

### Dodatek k 3. cvičení Dvouladinová soustava

Bezčasovou Schrödingerovu rovnici

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\varphi(\mathbf{r})+V(\mathbf{r})\varphi(\mathbf{r})=E\varphi(\mathbf{r})$$

můžeme vyjádřit ve tvaru

$$\mathbf{H}\varphi(\mathbf{r})=E\varphi(\mathbf{r})$$

(1)

kde

$$\mathbf{H}=-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta+V(\mathbf{r})$$

(2)

je operátor energie – hamiltonian<sup>1</sup> – definovaný na prostoru funkcí<sup>2</sup>. Rovnice (1) má formálně stejný tvar jako rovnice

$$\mathbf{A}\mathbf{u} = a\mathbf{u}, \tag{3}$$

známá z lineární algebry, kde  $\mathbf{A}$  je matice a  $\mathbf{u}$  je sloupcový vektor. (Matice je operátor, který působí na prostoru sloupcových vektorů.) Vektor  $\mathbf{u}$ , který hovoří rovnici (3), je vlastní vektor matice  $\mathbf{A}$  příslušející vlastní hodnotě  $a$ . Řešit rovnici (1) nebo rovnici (3) tedy znamená formálně totéž – znamená hledat vlastní vektory (buď v prostoru funkcí, nebo v prostoru sloupcových vektorů) a vlastní hodnoty operátoru (představovaného diferenciálním operátorem  $\mathbf{H}$  nebo maticí  $\mathbf{A}$ ).<sup>3</sup>

V kvantové mechanice hamiltonian může být diferenciální operátor nebo také matice, jde jen o různé reprezentace. V určitých situacích je výhodné stav popsat vlnovou funkcí, jindy sloupcovým vektorem<sup>4</sup>. U dvouladinových soustav je stav popsán dvouřádkovým sloupcovým vektorem a hamiltonian je čtvercová matice druhého řádu.

Příkladem dvouladinové soustavy je molekula čpavku<sup>5</sup>. Jestliže by atom dusíku mohl být buď jen nahoře – nad rovinou tvořenou atomy vodíku, nebo jen dole – pod rovinou tvořenou atomy vodíku, hamiltonian by byl dán diagonální maticí

$$\mathbf{H}_0 = \begin{pmatrix} E_0 & 0 \\ 0 & E_0 \end{pmatrix}.$$

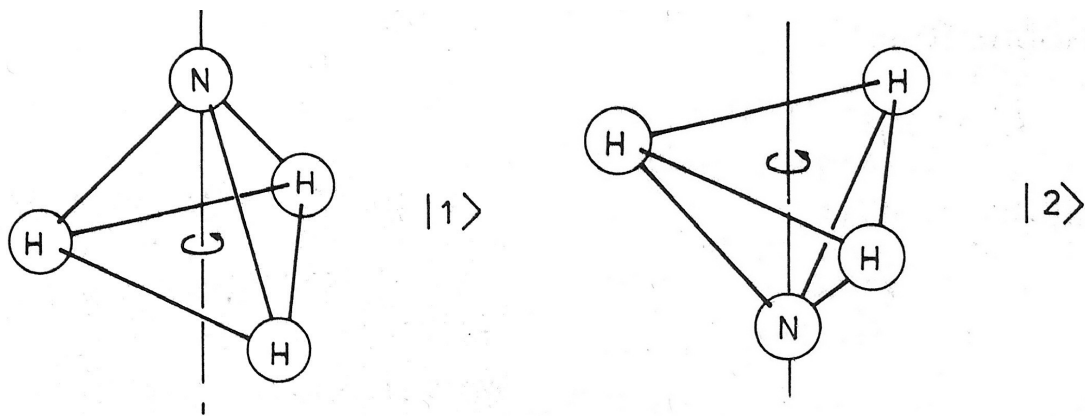
<sup>1</sup> Tento pojem již známe z klasické mechaniky.

<sup>2</sup> Připomeňme, že prostor (kvadraticky integrovatelných) funkcí (a jen takové funkce mohou popisovat stav částice) je vektorovým prostorem. Funkce je tedy prvkem vektorového prostoru a v tomto smyslu ji nazýváme vektorem.

<sup>3</sup> O problému vlastních čísel (hodnot) matic se lze seznámit na úvodní úrovni seznámit např. v J. KVASNICA: *Matematický aparát fyziky*. Academia, Praha 1997.

<sup>4</sup> V kvantové mechanice se obecně hovoří o stavovém vektoru z abstraktního Hilbertova prostoru. Zvolíme-li konkrétní reprezentaci, stavový vektor je buď (vlnovou) funkcí, nebo sloupcovým vektorem. Často se přitom užívá tzv. Diracovy symboliky – v ní  $|\psi\rangle$  označuje ket vektor a  $\langle\psi|$  bra vektor.

<sup>5</sup> Viz Feynmanovy přednášky z fyziky 3, Fragment 2002.



Obr. 1. Dvě ekvivalentní geometrická uspořádání molekuly čpavku

Vlastní vektory této matice jsou

$$\mathbf{u}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{u}_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (4)$$

a vlastní hodnota  $E_0$  je dvojnásobně degenerována. V důsledku tunelování však atom dusíku může být jak nahoře, tak i dole. Vektory (4) tedy nejsou stacionárními stavy soustavy. Tunelování vede tudíž k tomu, že hamiltonian soustavy musí mít nenulové maticové prvky i mimo diagonálu. Vzhledem k symetrii  $H_{12} = H_{21} = A$ . Potom je hamiltonian vyjádřen symetrickou maticí<sup>6</sup>

$$\mathbf{H} = \begin{pmatrix} E_0 & A \\ A & E_0 \end{pmatrix}, \quad (5)$$

kde  $E_0$  a  $A$  jsou reálná čísla.

**Úkol 1.** Ukažte, že vektory

$$\mathbf{u}_I = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{u}_{II} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \quad (6)$$

jsou vlastní (normalizované<sup>7</sup>) vektory hamiltonianu (5), a najděte příslušné vlastní hodnoty energie  $E_I$  a  $E_{II}$ .

<sup>6</sup> To, že matice (4) je symetrická, zaručuje, že vlastní hodnoty hamiltonianu budou reálné a že současně vlastní vektory příslušející různým vlastním hodnotám jsou ortogonální, tj.  $\mathbf{u}_I^T \mathbf{u}_J = \delta_{IJ}$ .

<sup>7</sup> Normalizované k jedničce. Vzhledem k pravděpodobnostní interpretaci musí být v kvantové mechanice každá vlnová funkce (stavový vektor) normalizována k jedničce.

♠

Obecné řešení časové Schrödingerovy rovnice

$$i\hbar\dot{\Psi}(t) = \mathbf{H}\Psi(t) \quad (7)$$

je dáno superpozicí stacionárních stavů<sup>8</sup>

$$\Psi(t) = \sum_n c_n \varphi_n \exp(-iE_n t/\hbar),$$

kde  $c_n$  jsou dány počáteční podmínkou a

$$\mathbf{H}\varphi_n(\mathbf{r}) = E_n \varphi_n(\mathbf{r}).$$

♠

V případě našeho dvouhladinového systému je obecný stav  $\mathbf{u}(t)$  superpozicí stacionárních stavů I a II:

$$\mathbf{u}(t) = \begin{pmatrix} u_1(t) \\ u_2(t) \end{pmatrix} = c_I \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \exp(-iE_I t/\hbar) + c_{II} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \exp(-iE_{II} t/\hbar). \quad (8)$$

$u_1(t)$ , resp.  $u_2(t)$  je amplituda pravděpodobnosti toho, že v čase  $t$  najdeme soustavu ve stavu  $\mathbf{u}_1$ , resp.  $\mathbf{u}_2$ .

**Úkol 2.** Najděte konstanty  $c_I$  a  $c_{II}$ , jestliže  $\mathbf{u}(0) = \mathbf{u}_1$ , a určete pravděpodobnost  $P_i(t)$  toho, že v čase  $t$  najdeme soustavu ve stavu  $\mathbf{u}_j$ , kde  $i = 1, 2$ .

Pravděpodobnost  $P_i(t)$  je periodickou funkcí času. Odpovídající frekvence odpovídá frekvenci, s níž se atom dusíku překlápí sem a tam. Tato frekvence je rovna 24 GHz. Překlápění atomu dusíku odpovídá kmitajícímu elektrickému dipólu, a proto molekula čpavku emituje nebo absorbuje elektromagnetické záření, a to v oblasti mikrovln (s vlnovou délkou 1,25 cm, již odpovídá frekvence 24 GHz). Vložíme-li pak molekuly čpavku do rezonanční dutiny, vytvoříme **čpavkový maser** (název vznikl nahrazením písmena  $l$  (*light*) písmenem  $m$  (*microwave*) ve slově laser).

<sup>8</sup> Totéž známe z teorie lineárních kmitů: obecný kmit je dán superpozicí vlastních módů.