Kvantová mechanika – cvičení s návody a výsledky

Wiki Skriptum FJFI

Ladislav Hlavatý, Libor Šnobl a Martin Štefaňák

11. září 2019

Kapitola 1

Klasická mechanika a statistická fyzika

Cvičení 1 *Napište rozdělovací funkci Gaussova pravděpodobnostního rozdělení. Interpretujte význam jejích parametrů. Vypočítejte jeho momenty. Napište vzorec pro*

$$I(n,a,b) := \int_{-\infty}^{\infty} x^n e^{-ax^2+bx} dx, \ n \in \mathbb{Z}, \ a,b \in \mathbb{C}, \ \mathrm{Re}\, a > 0.$$

(Zapamatujte si jej pro n=0,1,2!)

Návod: Rozdělovací funkce

$$\rho(x) = N e^{-\frac{(x-\alpha)^2}{2\sigma^2}}.$$

Normalizace:

$$\int\limits_{\mathbb{R}} \rho(x) dx = N\sqrt{2\pi}\sigma = 1, \quad \text{tj.} \quad N = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma}.$$

Momenty: definice

$$\langle (x-\alpha)^n \rangle_\rho = N \int\limits_{\mathbb{R}} (x-\alpha)^n e^{-\frac{(x-\alpha)^2}{2\sigma^2}} dx.$$

Výsledky se liší pro n liché, resp. sudé:

$$\langle (x-\alpha)^{2n+1} \rangle_\rho = 0, \quad \langle (x-\alpha)^{2n} \rangle_\rho = \sigma^{2n}(2n-1)!!$$

Hledaný vzorec:

$$I(n,a,b) = \frac{\partial^n}{\partial b^n} I(0,a,b) = \sqrt{\frac{\pi}{a}} \frac{\partial^n}{\partial b^n} e^{\frac{b^2}{4a}}$$

Cvičení 2 *Popište jednorozměrný harmonický oscilátor Hamiltonovskou formulací klasické mechaniky. Napište a vyřešte pohybové rovnice. Napište rovnici pro fázové trajektorie. Hodnotou jaké fyzikální veličiny jsou určeny?*

Návod: $H(p,q) = \frac{p^2}{2M} + \frac{1}{2}M\omega^2 q^2$
Pohybové rovnice
$$\dot{q} = \frac{\partial H}{\partial p},\ \dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial q},$$
tj.
$$\dot{q} = \frac{p}{M},\ \dot{p} = -M\omega^2 q.$$
Řešení: $q(t) = A\sin(\omega t + \alpha)$, $p(t) = A\omega M\cos(\omega t + \alpha)$,
Rovnice pro fázové trajektorie – získáme vyloučením času z pohybových rovnic, jsou určeny hodnotou energie
$$\frac{p^2}{2A^2\omega^2 M^2} + \frac{q^2}{2A^2} = 1.$$

Cvičení 3 *Jaká je hustota pravděpodobnosti nalezení klasického jednorozměrného oscilátoru s energií E v intervalu $(x, x+dx)$? Co potřebujeme znát, chceme-li tento pravděpodobnostní výrok změnit v deterministickou předpověď?*

Návod:
$$\rho(x)dx = \frac{\text{doba strávená v intervalu } \langle x, x+dx\rangle}{\text{půlperioda}} = \frac{\frac{dx}{|v(x)|}}{T/2} = \frac{dx}{\pi\sqrt{\frac{2E}{M\omega^2} - x^2}}.$$
Je vhodné si ověřit normalizaci
$$\int\limits_{-x_0}^{x_0} \rho(x)dx = 1, \quad x_0 = \sqrt{\frac{2E}{M\omega^2}}.$$
K deterministické předpovědi potřebujeme znát polohu a rychlost či hybnost v jednom časovém okamžiku (tj. počáteční podmínku).

Cvičení 4 *Nechť statistická rozdělovací funkce stavů klasického mechanického oscilátoru je dána Gibbsovou formulí*
$$w(p,q) = \frac{1}{Z}\, e^{-\frac{H(p,q)}{kT}}.$$
Spočtěte střední hodnotu energie.

Návod: Normalizace:
$$\frac{1}{Z}\int\limits_{\mathbb{R}^2} e^{-\frac{1}{kT}(\frac{p^2}{2M} + \frac{1}{2}M\omega^2 q^2)} dp\, dq = 1, \qquad \text{tj.} \quad Z = \frac{2\pi kT}{\omega}$$
Střední hodnota energie:
$$\frac{1}{Z}\int\limits_{\mathbb{R}^2} \left(\frac{p^2}{2M} + \frac{1}{2}M\omega^2 q^2\right) e^{-\frac{1}{2kT}(\frac{p^2}{M} + M\omega^2 q^2)} dp\, dq = kT$$

Kapitola 2

de Broglieova vlna

Cvičení 5 *Určete vlnovou délku elektromagnetického záření, jehož zdrojem je elektron - pozitronová anihilace v klidu*

$$e^+ + e^- \to \gamma + \gamma.$$

Návod: Ze zákona zachování energie je energie fotonu rovna $E = m_e c^2 = 0.511\,\mathrm{MeV}$, vlnová délka pak je $\lambda = \frac{c}{\nu} = \frac{ch}{m_e c^2} = 0.24\,10^{-11}\,\mathrm{m}$.

Cvičení 6 *Určete vlnovou délku de Broglieovy vlny pro molekulu kyslíku ve vzduchu vašeho pokoje a pro částici o hmotnosti 10 μg pohybující se rychlostí zvuku.*

Návod: Kyslík: $E = \frac{5}{2}kT \doteq 1{,}04 \cdot 10^{-20}\,\mathrm{J}$ $(T = 300\,\mathrm{K})$, $p = \sqrt{2m_{\mathrm{O}_2}E} = \ldots$, z de Broglieho vztahů pak plyne $\lambda = \frac{h}{p} = 2{,}04 \cdot 10^{-11}\,\mathrm{m}$. Částice: obdobně $\lambda = 1{,}95 \cdot 10^{-28}\,\mathrm{m}$.

Cvičení 7 *Podle de Broglieovy hypotézy určete ohyb způsobený průletem tenisového míčku ($m = 0.1$ kg) rychlostí 0,5 m/s oknem o rozměrech 1×1.5 m.*

Návod: Z Vlnění, optiky ... je známo $\theta \doteq \lambda/L$, kde L je šířka štěrbiny, po dosazení $1{,}3 \cdot 10^{-32}\,\mathrm{rad}$, resp. $9 \cdot 10^{-33}\,\mathrm{rad}$.

Cvičení 8 *Na jakou rychlost je třeba urychlit elektrony, aby bylo možno pozorovat jejich difrakci na krystalové mříži s charakteristickou vzdáleností atomů 0.1 nm?*

Návod: Z podmínky $\lambda \doteq 0{,}1\,\mathrm{nm}$ nalezneme přibližně $v = 7{,}3 \cdot 10^6\,\mathrm{ms}^{-1}$.

Cvičení 9 *Čemu je úměrná pravděpodobnost nalezení částice popsané de Broglieovou vlnou*

$$\psi_{\vec{p},E}(\vec{x},t) = Ae^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\vec{x}-Et)},$$

v oblasti $(x_1, x_2) \times (y_1, y_2) \times (z_1, z_2)$ *?*

Návod: Protože $|\psi(\vec{x},t)|^2 = |A|^2 = konst.$, je pravděpodobnost nalezení částice popsané de Broglieovou vlnou úměrná objemu uvažované oblasti.

Kapitola 3

Volná částice

Cvičení 10 *Pomocí Fourierovy transformace určete řešení Schrödingerovy rovnice pro volnou částici, které v čase $t = 0$ má tvar*

$$\psi(\vec{x}, 0) = g(\vec{x}) = C \exp[-Ax^2 + \vec{B}\vec{x}] \tag{3.1}$$

kde Re $A > 0$, $\vec{B} \in \mathbb{C}^3$, $C \in \mathbb{C}$.

Návod: Při řešení používáme Fourierovu transformaci (FT) ve tvaru

$$\tilde{\psi}(\vec{p}, t) = \frac{1}{(\sqrt{2\pi\hbar})^3} \int_{\mathbb{R}^3} e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{x}} \psi(\vec{x}, t) d^3x,$$

která převede Schrödingerovu rovnici na obyčejnou diferenciální rovnici 1. řádu v čase

$$i\hbar \frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial t} = \frac{p^2}{2M} \tilde{\psi}.$$

Řešení této rovnice je

$$\tilde{\psi}(\vec{p}, t) = e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{p^2}{2M}t} \tilde{\psi}(\vec{p}, 0), \tag{3.2}$$

kde $\tilde{\psi}(\vec{p}, 0)$ je FT počáteční podmínky $\psi(\vec{x}, 0)$, tj.

$$\tilde{\psi}(\vec{p}, 0) = \frac{1}{(\sqrt{2\pi\hbar})^3} \int_{\mathbb{R}^3} e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{x}} \psi(\vec{x}, 0) d^3x = \frac{C}{(\sqrt{2A\hbar})^3} e^{\frac{(\vec{B} - \frac{i}{\hbar}\vec{p})^2}{4A}}$$

Řešení v proměnné $\vec{x}$ získáme inverzní FT

$$\psi(\vec{x}, t) = \frac{1}{(\sqrt{2\pi\hbar})^3} \int_{\mathbb{R}^3} e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{x}} \tilde{\psi}(\vec{p}, t) d^3p = C\chi(t)^{-3/2} e^{\frac{\vec{B}^2}{4A}} e^{-A\frac{[\vec{x} - \vec{B}/(2A)]^2}{\chi(t)}}, \tag{3.3}$$

kde $\chi(t) = 1 + \frac{2iA\hbar}{M}t$.

Cvičení 11 *Čemu je úměrná hustota pravděpodobnosti pro řešení (3.3) z příkladu 10? Jak se mění poloha jejího maxima s časem? Čemu je rovna její střední kvadratická odchylka? Jak se mění s časem? Za jak dlouho se zdvojnásobí "šířka"vlnového balíku pro elektron lokalisovaný s přesností 1 cm a pro částici s hmotností 1 gram, jejíž těžiště je lokalizováno s přesností* 10^{-6}*m?*

Návod: Je zapotřebí spočítat $|\psi(x,t)|^2 \sim \left| e^{-A\frac{[\vec{x}-\vec{B}/(2A)]^2}{\chi(t)}} \right|^2$ (nezajímá nás časový vývoj normalizace, i v dalším počítání je vhodné vynechávat celkové faktory nezávisející na x). Odvoďte si a využijte $|e^z|^2 = e^{2\mathrm{Re}z}$. Pro určení střední kvadratické odchylky atd. porovnejte výsledek s tvarem Gaussovy rozdělovací funkce a najdete

$$\begin{aligned} \vec{x}_0(t) &= \frac{\mathrm{Re}\vec{B}}{2\mathrm{Re}A} + \frac{\hbar}{M}\mathrm{Im}\vec{B}\; t - \frac{\hbar}{M}\frac{\mathrm{Im}A}{\mathrm{Re}A}\mathrm{Re}\vec{B}\; t, \\ \sigma^2(t) &= \frac{1}{4\mathrm{Re}A} + \frac{\hbar^2}{M^2}\mathrm{Re}A\; t^2 + \frac{\hbar^2}{M^2}\frac{(\mathrm{Im}A)^2}{\mathrm{Re}A}\; t^2 - \frac{\hbar}{M}\frac{\mathrm{Im}A}{\mathrm{Re}A}\; t. \end{aligned}$$

Neurčitost polohy je stejná ve všech směrech, tj. $(\Delta x_j) = \sigma(t)$. Vlnový balík se může po konečnou dobu zužovat, pokud je $\mathrm{Im}A \neq 0$. Pro $A > 0$ se pouze rozšiřuje, vztahy se zjednoduší na

$$\begin{aligned} \vec{x}_0(t) &= \frac{\mathrm{Re}\vec{B}}{2A} + \frac{\hbar}{M}\mathrm{Im}\vec{B}\; t, \\ \sigma^2(t) &= \frac{1}{4A} + \frac{\hbar^2}{M^2}A\; t^2. \end{aligned}$$

Zdvojnásobení: pro elektron cca 3 s, pro částici cca 10^{12} let.

Cvičení 12 *Částice s hmotností m a hybností p letí kolmo proti stěně se dvěma štěrbinami v bodech* $\pm x_0$*. Šířka štěrbin je* σ_0*. Ve vzdálenosti d od štěrbin je stínítko. Určete hustotu pravděpodobnosti nalezení částice na stínítku. Předpokládejte, že po průchodu horní, resp. spodní štěrbinou, je stav částice možné popsat vlnovým balíkem se střední hodnotou polohy* $\pm x_0$ *a střední kvadratickou odchylkou rovnou* σ_0*.*

Návod: Vlnová funkce popisující stav částice po průchodu štěrbinami je superpozicí vlnových balíků

$$\psi(x,t) = \psi_1(x,t) + \psi_2(x,t), \quad \psi_{1,2}(x,t) = e^{-\frac{(x\mp x_0)^2}{4\sigma_0^2\chi(t)}} = e^{\frac{(x\mp x_0)^2(2\sigma_0^2 - i\frac{\hbar}{M}t)}{2(4\sigma_0^4+\frac{\hbar^2t^2}{M^2})}}.$$

Doba letu částice od štěrbin na stínítko je $t = \frac{dM}{p}$. Hustota pravděpodobnosti nalezení částice v místě x na stínítku je tedy rovna

$$\left|\psi(x, t = \frac{dM}{p})\right|^2 = |\psi_1(x) + \psi_2(x)|^2 = |\psi_1(x)|^2 + |\psi_2(x)|^2 + \psi_1(x)\overline{\psi_2}(x) + \overline{\psi_1}(x)\psi_2(x).$$

První dva členy odpovídají situaci jen s horní (resp. spodní) štěrbinou

$$|\psi_{1,2}(x)|^2 = e^{-\frac{(x \mp x_0)^2}{2\sigma^2}}, \quad \sigma^2 = \sigma_0^2 + \left(\frac{\hbar d}{4p\sigma_0}\right)^2.$$

Zbylé dva členy jsou zodpovědné za interferenci

$$\psi_1(x)\overline{\psi_2}(x) + \overline{\psi_1}(x)\psi_2(x) = 2e^{-\frac{x^2+x_0^2}{2\sigma^2}} \cos\left(\frac{4\hbar d p x x_0}{4p^2\sigma_0^4 + \hbar^2 d^2}\right).$$

Kapitola 4

Pravoúhlá potenciálová jáma

Cvičení 13 *Nalezněte vlastní hodnoty energie kvantové částice pohybující se v jednorozměrné konstantní "nekonečně hluboké potenciálové jámě" t.j. v potenciálu $V(x) = 0$ pro $|x| < a$ a $V(x) = \infty$ pro $|x| > a$. Nalezněte příslušné vlastní funkce.*
Návod: Předpokládejte, že vlnové funkce jsou všude spojité a nulové pro $|x| \geq a$.

Návod: Uvnitř "jámy" má vlnová funkce tvar vlnové funkce pro volnou částici. Z podmínek na okrajích $\psi(-a) = 0 = \psi(a)$ dostáváme soustavu homogenních rovnic, požadavek nulovosti jejího determinantu dává rovnici pro energii, výsledek je

$$E_n = \frac{1}{2M}\left(\frac{n\pi\hbar}{2a}\right)^2, \ n \in \mathbb{N}.$$

Vlastní funkce jsou (včetně normalizace)

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{2a}(x-a)\right).$$

Cvičení 14 *Nalezněte vlastní hodnoty energie kvantové částice pohybující se v jednorozměrné konstantní potenciálové jámě t.j. v potenciálu $V(x) = -V_0 < 0$ pro $|x| < a$ a $V(x) = 0$ pro $|x| > a$.*
Návod: Předpokládejte, že vlnové funkce jsou spojité a mají spojité derivace pro $\forall x \in \mathbb{R}$.

Návod: Nejprve si ukažte, že pro potenciály ve tvaru sudé funkce lze z libovolné vlastní funkce Hamiltoniánu $\psi(x)$ sestavit (ne nezbytně různou) vlastní funkci $\psi(-x)$ a odvoďte, že vlastní funkce lze v tomto případě volit sudé a liché. Využijte podmínek navázání (spojitost a spojitost 1. derivací) vlnových funkcí pro volnou částici v bodě $x = a$ (tím je díky symetrii splněna i podmínka v $x = -a$, jinak bychom měli 4 rovnice pro 4 konstanty) Výsledkem jsou následující vztahy pro sudý

$$\eta = \xi \tan \xi$$

a lichý případ

$$\eta = -\xi \cot \xi,$$

kde jsme označili

$$\xi = a\frac{\sqrt{2M(E+V_0)}}{\hbar}, \quad \eta = \frac{\sqrt{-2ME}}{\hbar}$$

Pro proměnné ξ a η navíc platí

$$\xi^2 + \eta^2 = \frac{2M}{\hbar} V_0 a^2 = \beta^2 = \text{konst.}$$

Energie částice v konečné potenciálové jámě jsou tedy určeny průsečíky kružnice $\xi^2+\eta^2 = \beta^2$ a křivek $\eta = \xi \tan \xi$, $\eta = -\xi \cot \xi$. Počet řešení n je dán poloměrem kružnice, tj. hloubkou a šířkou potenciálové jámy. Platí vztah

$$\frac{n-1}{2}\pi < \sqrt{2MV_0}\frac{a}{\hbar} \leq \frac{n}{2}\pi.$$

Kapitola 5

Harmonický oscilátor

Cvičení 15 *Ukažte, že Hermitovy polynomy lze definovat též způsobem*

$$H_n(z) = (-1)^n e^{z^2} \frac{d^n}{dz^n} e^{-z^2}$$

Návod: Stačí ukázat, že pravá strana splňuje rovnici

$$u'' = 2zu' - 2nu.$$

Po dosazení zadaného tvaru $H_n(z)$ do $u'' = 2zu' - 2nu$ využijte vhodně Leibnizova pravidla na $(n+1)$-ní derivaci součinu $2z.e^{-z^2}$ $(= -\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}z} e^{-z^2})$ a upravte. Shodnost definic pak plyne z věty o jednoznačnosti řešení diferenciálních rovnic (ještě porovnejte koeficient u nejvyšší mocniny z, aby bylo zaručeno splnění stejné počáteční podmínky).

Cvičení 16 *Ukažte, že platí vztah*

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{H_n(x)}{n!} \xi^n = \exp\left[x^2 - (x-\xi)^2\right].$$

Návod: Ověřte, že $(-1)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2} = \frac{\partial^n}{\partial \xi^n} \exp[x^2 - (x-\xi)^2]|_{\xi=0}$, $\forall n$.

Cvičení 17 *Použitím vytvořující funkce ze cvičení 16 ukažte, že*

$$\int_{\mathbb{R}} H_n(x) H_m(x) e^{-x^2} dx = 2^n n! \pi^{1/2} \delta_{nm}.$$

Ukažte, že odtud plyne ortonormalita vlastních funkcí harmonického oscilátoru.

Návod:

$$\begin{aligned} \int_{\mathbb{R}} H_n(x) H_m(x) e^{-x^2} dx &= \frac{\partial^n}{\partial \xi^n} \frac{\partial^m}{\partial \rho^m} \int_{\mathbb{R}} e^{x^2-(x-\xi)^2} e^{x^2-(x-\rho)^2} e^{-x^2} dx|_{\xi,\rho=0} \\ &= \frac{\partial^n}{\partial \xi^n} \frac{\partial^m}{\partial \rho^m} \sqrt{\pi} e^{2\xi\rho}|_{\xi,\rho=0} = 2^n n! \pi^{1/2} \delta_{nm}. \end{aligned}$$

Cvičení 18 *Mějme lineární harmonický oscilátor s vlastní frekvencí $\omega = \hbar/M$. Napište explicitní tvar vlastních funkcí hamiltoniánu $\psi_n(x)$ odpovídající energii $\hbar\omega(n+\frac{1}{2})$ pro $n = 0, 1, 2$. Určete příslušné hustoty pravděpodobnosti nalezení oscilátoru bodě x. Nakreslete grafy těchto rozdělení a srovnejte je s hustototu pravděpodobnosti výskytu klasického oscilátoru v daném místě. Jak vypadá hustota pravděpodobnosti, pokud je oscilátor ve stavu popsaném superpozicí $\psi(x) = c(\psi_0(x) + \frac{i}{\sqrt{2}}\psi_1(x))$.*

Výsledek:

$n = 0: \ \psi_0(x) = \frac{1}{\sqrt[4]{\pi}} e^{-\frac{x^2}{2}},$

$n = 1: \ \psi_1(x) = \frac{1}{\sqrt[4]{\pi}} \sqrt{2} x e^{-\frac{x^2}{2}},$

$n = 2: \ \psi(x) = \frac{1}{\sqrt[4]{\pi}} \frac{1}{\sqrt{2}} (2x^2 - 1) e^{-\frac{x^2}{2}}.$

Příslušné rozdělení polohy oscilátoru je dáno kvadrátem absolutní hodnoty vlnové funkce. V grafech je počet maxim roven stupni příslušného Hermiteova polynomu +1. Pro zadanou superpozici dostaneme hustotu pravděpodobnosti

$$|\psi(x)|^2 = \frac{2}{3\sqrt{\pi}}(1 + x^2)e^{-x^2}.$$

Kapitola 6

Moment hybnosti

Cvičení 19 *Spočítejte komutátory*

$$[\hat{L}_j, \hat{Q}_k], \ [\hat{L}_j, \hat{P}_k], \ [\hat{L}_j, \hat{L}_k],$$

kde

$$\hat{L}_j = \varepsilon_{jkl} \hat{Q}_k \hat{P}_l.$$

Návod: Vztahy jsou důsledkem kanonických komutačních relací

$$[\hat{Q}_j, \hat{P}_k] = i\hbar \delta_{jk},$$

a chování komutátoru vůči součinu operátorů

$$[\hat{A}\hat{B}, \hat{C}] = \hat{A}[\hat{B}, \hat{C}] + [\hat{A}, \hat{C}]\hat{B}.$$

Výsledkem je

$$\begin{aligned} [\hat{L}_j, \hat{Q}_k] &= i\hbar \varepsilon_{jkl} \hat{Q}_l, \\ [\hat{L}_j, \hat{P}_k] &= i\hbar \varepsilon_{jkl} \hat{P}_l, \\ [\hat{L}_j, \hat{L}_k] &= i\hbar \varepsilon_{jkl} \hat{L}_l. \end{aligned}$$

V klasické mechanice platí analogické vztahy pro Poissonovy závorky (až na faktor $i\hbar$). Z komutačních relací plyne, že operátory $\hat{\vec{Q}}, \hat{\vec{P}}, \hat{\vec{L}}$ jsou tzv. vektorové operátory (kvantová analogie vektorů $\vec{x}, \vec{p}, \vec{l}$, tj. objektů se správnými transformačními vlastnostmi vzhledem ke grupě rotací prostoru $SO(3)$).

Cvičení 20 *Ukažte, že vzájemně komutují operátory* $\hat{H} \equiv \frac{\hat{P}^2}{2M} + V(r), \ \hat{L}_j$ *a* $\hat{L}^2$.

Návod: Pro důkaz kompatibility operátorů $\hat{L}_j$, $\hat{L}^2$ a $\hat{P}^2$ využijte výsledků cvičení (19). Kompatibilita $\hat{L}_j$ a $V(r)$ plyne z tvaru operátorů složek momentu hybnosti ve sférických souřadnicích (viz. cvičení (21)), které na r nezávisí. Odtud už plyne kompatibilita $V(r)$ a $\hat{L}^2 = \hat{L}_1^2 + \hat{L}_2^2 + \hat{L}_3^2$. Z praktických důvodů se pro částici ve sféricky symetrickém poli za kompatibilní pozorovatelnou s $\hat{H}$ a $\hat{L}^2$ volí složka $\hat{L}_3$, která má ve sférických souřadnicích nejjednodušší tvar.

Cvičení 21 *Jak vypadají operátory* $\hat{Q}_j$, $\hat{P}_j$, $\hat{L}_j$, $j = 1,2,3 \equiv x,y,z$ *ve sférických souřadnicích?*

Návod: Operátory $\hat{Q}_j$ vzniknou dosazením definice sférických souřadnic

$$\begin{aligned}
\hat{Q}_1 &= r\sin\theta\cos\varphi,\\
\hat{Q}_2 &= r\sin\theta\sin\varphi,\\
\hat{Q}_3 &= r\cos\theta.
\end{aligned}$$

Pro výpočet operátorů $\hat{P}_j$ je vhodné využít pravidla pro derivaci složené funkce

$$\frac{\partial\psi}{\partial x_j} = \frac{\partial\psi}{\partial r}\frac{\partial r}{\partial x_j} + \frac{\partial\psi}{\partial\phi}\frac{\partial\varphi}{\partial x_j} + \frac{\partial\psi}{\partial\theta}\frac{\partial\theta}{\partial x_j},$$

a dosadit za $\frac{\partial r}{\partial x_j}$ atd. z definice sférických souřadnic. Výsledek je

$$\begin{aligned}
\hat{P}_1 &= -i\hbar\left(\cos\varphi\sin\theta\frac{\partial}{\partial r} - \frac{\sin\varphi}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi} + \frac{\cos\theta\cos\varphi}{r}\frac{\partial}{\partial\theta}\right),\\
\hat{P}_2 &= -i\hbar\left(\sin\varphi\sin\theta\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\cos\varphi}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi} + \frac{\cos\theta\sin\varphi}{r}\frac{\partial}{\partial\theta}\right),\\
\hat{P}_3 &= -i\hbar\left(\cos\theta\frac{\partial}{\partial r} - \frac{\sin\theta}{r}\frac{\partial}{\partial\theta}\right).
\end{aligned}$$

Při výpočtu $\hat{L}_j$ nezapomínejte na správný postup při skládání operátorů (např. $x\frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x}x - \mathbf{id} \neq \frac{\partial}{\partial x}x$), pro názornost si lze na konci všech operátorových identit představit vlnovou funkci, a pak postupovat jako při derivování složené funkce. Výsledkem je

$$\begin{aligned}
\hat{L}_1 &= i\hbar\left(\cos\varphi\cot\theta\frac{\partial}{\partial\varphi} + \sin\varphi\frac{\partial}{\partial\theta}\right),\\
\hat{L}_2 &= i\hbar\left(\sin\varphi\cot\theta\frac{\partial}{\partial\varphi} - \cos\varphi\frac{\partial}{\partial\theta}\right),\\
\hat{L}_3 &= -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}.
\end{aligned}$$

Cvičení 22 *S použitím vzorců pro jednotlivé složky momentu hybnosti ukažte, že operátor $\hat{L}^2$ má ve sférických souřadnicích tvar*

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} + \frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \left(\sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta} \right) \right].$$

Návod: Naučte se skládat (násobit) operátory.

Cvičení 23 *"Kvantové tuhé těleso"(např. dvouatomová molekula) s momentem setrvačnosti I volně rotuje v rovině. Najděte její možné hodnoty energie a určete příslušné vlastní funkce.*

Návod: $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2I}\frac{d^2}{d\varphi^2}$ (viz princip korespondence a klasickou kinetickou energii $\frac{1}{2}I\dot{\varphi}^2$). Řešením stacionární Schrödingerovy rovnice nalezneme řešení ve tvaru $\psi(\varphi) = Ae^{i\alpha\varphi} + Be^{-i\alpha\varphi}$, $\alpha = \ldots$ a z požadavku jednoznačnosti $\psi(\varphi) = \psi(\varphi + 2\pi)$ najdeme možné hodnoty energie $E_m = \frac{m^2\hbar^2}{2I}$, $m \in \mathbb{Z}$. Odpovídající vlastní funkce jsou $\psi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im\varphi}$.

Cvičení 24 *Najděte explicitní tvar kulových funkcí pro stavy s, p, d a určete příslušné pravděpodobnosti nalezení částice v daném prostorovém úhlu.*

Výsledek: Kulové funkce jsou určeny vztahem

$$Y_{l,m}(\theta,\varphi) = (-1)^m \sqrt{\frac{(2l+1)}{4\pi}\frac{(l-m)!}{(l+m)!}} P_l^m(\cos\theta) e^{im\varphi},$$

kde P_l^m jsou přidružené Legendreovy polynomy

$$P_l^m(t) = \frac{(1-t^2)^{\frac{m}{2}}}{2^l l!} \frac{d^{l+m}}{dt^{l+m}} (t^2-1)^l.$$

Pak už snadno nalezneme

$l = 0:\ \ Y_{0,0}(\theta,\varphi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$

$l = 1:\ \ Y_{1,1}(\theta,\varphi) = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin\theta e^{i\varphi},\ Y_{1,0}(\theta,\varphi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos\theta,\ Y_{1,-1}(\theta,\varphi) = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin\theta e^{-i\varphi}$

$l = 2:\ \ Y_{2,2}(\theta,\varphi) = \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2\theta e^{2i\varphi},\ Y_{2,1}(\theta,\varphi) = -\sqrt{\frac{15}{8\pi}} \cos\theta \sin\theta e^{i\varphi},$
$Y_{2,0}(\theta,\varphi) = \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (3\cos^2\theta - 1),\ Y_{2,-1}(\theta,\varphi) = \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \cos\theta \sin\theta e^{-i\varphi},$
$Y_{2,-2}(\theta,\varphi) = \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2\theta e^{-2i\varphi}.$

Pravděpodobnost nalezení pod daným prostorovým úhlem je rovna $|Y_{l,m}(\theta,\varphi)|^2 \sin\theta$. Výsledné rozdělení nezávisí na úhlu φ a je stejné pro kvantové číslo m a $-m$. Nakreslete si grafy (nejlépe trojrozměrné na počítači).

Cvičení 25 *Napište všechny vlnové funkce harmonického oscilátoru pro stavy s energiemi* $\frac{3}{2}\hbar\omega$, $\frac{5}{2}\hbar\omega$ *a* $\frac{7}{2}\hbar\omega$, *které jsou současně vlastní funkce* $\hat{L}^2, \hat{L}_3$. *Oscilátor má vlastní frekvenci* $\omega = \hbar/M$.

Návod: Společné vlastní funkce $\hat{H}, \hat{L}^2, \hat{L}_3$ mají tvar

$$\psi_{n,l,m}(r,\theta,\varphi) = K_{nl} r^l e^{-\frac{r^2}{2}} L_n^{l+\frac{1}{2}}(r^2) Y_{l,m}(\theta,\varphi),$$

kde $L_n^\beta(z)$ jsou zobecněné Laguerrovy polynomy

$$L_n^\beta(z) = \frac{1}{n!} e^z z^{-\beta} \frac{d^n}{dz^n}\left(e^{-z} z^{n+\beta}\right).$$

Normalizační konstanta je rovna

$$K_{nl} = \frac{2}{\sqrt[4]{\pi}} \sqrt{\frac{2^{n+l} n!}{(2n+2l+1)!!}}.$$

Výsledky jsou následující:

$E = \frac{3}{2}\hbar\omega:\ \ n = l = m = 0$

$$\psi_{0,0,0}(r,\theta,\varphi) = \frac{1}{\pi^{\frac{3}{4}}} e^{-\frac{r^2}{2}}$$

$E = \frac{5}{2}\hbar\omega:\ \ n = 0,\ l = 1,\ m = -1, 0, 1$

$$\psi_{0,1,-1} = \frac{1}{\pi^{\frac{3}{4}}} r e^{-\frac{r^2}{2}} \sin\theta e^{-i\varphi}, \quad \psi_{0,1,0} = \frac{\sqrt{2}}{\pi^{\frac{3}{4}}} r e^{-\frac{r^2}{2}} \cos\theta, \quad \psi_{0,1,1} = -\frac{1}{\pi^{\frac{3}{4}}} r e^{-\frac{r^2}{2}} \sin\theta e^{i\varphi}$$

$E = \frac{7}{2}\hbar\omega:\ \ n = 1,\ l = m = 0$

$$\psi_{1,0,0} = \frac{\sqrt{\frac{2}{3}}}{\pi^{\frac{3}{4}}} \left(\frac{3}{2} - r^2\right) e^{-\frac{r^2}{2}}$$

$n = 0,\ l = 2,\ m = -2, -1, 0, 1, 2$

$$\psi_{0,2,-2} = \frac{1}{\sqrt{2}\pi^{\frac{3}{4}}} r^2 e^{-\frac{r^2}{2}} \sin^2\theta e^{-2i\varphi}, \quad \psi_{0,2,-1} = \frac{\sqrt{2}}{\pi^{\frac{3}{4}}} r^2 e^{-\frac{r^2}{2}} \cos\theta \sin\theta e^{-i\varphi}$$

$$\psi_{0,2,0} = \frac{1}{\sqrt{3}\pi^{\frac{3}{4}}} r^2 e^{-\frac{r^2}{2}} (\cos^2\theta - 1), \quad \psi_{0,2,1} = -\frac{\sqrt{2}}{\pi^{\frac{3}{4}}} r^2 e^{-\frac{r^2}{2}} \cos\theta \sin\theta e^{i\varphi}$$

$$\psi_{0,2,2} = \frac{1}{\sqrt{2}\pi^{\frac{3}{4}}} r^2 e^{-\frac{r^2}{2}} \sin^2\theta e^{2i\varphi}$$

Kapitola 7

Posunovací operátory

Cvičení 26 *Ukažte, že posunovací operátory pro moment hybnosti lze zavést jako*

$$\hat{L}_{\pm} = \hat{L}_1 \pm i\hat{L}_2.$$

Napište operátor $\hat{L}^2$ vyjádřený pomocí posunovacích operátorů $\hat{L}_{\pm}$ a $\hat{L}_3$.

Návod: Z komutačních relací pro složky momentu hybnosti odvozených v příkladu (19) určíme komutátory

$$\begin{aligned}[] [\hat{L}_3, \hat{L}_{\pm}] &= \pm\hbar L_{\pm}, \\ [\hat{L}^2, \hat{L}_{\pm}] &= 0. \end{aligned}$$

Pro $\hat{L}^2$ pak nalezneme dva možné zápisy

$$\hat{L}^2 = \hat{L}_+\hat{L}_- + \hat{L}_3^2 - \hbar\hat{L}_3 = \hat{L}_-\hat{L}_+ + \hat{L}_3^2 + \hbar\hat{L}_3.$$

Cvičení 27 *Posunovací operátory $\hat{L}_{\pm}$ působí na vlastní vektory momentu hybnosti $|l, m\rangle$ způsobem*

$$\hat{L}_{\pm}|l, m\rangle = \alpha^{\pm}_{lm}|l, m \pm 1\rangle.$$

Spočítejte koeficienty $\alpha^{\pm}_{lm}$.

Návod: Snadno lze nalézt s využitím předchozího cvičení $|\alpha^{\pm}_{lm}|^2$ (obložte předchozí výsledek $\langle l, m|$ a $|l, m\rangle$ a uvědomte si, že kety jsou vlastní vektory $\hat{L}^2$, $\hat{L}_3$). Výsledek je

$$|\alpha^{+}_{lm}|^2 = \hbar^2[l(l+1) - m(m+1)],\ |\alpha^{-}_{lm}|^2 = \hbar^2[l(l+1) - m(m-1)].$$

Fáze $\alpha^{\pm}_{lm}$ neplyne z algebry operátorů, závisí na konkrétní volbě fází kulových funkcí $Y_{l,m}$, pro standardní volbu uvedenou ve slabikáři (Condon-Shortleyova konvence) jsou $\alpha^{\pm}_{lm}$ reálné kladné.

Cvičení 28 *Kreační a anihilační operátory pro hamiltonián LHO jsou zavedeny způsobem*

$$\hat{a}_\pm = \sqrt{\frac{M\omega}{2\hbar}}\left(\hat{Q} \mp \frac{i}{M\omega}\hat{P}\right).$$

Ověřte, že splňují komutační relace

$$[\hat{H}, \hat{a}_\pm] = \pm\hbar\omega\hat{a}_\pm.$$

Dále ukažte, že platí vztahy

$$[\hat{a}_-, \hat{a}_+] = \hat{\mathbb{1}}, \quad \hat{H} = \hbar\omega\left(\hat{a}_+\hat{a}_- + \frac{1}{2}\right) = \hbar\omega\left(\hat{a}_-\hat{a}_+ - \frac{1}{2}\right).$$

Návod: Vztahy jsou přímým důsledkem kanonických komutačních relací

$$[\hat{Q}, \hat{P}] = i\hbar.$$

Cvičení 29 *Kreační a anihilační operátory působí na vlastní vektory hamiltoniánu LHO způsobem*

$$\hat{a}_\pm|n\rangle = \alpha_n^\pm|n \pm 1\rangle.$$

Spočítejte koeficienty $\alpha_n^\pm$*. Ukažte, že platí následující vztahy*

$$\hat{a}_+\hat{a}_-|n\rangle = n|n\rangle, \qquad |n\rangle = \frac{\hat{a}_+^n}{\sqrt{n!}}|0\rangle.$$

Návod: Obložte $\hat{H} = \hbar\omega(\hat{a}_-\hat{a}_+ - \frac{1}{2})$, resp. $\hat{H} = \hbar\omega(\hat{a}_+\hat{a}_- + \frac{1}{2})$ vlastními vektory hamiltoniánu harmonického oscilátoru (obdobně jako v předchozím cvičení), výsledek:

$$|\alpha_n^+|^2 = n + 1, \ |\alpha_n^-|^2 = n.$$

Ohledně fáze platí stejný komentář jako výše. V druhé části využijte $\hat{H} = \hbar\omega(\hat{a}_+\hat{a}_- + \frac{1}{2})$ a právě spočítané koeficienty $\alpha_n^\pm$.

Cvičení 30 *Najděte vlastní funkce* $\psi_\alpha(x)$ *anihilačního operátoru jednorozměrného harmonického oscilátoru s vlastní frekvencí* $\omega = \hbar/M$ *(koherentní stavy).*

Návod: Z tvaru anihilačního operátoru plyne, že vlastní funkce jsou řešení diferenciální rovnice

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\left(x + \frac{d}{dx}\right)\psi_\alpha(x) = \alpha\psi_\alpha(x).$$

Řešení existuje pro každé $\alpha \in \mathbb{C}$ a má tvar

$$\psi_\alpha(x) = C_\alpha e^{-\frac{(x-\sqrt{2}\alpha)^2}{2}}.$$

Normovací konstantu C_α můžeme zapsat ve tvaru

$$C_\alpha = |C_\alpha| e^{i\varphi_\alpha}, \quad \varphi_\alpha \in \mathbb{R}.$$

Velikost $|C_\alpha|$ určíme z normovací podmínky

$$1 = (\psi_\alpha, \psi_\alpha) \Rightarrow |C_\alpha| = \frac{1}{\sqrt[4]{\pi}} e^{-(\mathrm{Im}\alpha)^2}.$$

Fázi normovací konstanty φ_α vhodně zvolíme ve cvičení (36).

Kapitola 8

Výsledky měření

Cvičení 31 *Elektron v atomu vodíku je v základním stavu. Jaké jsou střední hodnoty složek polohy a hybnosti elektronu? Jaká je jeho střední vzdálenost od jádra?*

Návod: Vlnová funkce základního stavu elektronu je

$$\psi(x, y, z) = Ce^{-\frac{\sqrt{x^2+y^2+z^2}}{a_0}}.$$

Snadno zjistíme, že všechny střední hodnoty složek polohy a hybnosti jsou nulové, jak lze ostatně očekávat ze symetrie vlnové funkce. Pokud jde o střední vzdálenost elektronu od jádra, musíme nejprve najít příslušnou hustotu pravděpodobnosti. Funkci $\psi(x, y, z)$ je třeba převést do sférických souřadnic, vzít absolutní hodnotu na druhou, vynásobit jakobiánem a vyintegrovat přes prostorové úhly. Hustota pravděpodobnosti nalezení elektronu ve vzdálenosti r od jádra je pak rovna

$$w(r) = \frac{4}{a_0^3} r^2 e^{-\frac{2r}{a_0}}.$$

Střední vzdálenost elektronu od jádra je

$$\langle r \rangle_\psi = \int_0^\infty r w(r) dr = \frac{3}{2} a_0.$$

Cvičení 32 *Částice na přímce je ve stavu popsaném vlnovou funkcí*

$$\psi(x) = Ce^{-\frac{(x-x_0)^2}{4\sigma^2} + \frac{i}{\hbar} p_0 x}.$$

Určete střední hodnoty a střední kvadratické odchylky polohy a hybnosti.

Výsledek:

$$\langle\hat{Q}\rangle_\psi = x_0, \quad \Delta_\psi\hat{Q} = \sigma, \quad \langle\hat{P}\rangle_\psi = p_0, \quad \Delta_\psi\hat{P} = \frac{\hbar}{2\sigma}$$

Stav tedy mimimalizuje relace neurčitosti.

Cvičení 33 *Ukažte, že v jednorozměrném případě podmínka*

$$[\hat{A} - < \hat{A} >_\psi - i\alpha(\hat{B} - < \hat{B} >_\psi)]\psi = 0, \quad \alpha \in \mathrm{R}$$

pro operátory $\hat{A} = \hat{Q}, \hat{B} = \hat{P}$ je integrodiferenciální rovnicí, jejímiž jedinými řešeními jsou funkce

$$\psi(x) = C\exp[-Ax^2 + Bx], \quad A > 0$$

Návod: Prozatím si označte $\langle\hat{Q}\rangle_\psi = x_0$, $\langle\hat{P}\rangle_\psi = p_0$ a najděte řešení patřičné diferenciální rovnice

$$x\psi - x_0\psi - i\alpha(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\psi - p_0\psi) = 0.$$

Na závěr určete vztah mezi α, integrační konstantou a x_0, p_0 nalezením středních hodnot $\langle\hat{Q}\rangle_\psi$, $\langle\hat{P}\rangle_\psi$ a jejich porovnáním s x_0, p_0 (využijte výsledky cvičení 32).

Cvičení 34 *Určete pravděpodobnostní rozdělení hybností volné částice popsané vlnovou funkcí (3.3). Jaká je střední hodnota a střední kvadratická odchylka hybnosti částice? Specifikujte výsledky pro případ $A > 0$. Jak v tomto případě závisí na čase součin středních kvadratických odchylek polohy a hybnosti?*

Výsledek: Rozdělení hybností částice ve stavu ψ je dáno vztahem

$$w_\psi(\vec{p}) = |(\psi_{\vec{p}}, \psi)|^2 = |\tilde{\psi}(\vec{p})|^2,$$

kde $\psi_{\vec{p}}$ jsou zobecněné vlastní funkce operátoru hybnosti normované k δ-funkci. Skalární součin je vlastně Fourierovou transformací funkce $\psi(\vec{x})$. Tu jsme počítali v příkladě (10), viz. vztah 3.2, takže máme

$$\tilde{\psi}(\vec{p}, t) \approx e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{p^2}{2M}(t-t_0)} e^{\frac{(\vec{B}-\frac{i}{\hbar}\vec{p})^2}{4A}}.$$

Rozdělení hybností pak dostaneme stejným postupem jako v příkladě (11). Výsledkem je Gaussovo normální rozdělení

$$w_\psi(\vec{p}) \approx e^{-\frac{(\vec{p}-\vec{p}_0)^2}{2(\Delta p)^2}},$$

kde střední hodnota hybnosti $\vec{p_0}$ a její variance $(\Delta p)^2$ mají tvar

$$\vec{p_0} = \hbar\left(\mathrm{Im}\vec{B} - \frac{\mathrm{ImA}}{\mathrm{ReA}}\,\mathrm{Re}\vec{\mathrm{B}}\right), \quad (\Delta p)^2 = \frac{\hbar^2|A|^2}{\mathrm{ReA}}.$$

Ani jeden z výsledků nezávisí na čase, jak lze očekávat z faktu, že pro volnou částici je hybnost integrálem pohybu. Neurčitost hybnosti je stejná ve všech směrech, tj. $(\Delta p_j) = (\Delta p)$. V případě $A > 0$ se vztahy zjednoduší na

$$\vec{p}_0 = \hbar \mathrm{Im} \vec{B}, \quad (\Delta p) = \hbar \sqrt{A}.$$

Neurčitost polohy jsme počítali v příkladě 11, součin v čase t je roven

$$(\Delta x(t))\,(\Delta p) = \frac{\hbar}{2}\sqrt{1 + \frac{4A^2\hbar^2}{M^2}t^2} = \frac{\hbar}{2}|\chi(t)|.$$

Pro $A > 0$ tedy stav minimalizuje relace neurčitosti v čase $t = 0$.

Cvičení 35 *Lineární oscilátor s vlastní frekvencí $\omega = \hbar/M$ je ve stavu popsaném vlnovou funkcí*

$$\psi(x) = Cx^2 e^{-\frac{x^2}{2}}$$

S jakou pravděpodobností naměříme hodnoty energie rovné $\frac{1}{2}\hbar\omega$, resp. $\hbar\omega$, $\frac{3}{2}\hbar\omega$, $\frac{5}{2}\hbar\omega$? Jaká je střední hodnota energie oscilátoru? Čemu je rovna střední hodnota hybnosti?

Návod: Snadno zjistíme, že stav je superpozicí vlastních vektorů hamiltoniánu

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{3}}\psi_0 + \sqrt{\frac{2}{3}}\psi_2.$$

Lze tedy naměřit energie $\frac{1}{2}\hbar\omega$ a $\frac{5}{2}\hbar\omega$ s pravděpodobnostmi $P_0 = \frac{1}{3}$ a $P_2 = \frac{2}{3}$. Energii $\hbar\omega$ nelze naměřit (není ve spektru). Střední hodnota energie je rovna

$$\langle \hat{H} \rangle_\psi = \frac{11}{6}\hbar\omega.$$

Střední hodnotu hybnosti můžeme buď počítat přímo integrací v x-reprezentaci, nebo využít zápis operátoru $\hat{P}$ pomocí posunovacích operátorů. Výsledek je nula.

Cvičení 36 *Lineární oscilátor s vlastní frekvencí $\omega = \hbar/M$ je v koherentním stavu s amplitudou α. S jakou pravděpodobností naměříme hodnotu energie rovnu $(n + \frac{1}{2})\hbar\omega$? Jaká je střední hodnota energie oscilátoru?*

Návod: Pravděpodobnost naměření hodnoty $(n + \frac{1}{2})\hbar\omega$ je dána výrazem $P_n = |\langle n|\alpha\rangle|^2$. S použitím vztahu $|n\rangle = \frac{\hat{a}_+^n}{\sqrt{n!}}|0\rangle$ dostaneme pro amplitudu pravděpodobnosti

$$\langle n|\alpha\rangle = \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}}\langle 0|\alpha\rangle = \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}}\frac{1}{\sqrt[4]{\pi}}C_\alpha \int_{\mathbb{R}} e^{-\frac{x^2}{2}} e^{-\frac{(x-\sqrt{2}\alpha)^2}{2}} dx = \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} e^{-(\mathrm{Im}\alpha)^2} e^{i\varphi_\alpha} e^{-\frac{\alpha^2}{2}}$$

takže pravděpodobnost naměření energie $(n+\frac{1}{2})\hbar\omega$ je

$$P_n = \frac{|\alpha|^{2n}}{n!}e^{-|\alpha|^2}.$$

Pravděpodobnost je tedy dána Poissonovým rozdělením s parametrem $\lambda = |\alpha|^2$. Odtud už snadno určíme střední hodnotu energie

$$\langle \hat{H} \rangle_\alpha = \hbar\omega(|\alpha|^2 + \frac{1}{2}).$$

Stejný výsledek lze získat i rozepsáním hamiltoniánu pomocí posunovacích operátorů.

Zvolíme-li fázi koherentního stavu jako

$$\varphi_\alpha = \mathrm{Re}\alpha \mathrm{Im}\alpha,$$

zjednoduší se skalární součin $\langle n|\alpha\rangle$ do tvaru

$$\langle n|\alpha\rangle = \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}}e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}}.$$

Koherentní stav pak můžeme rozložit do báze vlastních vektorů hamiltoniánu způsobem

$$|\alpha\rangle = e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}}|n\rangle.$$

Pro tuto volbu fáze je normovací konstanta koherentního stavu rovna

$$C_\alpha = \frac{1}{\sqrt[4]{\pi}}e^{\frac{\alpha^2-|\alpha|^2}{2}}.$$

Cvičení 37 *Isotropní oscilátor s vlastní frekvencí $\omega = \hbar/M$ je ve stavu popsaném vlnovou funkcí*

$$\psi(x) = Ce^{-\frac{\vec{x}^2}{2}+i\vec{p}\cdot\vec{x}}.$$

S jakou pravděpodobností naměříme hodnoty energie rovné $\frac{5}{2}\hbar\omega$?

Návod: Nezapomeňte, že energie $\frac{5}{2}\hbar\omega$ třírozměrného harmonického oscilátoru je degenerovaná, musíte spočítat pravděpodobnosti přechodu do jednotlivých ortogonálních vlastních stavů příslušných k této energii a pak je sečíst. Výsledná pravděpodobnost: $\frac{p^2}{2}e^{-\frac{p^2}{2}}$.

Cvičení 38 *Nechť částice je popsána vlnovou funkcí*

$$\psi(x,y,z) = C(2x+y+z)\exp(-\alpha\sqrt{x^2+y^2+z^2}).$$

Jaké hodnoty kvadrátu momentu hybnosti můžeme naměřit? Jaké hodnoty z-ové složky momentu hybnosti můžeme naměřit a s jakou pravděpodobností? Jakou vlnovou funkcí popíšeme stav částice, pokud naměříme hodnotu $L_z = \hbar$?

Návod: Převeďte vlnovou funkci do sférických souřadnic. Funkce má tvar $f(r)\Psi(\theta,\varphi)$. Úhlová část vlnové funkce je lineární kombinací kulových funkcí s $l=1$

$$\Psi = \frac{2+i}{2\sqrt{3}}Y_{1-1} + \frac{1}{\sqrt{6}}Y_{10} - \frac{2-i}{2\sqrt{3}}Y_{11},$$

lze tedy naměřit jen $l=1$. Projekce momentu hybnosti do osy z mohou nabývat hodnot $L_z = -\hbar, 0, \hbar$, s pravděpodobnostmi

$$P_{-1} = \frac{5}{12}, \quad P_0 = \frac{1}{6}, \quad P_1 = \frac{5}{12}.$$

Po naměření hodnoty $L_z = \hbar$ stav částice popíšeme vlnovou funkcí

$$g(r,\theta,\varphi) = Y_{11}(\theta,\varphi)e^{-\alpha r}.$$

Cvičení 39 *Nechť částice je ve stavu popsaném vlnovou funkcí*

$$\psi = C(e^{i\varphi}\sin\theta + \cos\theta)g(r).$$

Jaké hodnoty L_z můžeme naměřit a s jakou pravděpodobností? Jaká je střední hodnota L_z v tomto stavu? Jaká je střední hodnota x-ové složky momentu hybnosti?

Návod: Úhlová část vlnové funkce je superpozice kulových funkcí Y_{11} a Y_{10}. Lze tedy naměřit $L_z = 0$ a $L_z = \hbar$ s pravděpodobnostmi $P_0 = \frac{1}{3}$ a $P_1 = \frac{2}{3}$. Střední hodnota L_z je $\frac{2}{3}\hbar$. Pro výpočet střední hodnoty x-ové složky momentu hybnosti je vhodné rozepsat $\hat{L}_x$ pomocí posunovacích operátorů $\hat{L}_\pm$ (viz. cvičení 26). Výsledek je $\langle\hat{L}_x\rangle_\Psi = -\frac{2}{3}\hbar$.

Cvičení 40 *Uvažujte systém s Hilbertovým prostorem $\mathcal{H} = \mathbb{C}^3$ a hamiltoniánem $\hat{H}$ daným maticí*

$$H = \varepsilon \begin{pmatrix} 0 & i & 0 \\ -i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Systém je ve stavu popsaném vektorem

$$|\psi\rangle = \frac{1}{2}(1-i, i, 1)^T.$$

Jaké hodnoty energie můžeme naměřit a s jakou pravděpodobností? Jaká je střední hodnota energie?

Návod: Spektrum $\hat{H}$ tvoří vlastní čísla $E_1 = \varepsilon, \quad E_2 = E_3 = -\varepsilon$, příslušné vlastní vektory jsou

$$|\phi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} i \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |\phi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} -i \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |\phi_3\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Můžeme tedy naměřit energii ε nebo $-\varepsilon$ s pravděpodobnostmi

$$\begin{aligned} p(E=\varepsilon) &= |\langle\phi_1|\psi\rangle|^2 = \frac{1}{8}, \\ p(E=-\varepsilon) &= |\langle\phi_2|\psi\rangle|^2 + |\langle\phi_3|\psi\rangle|^2 = \frac{7}{8}. \end{aligned}$$

Střední hodnotu energie můžeme spočítat dvěma způsoby

$$\langle\hat{H}\rangle_\psi = \langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle, \quad \text{resp.} \quad \langle\hat{H}\rangle_\psi = p(E=\varepsilon)\varepsilon + p(E=-\varepsilon)(-\varepsilon),$$

výsledek je $\langle\hat{H}\rangle_\psi = -\frac{3}{4}\varepsilon$.

Kapitola 9

Časový vývoj

Cvičení 41 *Lineární harmonický oscilátor s hmotností $M = \hbar/\omega$ je v čase $t = 0$ ve stavu popsaném vlnovou funkcí*

$$\psi(x,0) = C(1+\sqrt{2}x)e^{-\frac{x^2}{2}}.$$

Určete, jaké hodnoty energie můžeme naměřit a s jakou pravděpodobností. V jakém stavu je oscilátor v čase $t > 0$? Jak se mění střední hodnota polohy oscilátoru s časem?

Návod: Stav je superpozicí vlastních vektorů hamiltoniánu

$$\psi(0) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_0 + \psi_1).$$

Můžeme tedy naměřit energie $E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}$ a $E_1 = \frac{3}{2}\hbar\omega$ s pravděpodobnostmi $P_0 = P_1 = \frac{1}{2}$. Časový vývoj vlastních vektorů známe, stav oscilátoru v čase t je potom

$$\psi(t) = \frac{1}{\sqrt{2}}(e^{-i\frac{\omega}{2}t}\psi_0 + e^{-i\frac{3\omega}{2}t}\psi_1).$$

Pro určení závislosti střední hodnoty polohy na čase je vhodné přepsat operátor polohy pomocí kreačního a anihilačního operátoru. Výsledek je

$$\langle\hat{Q}\rangle(t) = \frac{1}{\sqrt{2}}\cos(\omega t).$$

Cvičení 42 *Nechť částice s hmotností M v jednorozměrné nekonečně hluboké potenciálové jámě šířky $2a$ je v čase $t = 0$ popsána vlnovou funkcí,*

$$\psi(x,0) = 0,\ \text{pro } |x| > a, \quad \psi(x,0) = \sin\left(\frac{\pi}{2a}(x-a)\right) + \sin\left(\frac{\pi}{a}(x-a)\right),\ \text{pro } |x| < a.$$

Jaká je pravděpodobnost, že částice se v čase $t \geq 0$ bude nacházet v intervalu $(-a, 0)$? V jakém čase je tato pravděpodobnost minimální, resp. maximální?

Návod: $\psi(x,0)$ je superpozice stacionárních stavů, viz. příklad 13

$$\psi(x,0)=\frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_1(x)+\psi_2(x)).$$

Snadno naleznete časový vývoj $\psi(x,t)$, pak stačí prointegrovat $|\psi(x,t)|^2$ přes $(-a,0)$ a normovat. Výsledek je

$$\begin{aligned} P_{(-a,0)}(t) &= \frac{1}{2}-\frac{4}{3\pi}\cos\left(\frac{3}{8M}\frac{\pi^2\hbar t}{a^2}\right), \\ t_{min} &= 0,\ P_{min}=\frac{3-8\pi}{6\pi}, \qquad t_{max}=\frac{8Ma^2}{\pi\hbar},\ P_{max}=\frac{3+8\pi}{6\pi}. \end{aligned}$$

Cvičení 43 *Lineární oscilátor s vlastní frekvencí $\omega=\hbar/M$ je v čase $t=0$ v koherentním stavu s amplitudou $\alpha\in\mathbb{R}$. V jakém stavu je v libovolném čase $t>0$? Jak vypadá příslušná vlnová funkce v x-reprezentaci. Čemu je úměrná hustota pravděpodobnosti nalezení oscilátoru v bodě x? Jak se mění střední hodnota a střední kvadratická odchylka polohy oscilátoru s časem?*

Návod: Z výsledku příkladu (36) plyne

$$|\alpha\rangle = e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}}|n\rangle.$$

Odtud snadno dostaneme výsledek

$$|\alpha(t)\rangle = e^{-\frac{i}{2}\omega t}|\alpha e^{-i\omega t}\rangle.$$

Stav tedy zůstává koherentní, s časem se pouze mění fáze jeho amplitudy $\alpha(t)=\alpha e^{-i\omega t}$. Vlnová funkce v x-reprezentaci má tedy tvar

$$\psi_\alpha(x,t)=\psi_{\alpha(t)}(x)=\frac{1}{\sqrt[4]{\pi}}e^{\frac{\alpha^2(e^{-2i\omega t}-1)}{2}}e^{-\frac{(x-\sqrt{2}\alpha e^{-i\omega t})^2}{2}}.$$

Pro hustotu pravděpodobnosti v bodě x pak dostaneme (po zahození všech členů nezávislých na x)

$$|\psi_\alpha(x,t)|^2\approx e^{-(x-\sqrt{2}\alpha\cos\omega t)^2}.$$

Je to Gaussovo normální rozdělení, jeho šířka se s časem nemění ($(\Delta x)=\sigma=\frac{1}{\sqrt{2}}$). Střední hodnota polohy oscilátoru v čase t je rovna

$$\langle\hat{Q}\rangle_\alpha(t)=x_0(t)=\sqrt{2}\alpha\cos(\omega t).$$

Cvičení 44 *Určete časový vývoj střední hodnoty a střední kvadratické odchylky hybnosti lineárního oscilátoru s vlastní frekvencí $\omega=\hbar/M$. Oscilátor je v čase $t=0$ v koherentním stavu s amplitudou $\alpha\in\mathbb{R}$.*

Návod: Z předchozího příkladu víme že $|\alpha(t)\rangle = |\alpha e^{-i\omega t}\rangle$ (globální fáze je irelevantní). Operátor $\hat{P}$ stačí rozepsat pomocí posunovacích operátorů, pak už snadno nalezneme výsledek

$$\langle \widehat{P} \rangle_\alpha(t) = -\sqrt{2}\hbar\alpha \sin{(\omega t)}.$$

Střední hodnoty polohy a hybnosti tedy sledují klasickou trajektorii, jak lze ostatně očekávat z Ehrenfestových teorémů. Podobným způsobem pro střední kvadratickou odchylku hybnosti dostaneme

$$(\Delta p) = \frac{\hbar}{\sqrt{2}}.$$

Koherentní stavy lineární harmonického oscilátoru tedy minimalizují Heisenbergovy relace neurčitosti. Na rozdíl od volné částice to platí v libovolném čase.

Cvičení 45 *Jak se s časem mění střední hodnota polohy částice (v libovolném stavu ψ) v elektromagnetickém poli?*

Návod:

$$\frac{d}{dt}\langle \hat{Q}_j \rangle = \frac{i}{\hbar}\langle [\hat{H}, \hat{Q}_j] \rangle = \ldots = \frac{1}{M}\langle \hat{P}_j - e\hat{A}_j \rangle \equiv \langle \hat{V}_j \rangle.$$

Výsledek odpovídá dle principu korespondence (nikoliv překvapivě) výsledku v klasické mechanice.

Kapitola 10

Spin

Cvičení 46 *Určete tvar matic operátorů projekce spinu do osy x, y, z v bázi společných vlastních vektorů $\hat{S}_z$ a $\hat{S}^2$ pro spin $\frac{1}{2}$.*

Návod: Spin je moment hybnosti. Společné vlastní vektory $\hat{S}_z$ a $\hat{S}^2$ jsou $|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle$ a $|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$ splňující

$$\begin{aligned}\hat{S}_z|\frac{1}{2}, \pm\frac{1}{2}\rangle &= \pm\frac{\hbar}{2}|\frac{1}{2}, \pm\frac{1}{2}\rangle, \\ \hat{S}^2|\frac{1}{2}, \pm\frac{1}{2}\rangle &= \frac{3}{4}\hbar^2|\frac{1}{2}, \pm\frac{1}{2}\rangle.\end{aligned}$$

$\hat{S}_z$ je v bázi svých vlastních vektorů reprezentováno diagonální maticí

$$S_z = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Matice S_x a S_y určíme pomocí posunovacích operátorů

$$\hat{S}_\pm = \hat{S}_x \pm i\hat{S}_y,$$

jejichž působení na kety $|\frac{1}{2}, \pm\frac{1}{2}\rangle$ známe (viz. příklad 27). Matice posunovacích operátorů mají tvar

$$S_+ = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad S_- = S_+^\dagger = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Odtud už snadno získáme matice operátorů $\hat{S}_x$ a $\hat{S}_y$. Výsledek lze zapsat ve tvaru

$$S_j = \frac{\hbar}{2}\sigma_j,$$

kde σ_j jsou Pauliho matice

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Cvičení 47 *Ukažte explicitně, že* $S^2 = \frac{3}{4}\hbar^2\mathbb{1}$. *Porovnejte tento výsledek s* $\hat{L}^2$.

Návod: Pro výpočet je vhodné použít komutační a antikomutační relace pro Pauliho matice

$$[\sigma_i, \sigma_j] = 2i\varepsilon_{ijk}\sigma_k, \qquad \{\sigma_i, \sigma_j\} = 2\delta_{ij}\mathbb{1},$$

ze kterých plyne vztah

$$\sigma_i\sigma_j = \frac{1}{2}\Big([\sigma_i, \sigma_j] + \{\sigma_i, \sigma_j\}\Big) = \delta_{ij}\mathbb{1} + i\varepsilon_{ijk}\sigma_k.$$

Porovnání s $\hat{L}^2$ - odpovídající l pro spin je $\frac{1}{2}$, tj. spin elektronu je poločíselný.

Cvičení 48 *Napište vlnovou funkci* $\Psi(\vec{x},)$ *základního stavu elektronu ve vodíku s hodnotou z–ové, resp. x–ové, resp. y–ové složky spinu rovné* $\hbar/2$.

Návod: Bez spinu je základní stav popsán vlnovou funkcí $\psi_1(r) = Ce^{-\frac{r}{a}}$. Protože $\hat{H}$ je ve spinovém prostoru diagonální, bude mít základní stav stejnou energii, jako když spin neuvažujeme, a odpovídající vlastní vektor má tvar $\Psi_{1,i}(r) = Ce^{-\frac{r}{a}}\,(a,b)^T$. Koeficienty a, b určíme tak, aby to byl současně vlastní vektor odpovídající složky spinu $\hat{S}_i$. Výsledek:

$$\Psi_{1,z+}(r) = Ce^{-\frac{r}{a}}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \Psi_{1,x+}(r) = \frac{C}{\sqrt{2}}e^{-\frac{r}{a}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \Psi_{1,y+}(r) = \frac{C}{\sqrt{2}}e^{-\frac{r}{a}}\begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}$$

Cvičení 49 *Jakým vektorem z* $\mathcal{H} = \mathbb{C}^2$ *můžeme popsat spin elektronu, jestliže víme, že má kladnou (zápornou) projekci spinu do směru* $\vec{n} = (\sin\theta\cos\varphi, \sin\theta\sin\varphi, \cos\theta)$*?*

Návod: Hledáme vlastní vektory operátoru

$$\vec{n}\cdot\vec{\sigma} = \begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta e^{-i\varphi} \\ \sin\theta e^{i\varphi} & -\cos\theta \end{pmatrix}$$

s vlastními čísly ± 1. Řešení je (včetně normalizace)

$$\psi_{\vec{n}+} = \begin{pmatrix} e^{-i\frac{\varphi}{2}}\cos\frac{\theta}{2} \\ e^{i\frac{\varphi}{2}}\sin\frac{\theta}{2} \end{pmatrix}, \quad \psi_{\vec{n}-} = \begin{pmatrix} e^{-i\frac{\varphi}{2}}\sin\frac{\theta}{2} \\ -e^{i\frac{\varphi}{2}}\cos\frac{\theta}{2} \end{pmatrix}.$$

Cvičení 50 *Nechť pro volnou částici se spinem* $1/2$ *je naměřena hodnota z–ové složky spinu* s_z=$\hbar/2$. *Jestliže vzápětí měříme hodnotu spinu do směru* $\vec{n}$ *daného prostorovými úhly* θ, φ, *jaké můžeme naměřit hodnoty a s jakou pravděpodobností? Jaká je střední hodnota projekce spinu do směru* $\vec{n}$*?*

Návod: Stav spinu po měření do osy z je dán vektorem $\psi_{z+} = (1,0)^T$. Amplituda pravděpodobnosti naměření kladné (záporné) hodnoty projekce spinu do směru $\vec{n}$ je dána skalárním součinem ψ_{z+} s příslušným vlastním vektorem (viz. předchozí příklad). Pravděpodobnosti jsou nezávislé na úhlu φ, výsledek je

$$P_+ = \frac{1}{2}(1+\cos\theta), \qquad P_- = \frac{1}{2}(1-\cos\theta).$$

Střední hodnota je rovna

$$\langle \vec{n}\cdot\hat{\vec{S}}\rangle_{z+} = \frac{\hbar}{2}\cos\theta.$$

Cvičení 51 *Částice se spinem $1/2$ je umístěna v konstantním magnetickém poli $\vec{B} = (0,0,B)$. V čase $t=0$ byla naměřena hodnota x-ové složka spinu částice $+\hbar/2$. Jakým vektorem bude popsán stav částice v čase $t>0$? S jakou pravděpodobností nalezneme v libovolném dalším čase hodnotu její x-ové složky spinu $+\hbar/2$ (resp. $-\hbar/2$)? Jak se s časem mění střední hodnota projekce spinu do osy x?*

Návod: Hamiltonián částice je roven

$$\hat{H} = \mu_0\vec{B}\cdot\vec{\sigma} = \mu_0 B\sigma_3.$$

Jeho vlastní čísla jsou $\pm\mu_0 B$, příslušné vlastní vektory $\psi_{z\pm}$.

Stav v čase $t>0$ je dán jako řešení Schrödingerovy rovnice

$$\hat{H}\psi = i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t},$$

s počáteční podmínkou

$$\psi(t=0) = \psi_{x+} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{z+}+\psi_{z-}).$$

V našem případě tak dostaneme (označíme $\omega = \frac{\mu_0 B}{\hbar}$)

$$\psi(t) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(e^{-i\omega t}\psi_{z+} + e^{i\omega t}\psi_{z-}\right) = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}e^{-i\omega t}\\ e^{i\omega t}\end{pmatrix}.$$

Pravděpodobnosti naměření kladné (záporné) projekce spinu do osy x v čase t jsou rovny

$$\begin{aligned} P_+ &= |(\psi_{x+},\psi(t))|^2 = \frac{1}{2}\left(1+\cos(2\omega t)\right), \\ P_- &= |(\psi_{x-},\psi(t))|^2 = \frac{1}{2}\left(1-\cos(2\omega t)\right). \end{aligned}$$

Střední hodnota projekce spinu do osy x v čase t je

$$\langle\hat{S}_x\rangle(t) = \frac{\hbar}{2}(P_+ - P_-) = \frac{\hbar}{2}\cos(2\omega t).$$

Cvičení 52 *Ukažte, že pokud výraz* $\exp[i\vec{a}\cdot\vec{\sigma}]$ *definujeme pomocí řady*

$$\exp[i\vec{a}\cdot\vec{\sigma}] := \sum_{n=0}^{\infty}\frac{(i\vec{a}\cdot\vec{\sigma})^n}{n!},$$

pak platí

$$\exp[i\vec{a}\cdot\vec{\sigma}] = \cos(|\vec{a}|)\mathbb{1} + i\frac{\vec{a}\cdot\vec{\sigma}}{|\vec{a}|}\sin(|\vec{a}|).$$

Návod: Spočtěte nejprve $(\vec{a}\cdot\vec{\sigma})^2$ a povšimněte si, že je to násobek jednotkové matice, pak sumu rozdělte na součet přes sudé a liché indexy.

Cvičení 53 *Částice se spinem* $1/2$ *je umístěna v konstantním magnetickém poli* $\vec{B} = (B,0,0)$*. V čase* $t = 0$ *byla naměřena hodnota její z-ové složky spinu* $+\hbar/2$*. S jakou pravděpodobností nalezneme v libovolném dalším čase hodnotu její y-ové složky spinu* $+\hbar/2$*? Jak se s časem mění střední hodnota projekce spinu do osy z?*

Návod: Počáteční stav spinu je popsán vektorem

$$\psi(t=0) = \psi_{z+} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

V čase $t > 0$ má řešení Pauliho rovnice v homogenním magnetickém poli tvar

$$\psi(t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\mu_0\vec{\sigma}\cdot\vec{B}t\right)\psi(0).$$

V našem případě dostaneme (označíme $\omega = \frac{\mu_0}{\hbar}B$)

$$\psi(t) = (\cos(\omega t)\mathbb{1} - i\sin(\omega t)\sigma_1)\,\psi(0) = \begin{pmatrix} \cos(\omega t) \\ -i\sin(\omega t) \end{pmatrix}.$$

Amplituda pravděpodobnosti naměření kladné projekce spinu do osy y v čase t je dána skalárním součinem $\psi(t)$ a ψ_{y+}. Výsledná pravděpodobnost je rovna

$$P_{S_y=\frac{\hbar}{2}} = \frac{1}{2}\left(1 - \sin\left(2\omega t\right)\right).$$

Střední hodnota projekce spinu do osy z v čase t je

$$\langle\hat{S}_z\rangle(t) = \frac{\hbar}{2}\psi^{\dagger}(t)\sigma_z\psi(t) = \frac{\hbar}{2}\cos(2\omega t).$$

Cvičení 54 *Najděte energie a vlnové funkce základního a prvního excitovaného stavu dvou nerozlišitelných částic se spinem 0, respektive 1/2, v poli isotropního harmonického oscilátoru.*

Návod:

- Spin 0:
  - základní stav - $E = 3\hbar\omega$, nedegenerovaný
  - 1. excitovaný stav - $E = 4\hbar\omega$, degenerace 3
- Spin 1/2:
  - základní stav - $E = 3\hbar\omega$, nedegenerovaný
  - 1. excitovaný stav - $E = 4\hbar\omega$, degenerace 12

Kapitola 11

Poruchová teorie

Cvičení 55 *Uvažujte systém s Hilbertovým prostorem* $\mathcal{H} = \mathbb{C}^4$. *K původnímu hamiltoniánu daného maticí*

$$H_0 = E_0 \begin{pmatrix} 15 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 3 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 3 \end{pmatrix}$$

přidáme poruchu tvaru

$$H' = E_0 \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Určete vlastní čísla celkového hamiltoniánu

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \varepsilon \hat{H}',$$

a porovnejte je s výsledkem poruchového výpočtu do 1. řádu.

Návod: Vlastní čísla neporušeného hamiltoniánu jsou

$$E_1^{(0)} = 15E_0, \quad E_2^{(0)} = 3E_0,$$

kde $E_1^{(0)}$ je nedegenerovaná, $E_2^{(0)}$ má degeneraci 3. Odpovídající vlastní vektory jsou vektory standardní báze

$$|\phi_1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |\phi_2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |\phi_3\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |\phi_4\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Přesná vlastní čísla celkového hamiltoniánu jsou rovna

$$E_1 = 15E_0, \quad E_2 = 3E_0, \quad E_3 = (3-\varepsilon)E_0, \quad E_4 = (3+\varepsilon)E_0.$$

Pro poruchový výpočet musíme použít zvlášť postup pro prostou vlastní hodnotu $E_1^{(0)}$ a pro degenerovanou hodnotu $E_2^{(0)}$. V případě prosté vlastní hodnoty $E_1^{(0)}$ dostaneme do 1. řádu poruchového rozvoje

$$E_1(\varepsilon) = E_1^{(0)} + \varepsilon\langle\phi_1|\hat{H}'|\phi_1\rangle = 15E_0.$$

Pro degenerovanou hodnotu musíme nejprve určit matici operátoru poruchy v podprostoru odpovídajícím hodnotě $E_2^{(0)}$,

$$H'_{E_2^{(0)}} = \left(\langle\phi_i|\hat{H}'|\phi_j\rangle\right), \quad i,j = 2,3,4.$$

V tomto případě dostaneme

$$H'_{E_2^{(0)}} = \begin{pmatrix} 0 & E_0 & 0 \\ E_0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Vlastní čísla této matice jsou

$$\lambda_1 = 0, \quad \lambda_2 = -E_0, \quad \lambda_3 = E_0.$$

Odtud dostaneme energie $E_2^{(0)}$ do 1. řádu

$$\begin{aligned} E_2(\varepsilon) &= E_2^{(0)} + \varepsilon\lambda_1 = 3E_0, \\ E_3(\varepsilon) &= E_2^{(0)} + \varepsilon\lambda_2 = (3-\varepsilon)\ E_0, \\ E_4(\varepsilon) &= E_2^{(0)} + \varepsilon\lambda_3 = (3+\varepsilon)\ E_0. \end{aligned}$$

1. řád poruchové teorie zde dává přesné výsledky.

Cvičení 56 *Lineární harmonický oscilátor je v homogenním gravitačním poli. Určete energie oscilátoru do 2. řádu poruchového rozvoje.*

Návod: Porucha je $\hat{H}' = F\hat{Q}$. Při výpočtu maticových elementů $\langle n|\hat{H}'|m\rangle$ je vhodné rozepsat operátor polohy pomocí posunovacích operátorů. První oprava n-té hladiny $E_n^{(1)} = \langle n|\hat{H}'|n\rangle$ je rovna nule. Oprava druhého řádu je pro všechny hladiny stejná

$$E_n^{(2)} = \sum_{j\neq n} \frac{\left|\langle j|\hat{H}'|n\rangle\right|^2}{E_n - E_j} = -\frac{F^2}{2M\omega^2}.$$

Energie oscilátoru v homogenním poli jsou do druhého řádu rovny

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega - \frac{F^2}{2M\omega^2}.$$

Ve skutečnosti je to přesný výsledek, protože celkový hamiltonián lze upravit na čtverec

$$\hat{H} = \frac{\hat{P}^2}{2M} + \frac{1}{2}M\omega^2\hat{Q}^2 + F\hat{Q} = \frac{\hat{P}^2}{2M} + \frac{1}{2}M\omega^2\left(\hat{Q} + \frac{F}{M\omega^2}\right)^2 - \frac{F^2}{2M\omega^2}.$$

Cvičení 57 *Najděte v 1. řádu poruchové teorie energii základního stavu atomu helia.*

Návod:
Neporušený systém ... 2 elektrony v poli jádra.
Porucha ... elektrostatická interakce mezi elektrony $\hat{H}' = \tilde{e}^2/|\vec{x}^{(1)} - \vec{x}^{(2)}|$.
Základní stav neporušeného $\hat{H}_0$ (zdůvodněte a ověřte normalizaci)

$$\phi(\vec{x}^{(1)}, \vec{x}^{(2)}, \xi^{(1)}, \xi^{(2)}) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\psi_0^{(1)}(\vec{x}^{(1)}, \xi^{(1)})\psi_0^{(-1)}(\vec{x}^{(2)}, \xi^{(2)}) - \left((\vec{x}^{(1)}, \xi^{(1)}) \leftrightarrow (\vec{x}^{(2)}, \xi^{(2)})\right)\right),$$

kde

$$\psi_0^{(\alpha)}(\vec{x}, \xi) = \pi^{-1/2}(Z/a)^{3/2}\exp(-Zr/a)\delta_{\xi,\alpha}, \quad \xi = \pm 1.$$

Při výpočtu $E_0^{(1)} = \langle\phi|\hat{H}'|\phi\rangle$ využijte (viz Formánek: úvod do kvantové teorie)

$$\frac{1}{|\vec{x} - \vec{y}|} = \frac{1}{R}\sum_{l=0}^{\infty}\left(\frac{r}{R}\right)^l P_l^0(\cos\theta), \qquad r < R,\ r = |\vec{x}|,\ R = |\vec{y}|,\ \vec{x}\cdot\vec{y} = rR\cos\theta$$

a

$$P_l^0(\vec{n}_1 \cdot \vec{n}_2) = \frac{4\pi}{2l+1}\sum_{m=-l}^{l} Y_{lm}^*(\vec{n}_1)Y_{lm}(\vec{n}_2), \quad |\vec{n}_j| = 1.$$

Integrály pro $m \neq 0$, resp. $l \neq 0$ vymizí (proč?), zbývá provést triviální integraci přes úhly a per partes v r_1, r_2. Výsledek:

$$E_0^{(1)} = \frac{5\tilde{e}^2}{4a}, \quad E_0 = E_0^{(0)} + E_0^{(1)} + \ldots \simeq -74,8\text{eV}.$$