SERIA 10
ROZWIĄZANIA

MECHANIKA KWANTOWA ‘26

Zadanie 1

Treść: Rozważamy cząstkę o spinie $S = 1$, która żyje w trójwymiarowej przestrzeni Hilberta rozpiętej przez stany $|m\rangle$ spełniające $\hat{S}_z|m\rangle = \hbar m|m\rangle$ oraz $\hat{S}^2|m\rangle = 2\hbar^2|m\rangle$. Niech Hamiltonian cząstki bez zaburzenia ma postać

$$H_0^{ij} = \begin{pmatrix} E_1 & 0 & 0 \\ 0 & E_0 & 0 \\ 0 & 0 & E_{-1} \end{pmatrix}, \qquad E_1 > E_0 > E_{-1}. \tag{1}$$

Układ poddany jest zaburzeniu pochodzącemu od pola magnetycznego obracającego się w płaszczyźnie $x - y$. Hamiltonian zaburzenia wyraża się przez

$$\hat{V}(t) = \gamma \left(\cos\omega t \hat{S}_x + \cos\omega t \hat{S}_y \right). \tag{2}$$

a) Przedstaw stan w postaci

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{m=-1}^{1} c_m(t) e^{-iE_m t/\hbar}|m\rangle \tag{3}$$

i wyznacz układ równań różniczkowych na c_m opisujących ścisłą ewolucję stanu.

b) Wyznacz perturbatywne rozwinięcie $c_m(t)$ w potęgach γ postulując

$$c_m(t) = \sum_{p=0}^{\infty} c_m^{(p)}(t)\gamma^p. \tag{4}$$

Zakładając że w $t = 0$ układ znajduje się w stanie $|-1\rangle$, odpowiedz na pytanie: czy w pierwszym rzędzie rachunku zaburzeń może zajść przejście do $|+1\rangle$? Odpowiedź uzasadnij.

Rozwiązanie: Postulujemy rozwiązanie w postaci

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{m=-1}^{1} c_m(t) e^{-iE_m t/\hbar}|m\rangle, \tag{5}$$

gdzie E_m to energie układu niezaburzonego. By zapisać zależne od czasu równanie Schrödingera najpierw liczymy prawą stronę, to znaczy pochodną stanu. Mamy

$$i\hbar\partial_t|\psi(t)\rangle = i\hbar \sum_{m=-1}^{1} \dot{c}_m(t) e^{-iE_m t/\hbar}|m\rangle + \sum_{m=-1}^{1} E_m c_m(t) e^{-iE_m t/\hbar}|m\rangle. \tag{6}$$

Następnie działamy na stan Hamiltonianem, czyli

$$\left(\hat{H}_0 + \hat{V}(t)\right)|\psi(t)\rangle = \sum_{m=-1}^{1} E_m c_m(t) e^{-iE_m t/\hbar}|m\rangle + \sum_{m=-1}^{1} c_m(t) e^{-iE_m t/\hbar}\hat{V}(t)|m\rangle. \tag{7}$$

Przyrównujemy obie strony i skracamy człony swobodne, dostając, po zrzutowaniu na stan $|n\rangle$,

$$i\hbar\dot{c}_n(t) = \sum_{m=-1}^{1} c_m(t) e^{-i(E_n - E_m)t/\hbar}\langle n|\hat{V}(t)|m\rangle. \tag{8}$$

By wyznaczyć równania na wszystkie trzy współczynniki $c_{0/pm1}$ wygodnie jest zapisać potencjał zaburzający w języku operatorów podnoszących i opuszczających rzut spinu, czyli

$$\hat{V}(t) = \frac{\gamma}{2}\left(e^{-i\omega t}\hat{S}_+ + e^{-i\omega t}\hat{S}_-\right). \tag{9}$$

Wtedy mamy

$$\langle n|\hat{V}(t)|m\rangle = \frac{\hbar\gamma}{2}\left(e^{-i\omega t}\sqrt{2 - m(m+1)}\delta_{n,m+1} + e^{-i\omega t}\sqrt{2 - m(m-1)}\delta_{n,m-1}\right). \tag{10}$$

Oznacza to, że kolejne współczynniki sprzęgają się ze sobą w sposób następujący

$$i\dot{c}_1(t) = \frac{\gamma}{\sqrt{2}}e^{i(\omega_o - \omega)t}c_0(t) \tag{11a}$$

$$i\dot{c}_0(t) = \frac{\gamma}{\sqrt{2}}\left[e^{i(\omega'_o - \omega)t}c_{-1}(t) + e^{i(-\omega_o + \omega)t}c_1(t)\right] \tag{11b}$$

$$i\dot{c}_{-1}(t) = \frac{\gamma}{\sqrt{2}}e^{i(-\omega'_o + \omega)t}c_0(t), \tag{11c}$$

gdzie wprowadziliśmy

$$\omega_0 = \frac{E_1 - E_0}{\hbar}, \quad \omega'_0 = \frac{E_0 - E_{-1}}{\hbar}. \tag{12}$$

Następnie definiujemy

$$\Delta\omega = \omega_0 - \omega, \quad \Delta\omega' = \omega'_0 - \omega. \tag{13}$$

by zapisać zbiór równań w bardziej zwartej postaci

$$i\dot{c}_1(t) = \frac{\gamma}{\sqrt{2}}e^{i\Delta\omega t}c_0(t) \tag{14a}$$

$$i\dot{c}_0(t) = \frac{\gamma}{\sqrt{2}}\left[e^{i\Delta\omega' t}c_{-1}(t) + e^{-i\Delta\omega t}c_1(t)\right] \tag{14b}$$

$$i\dot{c}_{-1}(t) = \frac{\gamma}{\sqrt{2}}e^{-i\Delta\omega' t}c_0(t). \tag{14c}$$

W kolejnym kroku poszukujemy rozwiązań tych równań w rachunku zaburzeń. Postulujemy, zgodnie z treścią zadania,

$$c_m(t) = \sum_{p=0}^{\infty} c_m^{(p)}(t)\gamma^p, \tag{15}$$

po czym podstawiamy te wyrażenia do równań (14) i porównujemy stronami człony przy tych samych potęgach γ, otrzymując

$$i\dot{c}_1^{(p)}(t) = \frac{e^{i\Delta\omega t}}{\sqrt{2}}c_0^{(p-1)}(t) \tag{16a}$$

$$i\dot{c}_0^{(p)}(t) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[e^{i\Delta\omega' t}c_{-1}^{(p-1)}(t) + e^{-i\Delta\omega t}c_1^{(p-1)}(t)\right] \tag{16b}$$

$$i\dot{c}_{-1}^{(p)}(t) = \frac{e^{-i\Delta\omega' t}}{\sqrt{2}}e^{-i\Delta\omega' t}c_0^{(p-1)}(t). \tag{16c}$$

Przyjmując że w $t = 0$ cząstka jest w stanie $|-1\rangle$, otrzymujemy w wiodącym rzędzie

$$c_{-1}^{(0)}(t) = 1, \quad c_0^{(0)}(t) = c_1^{(0)}(0) = 0. \tag{17}$$

W kolejnym rzędzie mamy

$$c_1^{(1)}(t) = c_1^{(1)}(0) = 0 \tag{18}$$

oraz

$$\dot{c}_0^{(1)}(t) = \frac{e^{i\Delta\omega' t}}{\sqrt{2}} \quad \Rightarrow \quad c_0^{(1)}(t) = \frac{1 - e^{i\Delta\omega' t}}{\sqrt{2}\Delta\omega'}. \tag{19}$$

Zatem w najniższym nietrywialnym rzędzie stan jest postaci

$$|\psi(t)\rangle = e^{-iE_{-1}t/\hbar}|-1\rangle + \frac{1-e^{i\Delta\omega' t}}{\sqrt{2}\Delta\omega'}e^{-iE_0t/\hbar}|0\rangle + \dots. \tag{20}$$

Zatem w najniższym rzędzie możliwe jest przejście do $|0\rangle$, ale już nie do $|1\rangle$, co wynika bezpośrednio z tego, że zaburzenie jest liniowe w operatorach $\hat{S}_\pm$.

Zadanie 2

Treść: Rozważmy dwie cząstki o spinie 1/2 każda i o przeciwnych ładunkach $\pm q$ oddziałujące z zewnętrznym polem magnetycznym skierowanym wzdłuż osi z, które adiabatycznie jest włączane / wyłączane na odcinku $t \in]-\infty, \infty[$. Niech Hamiltonian tego pola ma postać

$$\hat{H}(t) = \frac{\mu B(t)}{\hbar}\left(\hat{S}_{1,z} - \hat{S}_{2,z}\right), \quad \mu = \frac{gq\hbar}{2mc}. \tag{21}$$

Początkowo układ znajduje się w stanie trypletowym $|10\rangle$.

a) Wyznacz bez przybliżeń stan układu dla $t \to \infty$. Bez dokonywania szczegółowych obliczeń uzasadnij, dlaczego prawdopodobieństwa przejścia do stanów $|1 \pm 1\rangle$ znikają. Wyznacz prawdopodobieństwo przejścia do $|00\rangle$ i pokaż, że zależy ono tylko od całki

$$\int_{-\infty}^{\infty} dt\, B(t). \tag{22}$$

b) Wyznacz prawdopodobieństwo przejścia do $|00\rangle$ w pierwszym rzędzie rachunku zaburzeń. Porównując z pełnym rozwiązaniem, przedstaw warunki stosowalności przybliżenia do pierwszego rzędu.

Rozwiązanie:
W ogólności stan dwu cząstek o spinie 1/2 każda można rozpisać w bazie całkowitego momentu pędu (i rzutu na oś z) jako

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{M=-S}^{S} C_{SM}(t)|SM\rangle. \tag{23}$$

Dzięki temu łatwo zapisać zależne od czasu równanie Schrödingera , czyli

$$\sum_{s'=0}^{1}\sum_{M'=-S'}^{S'} i\hbar\dot{C}_{S'M'}(t)|S'M'\rangle = \frac{\mu B(t)}{\hbar}\sum_{s=0}^{1}\sum_{M=-S}^{S} C_{SM}(t)\left(\hat{S}_{1,z} - \hat{S}_{2,z}\right)|SM\rangle. \tag{24}$$

Operator działający z prawej strony komutuje z $\hat{S}_z$, zatem obłożenie stronami stanem $|SM\rangle$ "wyprodukuje" $\delta_{MM'}$. Niemniej sprzęga on różnie S, zatem musimy uwzględnić tę możliwość. Mamy

$$\left(\hat{S}_{1,z} - \hat{S}_{2,z}\right)|1\pm 1\rangle = 0, \quad \left(\hat{S}_{1,z} - \hat{S}_{2,z}\right)|10\rangle = 0\hbar|00\rangle, \quad \left(\hat{S}_{1,z} - \hat{S}_{2,z}\right)|00\rangle = 0\hbar|10\rangle. \tag{25}$$

Zatem $C_{1\pm1}$ nie ewoluują. Natomiast pozostałe przypadki są postaci

$$\dot{C}_{00}(t) = -i\frac{\mu B(t)}{\hbar}C_{10}(t), \quad \dot{C}_{10}(t) = -i\frac{\mu B(t)}{\hbar}C_{00}(t). \tag{26}$$

Najlepiej stworzyć kombinacje $C_\pm(t) = C_{10}(t) \pm C_{00}(t)$, i dla nich dostajemy parę rozsprzegniętych równań

$$\dot{C}_\pm(t) = \mp i\frac{\mu B(t)}{\hbar}C_\pm(t) \quad \Longrightarrow \quad C_\pm(t) = C_\pm(0)e^{\mp i\frac{\mu}{\hbar}\int_0^t d\tau B(\tau)} = C_\pm(0)e^{\mp i\alpha(t)}. \tag{27}$$

Stąd rozwiązania na współczynniki, przy założeniu warunku początkowego na przykład postaci $C_{10}(0) = 1$ daje stan

$$|\psi(t)\rangle = C_{10}(t)|10\rangle + C_{00}(t)|00\rangle = \cos\alpha(t)|10\rangle - i\sin\alpha(t)|00\rangle. \tag{28}$$

Prawdopodobieństwo przejścia $|10\rangle \to |00\rangle$ w $t \to \infty$ ma postać

$$\mathcal{P} = |\langle 00|\psi(t)\rangle|^2 = \sin^2\left(\frac{\mu}{\hbar}\int_0^\infty d\tau B(\tau)\right). \tag{29}$$

Stosując zależny od czasu rachunek zaburzeń otrzymujemy amplitudę przejścia w pierwszym rzędzie

$$A^{(1)} = -\frac{i}{\hbar}\int_0^\infty dt\langle 00|\hat{V}|10\rangle. \tag{30}$$

Na podstawie powyższych rozważań, widać, że prawdopodobieństwo w pierwszym rzędzie jest postaci

$$\mathcal{P}^{(1)} = |\frac{\mu}{\hbar}\int_0^\infty d\tau B(\tau)|^2, \tag{31}$$

zatem jest to, po prostu, rozwinięcie pełnego wyniku do najniższego rzędu, i stosuje się rzecz jasna, gdy spełnione jest $\mathcal{P}^{(1)} \ll 1$.

Zadanie 3

Treść: Elektron w atomie wodoru znadjuje sie początkowo w stanie 1s i poddany jest zaburzeniu postaci

$$\hat{V} = e\mathcal{E}_0 z e^{-\frac{t}{\tau}}. \tag{32}$$

a) Wyznacz w pierszym rzędzie rachunku zaburzeń prawdopodobieństwa przejścia do stanów $n = 2$.

b) Wyznacz w pierszym rzędzie rachunku zaburzeń prawdopodobieństwo przejścia do 2p dla $t \gg \tau$.

Rozwiązanie:

a) Amplituda przejścia ze stanu $|100\rangle$ do stanu $|2lm\rangle$ w pierwszytm rzędzie rachunku zaburzeń dana jest wyrażeniem postaci

$$A_{fi} = -\frac{i}{\hbar}\int_0^t dt' e^{i(\epsilon_f-\epsilon_i)t'/\hbar}\langle f|\hat{V}(t')|i\rangle = -\frac{i}{\hbar}e\mathcal{E}_0\int_0^t dt' e^{-\frac{t'}{\tau}}e^{i(\epsilon_f-\epsilon_i)t'/\hbar}\langle 2lm|\hat{z}|100\rangle. \tag{33}$$

Widać, że wyrażenie to separuje się na całkę po t' oraz na element macierzowy operatora $\hat{z}$. Ponieważ w reprezentacji położeniowej z jest asymetryczne ze względu na odbicie, zaś funkcje falowe $\psi_{100}(\vec{r})$ oraz $\psi_{200}(\vec{r})$ są symetryczne, więc od razu widać, że zachodzi

$$\langle 200|\hat{z}|100\rangle = 0. \tag{34}$$

Widzimy również, że nie można otrzymać przejścia do stanów o $m \neq 0$, gdyż całka po ϕ da zero. Zatem jedyna niezerowa amplituda w pierwszym rzędzie to ta związana z przejściem do $|210\rangle$.

b) Następnie wyznaczamy tę amplitudę dla $t \gg \tau$. Liczymy osobno całkę po czasie i całkę po przestrzeni. Ta pierwsza daje

$$\lim_{t\gg\tau}\int_0^t dt' e^{\beta t'} = -\frac{1}{\beta}, \quad \beta = \frac{i\omega_{12}\tau - 1}{\tau}, \quad \omega_{12} = (\epsilon_2 - \epsilon_1)\hbar. \tag{35}$$

Z kolei całka przestrzenna jest postaci

$$\int d^3r\psi^*_{210}(\vec{r})r\cos\theta\psi_{100}(\vec{r}) = \int drR_{21(r)}R_{10}(r)r^3\int d\Omega\cos\theta Y^*_{20}(\Omega)Y_{10}(\Omega) \tag{36}$$

Podstawiając wyrażenia na funkcje falowe, otrzymujemy

$$\langle 210|\hat{z}|100\rangle = \frac{2^8}{3^5}\frac{a_0}{\sqrt{2}}. \tag{37}$$

Stąd prawdopodobieństwo przejścia jest postaci

$$\mathcal{P}_{fi}(\tau) = |A_{fi}|^2 = \frac{2^{15}}{3^{10}} \left(\frac{a_0^2 e \mathcal{E}_0}{\hbar} \right)^2 \frac{\tau^2}{(\omega_{12}\tau)^2 + 1}. \tag{38}$$

Zadanie 4

Treść: Elektron o masie m i ładunku $-e$ znajduje się w stanie podstawowym potencjału harmonicznego o częstości ω_0. Poddany jest zaburzeniu pochodzącemu od gwałtownie włączonego i wyłączonego pola elektrycznego,

$$\mathcal{E}(t) = \mathcal{E}_0[\theta(t) - \theta(t-\tau)]. \tag{39}$$

Jaki jest dominujący wkład do prawdopodobieństwa znalezienia elektronu w pierwszym i drugim stanie wzbudzonym dla $t \geqslant \tau$.

Rozwiązanie:
W pierwszym rzędzie mamy

$$\mathcal{P}_{10}^{(1)}(t \geqslant \tau) = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_0^\tau dt e^{-i\omega_{10}t/\hbar} \langle 1|\hat{V}(t)|0\rangle \right|^2, \quad \omega_{10} = \frac{E_1 - E_0}{\hbar}. \tag{40}$$

podstawiamy zaburzenie zgodnie z treścią zadania, czyli

$$\hat{V}(t) = e\mathcal{E}(t)x = e\mathcal{E}_0 x[\theta(t) - \theta(t-\tau)]. \tag{41}$$

Następnie zauważamy, że całka daje niezerowy wkład tylko dla $t \in [0, \tau]$ i pole jest wtedy stałe. Zaś całka przestrzenna jest trywialna, gdyż

$$\langle 1|\hat{x}|0\rangle = \frac{a_{ho}}{\sqrt{2}}, \tag{42}$$

co wynika z wyrażenia $\hat{x}$ przez operatory kreacji i anihilacji. Zatem prawdopodobieństwo wynosi

$$\mathcal{P}_{10}^{(1)}(t \geqslant \tau) = \left(\frac{e\mathcal{E}_0}{\hbar} \right)^2 \frac{\hbar}{2m\omega_0} \left[\frac{\sin\left(\frac{\omega_{10}\tau}{2}\right)}{\frac{\omega_{10}}{2}} \right]^2 \tag{43}$$

Widać też od razu, że w pierwszym rzędzie nie może zajść przejście $|0\rangle \to |1\rangle$, gdyż operator zaburzenia jest liniowy w $\hat{a}/\hat{a}^{dagger}$, a zatem sprzęga tylko sąsiednie stany.

Niemniej, w drugim rzędzie mamy wyrażenie na amplitudę prawdopowdobieństwa

$$A_{20}^{(2)}(t \geqslant \tau) = \left(-\frac{i}{\hbar} \right)^2 \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 e^{-iE_2(t-t_1)/\hbar} \langle 2|\hat{V}(t_1) e^{-i\hat{H}_0(t_1-t_2)/\hbar} \hat{V}(t_2)|0\rangle e^{-iE_0 t_2/\hbar}. \tag{44}$$

Następnie rozważamy element macierzowy, który jest pod całką i korzystamy z rozkładu jedynki na stany własne operatora $\hat{H}_0$, co daje

$$\langle 2|\hat{V}(t_1) e^{-i\hat{H}_0(t_1-t_2)/\hbar} \hat{V}(t_2)|0\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-iE_n(t_1-t_2)/\hbar} \langle 2|\hat{V}(t_1)|n\rangle\langle n|\hat{V}(t_2)|0\rangle. \tag{45}$$

Jedyny nieznikający wkład jest dla $n = 1$, zatem element ten wynosi

$$\sum_{n=0}^{\infty} e^{-iE_n(t_1-t_2)/\hbar} \langle 2|\hat{V}(t_1)|n\rangle\langle n|\hat{V}(t_2)|0\rangle = e^{-iE_1(t_1-t_2)/\hbar} (e\mathcal{E}_0)^2 \frac{\hbar}{2m\omega_0}. \tag{46}$$

Z kolei wykonanie całki po czasie daje

$$\begin{aligned} &\int_0^t dt_1 e^{i\omega_0 t_1} [\theta(t_1) - \theta(t_1 - \tau)] \int_0^{t_1} dt_2 e^{i\omega_0 t_2} [\theta(t_2) - \theta(t_2 - \tau)] = \int_0^\tau dt_1 e^{i\omega_0 t_1} \frac{e^{i\omega_0 t_1} - 1}{i\omega_0} = \\ &= -\frac{2i}{\omega_0^2} e^{i\omega_0\tau/2} \sin(\omega_0\tau/2) \left[e^{i\omega_0\tau/2} \cos(\omega_0\tau/2) - 1 \right]. \end{aligned} \tag{47}$$

Stąd pełne wyrażenie na prawdopodobieństwo przejścia $|0\rangle \to |2\rangle$ w drugim rzędzie rachunku zaburzeń ma postać

$$P_{20}^{(2)}(t \geqslant \tau) = \left| A_{20}^{(2)}(t \geqslant \tau) \right|^2 = 2 \left(\frac{e\mathcal{E}_0}{\hbar\omega_0} \right)^4 \left(\frac{\hbar}{m\omega_0} \right)^2 \sin^4(\omega_0\tau/2). \tag{48}$$