

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

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

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

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

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

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

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

$$\begin{aligned} \mathbf{S}_1 &= \frac{\hbar}{2} \left[\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \right] \\ &= \frac{\hbar}{2} \left[\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \right] \\ &= \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (3.1.6a)$$

$$\mathbf{S}_2 = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i & -i & 0 \\ i & 0 & 0 & -i \\ i & 0 & 0 & -i \\ 0 & i & i & 0 \end{pmatrix}, \quad (3.1.6b)$$

$$\mathbf{S}_3 = \hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (3.1.6c)$$

jejich kvadráty jsou

$$\mathbf{S}_1^2 = \frac{\hbar^2}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{S}_2^2 = \frac{\hbar^2}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{S}_3^2 = \hbar^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (3.1.7)$$

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

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

Vlastní čísla a této matice se určí diagonalizací

$$\det(\mathbf{A} - a\mathbf{1}) = \det \begin{pmatrix} -a & 0 & 0 & \hbar\omega \\ 0 & -a & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -a & 0 \\ \hbar\omega & 0 & 0 & -a \end{pmatrix} = a^2 [a^2 - (\hbar\omega)^2] = 0. \quad (3.1.9)$$

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

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

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

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

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

$$\boxed{ad - bc = 0}. \quad (3.1.19)$$

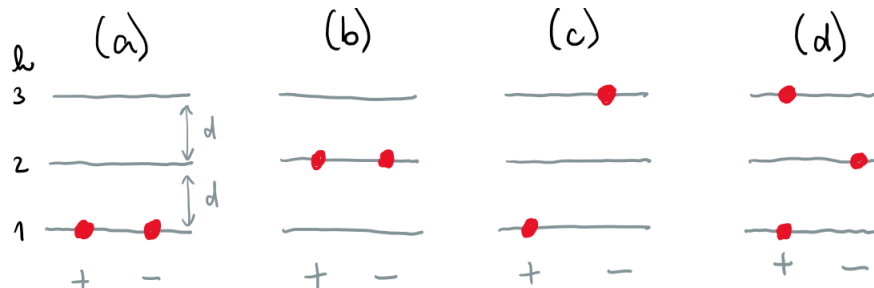
V případě stavu $|\psi'\rangle$ je $a = 0, b = -1/\sqrt{2}, c = 1/\sqrt{2}, d = 0$ a podmínka (3.1.19) splněna není. Stav je tedy provázaný (entanglovaný).

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

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

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

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_I, \quad (3.2.1)$$

přičemž jednočásticová část Hamiltoniánu splňuje

$$\hat{h}_0 |h\sigma\rangle = hd |h\sigma\rangle. \quad (3.2.2)$$

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:

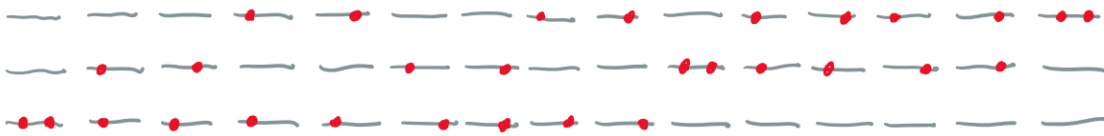
1. Počty vícečásticových stavů lze určit obecně pro systém n částic s H hladinami. Celkový počet pozic, na které můžeme částice umístit, je $P = 2H$ (počet hladin krát počet částic, které lze umístit na jednu hladinu). Počet n -částicových funkcí je pak dán počtem všech možných kombinací n částic na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

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

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

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

kteřou 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

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

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

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

je singletní spinový stav.

Poznámka: Se singletními a tripletními spinovými stavy se také počítá v příkladech 10.4, 11.2 a 17.2.