Cvičení KT1 11. 10. 2022 (2. cvičení)

Témata:

- Sternovy-Gerlachovy experimenty pro spin 1
- spektrální rozklad operátoru

Opakování III: Sternovy-Gerlachovy experimenty pro spin 1

Na přednášce a minulý semestr jste slyšeli o Sternových-Gerlachových experimentech, které nám ukazují, že (spinový) moment hybnosti je kvantován. Při SG experimentech pošleme svazek částic (např. elektronů) do silného nehomogenního magnetického pole (např. ve směru osy z) a pozorujeme, že se svazek rozdělil na několik jasně daných svazků. Tedy projekce momentů hybnosti v daném směru mohou nabývat jen určitých diskrétních hodnot.

Minulý semestr jsme pro první seznámení uvažovali elektrony, tedy částice se spinem $s = 1/2$. Viděli jsme, že v SG experimentu se svazek elektronů procházející nehomogenním magnetickým polem (ve směru osy z) rozdělil na dva svazky (existují dvě možné projekce spinu 1/2 do libovolného směru, $-1/2$ a $+1/2$): jeden s projekcí spinu podél osy z $s_z = +1/2$ a jeden s projekcí spinu podél osy z $s_z = -1/2$. Ty to dva stavy jsme označili

$$|{+z}\rangle \equiv |s = 1/2, s_z = +1/2\rangle \tag{1}$$
$$|{-z}\rangle \equiv |s = 1/2, s_z = -1/2\rangle \,. \tag{2}$$

a použili je jako bázi pro naše výpočty pravděpodobnosti. Připomeňme si, že tyto dva stavy jsou na sebe navzájem kolmé $\langle \pm z|\mp z\rangle = 0$ a každý z nich je normovaný na jedničku $\langle \pm z|\pm z\rangle = 1$. Zjednodušeně zapsáno $\langle i|j\rangle = \delta_{ij}$, kde $i, j = +z, -z$. Více si můžete připomenout např. na https://quantum.karlov.mff.cuni.cz/~uhlirovat/UDKM/UDKM2022_cv2.pdf.

Tento semestr si Sternovy-Gerlachovy experimenty připomeneme a zaměříme se na částice se spinem 1.

(I) Jaké jsou možné projekce spinu 1? A na kolik svazků se nám svazek rozštěpí při SG experimentech?

Stejně jako loni budeme uvažovat silné magnetické pole podél osy z a jako vhodnou bázi zvolíme projekce podél osy z, tj. vlastní stavy operátoru $\hat{S}_z$. Bázové funkce označíme $|{-z}\rangle$, $|0z\rangle$ a $|{+z}\rangle$.

(II) Zapište stavy $|{-z}\rangle$, $|0z\rangle$ a $|{+z}\rangle$ v uvedené bázi.

Měli byste dostat:

$$|{+z}\rangle = \begin{pmatrix}1\\0\\0\end{pmatrix}, \qquad |0z\rangle = \begin{pmatrix}0\\1\\0\end{pmatrix}, \qquad |{-z}\rangle = \begin{pmatrix}0\\0\\1\end{pmatrix}. \tag{3}$$

(III) Zapište odpovídající bra-vektory.

(IV) Ověřte, že naše báze je úplná.

(V) Ověřte, že bázové stavy jsou normované a navzájem na sebe kolmé.

Obecný stav $|\psi\rangle$ zapíšeme v této bázi

$$|\psi\rangle = c_+ |{+z}\rangle + c_0 |0z\rangle + c_- |{-z}\rangle = c_+ \begin{pmatrix}1\\0\\0\end{pmatrix} + c_- \begin{pmatrix}0\\1\\0\end{pmatrix} c_- \begin{pmatrix}0\\0\\1\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}c_+\\c_0\\c_-\end{pmatrix}. \tag{4}$$

Uvažujme nyní spinový operátor $\hat{\vec{S}}$

$$\hat{\vec{S}} = (\hat{S}_x, \hat{S}_y, \hat{S}_z) = \hat{S}_x n_x + \hat{S}_y n_y + \hat{S}_z n_z \,. \tag{5}$$

$\vec{n} = (n_x, n_y, n_z)$ je jednotkový směrový vektor. Tento operátor (tedy jeho i-tá složka, $i = x, y, z$) působí na stav $|\psi\rangle$, čímž tento stav převede na stav $|\phi\rangle$. Abstraktně toto působení zapíšeme

$$\hat{S}_i |\psi\rangle = |\phi\rangle \tag{6}$$

Oba tyto stavy $|\psi\rangle$, $|\phi\rangle$ můžeme vyjádřit v naší bázi, viz rce (4). Pro operátor $\hat{S}_i$ tak dostaneme tedy obecné maticové vyjádření

$$\hat{S}_i = \begin{pmatrix} \langle +z| S_i |{+z}\rangle & \langle +z| S_i |0z\rangle & \langle +z| S_i |{-z}\rangle \\ \langle 0z| S_i |{+z}\rangle & \langle 0z| S_i |0z\rangle & \langle 0z| S_i |{-z}\rangle \\ \langle -z| S_i |{+z}\rangle & \langle -z| S_i |0z\rangle & \langle -z| S_i |{-z}\rangle \end{pmatrix}. \tag{7}$$

(VI) Jak působí operátor $\hat{S}_z$ na stavy $|{-z}\rangle$, $|0z\rangle$ a $|{+z}\rangle$?

(VII) Vyjádřete operátor $\hat{S}_z$ v naší bázi. Měli byste dostat

$$\hat{S}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} . \tag{8}$$

Jak vypadají operátory $\hat{S}_x$ a $\hat{S}_y$ v bázi $\{|+z\rangle, |0z\rangle, |-z\rangle\}$?
(Pozor, $\hat{S}_x$ a $\hat{S}_y$ chceme vyjádřit v bázi $\{|+z\rangle, |0z\rangle, |-z\rangle\}$, nikoliv v bázi $\{|+x\rangle, |0x\rangle, |-x\rangle\}$, resp. $\{|+y\rangle, |0y\rangle, |-y\rangle\}$, kde by odpovídající operátory byly diagonální.)

Připomeňme si, že v kvantové mechanice často pracujeme s tzv. **snižovacími a zvyšovacími operátory** $\hat{S}_\pm$ (anglicky *ladder operators*), místo přímo operátorů $\hat{S}_x$ a $\hat{S}_y$. Zvyšovací operátor je definován

$$\hat{S}_+ = \hat{S}_x + i\hat{S}_y \tag{9}$$

a snižovací operátor je dán

$$\hat{S}_- = \hat{S}_x - i\hat{S}_y \, . \tag{10}$$

Pro jejich působení na obecný stav $|l, m\rangle$ platí

$$\hat{S}_\pm |l, m\rangle = \sqrt{l(l+1) - m(m \pm 1)}\, |l, m \pm 1\rangle \, . \tag{11}$$

l zde značí moment hybnosti a m zde značí jeho projekci, přičemž $m = -l, -l+1, ..., +l-1, +l$.
(VIII) Jak přesně vypadá působení operátorů $\hat{S}_\pm$ na stavy $|-z\rangle$, $|0z\rangle$ a $|+z\rangle$?
(IX) Zapište operátory $\hat{S}_\pm$ v naší bázi. Měli byste dostat

$$\hat{S}_+ = \sqrt{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} , \qquad \hat{S}_- = \sqrt{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} . \tag{12}$$

Z rovnic (9) a (10) tedy dostaneme vyjádření operátoru $\hat{S}_x$ (a $\hat{S}_y$):

$$\hat{S}_x = \frac{1}{2}(\hat{S}_+ + \hat{S}_-) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} . \tag{13}$$

Vyřením vlastního problému $\hat{S}_x |\lambda x\rangle = \lambda |\lambda x\rangle$ pak dostaneme stavy $|\lambda x\rangle$ vyjádřené v bázi $\{|+z\rangle, |0z\rangle, |-z\rangle\}$. Tedy: Obecně stav $|\lambda x\rangle$ vyjádříme v bázi jako

$$|\lambda x\rangle = a\,|+z\rangle + b\,|0z\rangle + c\,|-z\rangle \, . \tag{14}$$

Vlastní problém pak vypadá

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} . \tag{15}$$

(X) Vyřešením dostaneme tři možná vlastní čísla: $\lambda = +1\,, 0\,, -1$ a odpovídající stavy jsou (připomeňme si, že požadujeme, aby byly normalizované na jedničku)

$$|+x\rangle = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ \sqrt{2} \\ 1 \end{pmatrix} , \qquad |0x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} , \qquad |-x\rangle = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ -\sqrt{2} \\ 1 \end{pmatrix} \tag{16}$$

(XI) A zcela podobně získáme vyjádření operátoru $\hat{S}_y$ a jeho vlastní stavy v bázi $\{|+z\rangle, |0z\rangle, |-z\rangle\}$.
A na závěr si spočteme pár pravděpodobností ve Sternových-Gerlachových experimentech. Uvažujme, že máme svazek elektronů ve stavu $|+z\rangle$. S jakou pravděpodobností budeme detekovat stav $|0x\rangle$? Tj. tento svazek projde magnetickým polem ve směru osy x, rozdělí se na tři, $|+x\rangle$, $|0x\rangle$ a $|-x\rangle$, a my detekujeme $|0x\rangle$.
Připomeňme si, že amplituda pravděpodobnost je dána jako skalární součin bra="co chceme detekovat" (zde $\langle 0x|$) a ket="stav systému" (zde $|+z\rangle$)

$$A = \langle 0x|+z\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -1 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{-1}{\sqrt{2}} \, . \tag{17}$$

Pravděpodobnost je pak daná druhou mocninou absolutní hodnoty amplitudy pravděpodobnosti, tj.

$$P_{+z,0x} = \frac{1}{2}\,. \tag{18}$$

(XII) Podobně získáme další pravděpodobnosti $P_{+z,+x}$, $P_{+z,-x}$, $P_{0z,+x}$, $P_{0z,0x}$, $P_{0z,-x}$, $P_{+z,+x,-z}$, $P_{+z,\pm x,-z}$, $P_{+z,(\pm,0)x,-z}$, $P_{+z,(\pm,0)x,+z}$. $P_{A,B}$ značí, že na začátku byl systém ve stavu $|A\rangle$ a měříme stav $|B\rangle$.

Co o jednotlivých výsledcích a experimentech můžete říci?

V příkladu výše jsme se věnovali SG experimentům a počítali pravděpodobnosti naměření projekce spinu $+1, 0, -1$ podél souřadnicových os. Samozřejmě však nejsme limitovaní jen na tyto tři směry – můžeme se ptát na projekci spinu do obecné směru.

Zopakujme si, že operátor spinu je vektorový operátor

$$\hat{\vec{S}} = (\hat{S}_x, \hat{S}_y, \hat{S}_z) \tag{19}$$

a v bázi stavů $\{|{+z}\rangle\,, |0z\rangle\,, |{-z}\rangle\}$ ho můžeme vyjádřit

$$\hat{\vec{S}} = \left(\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} , \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix} , \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \right) . \tag{20}$$

Připomeňme si, že tyto tři matice (bez toho faktoru $1/\sqrt{2}$) se nazývají Pauliho maticemi a standardně se značí σ_x, σ_y a σ_z.

Dále si připomeňme, že směr v prostoru je dán jednotkovým směrovým vektorem $\vec{n}$ ((XIII) zopakujte si sférické souřadnice)

$$\vec{n} = (n_x, n_y, n_z)\,. \tag{21}$$

Jeho složky jsou dány

$$\begin{aligned} n_x &= \sin\theta\cos\varphi \\ n_y &= \sin\theta\sin\varphi \\ n_z &= \cos\theta\,. \end{aligned}$$

(XIV) Ukažte, že směrový vektor je opravdu jednotkový, tj. jeho norma (velikost) je jedna. Projekci spinu do libovolného směru pak získáme jako skalární součin vektorového operátoru spinu a směrového vektoru:

$$\hat{S}_n = \hat{\vec{S}} \cdot \vec{n}\,, \tag{22}$$

čili ((XV) ukažte mezikroky)

$$\hat{S}_n = \begin{pmatrix} \cos\vartheta & \frac{1}{\sqrt{2}}\sin\vartheta e^{-i\varphi} & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}}\sin\vartheta e^{i\varphi} & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}}\sin\vartheta e^{-i\varphi} \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}}\sin\vartheta e^{i\varphi} & -\cos\vartheta \end{pmatrix} \tag{23}$$

Pravděpodobnost, s jakou naměříme projekci spinu λ do libovolného směru, nacházel-li se systém na počátku ve stavu $|{+z}\rangle$, spočteme

$$P_{\lambda n} = |\langle \lambda n | {+z} \rangle|^2\,. \tag{24}$$

Potřebujeme tedy nalézt vlastní vektory operátor $\hat{S}_n$ náležící vlastním číslům $+1, 0, -1$.

(XVI) Ověřte, že vlastní čísla operátoru $\hat{S}_n$ jsou $+1, 0, -1$.

(XVII) Najděte stav odpovídající projekci 0, $|0n\rangle$. Mělo by vyjít

$$|0n\rangle = \begin{pmatrix} -\frac{1}{\sqrt{2}}\sin\vartheta e^{-i\varphi} \\ \cos\vartheta \\ \frac{1}{\sqrt{2}}\sin\vartheta e^{+i\varphi} \end{pmatrix} . \tag{25}$$

(XVIII) Jaká je pravděpodobnost $P_{0z,0n}$? Mělo by vyjít $P_{0z,0n} = \cos^2\vartheta$.

Opakování IV: Lin. algebra a práce s maticemi

V této části cvičení si připomeneme pár důležitých znalostí při manipulaci s maticemi. Libovolný operátor v kvantové mechanice, jako je např. hamiltonián, můžeme vyjádřit pomocí matice, tj. v tzv. maticové reprezentaci. Nalezením vlastních čísel a_i a vlastních vektorů $|i\rangle$ této matice získáme tzv. spektrální rozklad operátoru. Operátor pak získáme opětovným poskládáním těchto dílů:

$$\hat{A} = a_1 |1\rangle \langle 1| + a_2 |2\rangle \langle 2| + \dots \tag{26}$$

Lze ukázat, že libovolnou funkci matice můžeme převést na funkci vlastních čísel

$$f(\hat{A}) = f(a_1) |1\rangle \langle 1| + f(a_2) |2\rangle \langle 2| + \dots \tag{27}$$

Např. matici tak spočteme jako

$$\hat{A}^{-1} = a_1^{-1} |1\rangle \langle 1| + a_2^{-1} |2\rangle \langle 2| + \dots \tag{28}$$

a podobně mocninu, odmocninu, exponencielu a další...

$$\hat{A}^2 = a_1^2 |1\rangle \langle 1| + a_2^2 |2\rangle \langle 2| + \dots \tag{29}$$

$$\hat{A}^{1/2} = a_1^{1/2} |1\rangle \langle 1| + a_2^{1/2} |2\rangle \langle 2| + \dots \tag{30}$$

$$e^{\hat{A}} = e^{a_1} |1\rangle \langle 1| + e^{a_2} |2\rangle \langle 2| + \dots \tag{31}$$

(I) Ověřte, že (28) je opravdu inverzní matice k A, tj. $AA^{-1} = I$.

Obecnou hermitovskou 2x2 matici můžeme vyjádřit pomocí Pauliho σ-matic a jednotkové matice (c_i jsou reálné koeficienty)

$$c_0 I + c_1\sigma_x + c_2\sigma_y + c_3\sigma_z = \begin{pmatrix} c_0 + c_3 & c_1 - ic_2 \\ c_1 + ic_2 & c_0 - c_3 \end{pmatrix} \tag{32}$$

(II) Ukažte, že matice je opravdu hermitovská.

My si výše zmíněné procvičíme např. na matici

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 1-i \\ 1+i & 0 \end{pmatrix}. \tag{33}$$

(III) Najděte vlastní čísla a vlastní vektory matice A.
(IV) Výsledek můžete zkontrolovat pomocí (26).
(V) Najděte inverzní matici A^{-1}.
(VI) Ověřte, že opravdu $AA^{-1} = I$.

Povinná úloha na příště

Najděte vlastní stavy $\hat{S}_y$ a spočtěte pravděpodobnosti $P_{+z,0y}$, $P_{+z,+y}$, $P_{+z,-y}$. (1 b.)

Bonusová úloha

Spočtěte pravděpodobnost $P_{+z,-n}$. (1 b.)