

MECHANIKA KWANTOWA IB ĆW. #2 16.10.2018

① Operator (anty-)symetryzacji jako operator rzutowy

Pokazać, że operator symetryzacji/antysymetryzacji

$$P_{\left\{ \begin{smallmatrix} B \\ F \end{smallmatrix} \right\}} \psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) = \frac{1}{N!} \sum_P \zeta^P \psi(\vec{r}_{P1}, \dots, \vec{r}_{PN})$$

$\uparrow$ suma po permutacjach zbioru $\{1, \dots, N\}$

$\zeta = \begin{cases} -1, & \text{fermiony} \\ +1, & \text{bosony} \end{cases}$

jest operatorem rzutowym.

Rozwiązanie:

$$\begin{aligned} P_{\left\{ \begin{smallmatrix} B \\ F \end{smallmatrix} \right\}}^2 \psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) &= \frac{1}{N!} \frac{1}{N!} \sum_P \sum_{P'} \zeta^P \zeta^{P'} \psi(\vec{r}_{P1}, \dots, \vec{r}_{PN}) = \\ &= \left\{ \begin{array}{l} \zeta^{P'} \zeta^P = \zeta^{P'P} - \text{znak permutacji}, \\ Q = P'P - \text{złożenie permutacji}, \end{array} \right. \sum_{P'} \sum_P \rightarrow \sum_P \sum_Q \left\{ \right. \\ &= \frac{1}{N!} \sum_P \left(\frac{1}{N!} \sum_Q \zeta^Q \psi(\vec{r}_{Q1}, \dots, \vec{r}_{QN}) \right) = \\ &= P_{\left\{ \begin{smallmatrix} B \\ F \end{smallmatrix} \right\}} \psi \frac{1}{N!} \underbrace{\sum_P 1}_{\substack{\text{liczba} \\ \text{permutacji} \\ \text{zbioru } \{1, \dots, N\} = N!}} = P_{\left\{ \begin{smallmatrix} B \\ F \end{smallmatrix} \right\}} \psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) \quad \square \end{aligned}$$

Komentarz:

Operator symetryzacji / antysymetryzacji
zrzuca N -ciałową przestrzeń Hilberta

$$\mathcal{H}_N \equiv \bigotimes_{i=1}^N \mathcal{H}_1^{(i)}$$

↑ 1-ciałowa przestrzeń Hilberta

na podprzestrzeni symetrycznej / antysymetrycznej
odpowiadającej stanom bozonowym / fermionowym.

W przypadku układów o wymierności

$d < 3$ pojawiają się inne możliwości.

Na przykład dla $d=2$ istnieją cząstki

opisywane statystykami

zw. anyonami. Więcej na ten temat

można dowiedzieć się z artykułu

F. Wilczek, "Quantum Mechanics of

Fractional-Spin Particles",

Phys. Rev. Lett. 49, 957 (1982).

② Rozpatrzmy układ dwóch spinów potokowych A i B w stanie singletowym: $|S\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle_A |\downarrow\rangle_B - |\downarrow\rangle_A |\uparrow\rangle_B)$.

(a) Jaki jest prawdopodobieństwo otrzymania w wyniku pomiaru na spinie A wartości $S_{Az} = \frac{\hbar}{2}$, jeśli nie wykonano pomiaru na spinie B ?

(b) Pomiar spinu B wykaże wartość $S_{Bz} = \frac{\hbar}{2}$. Jaki będzie wtedy wynik pomiaru S_{Az} na spinie A ?

Rozwiązanie:

(a) S - całkowity spin

Stan singletowy to taki dla którego $S=0$.

$|S\rangle \in \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$ - dwuczłonowe przestrzeń Hilberta

↑

spinowe przestrzeń

Hilberta dla cząstki A

($\dim \mathcal{H}_A = 2$)

$\dim \mathcal{H}_2 =$

$= \dim(\mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B) = 4$

w pierwszym punkcie wyznaczamy

pomiar na cząstce A natomiast
cząstka B pozostawiamy "w spokoju".

Takiej sytuacji odpowiada operator
działający tylko na podprzestrzeni $\mathcal{H}_A$:

$$\hat{S}_{Az} \otimes \hat{1}_B = \frac{\hbar}{2} P_{A\uparrow} \otimes \hat{1}_B + \frac{\hbar}{2} P_{A\downarrow} \otimes \hat{1}_B,$$

gdzie $P_{A\uparrow} = |\uparrow\rangle\langle\uparrow|_A$ to operator młowy
na spin $\uparrow$ działający w podprzestrzeni $\mathcal{H}_A$.

Prawdopodobieństwo uzyskania w wyniku
pomiaru $S_{Az} = \frac{\hbar}{2}$ wynosi:

$$p_{A\uparrow} = \langle S | P_{A\uparrow} \otimes \hat{1}_B | S \rangle =$$

$$\frac{1}{2} \left(\langle \uparrow |_A \otimes \langle \downarrow |_B - \langle \downarrow |_A \otimes \langle \uparrow |_B \right) |\uparrow\rangle\langle\uparrow|_A \otimes \hat{1}_B \left(|\uparrow\rangle\langle\downarrow\rangle_B - |\downarrow\rangle\langle\uparrow|_B \right)$$

$$= \frac{1}{2} \overbrace{\langle \uparrow | \uparrow \rangle_A}^1 \overbrace{\langle \uparrow | \uparrow \rangle_A}^1 \overbrace{\langle \downarrow | \downarrow \rangle_B}^1 = \frac{1}{2} //$$

b) W wyniku pomiaru spinu cząstki B
stan układu ulega kolapsowi, czyli

$$|S\rangle \xrightarrow{\text{kolaps}} |k\rangle = \mathcal{N} \mathbb{1}_A \otimes P_{B\uparrow} |S\rangle$$

↑ stała normalizacyjna

$$\begin{aligned} \mathbb{1}_A \otimes P_{B\uparrow} |S\rangle &= \mathbb{1}_A \otimes |\uparrow\rangle\langle\uparrow|_B \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|\uparrow\rangle_A \otimes |\downarrow\rangle_B - |\downarrow\rangle_A \otimes |\uparrow\rangle_B \right) = \\ &= -\frac{1}{\sqrt{2}} |\downarrow\rangle_A \otimes |\uparrow\rangle_B \end{aligned}$$

Ponadto $\langle k|k\rangle = \frac{1}{2} \mathcal{N}^2 = 1 \Rightarrow \mathcal{N} = \pm \sqrt{2}$

↑
bez znaczenia,
bo mamy
swobodę wyboru
fazy.

Wynik pomiaru S_{Az} :

$$\begin{aligned} S_{Az} &= \langle k | \hat{S}_{Az} \otimes \mathbb{1}_B | k \rangle = \\ &= \langle \downarrow |_A \otimes \langle \uparrow |_B \left(\frac{\hbar}{2} |\uparrow\rangle\langle\uparrow|_A \otimes \mathbb{1}_B - \frac{\hbar}{2} |\downarrow\rangle\langle\downarrow|_A \otimes \mathbb{1}_B \right) |\downarrow\rangle_A \otimes |\uparrow\rangle_B \\ &= -\frac{\hbar}{2} \langle \downarrow |_A |\downarrow\rangle_A \langle \uparrow |_B |\uparrow\rangle_B = -\frac{\hbar}{2} // \end{aligned}$$

Komentarz:

W przypadku gdyby cząstka była opisywana przez współrzędne przestrzenne i spinowe, wtedy

musielibyśmy rozszerzyć jej przestrzeń

Hilberta : $\mathcal{H}_1 = \mathcal{H}_{\text{prest.}} \otimes \mathcal{H}_{\text{spin}}$

$\uparrow$ $\dim \mathcal{H}_{\text{prest.}} = \infty$ $\uparrow$ $\dim \mathcal{H}_{\text{spin}} = 2$
dla $s = \frac{1}{2}$

- ③ Dwa identyczne bozony o masie m ,
poruszają się w jednowymiarowym
potencjale harmonicznym $V = \frac{1}{2} m \omega^2 x^2$,
Powadzą oddziaływają ze sobą za pomocą
potencjału:

$$V_{\text{int}}(x_1, x_2) = \alpha e^{-\beta(x_1 - x_2)^2},$$

gdzie β jest dodatnim parametrem.

Oblicz energię stanu podstawowego
w pierwszym rzędzie rachunku zaburzeń.

Rozwiązanie:

Wyznaczenie stanu podstawowego oscylatora
harmonicznego: $|\phi_0\rangle \equiv |0\rangle$

$$\langle x | \hat{a} | \phi_0 \rangle = \left(\frac{d}{dX} + X \right) \phi_0(X) = 0$$

$$\frac{d\phi_0}{dX} = -X\phi_0 \Rightarrow \ln \phi_0 - \int X dX = -\frac{1}{2}X^2 + A,$$

czyli

$$\phi_0(x) = c_0 \exp\left(-\frac{1}{2}X^2\right) = c_0 \exp\left(-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}\right)$$

Normalizacja: $\left\{ \int_{\mathbb{R}} \exp(-ax^2) dx = \sqrt{\pi/a} \right\}$

$$\int_{\mathbb{R}} |\phi_0(x)|^2 = |c_0|^2 \int_{\mathbb{R}} dx \exp\left(-\frac{m\omega x^2}{\hbar}\right) = |c_0|^2 \sqrt{\frac{\pi\hbar}{m\omega}} = 1$$

$$\Rightarrow c_0 = \sqrt[4]{\frac{m\omega}{\pi\hbar}}, \text{ wtedy } \alpha_0 = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}},$$

$$\text{wtedy } \phi_0(x) = \sqrt{\frac{\alpha_0^2}{\pi}} \exp\left(-\frac{\alpha_0^2 x^2}{2}\right)$$

Bozony nie podlegają zakazowi

Pauliego, dlatego mogą jednocześnie przebywać w stanie podstawowym:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}_{\text{int}}, \quad \hat{H}_0 = \sum_{i=1}^2 \left(\frac{\hat{p}_i^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 x_i^2 \right)$$

$$E_0 = \langle \psi_0(x_1, x_2) | \hat{H}_0 | \psi_0(x_1, x_2) \rangle = \frac{\hbar\omega}{2} + \frac{\hbar\omega}{2} = \hbar\omega,$$

$$\text{gdzie } \psi_0(x_1, x_2) = \phi_0(x_1) \phi_0(x_2)$$

Poprawka w pierwszym rzędzie
rozwinięcia zaburzeń:

$$\begin{aligned}\Delta E &= \langle \psi_0(x_1, x_2) | \hat{V}_{\text{int}} | \psi_0(x_1, x_2) \rangle = \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} dx_1 \int_{-\infty}^{+\infty} dx_2 \psi_0^*(x_1, x_2) V_{\text{int}}(x_1, x_2) \psi_0(x_1, x_2) = \\ &= \frac{\alpha_0^2 \alpha}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dx_1 \int_{-\infty}^{+\infty} dx_2 \exp \left[-\alpha_0^2 (x_1^2 + x_2^2) - \beta (x_1 - x_2)^2 \right] =\end{aligned}$$

Zamiana zmiennych:

$$\begin{cases} y_1 = \frac{x_1 + x_2}{2} \\ y_2 = \frac{x_2 - x_1}{2} \end{cases}$$

$\Downarrow$

$$\begin{cases} x_2 = y_1 + y_2 \\ x_1 = y_1 - y_2 \end{cases}$$

Jacobian:

$$\begin{aligned} \left| \frac{\partial(x_1, x_2)}{\partial(y_1, y_2)} \right| &= \left| \det \begin{bmatrix} \frac{\partial x_1}{\partial y_1} & \frac{\partial x_1}{\partial y_2} \\ \frac{\partial x_2}{\partial y_1} & \frac{\partial x_2}{\partial y_2} \end{bmatrix} \right| = \\ &= \left| \begin{vmatrix} 1 & -1 \\ 1 & +1 \end{vmatrix} \right| = 2 \end{aligned}$$

$$x_1^2 + x_2^2 = (x_1 + x_2)^2 - 2x_1x_2 = 4y_1^2 - 2y_1^2 + 2y_2^2 = 2(y_1^2 + y_2^2)$$

$$(x_1 - x_2)^2 = 4y_2^2$$

$$= 2 \frac{\alpha_0^2 \alpha}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dy_1 \int_{-\infty}^{+\infty} dy_2 \exp(-2\alpha_0^2 y_1^2) \exp(-(4\beta + 2\alpha_0^2) y_2^2) =$$

$$= 2 \frac{\alpha_0^2 \alpha}{\pi} \sqrt{\frac{\pi}{2\alpha_0^2}} \sqrt{\frac{\pi}{4\beta + 2\alpha_0^2}} = \frac{\alpha_0 \alpha}{\sqrt{2\beta + \alpha_0^2}},$$

czyli $E = \hbar\omega + \frac{\alpha_0 \alpha}{\sqrt{2\beta + \alpha_0^2}} //$

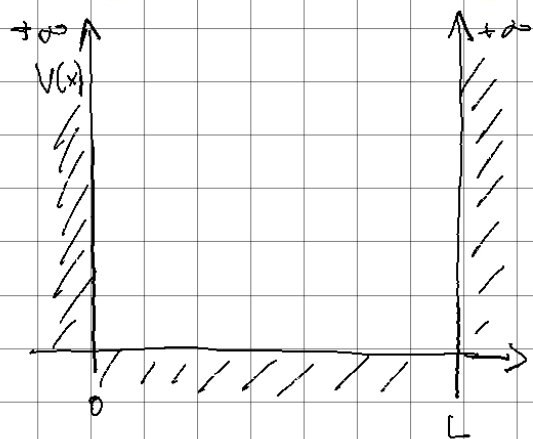
4) Wygodnym sposobem zapisania fermionowej funkcji faldowej układu składającego się z N -cząstek jest wykonywanie tzw. wyznacznika Slatera:

$$\psi(\vec{r}_1, \sigma_1, \dots, \vec{r}_N, \sigma_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \psi_1(\vec{r}_1, \sigma_1) & \psi_1(\vec{r}_2, \sigma_2) & \dots & \psi_1(\vec{r}_N, \sigma_N) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \psi_N(\vec{r}_1, \sigma_1) & \dots & \dots & \psi_N(\vec{r}_N, \sigma_N) \end{vmatrix},$$

gdzie $\psi_i(\vec{r}_j, \sigma_j)$ jest i -tym spinorbitem (tj. iloczynem przestrzennej i spinowej części 1-cząstki funkcji faldowej) opisującym j -tą cząstkę. Rozważ dwa elektrony (masa m , spin $\frac{1}{2}$) zamknięte w nieskończonej jamie ($d=1$) jamie potencjału o długości L .

Elektrony oddziałują ze sobą za pomocą odpychającego potencjału $V(x_1 - x_2)$, który nie zależy od spinowych stopni swobody i może być traktowany jak niewielka perturbacja. Skleszifikuj trzy najniższe stany energetyczne w terminach stanów jednoosobowych i spinu każdej z cząstek. Oblicz w pierwszym rzędzie rachunku zaburzeń energię pierwszych dwóch stanów wzbudzonych. Wynik pozostawić w postaci całki.

Rozwiązanie:



$$V(x) = \begin{cases} 0, & x \in [0, L] \\ \infty, & \text{w.p.p.} \end{cases}$$

Jednoosobowe funkcje falowe (cząstki niezależne):

$$\phi_n(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right), & x \in [0, L] \\ 0, & \text{w.p.p.} \end{cases}$$

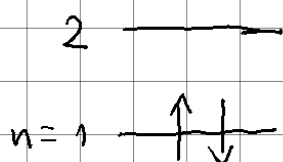
gdzie $n \in \mathbb{N} \setminus \{0\}$. Funkcje spinowe dla cząstki o spinie $\frac{1}{2}$ ma postać

$$\alpha \equiv \uparrow = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \chi_+ \text{ lub } \beta \equiv \downarrow = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \chi_-$$

Spinorbitale będące, więc postaci

$$\phi_n(x_i) \uparrow(i) \text{ lub } \phi_n(x_i) \downarrow(i)$$

1°) Stan podstawowy odpowiada sytuacji w której oba elektrony zmagają się na najniższym orbitale ($n=1$), czyli schematy orbitali:



Wyznacznik Slatera ma wtedy postać:

$$\psi_0(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} \phi_1(x_1) \uparrow(1) & \phi_1(x_2) \downarrow(1) \\ \phi_1(x_2) \uparrow(2) & \phi_1(x_2) \downarrow(2) \end{vmatrix} =$$

$$= \phi_1(x_1) \phi_1(x_2) \frac{1}{\sqrt{2}} [\uparrow(1) \downarrow(2) - \downarrow(1) \uparrow(2)]$$

symetryczna część
przestrzenna

antysymetryczna część
spinowa = singlet

o energii $E_{11} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} (1^2 + 1^2) = \frac{\pi^2 \hbar^2}{mL^2}$

2°) Pierwszy stan wzbudzony jest czterokrotnie zdegenerowany

a) oba elektrony mają spin $\uparrow$
jeden znajduje się w stanie $n=1$, a drugi w stanie $n=2$

$n=2$ $\uparrow$

$n=1$ $\uparrow$

Wyznacznik Slatera:

$$\psi_1^a(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} \phi_1(x_1) \uparrow(1) & \phi_2(x_1) \uparrow(1) \\ \phi_1(x_2) \uparrow(2) & \phi_2(x_2) \uparrow(2) \end{vmatrix}$$

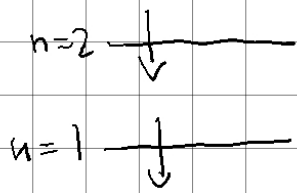
$$= \frac{1}{\sqrt{2}} [\underbrace{\phi_1(x_1) \phi_2(x_2)}_{\text{anty symetryczna część przestrzenna}} - \underbrace{\phi_2(x_1) \phi_1(x_2)}_{\text{symetryczna część spinowa}}] \uparrow(1) \uparrow(2)$$

anty symetryczna część przestrzenna

symetryczna część spinowa

b) kolejna możliwość jest analogiczna tylko oba elektrony mają spin $\downarrow$

- pierwszy stan trypletowy



Wyznacznik Slatera:

$$\psi_1^b(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} \phi_1(x_1) \downarrow(1) & \phi_2(x_1) \downarrow(1) \\ \phi_1(x_2) \downarrow(2) & \phi_2(x_2) \downarrow(2) \end{vmatrix}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}} [\phi_1(x_1) \phi_2(x_2) - \phi_2(x_1) \phi_1(x_2)] \downarrow(1) \downarrow(2)$$

c) i d) w kolejnych dwóch możliwościach
znowu mamy elektrony w stanie
 $n=1$ i $n=2$, ale o przeciwnych
spinach, ponieważ elektrony są
jednakowe nie wiemy czy ten
o spinie $\uparrow$ jest na stanie
wyższym czy niższym, więc
musimy wziąć kombinację tych
możliwości i tu możemy wziąć
kombinację symetryczną (z „+”)
lub antysymetryczną (z „-”),
czyli

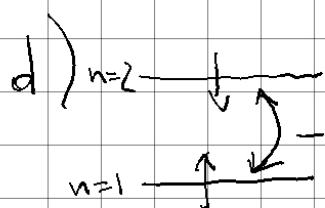


Wyznaczmy Slatera:

$$\psi_1^c(x_1, x_2) = \frac{1}{2} \left(\begin{vmatrix} \phi_1(x_1) \uparrow(1) & \phi_2(x_1) \downarrow(1) \\ \phi_1(x_2) \uparrow(2) & \phi_2(x_2) \downarrow(2) \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} \phi_1(x_1) \downarrow(1) & \phi_2(x_1) \uparrow(1) \\ \phi_1(x_2) \downarrow(2) & \phi_2(x_2) \uparrow(2) \end{vmatrix} \right) =$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\phi_1(x_1) \phi_2(x_2) - \phi_2(x_1) \phi_1(x_2) \right) \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\uparrow(1) \downarrow(2) + \downarrow(1) \uparrow(2) \right)$$

anty symmetry one
przeciwna
symmetry one
symmetry spinowa



Wyznaczmy Slatera:

$$\psi_1^d(x_1, x_2) = \frac{1}{2} \left(\begin{vmatrix} \phi_1(x_1) \uparrow(1) & \phi_2(x_1) \downarrow(1) \\ \phi_1(x_2) \uparrow(2) & \phi_2(x_2) \downarrow(2) \end{vmatrix} - \begin{vmatrix} \phi_1(x_1) \downarrow(1) & \phi_2(x_1) \uparrow(1) \\ \phi_1(x_2) \downarrow(2) & \phi_2(x_2) \uparrow(2) \end{vmatrix} \right) =$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\phi_1(x_1) \phi_2(x_2) + \phi_1(x_2) \phi_2(x_1) \right) \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\uparrow(1) \downarrow(2) - \downarrow(1) \uparrow(2) \right)$$

Wszystkie te stany mają energię:

$$E_{12} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} (1^2 + 2^2) = \frac{5\pi^2 \hbar^2}{2mL^2}$$

3°) Drugi stan wzbudzony odpowiada sytuacji w której oba elektrony znajdują się w stanie $n=2$ i mają przeciwne spiny:

$n=2$ $\uparrow \downarrow$

Wyznacznik Slatera

$n=1$ —————

$$\psi_2(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} \phi_2(x_1) \uparrow(1) & \phi_2(x_1) \downarrow(1) \\ \phi_2(x_2) \uparrow(2) & \phi_2(x_2) \downarrow(2) \end{vmatrix}$$

$$= \phi_2(x_1) \phi_2(x_2) \frac{1}{\sqrt{2}} [\uparrow(1) \downarrow(2) - \downarrow(1) \uparrow(2)]$$

Stan ten ma energię: $E_{22} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} (2^2 + 2^2)$

$$= \frac{4\pi^2 \hbar^2}{mL^2}$$

4°) W pierwszym rzędzie

rachunku zaburzeń liczy się tylko

symetria przestrzennej części

funkcji faldowej, bo oddziaływanie
nie zależy od stanu spinowej
mamy, więc poprawki:

$$\Delta E_{1a/b}^{\text{sym}} = \int_0^L dx_1 \int_0^L dx_2 |\phi_1(x_1)\phi_2(x_2)|^2 V(x_1 - x_2)$$

dla stanów ψ_1^a i ψ_1^b

$$\Delta E_{1d}^{\text{sym}} = \int_0^L dx_1 \int_0^L dx_2 \left| \frac{1}{\sqrt{2}} (\phi_1(x_1)\phi_2(x_2) + \phi_2(x_1)\phi_1(x_2)) \right|^2 \cdot V(x_1 - x_2)$$

dla stanu ψ_1^d

$$\Delta E_{1c}^{\text{antis}} = \int_0^L dx_1 \int_0^L dx_2 \left| \frac{1}{\sqrt{2}} (\phi_1(x_1)\phi_2(x_2) - \phi_2(x_1)\phi_1(x_2)) \right|^2 \cdot V(x_1 - x_2)$$

dla stanu ψ_1^c

$$\Delta E_2^{\text{sym}} = \int_0^L dx_1 \int_0^L dx_2 |\phi_2(x_1)\phi_2(x_2)|^2 V(x_1 - x_2)$$

dla stanu ψ_2 .