1. Částice se spinem $\frac{1}{2}$ a vlastním magnetickým momentem μ_0 je v homogenním magnetickém poli $\vec{B} = (0, 0, B)$. V čase $t = 0$ je ve smíšeném stavu popsaném maticí hustoty

$$\hat{\rho}(0) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & -\frac{i}{2} \\ \frac{i}{2} & 1 \end{pmatrix}.$$

Určete $\hat{\rho}(t)$. Jaká je střední hodnota projekce spinu částice do osy x v čase t?
Nápověda: Stav v čase t hledejte ve tvaru $\hat{\rho}(t) = \frac{1}{2}(\mathbb{I} + \vec{p}(t) \cdot \vec{\sigma})$

2. Uvažujte částici v potenciálu $V(r) = -\frac{q}{r}$. Najděte přibližnou hodnotu energie základního stavu použitím variační metody se zkušební funkcí

$$\psi(r, \theta, \varphi) = Ce^{-\frac{r}{\alpha}}.$$

3. Uvažujte nabitou částici s nábojem q v poli izotropního harmonického oscilátoru. Označme vlastní vektory hamiltoniánu částice pomocí $|n, l, m\rangle$, kde n je radiální, l orbitální a m magnetické kvantové číslo. Určete rychlost spontánní emise pro přechod $1p \to 0s$, tj.

$$\Gamma_{1p \to 0s} = \frac{4q^2\omega^3}{3\hbar c^3} \frac{1}{3} \sum_{m=-1}^{1} \sum_{i=1}^{3} |\langle 0, 0, 0|\hat{Q}_i|0, 1, m\rangle|^2$$

Nápověda: vyjádřete x_i ve sférických souřadnicích pomocí kulových funkcí.

Řešení

1. Počáteční stav odpovídá $\vec{p}(0) = (0, \frac{1}{2}, 0)$, hamiltonián je $\hat{H} = \mu_0 B \sigma_3$. Pohybová rovnice
$$i\hbar \frac{d\hat{\rho}}{dt} = \left[\hat{H}, \hat{\rho}\right] = \mu_0 B (p_1 \sigma_2 - p_2 \sigma_1),$$
vede na rovnice
$$\begin{aligned} \dot{p}_3 &= 0 \quad \Rightarrow \quad p_3(t) = p_3(0) = 0, \\ \dot{p}_1 + i\dot{p}_2 &= i\frac{2\mu_0 B}{\hbar}(p_1 + ip_2) \end{aligned}$$
Substitucí $z = p_1 + ip_2$ dostaneme $z(t) = z(0)e^{\frac{i}{\hbar}2\mu_0 Bt} = \frac{i}{2}e^{\frac{i}{\hbar}2\mu_0 Bt}$, a tedy
$$\begin{aligned} p_1(t) &= \frac{z + \overline{z}}{2} = \frac{1}{2}\sin\left(\frac{2\mu_0 B}{\hbar}t\right), \\ p_2(t) &= \frac{z - \overline{z}}{2i} = \frac{1}{2}\cos\left(\frac{2\mu_0 B}{\hbar}t\right). \end{aligned}$$
Střední hodnota projekce spinu do osy x je rovna $p_1(t)$.

2. Normalizace funkce - $C = \frac{1}{\sqrt{\pi\alpha^3}}$. Střední hodnota potenciální energie
$$\langle \hat{V} \rangle = -\frac{4q}{\alpha^3}\int_0^\infty r e^{-\frac{2r}{\alpha}} dr = -\frac{q}{\alpha}.$$
Střední hodnota kinetické energie
$$\begin{aligned} \Delta\psi &= \left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{d}{dr}\right)\psi = \frac{1}{\sqrt{\pi\alpha^3}\alpha^2}e^{-\frac{r}{\alpha}}(1 - \frac{2\alpha}{r}), \\ \langle \frac{\hat{P}^2}{2M} \rangle &= \frac{2\hbar^2}{\alpha^5 M}\int_0^\infty r(2\alpha - r)e^{-\frac{2r}{\alpha}} = \frac{\hbar^2}{2\alpha^2 M}. \end{aligned}$$
Střední hodnota energie je tedy
$$E(\alpha) = \frac{\hbar^2}{2\alpha^2 M} - \frac{q}{\alpha}.$$
Minimum funkce
$$\frac{dE_0(\alpha)}{d\alpha} = -\frac{\hbar^2}{\alpha^3 M} + \frac{q}{\alpha^2} = 0 \Rightarrow \alpha_0 = \frac{\hbar^2}{Mq}$$
Odhad energie základního stavu
$$E_0^{VM} = E_0(\alpha_0) = -\frac{Mq^2}{2\hbar^2}.$$

3. Vlnové funkce příslušných stavů

$$\begin{aligned}
\psi_{n,l,m}(r,\theta,\varphi) &= R_{n,l}(r)Y_{l,m}(\theta,\varphi), \\
\psi_{0,0,0}(r,\theta,\varphi) &= \frac{2}{\pi^{\frac{1}{4}}}\left(\frac{M\omega}{\hbar}\right)^{\frac{3}{4}} e^{-\frac{M\omega r^2}{2\hbar}} \frac{1}{\sqrt{4\pi}}, \\
\psi_{1,1,m}(r,\theta,\varphi) &= \sqrt{\frac{8}{3\sqrt{\pi}}}\left(\frac{M\omega}{\hbar}\right)^{\frac{5}{4}} r e^{-\frac{M\omega r^2}{2\hbar}} Y_{1,m}(\theta,\varphi).
\end{aligned}$$

Přepíšeme x_i do sférických souřadnic a pomocí kulových funkcí

$$\begin{aligned}
x_1 &= r\sin\theta\cos\varphi = r\sqrt{\frac{2\pi}{3}}(-Y_{1,1}+Y_{1,-1}), \\
x_2 &= r\sin\theta\sin\varphi = ir\sqrt{\frac{2\pi}{3}}(Y_{1,1}+Y_{1,-1}), \\
x_3 &= r\cos\theta = r\sqrt{\frac{4\pi}{3}}Y_{1,0}.
\end{aligned}$$

Radiální integrál (ozn. K) je stejný ve všech maticových elementech

$$K = \int\limits_0^{+\infty} r^3\overline{R}_{0,0}(r)R_{0,1}(r)dr = 4\sqrt{\frac{2}{3\pi}}\left(\frac{M\omega}{\hbar}\right)^2 \int\limits_0^{+\infty} r^4 e^{-\frac{M\omega r^2}{\hbar}}dr = \sqrt{\frac{3\hbar}{2M\omega}}.$$

Jednotlivé maticové elementy ($Y_{0,0} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$)

$$\begin{aligned}
\langle 0,0,0|x_1|0,1,m\rangle &= K\int d\Omega\overline{Y}_{0,0}\sqrt{\frac{2\pi}{3}}(-Y_{1,1}+Y_{1,-1})Y_{1,m} \\
&= \frac{K}{\sqrt{6}}\left(\delta_{m,-1}-\delta_{m,1}\right), \\
\langle 0,0,0|x_2|0,1,m\rangle &= K\int d\Omega\overline{Y}_{0,0} i\sqrt{\frac{2\pi}{3}}(Y_{1,1}+Y_{1,-1})Y_{1,m} \\
&= -i\frac{K}{\sqrt{6}}\left(\delta_{m,-1}+\delta_{m,1}\right), \\
\langle 0,0,0|x_3|0,1,m\rangle &= K\int d\Omega\overline{Y}_{0,0}\sqrt{\frac{4\pi}{3}}Y_{1,0}Y_{1,m} \\
&= \frac{K}{\sqrt{3}}\delta_{m,0}.
\end{aligned}$$

Celkem pro součet maticových elementů dostaneme

$$\begin{aligned}
\frac{1}{3}\sum_{m=-1}^{1}\sum_{i=1}^{3}|\langle 0,0,0|\hat{Q}_i|0,1,m\rangle|^2 &= \frac{K^2}{3}\sum_{m=-1}^{1}\left(\frac{1}{6}(\delta_{m,-1}+\delta_{m,1})+\frac{1}{6}(\delta_{m,-1}+\delta_{m,1})+\frac{1}{3}\delta_{m,0}\right) \\
&= \frac{1}{3}\frac{3\hbar}{2M\omega}
\end{aligned}$$

Výsledná rychlost přechodu pak bude

$$\Gamma_{1p\to 0s} = \frac{4q^2\omega^3}{3\hbar c^3}\frac{\hbar}{2M\omega} = \frac{2q^2\omega^2}{3Mc^3}.$$