3 Formalismus kvantové mechaniky

3.1 Vlastnosti hermiteovského sdružení a hermiteovských operátorů

(a) Nechť A a B jsou lineární operátory na Hilbertově prostoru. Ukažte, že $(AB)^+ = B^+A^+$.
(b) Ukažte, že vlastní hodnoty hermiteovského operátoru jsou reálné.
(c) Nechť $|\varphi\rangle$ a $|\psi\rangle$ jsou vlastní vektory hermiteovského operátoru patřící k různým vlastním hodnotám. Ukažte, že $\langle\varphi|\psi\rangle = 0$.

3.2 Operátor souřadnice

Uvažujme o Hilbertově prostoru odpovídajícím částici v jednorozměrném prostoru. Vyjádřete operátor souřadnice $\hat{x}$ v hybnostní reprezentaci, určete jeho vlastní hodnoty a vlastní funkce.

3.3 Operátor hybnosti

Ukažte, že operátor $\hat{p}_x$ je hermiteovský.
(a) S využitím hybnostní reprezentace.
(b) S využitím souřadnicové reprezentace.

3.4 Normování a skalární součin •

Mějme systém s ortonormální bází $\{|n\rangle\}_{n=1}^{\infty}$ a v ní zavedené následující stavy:

$$\begin{aligned}
|\psi\rangle &= N_1(|1\rangle + |2\rangle) \\
|\varphi\rangle &= N_2(|1\rangle - |2\rangle) \\
|\xi\rangle &= N_3(2\,|1\rangle + |2\rangle - i\,|3\rangle) \\
|\eta\rangle &= N_4 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{2^n}\,|n\rangle
\end{aligned}$$

(a) Najděte normovací foktory N_1, N_2, N_3, N_4.
(b) Vyčíslete všechny skalární součiny mezi výše uvedenými stavy.

3.5 Maticové elementy pro nekonečně hlubokou potenciálovou jámu •

V předchozí sekci jsme odvodili, že stacionární stavy nekonečně hluboké potenciálové jámy od 0 po L jsou v souřadnicové reprezentaci vyjádřeny $\langle x|n\rangle = \sqrt{\frac{2}{L}}\sin\frac{n\pi x}{L}$. V bazi tvořené těmito stavy spočtěte maticové elementy $(x^2)_{11}$, $(p)_{12}$ a $(p)_{21}$ operátorů $\hat{x^2}$ a $\hat{p}$.

3.6 Molekula NH_3 •

Uvažujme zjednodušený popis molekuly NH_3 jako dvojhladinový systém s ortonormální bází $|1\rangle$ a $|2\rangle$. V této bázi jsou vyjádřeny následující fyzikální operátory:

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} E_0 & -T \\ -T & E_0 \end{pmatrix} \qquad \text{a} \qquad \hat{x} = \begin{pmatrix} a & 0 \\ 0 & -a \end{pmatrix},$$

kde E_0, T a a jsou reálné kladné konstanty.
(a) Najděte vlastní stavy a vlastní hodnoty operátoru $\hat{x}$.
(b) Najděte vlastní stavy a vlastní hodnoty operátoru $\hat{H}$.
(c) Najděte matici přechodu mezi bazí $|1\rangle$, $|2\rangle$ a bází vlastních stavů operátoru $\hat{H}$.

(d) Vyjádřete operátor $\hat{x}$ v bázi vlastních stavů operátoru $\hat{H}$.
(e) Vyjádřete operátor časového vývoje $\hat{U}$ v bázi vlastních stavů operátoru $\hat{H}$.
(f) Vyjádřete operátor časového vývoje $\hat{U}$ v bázi vlastních stavů operátoru $\hat{x}$.
(g) V čase $t = 0$ máme stav $|\psi(t = 0)\rangle = |1\rangle$. S pomocí operátoru časového vývoje zapište stav $|\psi(t)\rangle$ pro libovolný budoucí čas v bázi vlastních stavů operátoru $\hat{H}$ i $\hat{x}$.

3.7 Dvoustavový systém 1

Uvažujme o dvourozměrném Hilbertově prostoru. Operátor A je v ortonormální bázi $\{|1\rangle, |2\rangle\}$ reprezentován maticí

$$\begin{pmatrix} 2 & i\sqrt{2} \\ -i\sqrt{2} & 3 \end{pmatrix} .$$

(a) Je operátor A hermiteovský?
(b) Stanovte vlastní hodnoty a vlastní vektory (tyto vyjádřete v bázi $\{|1\rangle, |2\rangle\}$).
(c) Stanovte matice reprezentující projektory do vlastních vektorů.
(d) Ověřte, že je splněna relace úplnosti.

3.8 Dvoustavový systém 2

Uvažujme o kvantovém systému se dvěma možnými stavy. Je popsán hamiltoniánem (pro jednoduchost položme $\hbar = 1$)

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

(a) Najděte vlastní stavy a vlastní hodnoty $\hat{H}$.
(b) Explicitně vyjádřete operátor časového vývoje e^{-iHt}.
(c) Nechť jsou

$$|\psi(0)\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \qquad \text{a} \qquad \hat{O} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix}$$

stavový vektor v čase $t = 0$ a operátor příslušný pozorovatelné O. Najděte pravděpodobnost, že v čase $t > 0$ naměříme hodnotu $O = 2$.

3.9 Dvoustavový systém 3

Kvantový systém se dvěma ortogonálními stavy $|1\rangle$ a $|2\rangle$ je popsán hamiltoniánem

$$\hat{H} = i|2\rangle\langle 1| - i|1\rangle\langle 2| .$$

V čase $t = 0$ byla změřena hodnota -1 pozorovatelné O příslušné operátoru

$$\hat{O} = 3|1\rangle\langle 1| - |2\rangle\langle 2| .$$

Najděte nejmenší čas $t > 0$, ve kterém nastane $|\psi(t)\rangle = |1\rangle$.

3.10 Vlastnosti komutátorů •

S využitím definice komutátoru dokažte následující vztahy:
(a)$[\hat{A}, \hat{B} + \hat{C}] = [\hat{A}, \hat{B}] + [\hat{A}, \hat{C}]$
(b)$[\hat{A}, \beta\hat{B}] = \beta[\hat{A}, \hat{B}]$
(c)$[\hat{A}, \beta\hat{A}^n] = 0$

3.11 Komutátory pro harmonický oscilátor •

Mějme Hamiltonián harmonického oscilátoru $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2$. S využitím vlastností komutátoru odvozených v příkladu 3.10 spočtěte komutátory $[\hat{x}, \hat{H}]$ a $[\hat{p}, \hat{H}]$
(a) s pomocí elementárního komutátotru $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$.
(b) v x-reprezentaci.
(c) v p-reprezentaci.

3.12 Měření částice v nekonečně hluboké jámě 1

Uvažujme o částici o hmotnosti m v nekonečně hluboké potenciálové jámě o šířce a. Vlastní vektory hamiltoniánu označme $|1\rangle$, $|2\rangle$, ... V čase $t = 0$ je stav částice popsán stavovým vektorem $|\psi(0)\rangle = a_1|1\rangle + a_2|2\rangle + a_3|3\rangle + a_4|4\rangle$.
(a) Jaká je pravděpodobnost, že ve stavu $|\psi(0)\rangle$ naměříme vyšší hodnotu energie než $3\pi^2\hbar^2/ma^2$?
(b) Jaká je střední hodnota energie a střední kvadratická odchylka od této střední hodnoty ve stavu $|\psi(0)\rangle$?
(c) Určete stavový vektor $|\psi(t)\rangle$ v čase t. Budou výsledky bodů (a) a (b) platit pro libovolný čas t?
(d) Při měření energie byla získána hodnota $8\pi^2\hbar^2/ma^2$. V jakém stavu se po měření částice nachází? Jak by dopadlo opětovné měření energie?

3.13 Měření částice v nekonečně hluboké jámě 2 ✡

Částice o hmotnosti m se pohybuje v jednorozměrné nekonečně hluboké potenciálové jámě vymezené intervalem $x \in (0, a)$. V čase $t = 0$ se částice nachází ve stavu $|\psi(0)\rangle$, o kterém jsou známy následující skutečnosti:
(a) Výsledek jakéhokoli měření energie je menší $3\pi^2\hbar^2/ma^2$.
(b) Střední energie je rovna $7\pi^2\hbar^2/8ma^2$.
(c) Střední hodnota operátoru hybnosti $\hat{p}$ je rovna $4\hbar/3a$.
Pokuste se co možná nejpřesněji určit stav $|\psi(0)\rangle$ a najděte střední hodnotu $\hat{p}^4$ v čase $t \geq 0$.

3.14 Trojrozměrná vlnová funkce

Uvažujme o částici popsané stavovým vektorem $|\psi\rangle$, kterému v souřadnicové reprezentaci odpovídá funkce $\psi(x, y, z) = \psi(\mathbf{r})$.
(a) Vyjádřete pravděpodobnost, že při měření veličiny x získáme hodnotu v intervalu (x_1, x_2).
(b) Vyjádřete pravděpodobnost, že při měření veličiny p_x získáme hodnotu v intervalu (p_1, p_2).
(c) Vyjádřete pravděpodobnost, že při současném měření veličin x a p_y získáme hodnotu x v intervalu (x_1, x_2) a hodnotu p_y v intervalu (p_1, p_2).
Pomůcka: v části (a) a (b) použijte variantu postulátu IV odpovídající spojitému a degenerovanému spektru. Za úplný systém vlastních vektorů operátoru $\hat{x}$ lze vzít $\{|xyz\rangle\}$, $x \in (-\infty, \infty)$, $y \in (-\infty, \infty)$, $z \in (-\infty, \infty)$. Za úplný systém vlastních vektorů operátoru $\hat{p}_x$ $\{|p_x yz\rangle\}$, $p_x \in (-\infty, \infty)$, $y \in (-\infty, \infty)$, $z \in (-\infty, \infty)$. K části (c): vzhledem k tomu, že operátory $\hat{x}$ a $\hat{p}_y$ komutují, lze uvažovat o jedné kombinované veličině, o jednom měřicím přístroji, a lze použít přirozené rozšíření postulátu IV, kde vystupuje soubor vlastních vektorů $\{|xp_y z\rangle\}$ kombinované veličiny.

3.15 Operátory spinu

Uvažujme o prostoru spinových stavů částice se spinem 1/2, $|1/2\rangle$ ($|-1/2\rangle$) nechť značí stavový vektor s hodnotou průmětu spinu do osy z rovnou $\hbar/2$ ($-\hbar/2$). Složky $\hat{s}_x$, $\hat{s}_y$, $\hat{s}_z$ operátoru spinu

$\hat{\mathbf{s}}$ jsou v bázi $\{|1/2\rangle, |-1/2\rangle\}$ reprezentovány následujícími maticemi

$$\hat{s}_x = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \; \hat{s}_y = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \; \hat{s}_z = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

(a) Jaké jsou možné výsledky měření veličin s_x, s_y, s_z?
(b) Částice se nachází ve stavu $|1/2\rangle$. Určete možné výsledky měření veličin s_x, s_y a s_z, jejich pravděpodobnosti a
(c) střední hodnoty těchto veličin.

3.16 Rotace spinu

Uvažujme o operátoru $\hat{\sigma}_x$ působícím na Hilbertově prostoru spinových stavů částice se spinem $1/2$, $\hat{\sigma}_x = (2/\hbar)\hat{s}_x$, kde operátor $\hat{s}_x$ je definovaný v zadání příkladu 3.15. Ukažte, že

$$\mathrm{e}^{i\alpha\hat{\sigma}_x} = I\cos\alpha + i\hat{\sigma}_x \sin\alpha\,.$$

3.17 Bakerovo-Hausdorffovo lemma ✡

Heisenbergův obraz časového vývoje používá časově nezávislých stavů $|\psi\rangle = |\psi(0)\rangle$ a časově závislých operátorů $\hat{A}(t) = \mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}}\hat{A}\,\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}}$. Při jejich výpočtu lze často využít Bakerovo-Hausdorffovo lemma:

$$\mathrm{e}^{\hat{B}}\hat{A}\,\mathrm{e}^{-\hat{B}} = \hat{A} + [\hat{B},\hat{A}] + \frac{1}{2!}[\hat{B},[\hat{B},\hat{A}]] + \frac{1}{3!}[\hat{B},[\hat{B},[\hat{B},\hat{A}]]] + \ldots$$

Dokažte jeho platnost.
Nápověda: Použijte Taylorův rozvoj operátoru $\hat{\phi}(t) = \mathrm{e}^{t\hat{B}}\hat{A}\,\mathrm{e}^{-t\hat{B}}$ vzhledem k proměnné t.

3.18 Částice v homogenním poli ✡

Částice s hmotností m se pohybuje v jednorozměrném potenciálu $U(x) = -\alpha x$ ($\alpha > 0$).
(a) Určete časový vývoj veličiny $\Delta p = \sqrt{\langle\hat{p}^2\rangle - \langle\hat{p}\rangle^2}$, kde $\hat{p}$ je operátor hybnosti.
(b) Najděte časově závislou vlnovou funkci $\psi(x,t)$, víte-li, že $\psi(x,0) = \mathrm{e}^{ip_0x/\hbar - i\phi_0}$, kde p_0 a ϕ_0 jsou konstanty.