Seria IV zadań z Mechaniki Kwantowej II B do wykładu dr. hab. Krzysztofa Byczuka

r.p. 2008/2009

Zadanie 1 — bozony i fermiony w jednowymiarowej studni

Załóżmy, że cząstki są pozbawione twardego rdzenia, nieoddziałujące i bezspinowe (względnie mają taki sam rzut spinu na oś kwantyzacji) i nas jedynie część orbitalna funkcji falowej. Proszę napisać jak będą wyglądały unormowane fale płaskie $\phi_k(x)$ w studni szerokości L i za ich pomocą skonstruować dwucząstkowe funkcje falowe $\Psi^{B/F}_{k,k'}(r_1, r_2)$ dla przypadku bozonowego/fermionowego, a następnie obliczyć gęstość prawdopodobieństwa znalezienia cząstek w odległości $|r_1 - r_2| = R_0$. A co by było dla dwóch fermionów o spinie 1/2, których sumaryczny rzut spinu na oś kwantyzacji wynosi 0 — dlaczego odpowiedź nie jest już jednoznaczna?

Zadanie 2 — atom helu

Stan podstawowy atomu He i sześć z jego stanów wzbudzonych można w przybliżeniu opisać umieszczając elektrony na czterech ortonormalnych spinorbitalach $\phi_{1s\uparrow}$, $\phi_{1s\downarrow}$, $\phi_{2s\uparrow}$, $\phi_{2s\downarrow}$ i antysymetryzując powstałą funkcję falową. Definiujemy $\phi_{1s\uparrow}(\vec{r}, \sigma) = \phi_{1s}(\vec{r})\chi_\uparrow(\sigma)$, gdzie ϕ_{1s} jest funkcją przestrzenną, a $\chi_\uparrow$ — spinową. Wypisz w postaci wyznaczników Slatera cztery najprostsze funkcje. Pozostałe dwie dane są wzorami

$$\Psi^{\pm}_{1s2s}(1,2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} \phi_{1s\uparrow}(1) & \phi_{2s\downarrow}(1) \\ \phi_{1s\uparrow}(2) & \phi_{2s\downarrow}(2) \end{vmatrix} \pm \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} \phi_{1s\downarrow}(1) & \phi_{2s\uparrow}(1) \\ \phi_{1s\downarrow}(2) & \phi_{2s\uparrow}(2) \end{vmatrix} \right],$$

gdzie $f(1)$ oznacza, że funkcja f zależy od współrzędnych cząstki pierwszej.

1. Pokaż, że funkcje $\Psi^{\pm}_{1s2s}$ są znormalizowane i wzajemnie ortogonalne.
2. Które z sześciu otrzymanych funkcji odpowiadają stanom singletowym, a które trypletowym? Kiedy widać to od razu? W niektórych wypadkach, aby udzielić odpowiedzi przydatny będzie operator całkowitego spinu pary cząstek $\hat{S}^2 = [3/2 + 2s^z(1)s^z(2) + s^+(1)s^-(2) + s^-(1)s^+(2)]$, gdzie jednocząstkowe operatory s działają tak: $s^z(i)\chi_\uparrow(j) = (1/2)\delta_{i,j}$, $s^+(i)\chi_\uparrow(j) = 0$, $s^-(i)\chi_\downarrow(j) = \chi_\uparrow(j)\delta_{i,j}$ itd.
3. Przepisz funkcje $\Psi^{\pm}_{1s2s}$ jako iloczyny funkcji przestrzennych i spinowych, i porównaj ich zachowane się przy permutacji cząstek z zachowaniem pozostałych czterech funkcji. Czy widać jakieś analogie?
4. Załóżmy, że chcemy poprawić funkcję falową stanu podstawowego przedstawiając ją jako kombinację liniową funkcji wyznacznikowych. Które z powyższych wyznaczników na pewno można wykluczyć z takich obliczeń (będziemy stosowali nierelatywistyczny hamiltonian dla atomu helu)?

Zadanie 3 — operator antysymetryzacji

Zdefiniujmy działanie operatora permutacji cząstek P_σ odpowiadającego permutacji $\sigma \in S_N$ na N-cząstkową funkcję falową Ψ w następujący sposób: $P_\sigma\Psi(1, 2, \dots N) = \Psi(\sigma(1), \sigma(2), \dots \sigma(N))$, gdzie $\sigma(k)$ oznacza współrzędne cząstki o numerze, który permutacja σ stawia na k-tym miejscu.

Działanie operatora antysymetryzacji $\mathcal{A}$ na funkcje N-cząstkowe określa się wzorem $\mathcal{A}\Psi = (1/\sqrt{N!}) \sum_{\sigma \in S_N} \mathrm{sgn}\,(\sigma) P_\sigma \Psi$. Wykaż, że:

1. dla operatora antysymetryzacji N cząstek $\mathcal{A}^2 = \sqrt{N!}\mathcal{A}$;
2. $\mathcal{A} = \mathcal{A}^\dagger$;
3. $\mathcal{A}$ działając na iloczynową funkcję falową zbudowaną z różnych od siebie spinorbitali, zachowuje jej normalizację, ale nie jest unitarny;
4. jeśli $\mathcal{O}$ jest operatorem całkowicie symetrycznym ze względu na przestawienia cząstek to $[\mathcal{A}, \mathcal{O}] = 0$ (co niesłychanie upraszcza i tak obszerne rachunki z użyciem wyznaczników Slatera).