lze rozložit na direktní součet $SO(4) = SU(2) \oplus SU(2)$

11. Dopočítejte energii a vyjádřete ji ve tvaru

$$E_n = -\frac{M\gamma^2}{2\hbar^2 n^2}, \quad (5.4.14)$$

kde $n \equiv 2a + 1$, $n = 1, 2, \dots$ jsou přirozená čísla.

Tímto jsme určili energetické spektrum částice v Coulombickém poli jen pomocí algebraických metod, aniž bychom museli hledat analytické řešení Schrödingerovy diferenciální rovnice, a ukázali, že dynamická symetrie tohoto systému je SO(4), tj. vyšší než jen rotační symetrie SO(3).

Poznámka: K výpočtu mohou hodit vztahy pro Levi-Civitův symbol

$$\epsilon_{jkl}\epsilon_{jmn} = \delta_{km}\delta_{ln} - \delta_{kn}\delta_{lm}, \quad (5.4.15a)$$

$$\epsilon_{jkl}\epsilon_{jkm} = 2\delta_{lm}. \quad (5.4.15b)$$

E.5 Schwingerova realizace grupy SU(2)

Jsou zadány dva operátory \hat{a} a \hat{b} , které splňují komutační relace pro posunovací operátory harmonického oscilátoru a které mezi sebou navzájem komutují:

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = [\hat{b}, \hat{b}^\dagger] = 1, \quad (5.5.1a)$$

$$[\hat{a}, \hat{b}] = [\hat{a}^\dagger, \hat{b}^\dagger] = [\hat{a}, \hat{b}^\dagger] = [\hat{a}^\dagger, \hat{b}] = 0. \quad (5.5.1b)$$

Pomocí nich se definují operátory

$$\hat{J}_1 = \frac{1}{2} (\hat{b}^\dagger \hat{a} + \hat{a}^\dagger \hat{b}), \quad (5.5.2a)$$

$$\hat{J}_2 = \frac{i}{2} (\hat{b}^\dagger \hat{a} - \hat{a}^\dagger \hat{b}), \quad (5.5.2b)$$

$$\hat{J}_3 = \frac{1}{2} (\hat{a}^\dagger \hat{a} - \hat{b}^\dagger \hat{b}), \quad (5.5.2c)$$

$$\hat{J} = \frac{1}{2} (\hat{a}^\dagger \hat{a} + \hat{b}^\dagger \hat{b}). \quad (5.5.2d)$$

1. Ukažte, čemu se rovnají komutační relace $[\hat{J}_j, \hat{J}_k]$, kde $j, k = 1, 2, 3$.
2. Vyjádřete operátor $\hat{J}^2 = \hat{J}_1^2 + \hat{J}_2^2 + \hat{J}_3^2$ pomocí operátoru \hat{J} .
3. Nalezněte vlastní hodnoty operátorů \hat{J} , \hat{J}^2 a \hat{J}_3 .

F Dekohherence

F.1 Spin a prostředí

Spinový (dvouhladinový) systém, popsáný stavem z Hilbertova prostoru

$$\mathcal{H}_s = \{|+\rangle, |-\rangle\} \quad (6.1.1)$$

je v interakci s prostředím

$$\mathcal{H}_e = \{|e_j\rangle, j = 1, 2, \dots\}. \quad (6.1.2)$$

Časový vývoj složeného systému je dán předpisem

$$\begin{aligned} |+\rangle \otimes |e_j\rangle &\xrightarrow{t} |+\rangle \otimes |e_j^{(+)}(t)\rangle, \\ |-\rangle \otimes |e_j\rangle &\xrightarrow{t} |-\rangle \otimes |e_j^{(-)}(t)\rangle, \end{aligned} \quad (6.1.3a)$$

$$(6.1.3b)$$

kde $|e_j^{\pm}(t)\rangle \in \mathcal{H}_e$.

Na počátku v čase $t = 0$ je dvouhladinový systém v obecném čistém stavu

$$|\psi_i\rangle = \alpha |+\rangle + \beta |-\rangle \quad (6.1.4)$$

odpovídajícímu matici hustoty

$$\begin{aligned} \hat{\rho}_s(0) &= |\psi_i\rangle \langle\psi_i| \\ &= |\alpha|^2 |+\rangle \langle+| + \alpha\beta^* |+\rangle \langle-| + \alpha^*\beta |-\rangle \langle+| + |\beta|^2 |-\rangle \langle-| \\ &= \begin{pmatrix} |\alpha|^2 & \alpha\beta^* \\ \alpha^*\beta & |\beta|^2 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (6.1.5)$$

(poslední výraz je maticové vyjádření v bázi $|\pm\rangle$), zatímco prostředí je v obecném smíšeném stavu

$$\hat{\rho}_e(0) = \sum_j w_j |e_j\rangle \langle e_j|. \quad (6.1.6)$$

Celkový stav systému a prostředí je na počátku separovaný, je tedy popsáný maticí hustoty

$$\hat{\rho}_{se}(0) = \hat{\rho}_s(0) \otimes \hat{\rho}_e(0). \quad (6.1.7)$$

1. Určete matici hustoty $\hat{\rho}_{se}(t)$.
2. Určete redukovanou matici hustoty $\hat{\rho}_s(t)$.
3. Spočítejte $\text{Tr}_s \hat{\rho}_s^2(t)$.
4. Předpokládejte, že spin na počátku míří ve směru daném jednotkovým vektorem \hat{n} . Ukažte, že v průběhu času spin nemůže změnit komponentu ve směru osy z , avšak důsledkem dekoherence mohou vymizet komponenty ve směru os x a y .

Řešení:

1. Matice hustoty (6.1.7) se rozepíše a využije se předpisu pro časový vývoj (6.1.3):

$$\begin{aligned} \hat{\rho}_{se}(t) &= \sum_j w_j \left[|\alpha|^2 |+\rangle \langle+| \otimes |e_j^{(+)}(t)\rangle \langle e_j^{(+)}(t)| + \alpha\beta^* |+\rangle \langle-| \otimes |e_j^{(+)}(t)\rangle \langle e_j^{(-)}(t)| \right. \\ &\quad \left. + \alpha^*\beta |-\rangle \langle+| \otimes |e_j^{(-)}(t)\rangle \langle e_j^{(+)}(t)| + |\beta|^2 |-\rangle \langle-| \otimes |e_j^{(-)}(t)\rangle \langle e_j^{(-)}(t)| \right] \end{aligned} \quad (6.1.8)$$

2. Parciální stopa je

$$\begin{aligned}
\hat{\rho}_s(t) &= \text{Tr}_e \hat{\rho}_{se}(t) = \sum_k \langle e_k | \hat{\rho}_{se}(t) | e_k \rangle = \\
&= |\alpha|^2 |+\rangle \langle +| \underbrace{\sum_{jk} w_j \langle e_k | e_j^{(+)}(t) \rangle \langle e_j^{(+)}(t) | e_k \rangle}_1 \\
&\quad + \alpha \beta^* |+\rangle \langle -| \underbrace{\sum_{jk} w_j \langle e_k | e_j^{(+)}(t) \rangle \langle e_j^{(-)}(t) | e_k \rangle}_{\sum_j w_j \langle e_j^{(-)}(t) | e_j^{(+)}(t) \rangle \equiv D(t)} \\
&\quad + \alpha^* \beta |-\rangle \langle +| \underbrace{\sum_{jk} w_j \langle e_k | e_j^{(-)}(t) \rangle \langle e_j^{(+)}(t) | e_k \rangle}_{\sum_j w_j \langle e_j^{(+)}(t) | e_j^{(-)}(t) \rangle \equiv D^*(t)} \\
&\quad + |\beta|^2 |-\rangle \langle -| \underbrace{\sum_{jk} w_j \langle e_k | e_j^{(-)}(t) \rangle \langle e_j^{(-)}(t) | e_k \rangle}_1 \\
&= \begin{pmatrix} |\alpha|^2 & \alpha \beta^* D(t) \\ \alpha^* \beta D^*(t) & |\beta|^2 \end{pmatrix}, \tag{6.1.9}
\end{aligned}$$

kde díky trojúhelníkové nerovnosti

$$|D(t)| \leq \sum_j w_j \left| \langle e_j^{(-)}(t) | e_j^{(+)}(t) \rangle \right| \leq 1. \tag{6.1.10}$$

3. Umocnění (6.1.9) dává

$$\hat{\rho}_s^2(t) = \begin{pmatrix} |\alpha|^4 + |\alpha|^2 |\beta|^2 |D(t)|^2 & (|\alpha|^2 + |\beta|^2) \alpha \beta^* D(t) \\ (\alpha^* \beta D^*(t) & |\beta|^4 + |\alpha|^2 |\beta|^2 |D(t)|^2 \end{pmatrix}. \tag{6.1.11}$$

a stopa kvadrátu matice hustoty pak je

$$\begin{aligned}
\text{Tr}_s \hat{\rho}_s^2(t) &= |\alpha|^4 + 2 |\alpha|^2 |\beta|^2 |D(t)|^2 + |\beta|^4 \\
&= (|\alpha|^2 + |\beta|^2) - 2 |\alpha|^2 |\beta|^2 [1 - |D(t)|^2]. \tag{6.1.12}
\end{aligned}$$

$\text{Tr}_s \hat{\rho}_s^2(t) = 1$, tj. spin bude v čistém stavu za podmínky $|D(t)| = 1$ (v tom případě musí platit, že $|\langle e_j^{(-)}(t) | e_j^{(+)}(t) \rangle| = 1$, tj. $|e_j^{(+)}(t)\rangle = e^{i\phi} |e_j^{(-)}(t)\rangle$ pro všechna $j = 1, 2, \dots$) nebo $\alpha\beta = 0$ (to znamená, že spin je na počátku ve vlastním stavu $|+\rangle$ nebo $|-\rangle$). V ostatních případech bude spin ve smíšeném stavu.

Pokud je prostředí velké, je $|D(t)|$ obvykle velmi rychle klesající funkce v čase, což plyne z toho, že stavy $|e_j^{(+)}(t)\rangle$ a $|e_j^{(-)}(t)\rangle$ se vzdalují a jejich skalární součin se zmenšuje k nule. Z počátečního čistého stavu (6.1.4) se po čase t systém vyvine do smíšeného stavu popsaného maticí hustoty (6.1.9):

$$\hat{\rho}_s(t) = |\alpha|^2 |+\rangle \langle +| + |\beta|^2 |-\rangle \langle -|. \tag{6.1.13}$$

4. Pokud spin na počátku míří ve směru daném jednotkovým vektorem \hat{n} , je podle výsledků cvičení 2.1 jeho stav

$$|\psi_i\rangle = \underbrace{e^{-i\phi} \cos \frac{\theta}{2}}_{\alpha} |+\rangle + \underbrace{\sin \frac{\theta}{2}}_{\beta} |-\rangle \tag{6.1.14}$$

Parametrizace funkce $D(t)$ pomocí velikosti a fáze

$$D(t) = |D(t)| e^{i\chi(t)} \tag{6.1.15}$$

dá po dosazení do (6.1.9) redukovanou matici hustoty

$$\hat{\rho}_s(t) = \begin{pmatrix} |\alpha|^2 & \alpha\beta^* |D(t)| e^{i\chi(t)} \\ \alpha^*\beta |D(t)| e^{-i\chi(t)} & |\beta|^2 \end{pmatrix}. \quad (6.1.16)$$

Srovnáním s maticí hustoty spinového systému (11.1.18) dostaneme směr spinu v čase t :

$$\hat{\rho}_s(t) = \frac{1}{2} [\hat{1} + \mathbf{n}(t) \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}] = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + n_3(t) & n_1(t) - in_2(t) \\ n_1(t) + in_2(t) & 1 - n_3(t) \end{pmatrix}, \quad (6.1.17)$$

takže

$$\begin{aligned} |\alpha|^2 &= \cos^2 \frac{\theta}{2} = \frac{1}{2} [1 + n_3(t)], \\ \alpha\beta^* |D(t)| e^{i\chi} &= \sin \frac{\theta}{2} \cos \frac{\theta}{2} e^{-i\phi} |D(t)| e^{i\chi} \\ &= \frac{1}{2} \sin \theta \{ \cos [\phi - \chi(t)] - i \sin [\phi - \chi(t)] \} \\ &= \frac{1}{2} [n_1(t) - in_2(t)], \end{aligned} \quad (6.1.18)$$

neboli spin míří do směru

$$\mathbf{n}(t) = \begin{pmatrix} |D(t)| \sin \theta \cos [\phi - \chi(t)] \\ |D(t)| \sin \theta \sin [\phi - \chi(t)] \\ \cos \theta \end{pmatrix}. \quad (6.1.19)$$

Pro velké časy se může předpokládat $|D(t)| \xrightarrow{t \rightarrow \infty} 0$, což dá

$$\mathbf{n}(t) \approx \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \cos \theta \end{pmatrix}. \quad (6.1.20)$$

G Dráhový integrál

Propagátor částice pohybující se v potenciálu $V(\mathbf{x})$ lze formálně zapsat ve tvaru Feynmanova integrálu

$$G(\mathbf{x}_f, t_f; \mathbf{x}_i, t_i) = \int_{\mathbf{x}(t_i)=\mathbf{x}_i}^{\mathbf{x}(t_f)=\mathbf{x}_f} e^{\frac{i}{\hbar} S[\mathbf{x}(t)]} \mathcal{D}\mathbf{x}, \quad (7.0.1)$$

kde

$$S[\mathbf{x}(t)] = \int_{t_i}^{t_f} \left[\frac{1}{2} M \dot{\mathbf{x}}^2(t) - V(\mathbf{x}) \right] dt \quad (7.0.2)$$

je akce trajektorie $\mathbf{x}(t)$ a $\mathcal{D}\mathbf{x}$ je míra integrace. Pro praktické výpočty se používá diskretizovaná verze tohoto integrálu

$$G(\mathbf{x}_f, t_f; \mathbf{x}_i, t_i) = \lim_{N \rightarrow \infty} \left[\left(\frac{M}{2i\pi\hbar\delta\tau} \right)^{d/2} \right]^N \int \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \delta\tau \sum_{k=1}^N \left[\frac{M}{2} \frac{\mathbf{x}_k - \mathbf{x}_{k-1}}{\delta\tau} - V(\mathbf{x}_{k-1}) \right] \right\} d^d \mathbf{x}_1 \dots d^d \mathbf{x}_{N-1}, \quad (7.0.3)$$

kde d je dimenze prostoru, $\delta\tau \equiv (t_f - t_i)/N$ a $\mathbf{x}_0 \equiv \mathbf{x}_i$, $\mathbf{x}_N \equiv \mathbf{x}_f$.

V této sekci odvodíme vztah pro dráhový integrál libovolného systému s maximálně kvadratickou akcí (integrál (7.0.3) bude v tomto případě Gaussovský).

G.1 Gaussovský integrál

1. Nechť \mathbf{A} je reálná, symetrická, pozitivně definitní matice. Dokažte, že pak platí

$$\int d^d \mathbf{x} \exp \left(-\frac{1}{2} \mathbf{x}^T \cdot \mathbf{A} \cdot \mathbf{x} \right) = \left(\det \frac{\mathbf{A}}{2\pi} \right)^{-\frac{1}{2}} \quad (7.1.1)$$

(d je dimenze prostoru).

2. Nechť navíc \mathbf{b} je libovolný vektor, c libovolný skalár. Označme $K(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \mathbf{x}^T \cdot \mathbf{A} \cdot \mathbf{x} + \mathbf{b} \cdot \mathbf{x} + c$. V tomto případě se přesvědčte, že

$$\int d^d \mathbf{x} e^{-K(\mathbf{x})} = \left(\det \frac{\mathbf{A}}{2\pi} \right)^{-\frac{1}{2}} \exp \left(\frac{1}{2} \mathbf{b}^T \cdot \mathbf{A}^{-1} \cdot \mathbf{b} - c \right). \quad (7.1.2)$$

3. Ukažte, že poslední uvedený integrál lze také vyjádřit takto:

$$\int d^d \mathbf{x} e^{-K(\mathbf{x})} = \left(\det \frac{\mathbf{A}}{2\pi} \right)^{-\frac{1}{2}} e^{-K_{\text{stac}}}, \quad (7.1.3)$$

kde K_{stac} je stacionární bod výrazu $K(\mathbf{x})$, tj. bod, pro který $\nabla K(\mathbf{x}) = 0$.

Tento výsledek vlastně znamená, že počítáme-li propagátor systému s maximálně kvadratickou akcí, dá se vyjádřit jen pomocí akce klasické trajektorie (pro klasickou trajektorii je akce extrémní).

G.2 Dráhový integrál pro volnou částici

Spočítejte dráhový integrál (7.0.3) pro volnou částici ($V(\mathbf{x}) = 0$).

- Nalezněte vyjádření pro matici \mathbf{A} a spočítejte její determinant.
- Nalezněte vyjádření pro vektor \mathbf{b} a dále relevantní elementy inverzní matice \mathbf{A}^{-1} potřebné pro výpočet výrazu $\frac{1}{2} \mathbf{b}^T \cdot \mathbf{A}^{-1} \cdot \mathbf{b}$.
- Dopačítejte propagátor volné částice.

G.3 Dráhový integrál částice v homogenním poli

Mějme jednorozměrný případ částice pohybující se v homogenním poli. Systém je popsán Hamiltoniánem

$$\hat{H} = \frac{1}{2M} \hat{p}^2 - F\hat{x} \quad (7.3.1)$$

1. Rozložme libovolnou trajektorii $x(t)$ s okrajovými podmínkami $x(t_{i,f}) = x_{i,f}$ na

$$x(t) = x_{kl}(t) + x_q(t), \quad (7.3.2)$$

kde x_{kl} splňuje výše uvedené okrajové podmínky a pro x_q platí $x_q(t_{i,f}) = 0$.

Nalezněte akci takovéto trajektorie pro případ obecného potenciálu $V(x)$. Využijte přitom toho integrace per partes a skutečnosti, že klasická trajektorie je řešením klasické pohybové rovnice.

2. Nalezněte totéž pro případ homogenního pole a ukažte, že výraz pro trajektorii $x_q(t)$ je stejný jako v případě volné částice.
3. Nalezněte klasickou trajektorii $x_{kl}(t)$ částice pohybující se v homogenním poli při okrajových podmínkách $x_{kl}(t_i) = x_i$, $x_{kl}(t_f) = x_f$ a spočítejte její akci.
4. Napište výraz pro diferenciální operátor odpovídající matici A z Gaussovského integrálu (7.1.1).

Jelikož je tento operátor stejný jako v případě volné částice, bude normalizační faktor dráhového integrálu v obou případech stejný. Oba výrazy se budou lišit akcí v exponenciále.

5. Vyjádřete finální tvar propagátoru.

G.4 Propagátor harmonického oscilátoru

Cílem této úlohy je spočítat propagátor jednorozměrného harmonického oscilátoru daného Hamiltoniánem

$$\hat{H} = \frac{1}{2M} \hat{p}^2 + \frac{1}{2} M \Omega^2 \hat{x}^2. \quad (7.4.1)$$

Budeme sledovat stejné kroky jako v případě propagátoru částice v homogenním poli. Potenciál je kvadratický, propagátor bude tedy úměrný

$$G(x_f, t_f; x_i, t_i) \sim e^{\frac{i}{\hbar} S_{kl}} \quad (7.4.2)$$

(označili jsme $S_{kl} \equiv S \left[x_{kl}(t) \right]_{x_{kl}(t_{i,f})=x_{i,f}}$), což je akce pro klasickou trajektorii s okrajovými podmínkami $x_{kl}(t_i) = x_i$, $x_{kl}(t_f) = x_f$.

1. Nalezněte klasickou trajektorii $x_{kl}(t)$ částice pohybující se v poli harmonického oscilátoru při okrajových podmínkách $x_{kl}(t_i) = x_i$, $x_{kl}(t_f) = x_f$.
2. Nalezněte rychlosti $v_i = \dot{x}_{kl}(t_i)$, $v_f = \dot{x}_{kl}(t_f)$.
3. Rozložme libovolnou trajektorii $x(t)$ s okrajovými podmínkami $x(t_{i,f}) = x_{i,f}$ na

$$x(t) = x_{kl}(t) + x_q(t), \quad (7.4.3)$$

kde x_{kl} splňuje výše uvedené okrajové podmínky a pro x_q platí $x_q(t_{i,f}) = 0$. Nalezněte diferenciální operátor \hat{A} , který odpovídá matici A Gaussovské integrace, a na prostoru funkcí x_q nalezněte jeho vlastní čísla.

4. Jelikož $\det \frac{\hat{A}}{2\pi}$ nekonverguje, regularizujte jej vydělením determinantem volné částice $\det \frac{\hat{A}_0}{2\pi}$, kde $\hat{A}_0 = \frac{i}{\hbar} M \frac{d^2}{dt^2}$, a dopočítejte. Můžete využít vztah

$$\prod_{k=1}^{\infty} \left[1 - \left(\frac{x}{k\pi} \right)^2 \right] = \frac{\sin x}{x}. \quad (7.4.4)$$

5. Ukažte, že porovnáním s propagátorem volné částice, kde má diferenciální operátor tvar \hat{A}_0 , můžete propagátor harmonického oscilátoru vyjádřit ve tvaru

$$G(x_f, t_f; x_i, t_i) = \sqrt{\frac{M}{2i\pi\hbar(t_f - t_i)}} \sqrt{\frac{\det \frac{\hat{A}_0}{2\pi}}{\det \frac{\hat{A}}{2\pi}}} e^{\frac{i}{\hbar} S[x_{kl}(t)]}$$

Dosad'te, dopočítejte akci klasické trajektorie a napište konečný výsledek.

Díky regularizaci máme v rukou prostředek, který výrazně zjednodušuje výpočet dráhového integrálu. Nemusíme již uvažovat jeho diskrétní vyjádření.


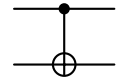
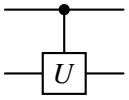
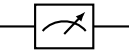
Dalším krokem je *Van Vleckova formule*, která říká, že propagátor Gaussovského systému lze vyjádřit jen pomocí akce klasické trajektorie

$$G(\mathbf{x}_f, t_f; \mathbf{x}_i, t_i) = \sqrt{\det \left(\frac{-1}{2i\pi\hbar} \frac{\partial^2 S_{kl}}{\partial \mathbf{x}_i \partial \mathbf{x}_f} \right)} \exp \left(\frac{i}{\hbar} S_{kl} \right). \quad (7.4.5)$$

Ukažte, že Van Vleckova formule reprodukuje propagátor volné částice, propagátor částice v homogenním poli a propagátor částice v poli harmonického oscilátoru.

H Kvantové počítání

H.1 Kvantová hradla

Hradlo	Symbol	Maticové vyjádření
Hadamard		$H = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}$
Kontrolované NOT		$C_{NOT} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$
Kontrolovaná unitární transformace		
Měření		

Tabulka 3: Nejčastěji používaná hradla a objekty.

Odkazy

- ¹P. Cejnar, *Kvantová teorie*, <https://www-ucjf.troja.mff.cuni.cz/cejnar/prednasky/qm.html>, [online].
- ²A. Z. Capri, *Problems and Solutions in Nonrelativistic Quantum Mechanics* (World Scientific Publishing, Singapore, pros. 2002), 512 s.
- ³J.-L. Basdevant a J. Dalibard, *The Quantum Mechanics Solver, How to Apply Quantum Theory to Modern Physics*, Advanced Texts in Physics (Springer, 2000), s. 240.
- ⁴K. Tamvakis, *Problems and Solutions in Quantum Mechanics | Quantum physics, quantum information and quantum computation*, en (Cambridge University Press, 2005), s. 342.
- ⁵M. Čížek, NOFY076 - *Kvantová teorie I*, <https://utf.mff.cuni.cz/~cizek/KvantovkaI/NOFY076.htm>, [online].
- ⁶M. Čížek, NOFY079 - *Kvantová teorie II*, <http://utf.mff.cuni.cz/~cizek/KvantovkaII/NOFY079.htm>, [online].
- ⁷F. Casas a A. Murua, „An efficient algorithm for computing the Baker–Campbell–Hausdorff series and some of its applications“, [Journal of Mathematical Physics](#) **50**, 033513 (2009).
- ⁸M. Cini, F. Fucito a M. Sbragaglia, *Solved Problems in Quantum and Statistical Mechanics* (Springer Milan, břez. 2012), 399 s.
- ⁹R. D. L. Kronig a W. G. Penney, „Quantum mechanics of electrons in crystal lattices“, [Proceedings of the Royal Society of London. Series A](#) **130**, 499–513 (1931).
- ¹⁰J. Formánek, *Úvod do kvantové teorie* (Academia, Praha, 2004).
- ¹¹E. B. Manoukian, *Quantum Theory* (Springer Netherlands, říj. 2006), 1032 s.
- ¹²P. Cejnar, *A Condensed Course of Quantum Mechanics* (Karolinum Press, Prague, 2013).
- ¹³H. Margenau, „Van der waals forces“, [Reviews of Modern Physics](#) **11**, 1–35 (1939).
- ¹⁴S. A. Coon a B. R. Holstein, „Anomalies in quantum mechanics: The $1/r^2$ potential“, [American Journal of Physics](#) **70**, 513–519 (2002).
- ¹⁵W. M. Frank, D. J. Land a R. M. Spector, „Singular Potentials“, [Reviews of Modern Physics](#) **43**, 36–98 (1971).
- ¹⁶M. A. Caprio, „Application of the coherent state formalism to multiply excited states“, [Journal of Physics A: Mathematical and General](#) **38**, 6385–6392 (2005).
- ¹⁷M. V. Berry a K. E. Mount, „Semiclassical approximations in wave mechanics“, [Reports on Progress in Physics](#) **35**, 315–397 (1972).
- ¹⁸B. R. Holstein, „Understanding alpha decay“, [American Journal of Physics](#) **64**, 1061–1071 (1996).
- ¹⁹H. Geiger a J. Nuttall, „LVII. The ranges of the α particles from various radioactive substances and a relation between range and period of transformation“, [The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science](#) **22**, 613–621 (1911).
- ²⁰R. E. Langer, „On the Connection Formulas and the Solutions of the Wave Equation“, [Phys. Rev.](#) **51**, 669–676 (1937).
- ²¹M. Kac, „Can One Hear the Shape of a Drum?“, [The American Mathematical Monthly](#) **73**, 1 (1966).
- ²²B. Podolsky, „Quantum-Mechanically Correct Form of Hamiltonian Function for Conservative Systems“, [Physical Review](#) **32**, 812–816 (1928).
- ²³K. Simon, „Quantization in Curvilinear Coordinates“, [American Journal of Physics](#) **33**, 60–61 (1965).
- ²⁴G. R. Gruber, „Quantization in generalized coordinates“, [Foundations of Physics](#) **1**, 227–234 (1971).
- ²⁵B. Leaf, „Momentum operators for curvilinear coordinate systems“, [American Journal of Physics](#) **47**, 811–813 (1979).

- ²⁶B. Leaf, „Curvilinear coordinate and momentum operators in configuration representation“, [Foundations of Physics](#) **10**, 581–599 (1980).
- ²⁷H. Essén, „Quantization and independent coordinates“, [American Journal of Physics](#) **46**, 983–988 (1978).
- ²⁸R. D. L. Kronig a I. I. Rabi, „The Symmetrical Top in the Undulatory Mechanics“, [Physical Review](#) **29**, 262–269 (1927).
- ²⁹S. Nouri, „Generalized coherent states for the d-dimensional Coulomb problem“, [Physical Review A](#) **60**, 1702–1705 (1999).