1. domácí úkol do cvičení ze základů kvantové mechaniky

Tomáš Záležák

Může foton předat stojícímu elektronu při fotoefektu všechnu svoji energii?
Lze to zjitit pomocí zákona zachování hybnosti a zákona zachování energie.

$$\begin{aligned} p_f + p_e &= p'_f + p'_e & \frac{h\nu}{c} &= m_e v' \\ E_f + E_e &= E'_f + E'_e & h\nu + m_e c^2 &= m'_e c^2 \end{aligned}$$

Dosazením první rovnice do druhé a dosazením relativistické hmotnosti vyjde:

$$\begin{aligned} m'_e v' c + m_e c^2 &= m'_e c^2 \\ m_e c^2 &= \frac{m_e}{\sqrt{1 - \frac{v'^2}{c^2}}}(c^2 - v'c) \\ 1 &= \frac{c - v'}{\sqrt{c^2 - v'^2}} \end{aligned}$$

Rovnost je splněna pro $v' = 0$, pak by však ze zákona zachování hybnosti muselo platit $\nu = 0$, takže by k žádnému jevu nedošlo. Dále je splněna pro $v' = c$, kdy by muselo ze zákona zachování hybnosti platit $h\nu = m'_e c^2$ a následně ze zákona zachování energie $m'_e = 0$, tj. elektron by musel mít nulovou klidovou hmotnost. Ani jedna z možností nemá fyzikální význam, při fotoefektu tedy nelze předat elektronu všechnu energii fotonu.

2. domácí úkol do cvičení ze základů kvantové mechaniky

Tomáš Záležák

Komutátor je definován takto:

$$[A, B] = A \cdot B - B \cdot A$$

1. Jsou zadány tyto operátory:

$$\begin{aligned} S_1 &= \frac{\hbar}{2}(|z,+\rangle\langle z,-| + |z,-\rangle\langle z,+|) &= \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \\ S_2 &= \frac{\hbar}{2}(-\mathrm{i}|z,+\rangle\langle z,-| + \mathrm{i}|z,-\rangle\langle z,+|) &= \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & -\mathrm{i} \\ \mathrm{i} & 0 \end{pmatrix} \\ S_3 &= \frac{\hbar}{2}(|z,+\rangle\langle z,+| - |z,-\rangle\langle z,-|) &= \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Platí $[S_i, S_j] = \mathrm{i}\hbar\varepsilon_{ijk}S_k$?

K ověření je potřeba vypočítat šest součinů matic a jejich rozdíly:

$$S_1S_2 = \frac{\hbar^2}{4}\begin{pmatrix} \mathrm{i} & 0 \\ 0 & -\mathrm{i} \end{pmatrix} \quad S_2S_1 = \frac{\hbar^2}{4}\begin{pmatrix} -\mathrm{i} & 0 \\ 0 & \mathrm{i} \end{pmatrix} \quad S_1S_2 - S_2S_1 = \frac{\hbar^2}{2}\begin{pmatrix} \mathrm{i} & 0 \\ 0 & -\mathrm{i} \end{pmatrix}$$

$$S_1S_3 = \frac{\hbar^2}{4}\begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad S_3S_1 = \frac{\hbar^2}{4}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \quad S_1S_3 - S_3S_1 = \frac{\hbar^2}{2}\begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$S_2S_3 = \frac{\hbar^2}{4}\begin{pmatrix} 0 & \mathrm{i} \\ \mathrm{i} & 0 \end{pmatrix} \quad S_3S_2 = \frac{\hbar^2}{4}\begin{pmatrix} 0 & -\mathrm{i} \\ -\mathrm{i} & 0 \end{pmatrix} \quad S_2S_3 - S_3S_2 = \frac{\hbar^2}{2}\begin{pmatrix} 0 & \mathrm{i} \\ \mathrm{i} & 0 \end{pmatrix}$$

Zřejmě platí, že $S_1S_2 - S_2S_1 = \mathrm{i}\hbar S_3$, $S_1S_3 - S_3S_1 = -\mathrm{i}\hbar S_2$ a $S_2S_3 - S_3S_2 = \mathrm{i}\hbar S_1$. Zbývající tři vztahy budou mít opačné znaménko, protože $[A, B] = -[B, A]$ a $\varepsilon_{ijk} = -\varepsilon_{jik}$. Bylo tak potvrzeno, že výše uvedený vztah platí.

2. Jaká je hodnota výrazů $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi S_i}$?

K výpočtu je potřeba použít tento vztah:

$$\mathrm{e}^A = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{A^n}{n!}$$

Lze snadno ověřit, že pro všechny tři operátory platí $S_i^2 = \left(\frac{\hbar}{2}\right)^2 \mathrm{E} = \left(\frac{\hbar}{2}\right)^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$, takže vyjde:

$$S_i^n = \begin{cases} (\hbar/2)^n\mathrm{E} & \Leftrightarrow \quad n = 2k \\ (\hbar/2)^n S_i & \Leftrightarrow \quad n = 2k+1, k \in \mathbb{N}_0 \end{cases}$$

Po dosazení vyjde:

$$\begin{aligned} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi S_1} &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\mathrm{i}^n(\varphi\hbar/2)^n S_1^n}{n!} = \mathrm{E}\sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k(\varphi\hbar/2)^{2k}}{2k!} + \mathrm{i}S_1\sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k(\varphi\hbar/2)^{2k+1}}{(2k+1)!} = \\ &= E\cos\varphi\hbar/2 + \mathrm{i}S_1\sin\varphi\hbar/2 = \begin{pmatrix} \cos\varphi\hbar/2 & \mathrm{i}\sin\varphi\hbar/2 \\ \mathrm{i}\sin\varphi\hbar/2 & \cos\varphi\hbar/2 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

U operátorů S_2 a S_3 vyjde shodným postupem toto:

$$\begin{aligned} e^{\mathrm{i}\varphi S_2} &= \begin{pmatrix} \cos\varphi\hbar/2 & \sin\varphi\hbar/2 \\ -\sin\varphi\hbar/2 & \cos\varphi\hbar/2 \end{pmatrix} \\ e^{\mathrm{i}\varphi S_3} &= \begin{pmatrix} \cos\varphi\hbar/2 + \mathrm{i}\sin\varphi\hbar/2 & 0 \\ 0 & \cos\varphi\hbar/2 - \mathrm{i}\sin\varphi\hbar/2 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Při pohledu na rozdíly mezi S_1, S_2 a S_3 je výsledek zřejmý.

3. domácí úkol do cvičení ze základů kvantové mechaniky

Tomáš Záležák

Jaké jsou možné hodnoty výsledku měření spinu ve směru osy x na stavu $|\psi\rangle = 3|z,+\rangle + 2\mathrm{i}|y,-\rangle$, s jakou pravděpodobností budou naměreny a jaká je střední hodnota spinu ve směru osy x v tomto stavu?

Možné hodnoty výsledku měření spinu ve směru x jsou $|x,+\rangle$ a $|x,-\rangle$, jsou to vlastní hodnoty operátoru spinu ve směru x – $\hat{S}_x$.

$$\hat{S}_x|x\rangle = \lambda|x\rangle \Leftrightarrow (\hat{S}_x - \lambda E)|x\rangle = |0\rangle \Leftrightarrow |x\rangle = |0\rangle \vee |\hat{S}_x - \lambda E| = 0$$

Vlastní hodnoty $\lambda \in \{-\hbar/2, +\hbar/2\}$, jsou jedinými možnými výsledky měření. Odpovídají jim vlastní vektory – stavy $|x,-\rangle = \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} \end{pmatrix} = (|z,+\rangle + |z,-\rangle)/\sqrt{2}$ a $|x,+\rangle = \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ -1/\sqrt{2} \end{pmatrix} = (|z,+\rangle - |z,-\rangle)/\sqrt{2}$.

Obdobně jsou $|y,\pm\rangle$, $|z,\pm\rangle$ vlastními hodnotami $\hat{S}_y, \hat{S}_z$. Platí $|y,\pm\rangle = (|z,+\rangle \pm \mathrm{i}|z,-\rangle)/\sqrt{2} = \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ \pm\mathrm{i}/\sqrt{2} \end{pmatrix}$

Takže $|\psi\rangle = \begin{pmatrix} 3+\sqrt{2}\mathrm{i} \\ \sqrt{2} \end{pmatrix}$. K výpočtům je vhodnější používat normované vektory: $|\psi_1\rangle = |\psi\rangle/\sqrt{\langle\psi|\psi\rangle} = |\psi\rangle/\sqrt{13}$.

Pravděpodobnost naměření spinu ve směru osy x je

$$\mathrm{P}(|\psi\rangle \to |x,+\rangle) = |\langle x,+|\psi_1\rangle|^2 = \left| \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} = \hbar\frac{3\sqrt{2}}{13} \begin{pmatrix} (3+\mathrm{i}\sqrt{2})/\sqrt{13} \\ \sqrt{2/13} \end{pmatrix} \right|^2 =$$

$$\left| \frac{\frac{3}{\sqrt{2}} + 1 + i}{\sqrt{13}} \right|^2 = \frac{13+6\sqrt{2}}{26}$$

Pravděpodobnost naměření spinu proti směru osy x je

$$\mathrm{P}(|\psi\rangle \to |x,-\rangle) = |\langle x,-|\psi_1\rangle|^2 = \left| \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} (3+\mathrm{i}\sqrt{2})/\sqrt{13} \\ \sqrt{2/13} \end{pmatrix} \right|^2 = \left| \frac{\frac{3}{\sqrt{2}} - 1 + i}{\sqrt{13}} \right|^2 =$$

$$\frac{13-6\sqrt{2}}{26}$$

Střední hodnota spinu ve směru osy x ve stavu $|\psi\rangle$ se vypočítá takto:

$$\langle\psi_1|\hat{S}_x|\psi_1\rangle = \begin{pmatrix} \frac{3-\mathrm{i}\sqrt{2}}{\sqrt{13}} & \sqrt{\frac{2}{13}} \end{pmatrix} \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{3+\mathrm{i}\sqrt{2}}{\sqrt{13}} \\ \sqrt{\frac{2}{13}} \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{26} \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{2}{13}} & \frac{3-\mathrm{i}\sqrt{2}}{\sqrt{13}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{3+\mathrm{i}\sqrt{2}}{\sqrt{13}} \\ \sqrt{\frac{2}{13}} \end{pmatrix} = \hbar\frac{3\sqrt{2}}{13}$$

4. domácí úkol do cvičení ze základů kvantové mechaniky

Tomáš Záležák

Spinová část hamiltoniánu pro elektron v magnetickém poli je

$$\hat{H} = \frac{e}{m_e c}\mathcal{S}(\vec{B}),$$

kde $\mathcal{S}_i = \hat{S}_i$ je tvořen Pauliho spinovými maticemi. Za úkol je vypočítat v magnetickém poli $\vec{B} = (0,0,B)$ časový vývoj stavu

$$|\psi(t)\rangle = a(t)\,|z,+\rangle + b(t)\,|z,-\rangle$$

a střední hodnoty $\langle\psi(t)|\hat{S}_i|\psi(t)\rangle$.
Časový vývoj stavu je dán Schrödingerovou rovnicí:

$$\mathrm{i}\hbar|\dot{\psi}\rangle = \hat{H}|\psi\rangle$$

Je potřeba určit tvar hamiltoniánu:

$$\hat{H} = \frac{e}{m_e c}\mathcal{S}_{ijk}B_i = \frac{eBS_3}{m_e c} = \frac{eB}{m_e c}\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}$$

Po dosazení vyjdou dvě nezávislé diferenciální rovnice:

$$\begin{aligned}\mathrm{i}\hbar\dot{a}(t) &= -\frac{e\hbar B}{2m_e c}a(t)\\ \mathrm{i}\hbar\dot{b}(t) &= \frac{e\hbar B}{2m_e c}b(t)\end{aligned}$$

Řešení má tento tvar:

$$\begin{aligned}a(t) &= A\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}e\hbar B}{2m_e c}t}\\ b(t) &= B\mathrm{e}^{\frac{-\mathrm{i}e\hbar B}{2m_e c}t}\end{aligned}$$

Toto lze zapsat pomocí $|\psi_0(t)\rangle = \begin{pmatrix}A\\ B\end{pmatrix}$ takto:

$$|\psi(t)\rangle = |\psi_0(t)\rangle\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{\hat{H}}{\hbar}t}$$

Jenže vektor $|\psi\rangle$ je normovaný, platí tedy $A = B = 1/\sqrt{2}$.
Nyní je již možné určit střední hodnoty Pauliho spinových operátorů ve stavu ψ.

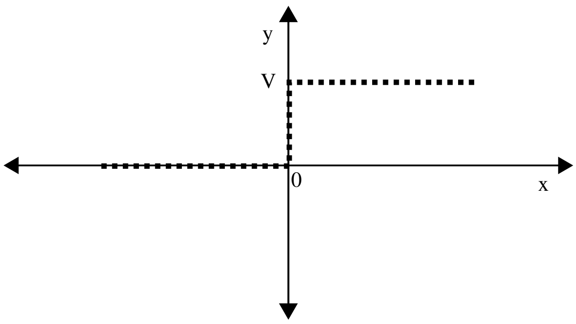
$$\begin{aligned}
\langle\psi|S_1|\psi\rangle &= \begin{pmatrix}a^* b^*\end{pmatrix}\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a\\ b\end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}(ab^* + a^*b) =\\
&= \frac{\hbar}{4}\left(\mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{eB}{m_e c}t} + \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{eB}{m_e c}t}\right) = \frac{\hbar}{2}\cos\left(\frac{eB}{m_e c}t\right)\\
\langle\psi|S_2|\psi\rangle &= \begin{pmatrix}a^* b^*\end{pmatrix}\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0 & -\mathrm{i}\\ \mathrm{i} & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a\\ b\end{pmatrix} = \mathrm{i}\frac{\hbar}{2}(a^*b - ab^*) =\\
&= -\mathrm{i}\frac{\hbar}{4}\left(\mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{eB}{m_e c}t} - \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{eB}{m_e c}t}\right) = \frac{\hbar}{2}\sin\left(\frac{eB}{m_e c}t\right)\\
\langle\psi|S_3|\psi\rangle &= \begin{pmatrix}a^* b^*\end{pmatrix}\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a\\ b\end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}(a^*a - b^*b) =\\
&= \frac{\hbar}{4}\left(\mathrm{e}^{0t} - \mathrm{e}^{0t}\right) = 0
\end{aligned}$$

Lze tedy napsat, že vektor $\left(\langle\hat{S}_1\rangle, \langle\hat{S}_2\rangle, \langle\hat{S}_3\rangle\right) = \hbar(\cos\omega t, \sin\omega t, 0)$, kde $\omega = \dfrac{eB}{m_e c}$ je úhlová rychlost. Pro magnetické pole $B = 1$ mT vyjde $\omega = 0{,}586\ \mathrm{rad}\cdot\mathrm{s}^{-1}$.

5. domácí úkol do cvičení ze základů kvantové mechaniky

Tomáš Záležák

Za úkol je tentokrát najít chování částice přilétávající zleva na potenciálový schod výšky V. Je tedy potřeba vyřešit tuto Schrödingerovu rovnici:



$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t) = \hat{H}\psi(x,t)$$

Platí $\hat{H} = \dfrac{\hat{p}^2}{2m} + V(x)$, $V(x) = \Upsilon(x)V$, kde $\Upsilon(x) = 1 \Leftrightarrow x > 0 \vee \Upsilon(x) = 0 \Leftrightarrow x < 0$.
Je tedy třeba vyřešit tuto diferenciální rovnici:

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \Upsilon(x)V\right)\psi(x,t)$$

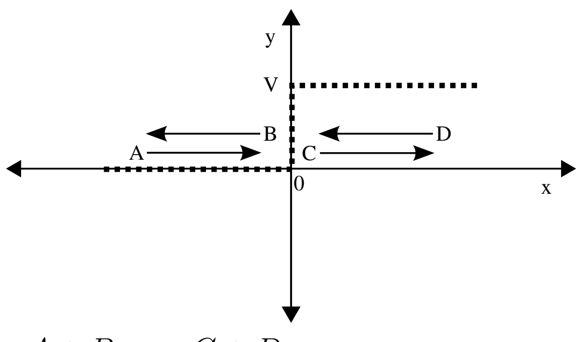
Lze ji vyřešit separací proměnných: $\psi(x,t) = XT, X = X(x), T = T(t)$. Po dosazení vyjde:

$$\mathrm{i}\hbar\frac{T_t}{T} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{X_{xx}}{X} + \Upsilon(x)V = E$$

Aby se dvě rovnice závislé na dvou různých proměnných rovnaly, musí se rovnat konstantě - zde E.
Z levé strany vyjde $T(t) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}Et/\hbar} = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}, \omega = E/\hbar$. Z pravé vyjde $X(x) = X_1(x)\Upsilon(-x) + X_1(x)\Upsilon(x)$, kde $X_1(t) = A\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_1 t} + B\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k_1 t}, k_1 = \sqrt{2mE}/\hbar$ a $X_2(t) = C\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_1 t} + D\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k_2 t}, k_2 = \sqrt{2m(E-V)}/\hbar$.
Pravá strana představuje stacionární Schrödingerovu rovnici: $\hat{H}\psi = E\psi, \psi(x) = X(x)$.
Výsledná vlnová funkce je pak:

$$\psi(x,t) = X(x)T(t) = \Upsilon(-x)\left(A\mathrm{e}^{\mathrm{i}(k_1x-\omega t)} + B\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(k_1x+\omega t)}\right) + \Upsilon(x)\left(C\mathrm{e}^{\mathrm{i}(k_2x-\omega t)} + D\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(k_2x+\omega t)}\right)$$

Z tohoto zápisu je patrné, že A a C přísluší rovinné vlně pohybující se ve směru osy x, B a D pak směru opačnému.
Členy A, B, C, D nemohou být libovolné, protože funkce $\psi(x,t)$ musí být spojitá, stejně tak její první derivace. Podle parametru t je spojitá vždy, podle x ne. Musí tak být splněny tyto vztahy:



$$\begin{aligned} X_1(0) = X_2(0) \quad &\Leftrightarrow \quad & A + B &= C + D \\ X_{1x}(0) = X_{2x}(0) \quad &\Leftrightarrow \quad & k_1(A - B) &= k_2(C - D) \end{aligned}$$

Pokud částice přichází z levé strany (ze záporného směru), musí být $D = 0$. Je tedy třeba vyřešit soustavu rovnic:

$$\begin{aligned} A + B &= C \\ k_1(A - B) &= k_2 C \end{aligned} \quad \Rightarrow \quad B = A\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2},\ C = A\frac{2k_1}{k_1 + k_2}$$

Z těchto vztahů je možné spočítat součinitele odrazu a průchodu na potenciálovém schodu. Vhodné je toto značení: $\psi_A = Ae^{\mathrm{i}(k_1x-\omega t)}$ pro dopadající částici, $\psi_B = Be^{-\mathrm{i}(k_1x+\omega t)}$ pro odraženou vlnu a $\psi_C = Ce^{\mathrm{i}(k_2x-\omega t)}$ pro prošlou vlnu. Je potřeba však ještě zavést tzv. *proud* – tok pravděpodobnosti:

$$j = \frac{\mathrm{i}\hbar}{2m}\left(\psi\frac{\partial}{\partial x}\psi^* - \psi^*\frac{\partial}{\partial x}\psi\right)$$

Pro odrazivost platí $R = j_B/j_A$, pro propustnost $T = j_C/j_A$. Je tedy potřeba vypočítat ještě toky pravděpodobnosti:

$$\begin{aligned}
j_A &= \frac{\mathrm{i}\hbar}{2m}\left(\psi_A\frac{\partial}{\partial x}\psi_A^* - \psi_A^*\frac{\partial}{\partial x}\psi_A\right) = \frac{\hbar k_1 A^2}{m} \\
j_B &= \frac{\mathrm{i}\hbar}{2m}\left(\psi_B\frac{\partial}{\partial x}\psi_B^* - \psi_B^*\frac{\partial}{\partial x}\psi_B\right) = -\frac{\hbar k_1 B^2}{m} \\
j_C &= \frac{\mathrm{i}\hbar}{2m}\left(\psi_C\frac{\partial}{\partial x}\psi_B^* - \psi_C^*\frac{\partial}{\partial x}\psi_C\right) = \frac{\hbar k_2 C^2}{m}
\end{aligned}$$

Po dosazení vyjde:

$$R = j_B/j_A = -\frac{B^2}{A^2} = \left(\frac{k_1-k_2}{k_1+k_2}\right)^2 = \left(\frac{1-Q}{1+Q}\right)^2$$

$$T = j_C/j_A = \frac{k_2C^2}{k_1A^2} = \frac{4k_1k_2}{(k_1+k_2)^2} = \frac{4Q}{(1+Q)^2}$$

Nakonec je možné ješta nahradit $k_2/k_1 = Q = \sqrt{1-V/E}$.
Pro $V = E$ je tedy $Q = 0$ a $T = 0, R = 1$. Pokud má tedy částice energii přesně takovou, jaká odpovídá výšce schodu, odrazí se. Pokud je $V \ll E$, potom je $Q \approx 1$ a $R \to 0, T \approx 1$. Je-li schod nízký, částice přes něj projde.

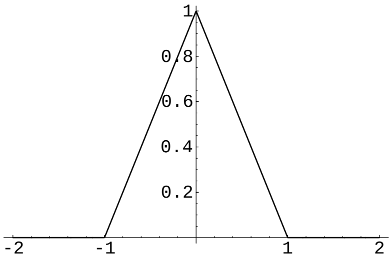
6. domácí úkol do cvičení ze základů kvantové mechaniky

Tomáš Záležák

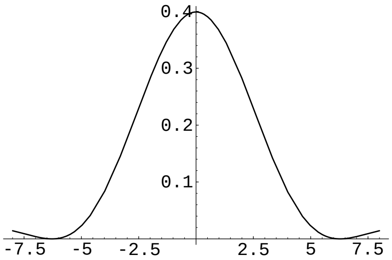
1. Je dána funkce $\varphi(k) = A(a - |k|)\Upsilon(a+k)\Upsilon(a-k)$, která má tvar trojúhelníku s výškou A a podstavou $2a$ (na obrázku je pro $\varphi(k)$ pro $A = a = 1$). Její zpětná Fourierova transformace bude se vypočítá takto:

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} \varphi(k) \mathrm{e}^{\mathrm{i}kx} \, \mathrm{d}k$$

$\varphi(k)$ pro $A = a = 1$



$\psi(x)$ pro $A = a = 1$



Platí tedy:

$$\begin{aligned}
\psi(x) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} A(a - |k|)\Upsilon(a+k)\Upsilon(a-k)\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx} \, \mathrm{d}k = \\
&= \frac{A}{\sqrt{2\pi}} \left\{ a \int_{-a}^{+a} \mathrm{e}^{\mathrm{i}kx} \, \mathrm{d}k + \int_{-a}^{0} k\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx} \, \mathrm{d}k - \int_{0}^{+a} k\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx} \, \mathrm{d}k \right\} = \\
&= \frac{A}{\sqrt{2\pi}} \left\{ a \left[\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}}{\mathrm{i}x} \right]_{-a}^{+a} + \left[\frac{k\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}}{\mathrm{i}x} + \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}}{x^2} \right]_{\{-a;+a\}}^{\{0;0\}} \right\} = \\
&= \frac{A}{\sqrt{2\pi}} \left\{ \frac{2}{x^2} - \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}ax} + \mathrm{e}^{-\mathrm{i}ax}}{x^2} \right\} = \\
&= \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{A}{x^2} (1 - \cos ax)
\end{aligned}$$

2. Vlnová funkce volné částice má podobu gaussovského balíku:

$$\varphi(k) = \sqrt[4]{\frac{a^2}{2\pi}} \mathrm{e}^{-a^2(k-k_0)^2/4}$$

Její zpětná Fourierova transformace je určena takto:

$$\begin{aligned}
\psi(x) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} \varphi(k)\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx} \, \mathrm{d}k = \sqrt[4]{\frac{a^2}{8\pi^3}} \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{e}^{-\frac{a^2}{4}(k-k_0)^2 + \mathrm{i}kx} \, \mathrm{d}k = \left| \begin{array}{rcl} K &=& k - k_0 \\ \mathrm{d}K &=& \mathrm{d}k \end{array} \right| = \\
&= \sqrt[4]{\frac{a^2}{8\pi^3}} \mathrm{e}^{\mathrm{i}k_0x} \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{e}^{-\frac{a^2}{4}\left(K - \frac{2\mathrm{i}x}{a^2}\right)^2 - \frac{x^2}{a^2}} \, \mathrm{d}K = \left| \begin{array}{rcl} L &=& \frac{a}{2}\left(K - \frac{2\mathrm{i}x}{a^2}\right) \\ \mathrm{d}L &=& \frac{2}{a}\mathrm{d}K \end{array} \right| = \\
&= \sqrt[4]{\frac{a^2}{8\pi^3}} \mathrm{e}^{\mathrm{i}k_0x - \frac{x^2}{a^2}} \underbrace{\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{e}^{-L^2} \frac{2}{a} \mathrm{d}L}_{2\sqrt{\pi}/a} = \sqrt[4]{\frac{2}{\pi a^2}} \mathrm{e}^{\mathrm{i}k_0x - \frac{x^2}{a^2}}
\end{aligned}$$

Lze ukázat, že pro časový vývoj pravděpodobnosti platí:

$$|\psi(x,t)|^2 = \sqrt{\frac{2}{\pi a^2}} \frac{1}{\gamma(t)} \, \mathrm{e}^{-\frac{2}{a^2\gamma^2(t)}\left(x - \frac{\hbar k_0 t}{m}\right)^2}, \gamma(t) = \sqrt{1 + \frac{\hbar^2 t^2}{m^2 a^4}}$$

Tato funkce má několik vlastností:

- Funkce má tvar $\psi(x,t) = A\mathrm{e}^{-BX^2}$, je to Gaussova křivka.
- $A \sim \frac{1}{\gamma(t)} \sim \frac{1}{t}$, vrchol Gaussovy křivky klesá rovnoměrně s časem.
- Protože $B \sim \frac{1}{\gamma^2(t)} \sim \frac{1}{t^2}$, bude se Gaussova křivka s ubíhajícím časem rozplývat. Označíme-li $2r$ pološířku Gaussovy křivky, tj. $\frac{1}{2} = \mathrm{e}^{-Br^2}, r = \sqrt{(\ln 2)/B}$, bude $r \sim t$. Šířka Gaussovy křivky je dána neurčitostí polohy. Lze tedy čekat, že $\Delta x(t) \sim \gamma(t) \sim t$.

Neurčitost polohy závisí na čase takto: $\Delta x(t) = \gamma(t)a/2$. (Takže pro $t = 0$ je $a = 2\Delta x(0)$. Na základě tohoto vztahu je za úkol určit neurčitost polohy dvou elektronů potom, co oba urazí vzdálenost $s = 100$ m. Jeden má energii 25 eV, tem měl na počátku neurčitost 1 μm a druhý 100 MeV s počáteční neručitostí 1 mm. Je tedy potřeba zjistit, jakou mají elektrony rychlost. Tu lze spočítat klasicky $T = 1/2mv^2 \Rightarrow v = \sqrt{2T/m}$ či relativisticky (třeba s přírůstku hmotnosti):

$$mc^2 = T + m_0c^2 \wedge m = \frac{m_0}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} \Rightarrow v = c\sqrt{1 - \left(\frac{T}{m_0c^2} + 1\right)^{-2}}$$

První elektron má malou energii, podle obou vztahů vyjde $v_1 \approx 3 \cdot 10^{-6}$ ms^{-1}. Vyjde tak $t_1 = s/v_1 \doteq 34$ μs. Po dosazení do vztahu výše vyjde $\Delta x_1(t_1) \approx 4$ mm. Druhý elektron má obrovskou energii, která odpovídá rychlosti blížící se rychlosti světla $v_2 \approx c$, doba letu po dráze $s = 100$ m je velmi krátká $t_2 \doteq 0,33$ μs, asi stokrát menší, než v předchozím případě. Projeví se to tak, že neurčitost polohy se téměř nezmění – $\Delta x_2(t_2) \approx \Delta x_2(0) = 1$ mm. To je však způsobeno i tím, že v členu $\gamma(t)$ se nachází člen $\frac{1}{a^4}$, který v sobě zahrnuje neurčitost na počátku. Ta je u druhého elektronu tisíckrát menší. Celkem je tedy výraz $\frac{\hbar^2 t^2}{m^2 a^4}$ u druhého elektronu o šestnáct řádů menší než u prvního.

7. domácí úkol do cvičení ze základů kvantové mechaniky

Tomáš Záležák

Splňuje gaussovský balík $\varphi(k){=}A\mathrm{e}^{-\frac{a^2}{4}(k-k_0)^2}$ minimalizované relace neurčitosti $\Delta x{\cdot}\Delta p{=}\frac{\hbar}{2}$?
Před výpočty je třeba zdůraznit, že vlnová funkce musí být normovaná:

$$\begin{aligned}1 &= \int_{\mathbb{R}} |\varphi(k)|^2 \mathrm{d}k = A^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{e}^{-\frac{a^2}{2}(k-k_0)^2}\mathrm{d}k = A^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{e}^{-\frac{a^2}{2}K^2}\mathrm{d}K = \left| \begin{array}{rcl} \frac{a}{\sqrt{2}}K &=& L \\ \mathrm{d}K &=& \frac{\sqrt{2}}{a}\mathrm{d}L \end{array} \right| = \\ &= A^2\frac{\sqrt{2}}{a}\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{e}^{-L^2}\mathrm{d}L = A^2\frac{\sqrt{2}}{a}\sqrt{\pi} \Rightarrow A^2 = \frac{a}{\sqrt{2\pi}}\end{aligned}$$

Je tedy potřeba spočítat Δx a Δp. Protože je vlnová funkce vyjádřena pomocí impulsu ($\hbar k = p$), bude snazší začít právě neurčitostí impulsu:

$$(\Delta p)^2 = \langle \varphi | (p - \langle p \rangle)^2 | \varphi \rangle$$

Je tedy potřeba určit střední hodnotu impulsu:

$$\begin{aligned}\langle p \rangle &= \langle \varphi | p | \varphi \rangle = \langle \varphi | \hbar k | \varphi \rangle = \hbar \int_{\mathbb{R}} k |\varphi(k)|^2 \mathrm{d}k = \hbar A^2 \int_{-\infty}^{+\infty} k\, \mathrm{e}^{-\frac{a^2}{2}(k-k_0)^2}\mathrm{d}k = \\ &= \hbar A^2 \left[\int_{-\infty}^{+\infty} \underbrace{K\, \mathrm{e}^{-\frac{a^2}{2}K^2}}_{\text{lichá}\cdot\text{sudá}} \mathrm{d}K + k_0 \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{e}^{-\frac{a^2}{2}K^2}\mathrm{d}K \right] = \hbar k_0\end{aligned}$$

Teď lze vypočítat střední kvadratickou odchylku impulsu:

$$\begin{aligned}(\Delta p)^2 &= \langle \varphi | (p - \langle p \rangle)^2 | \varphi \rangle = \langle \varphi | (\hbar k - \hbar k_0)^2 | \varphi \rangle = \hbar^2 A^2 \int_{-\infty}^{+\infty} (k-k_0)^2 \mathrm{e}^{-\frac{a^2}{2}(k-k_0)^2}\mathrm{d}k = \\ &= \hbar^2 A^2 \int_{-\infty}^{+\infty} K^2 \mathrm{e}^{-\frac{a^2}{2}K^2}\mathrm{d}K\end{aligned}$$

K tomu se hodí hodnota integrálu $\int_{-\infty}^{+\infty} x^2 \mathrm{e}^{-x^2}\mathrm{d}x = \sqrt{\pi}/2$.
Střední kvadratická odchylka se po substituci $K = L\sqrt{2}/a$ tedy rovná

$$\Delta p = \sqrt{\langle \varphi | (p - \langle p \rangle)^2 | \varphi \rangle} = \sqrt{\frac{\hbar^2 A^2 \sqrt{2}^3 \sqrt{\pi}}{2a^3}} = \frac{\hbar}{a}$$

Střední hodnotu souřadnice a její střední kvadratickou odchylku je vhodné vypočítat v souřadnicové reprezentaci. Opět je třeba určit zpětnou Fourierovu transformaci:

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} \varphi(k) \mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}\, \mathrm{d}k = B \mathrm{e}^{\mathrm{i}k_0 x - \frac{x^2}{a^2}}$$

Konstanta B zahrnuje také konstantu A z impulsové reprezentace, přesně ji však není potřeba vyjadřovat, protože je stejně nutné vlnovou funkci opět normovat. Tedy

$$1 = \int_{\mathbb{R}} |\psi(x)|^2 \mathrm{d}x = B^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{e}^{-\frac{2x^2}{a^2}}\mathrm{d}x = B^2 \frac{a}{\sqrt{2}}\sqrt{\pi} \Rightarrow B^2 = \frac{1}{a}\sqrt{\frac{2}{\pi}}$$

Střední hodnota souřadnice se vypočítá takto:

$$\langle x \rangle = \langle \psi | x | \psi \rangle = \int_{\mathbb{R}} x |\psi(x)|^2 \mathrm{d}x = B^2 \int_{-\infty}^{+\infty} x\, \mathrm{e}^{-\frac{2x^2}{a^2}}\mathrm{d}x = 0$$

Neurčitost souřadnice se vypočítá obdobně, jako neurčitost impulsu:

$$\begin{aligned}(\Delta x)^2 &= \langle \psi | (x - \langle x \rangle)^2 | \psi \rangle = B^2 \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 \mathrm{e}^{-\frac{2x^2}{a^2}}\mathrm{d}x = B^2 \frac{a^3}{2\sqrt{2}} \int_{-\infty}^{+\infty} X^2 e^{-X^2}\mathrm{d}X = \\ &= B^2 \frac{a^3}{2\sqrt{2}} \frac{\sqrt{\pi}}{2} = \frac{a^2}{4} \\ \Delta x &= \frac{a}{2}\end{aligned}$$

Pro součin kvadratických odychlek – neurčitostí polohy – platí

$$\Delta x \cdot \Delta p = \frac{\hbar}{2}$$

8. domácí úkol do cvičení ze základů kvantové mechaniky

Tomáš Záležák

Tentokrát se řeší harmonický oscilátor a za úkol je opět určit relace neurčitosti.

Hamiltonián kvantového harmonického oscilátoru má stejnou podobu, jako hamiltonova funkce mechanického harmonického oscilátoru:

$$\widehat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2$$

Lze jej vyjádřit i s pomocí kreačního operátoru $\hat{a}^+$ a anihilačního operátoru $\hat{a}$, s pomocí nich lze pak vyjádřit také operátory souřadnice a hybnosti:

$$\begin{aligned} \hat{a}^+ &= \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{x} - \mathrm{i}\frac{\hat{p}}{\sqrt{2m\omega\hbar}} & \qquad \hat{x} &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left(\hat{a} + \hat{a}^+\right) \\ \hat{a} &= \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{x} + \mathrm{i}\frac{\hat{p}}{\sqrt{2m\omega\hbar}} & \qquad \hat{p} &= -\mathrm{i}\sqrt{\frac{mw\hbar}{2}}\left(\hat{a} - \hat{a}^+\right) \end{aligned}$$

Hamiltonián lze pak přepsat takto:

$$\widehat{H} = \frac{\hbar\omega}{2}\left(\hat{a}\hat{a}^+ + \hat{a}^+\hat{a}\right)$$

Kreační a anihilační operátory nejsou hermitovské a nekomutují. Označme pro jednoduchost $\hat{a} = A\hat{x} + \mathrm{i}B\hat{p}, \hat{a}^+ = A\hat{x} - \mathrm{i}B\hat{p}$.

$$[\hat{a}, \hat{a}^+] = [A\hat{x} + \mathrm{i}B\hat{p}, A\hat{x} - \mathrm{i}B\hat{p}] = A^2\overbrace{[\hat{x}, \hat{x}]}^{0} + B^2\overbrace{[\hat{p}, \hat{p}]}^{0} - \mathrm{i}\underbrace{AB}_{1/(2\hbar)}\overbrace{([\hat{x}, \hat{p}] - [\hat{p}, \hat{x}])}^{2\mathrm{i}\hbar} = \hat{1}$$

Pokud působí kreační operátor na nějaký vlastní stav hamiltoniánu ($\widehat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle$), bude vypadat Schrödingerova rovnice takto:

$$\begin{aligned} \widehat{H}\hat{a}^+|\psi\rangle &= \tfrac{\hbar\omega}{2}(\hat{a}\hat{a}^+ + \hat{a}^+\hat{a})\hat{a}^+|\psi\rangle = \tfrac{\hbar\omega}{2}[\hat{a}\hat{a}^+\hat{a}^+ + \hat{a}^+\hat{a}\hat{a}^+]|\psi\rangle = \\ &= \tfrac{\hbar\omega}{2}[(\hat{a}^+\hat{a} + 1)\hat{a}^+ + \hat{a}^+(\hat{a}^+\hat{a} + 1)]|\psi\rangle = \tfrac{\hbar\omega}{2}\hat{a}^+[\hat{a}\hat{a}^+ + \hat{a}^+\hat{a} + 2]|\psi\rangle = \\ &= \hat{a}^+\widehat{H}|\psi\rangle + \hbar\omega\hat{a}^+|\psi\rangle = (E + \hbar\omega)\hat{a}^+|\psi\rangle \end{aligned}$$

Kreační operátor tedy zvyšuje energii vlastního stavu o $\hbar\omega$. Obdobně lze ukázat, že anihilační operátor ji snižuje:

$$\widehat{H}\hat{a}|\psi\rangle = (E - \hbar\omega)\hat{a}|\psi\rangle$$

Nesnižuje ji však do nekonečna. Lze spočítat normu stavu $|\psi'\rangle = \hat{a}|\psi\rangle$ takto

$$\langle\psi'|\psi'\rangle = \langle\psi|\hat{a}^+\hat{a}|\psi\rangle = \langle\psi|\frac{\widehat{H}}{\hbar\omega} - \frac{1}{2}|\psi\rangle = \langle\psi|\frac{E}{\hbar\omega} - \frac{1}{2}|\psi\rangle = \overbrace{\langle\psi|\psi\rangle}^{\geq 0}\left(\frac{E}{\hbar\omega} - \frac{1}{2}\right) \geq 0 \Rightarrow E \geq \frac{\hbar\omega}{2}$$

Bylo využito jiného přepisu hamiltoniánu

$$\widehat{H} = \hbar\omega\left(\hat{a}\hat{a}^+ + \frac{1}{2}\right)$$

Kreační a anihilační operátor posunují energii o $\hbar\omega$, lze tedy uvažovat o těchto hladinách:

$$E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right), n \in \mathbb{N}_0$$

Energie E_n jsou vlastní hodnoty hamiltoniánu. Lze tedy předpokládat, že n jsou vlastní hodnoty složeného operátoru $\hat{a}\hat{a}^+ = \hat{n}$, což je operátor počtu excitací. Tento operátor je hermitovský a jeho vlastní vektory odpovídající různým vlastním hodnotám jsou proto ortogonální (to se bude hodit třeba při dalších výpočtech).

$$\hat{n}|n\rangle = n|n\rangle \qquad\qquad \langle m|n\rangle = \delta_{mn}$$

Také platí, že $\hat{a}|n\rangle = k|n-1\rangle$, je však třeba stavy normovat:

$$\langle n|\hat{a}^+\hat{a}|n\rangle = \langle n|\hat{n}|n\rangle = n\langle n|n\rangle = n = |\hat{a}|n\rangle|^2 \Rightarrow |\hat{a}|n\rangle| = \sqrt{n} \Rightarrow \left|\frac{\hat{a}}{\sqrt{n}}|n\rangle\right| = 1,\ \frac{\hat{a}}{\sqrt{n}}|n\rangle = |n-1\rangle$$

Obdobně lze normovat $\hat{a}^+|n\rangle = l|n+1\rangle$:

$$\langle n|\hat{a}\hat{a}^+|n\rangle = \langle n|\hat{a}^+\hat{a} + \hat{1}|n\rangle = \langle n|\hat{n} + \hat{1}|n\rangle = n + 1 = |\hat{a}|n\rangle|^2 \Rightarrow \frac{\hat{a}^+}{\sqrt{n+1}}|n\rangle = |n+1\rangle$$

Nyní lze konečně určit neurčitost polohy a hybnosti u kvantového harmonického oscilátoru. Energii $E_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})$ lze přiřadit stacionární stav $|n\rangle$, v němž budou střední hodnoty počítány. kde $n \in \mathbb{N}_0$.

$$\langle n|\hat{x}|n\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\langle n|\hat{a}+\hat{a}^{+}|n\rangle, \quad \langle n|\hat{p}|n\rangle = -\mathrm{i}\sqrt{\frac{mw\hbar}{2}}\langle n|\hat{a}-\hat{a}^{+}|n\rangle$$

Je třeba tedy určit střední hodnoty kreačního a anihilačního operátoru ve stavu $|n\rangle$:

$$\langle n|\hat{a}^{+}|n\rangle = \sqrt{n+1}\langle n|n+1\rangle = 0, \quad \langle n|\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}\langle n|n-1\rangle = 0$$

Z toho plyne, že střední hodnoty souřadnice $\langle\hat{x}\rangle = \langle n|\hat{x}|n\rangle$ a hybnosti $\langle\hat{p}\rangle = \langle n|\hat{p}|n\rangle$ jsou rovny nule. To je stejné, jako u mechanického oscilátoru:

$$x = A\cos\omega t, \langle x\rangle = \frac{1}{T}\int_0^T A\cos\omega t\,\mathrm{d}t = 0; \quad p = m\dot{x} = -mA\sin\omega t, \langle p\rangle = 0$$

Neurčitost polohy ve stavu $|n\rangle$ je určena takto:

$$(\Delta x)^2 = \left\langle(\hat{x}-\langle\hat{x}\rangle)^2\right\rangle = \langle n|\hat{x}^{+}\hat{x}|n\rangle = \frac{\hbar}{2m\omega}\langle n|\hat{a}\hat{a}+\hat{a}^{+}\hat{a}^{+}+\hat{a}\hat{a}^{+}+\hat{a}^{+}\hat{a}|n\rangle = \frac{\hbar}{2m\omega}(2n+1)$$

Střední hodnota dvakrát použitého anihilačního či kreačního operátoru je nula, stejně jako střední hodnota jednoho anihilačního či kreačního operátoru. Neurčitost hybnosti ve stavu $|n\rangle$ je určena obdobně:

$$(\Delta p)^2 = \left\langle(\hat{p}-\langle\hat{p}\rangle)^2\right\rangle = \langle n|\hat{p}^{+}\hat{p}|n\rangle = -\frac{m\omega\hbar}{2}\langle n|\hat{a}\hat{a}+\hat{a}^{+}\hat{a}^{+}-\hat{a}\hat{a}^{+}-\hat{a}^{+}\hat{a}|n\rangle = \frac{m\omega\hbar}{2}(2n+1)$$

Potom platí:

$$\begin{aligned} \Delta x &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} & \qquad \Delta x\cdot\Delta p &= \frac{\hbar}{2} \\ \Delta p &= \sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}} \end{aligned}$$

Dále lze určit, jak to dopadne u časového vývoje složeného stavu $|\psi\rangle = |n\rangle + |n+1\rangle$. Nejprve je třeba jej normovat:

$$\langle\psi|\psi\rangle = \langle n|n\rangle + \langle n|n+1\rangle + \langle n+1|n\rangle + \langle n+1|n+1\rangle = 2 \Rightarrow |\psi_0\rangle = \frac{1}{2}\left[|n\rangle + |n+1\rangle\right]$$

Při odvození předchozích vztahů v této úloze nebyl brán časový vývoj v úvahu. Nicméně na základě předchozích úloh lze očekávat, že by mohl vypadat takto:

$$\begin{aligned} |n\rangle_t &= |n\rangle\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_n t/\hbar} \\ |n+1\rangle_t &= |n+1\rangle\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_{n+1} t/\hbar} \\ |\psi\rangle_t &= \tfrac{1}{2}\left[|n\rangle\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_n t/\hbar} + |n+1\rangle\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_{n+1} t/\hbar}\right] \end{aligned}$$

Hodnoty E_n a E_{n+1} odpovídají energiím stavů $|n\rangle$ a $|n+1\rangle$.

Nyní lze určit střední hodnoty souřadnice a hybnosti ve stavu $|\psi_0\rangle$:

$$\begin{aligned} \langle\psi_0|\hat{x}|\psi_0\rangle &= \sqrt{\tfrac{\hbar}{2m\omega}}\tfrac{1}{4}\left[\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}E_n t}{\hbar}}\langle n| + \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}E_{n+1} t}{\hbar}}\langle n+1|\right]\left[\hat{a}+\hat{a}^{+}\right]\left[|n\rangle\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}E_n t}{\hbar}} + |n+1\rangle\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}E_{n+1} t}{\hbar}}\right] = \\ &= \sqrt{\tfrac{\hbar}{2m\omega}}\tfrac{\sqrt{n+1}}{4}\left(\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}t}{\hbar}(E_n-E_{n+1})} + \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}t}{\hbar}(E_n-E_{n+1})}\right) = \sqrt{\tfrac{\hbar}{2m\omega}}\tfrac{\sqrt{n+1}}{2}\cos\left(\tfrac{E_n-E_{n+1}}{\hbar}t\right) \\ \langle\psi_0|\hat{p}|\psi_0\rangle &= -\mathrm{i}\sqrt{\tfrac{m\omega\hbar}{2}}\tfrac{1}{4}\left[\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}E_n t}{\hbar}}\langle n| + \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}E_{n+1} t}{\hbar}}\langle n+1|\right]\left[\hat{a}-\hat{a}^{+}\right]\left[|n\rangle\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}E_n t}{\hbar}} + |n+1\rangle\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}E_{n+1} t}{\hbar}}\right] = \\ &= -\mathrm{i}\sqrt{\tfrac{m\omega\hbar}{2}}\tfrac{\sqrt{n+1}}{4}\left(\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}t}{\hbar}(E_n-E_{n+1})} - \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}t}{\hbar}(E_n-E_{n+1})}\right) = \sqrt{\tfrac{m\omega\hbar}{2}}\tfrac{\sqrt{n+1}}{2}\sin\left(\tfrac{E_n-E_{n+1}}{\hbar}t\right) \end{aligned}$$

9. domácí úkol do cvičení ze základů kvantové mechaniky

Tomáš Záležák

Nejprve budeme počítat součin neurčitostí nějakých veličin L_x, L_y:

$$\Delta L_x \cdot \Delta L_y = ?$$

Označme $\hat{A} = \hat{L}_x - \langle \hat{L}_x \rangle \hat{\mathbf{1}}, \quad \hat{B} = \hat{L}_y - \langle \hat{L}_y \rangle \hat{\mathbf{1}}$:

Pomocí stavu $|\psi\rangle$ a opetátorů $\hat{A}, \hat{B}$ lze zavést nový stav:

$$|\varphi\rangle = (\hat{A} + \mathrm{i}\lambda\hat{B})|\psi\rangle, \quad \lambda \in \mathbb{R}$$

Pro libovolný vektor platí:

$0 \leq \langle\varphi|\varphi\rangle = \langle\psi|(\hat{A}-\mathrm{i}\lambda\hat{B})(\hat{A}+\mathrm{i}\lambda\hat{B})|\psi\rangle = \langle\psi|\hat{A}^2|\psi\rangle + \lambda^2\langle\psi|\hat{B}^2|\psi\rangle + \mathrm{i}\lambda\langle\psi|\hat{A}\hat{B}|\psi\rangle - \mathrm{i}\lambda\langle\psi|\hat{B}\hat{A}|\psi\rangle$

Z toho vyjde:

$$0 \leq \langle\hat{A}^2\rangle + \lambda^2\langle\hat{B}^2\rangle + \mathrm{i}\lambda\langle[\hat{A}, \hat{B}]\rangle$$

Protože platí $\langle\psi|\hat{B}\hat{A}|\psi\rangle = \left(\langle\psi|\hat{A}\hat{B}|\psi\rangle\right)^*$ díky hermitovskosti $\hat{A}, \hat{B}$, musí být $\langle[\hat{A}, \hat{B}]\rangle$ ryze imaginární. (Pozn.: $(z - z^*) \in \mathbb{I}$.) Je-li zvoleno $\lambda = -\mathrm{i}\dfrac{\langle[\hat{A}, \hat{B}]\rangle}{2\langle\hat{B}^2\rangle}$, pak je reálné.

Po dosazení do předchozí nerovnosti tak vyjde:

$$0 \leq \langle\hat{A}^2\rangle - \frac{\langle[\hat{A}, \hat{B}]\rangle^2}{4\langle\hat{B}^2\rangle} + \frac{\langle[\hat{A}, \hat{B}]\rangle^2}{2\langle\hat{B}\rangle} = \langle\hat{A}^2\rangle + \frac{\langle[\hat{A}, \hat{B}]\rangle^2}{4\langle\hat{B}^2\rangle}$$

Z toho vyjde nerovnost:

$$\langle\hat{A}^2\rangle\langle\hat{B}^2\rangle \geq -\frac{1}{2}\langle[\hat{A}, \hat{B}]\rangle^2$$

Střední hodnoty druhých mocnin operátorů $\hat{A}, \hat{B}$ vyjadřují díky na začátku provedenému posunutí neurčitost středních hodnot veličin L_x, L_y. Komutátor $[\hat{A}, \hat{B}]$ je zřejmě stejný, jako $[\hat{L}_x, \hat{L}_y]$. Pak vyjde:

$$\Delta L_x \Delta L_y \geq \frac{1}{2}\left|\left\langle[\hat{L}_x, \hat{L}_y]\right\rangle\right|$$

Označení L_x, L_y bylo zvoleno proto, že ve skutečnosti je za úkol nalézt vztah pro neurčitost momentu hybnosti. Podle právě odvozeného vztahu je patrné, že stačí dosadit komutátor jednotlivých složek momentu hybnosti. Ten je určen vztahem

$$[\hat{L}_i, \hat{L}_j] = \varepsilon_{ijk} L_k$$

Tedy platí $\Delta M_x \Delta M_y = \mathrm{i}\hbar\langle M_z\rangle/2$.

10. domácí úkol do cvičení ze základů kvantové mechaniky

Tomáš Záležák

Máme za úkol stanovit střední vzdálenost elektronu od jádra atomu vodíku ve stavech $|100\rangle, |200\rangle$, tj. vypočítat $\langle nlm|\hat{r}|nlm\rangle$ pro $n \in 1, 2, l, m = 0$.
Výpočet lze řešit analyticky tímto integrálem:

$$\langle nlm|\hat{r}|nlm\rangle = \iiint_{\mathbb{R}^3} r|\Psi_{nlm}(x,y,z)|^2 \mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}z$$

Vlnovou funkci lze vyjádřit součinem funkce vzdálenosti a funkce prostorového úhlu, tj. $\Psi_{nlm}(r,\vartheta,\varphi) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\vartheta,\varphi)$:

$$= \int_0^\infty \mathrm{d}r\, r r^2 R_{nl}^2(r) \underbrace{\int_0^\pi \mathrm{d}\vartheta\, \sin\vartheta \int_0^{2\pi} \mathrm{d}\varphi\, Y_{lm}^2(\vartheta,\varphi)}_{1}$$

Kulová funkce Y_{lm} je normována na jedničku, takže není třeba nic počítat. Kulově symetrické složky normovány nejsou.

$$\begin{aligned}
R_{10}(r) &= 2a^{-\frac{3}{2}}\mathrm{e}^{-\frac{r}{a}} \\
\langle 100|\hat{r}|100\rangle &= \int_0^\infty \mathrm{d}r\, r^3 R_{10}^2(r) = 4a^{-3}\int_0^\infty r^3 \mathrm{e}^{-\frac{r}{a}}\mathrm{d}r = \left| \begin{array}{ccc} r & = & sa \\ \mathrm{d}r & = & \mathrm{d}s\, a \end{array} \right| \\
&= \frac{a}{4}\int_0^\infty s^3 \mathrm{e}^{-s}\mathrm{d}s = \frac{a}{4}\Gamma(4) = \frac{3}{2}a \\
R_{20}(r) &= (2a^3)^{-\frac{1}{2}}\left(1 - \tfrac{r}{2a}\right)\mathrm{e}^{-\frac{r}{2a}} \\
\langle 200|\hat{r}|200\rangle &= \int_0^\infty \mathrm{d}r\, r^3 R_{20}^2(r) = \int_0^\infty \mathrm{d}r\, \frac{r^3}{2a^3}\left(1 - \frac{r}{2a}\right)\mathrm{e}^{-\frac{r}{a}} = \left| \begin{array}{ccc} r & = & sa \\ \mathrm{d}r & = & \mathrm{d}s\, a \end{array} \right| = \\
&= \frac{a}{2}\int_0^\infty s^3\left(1 - s + \frac{s^2}{4}\right)\mathrm{e}^{-s}\mathrm{d}s = \frac{a}{2}\left(\Gamma(4) - \Gamma(5) + \frac{\Gamma(6)}{4}\right) = 6a
\end{aligned}$$

Obě hodnoty odpovídají obecnému vztahu $\langle nlm|\hat{r}|nlm\rangle = a\dfrac{3n^2 - l(l-1)}{2}$.

11. domácí úkol do cvičení ze základů kvantové mechaniky

Tomáš Záležák

Tentokrát je za úkol vypočítat poruchovou teorii opravu prvního a druhého řádu pro energii anharmonického oscilátoru s hamiltoniánem $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{M\Omega^2}{2}x^2 + \alpha x^3 + \beta x^4$, kde α, β jsou malé veličiny (a v opravě druhého řádu pro jednoduchost $\beta = 0$).
Nejprve budou odvozeny některé vztahy poruchové teorie.
Pokud lze hamiltonián vyjádřit ve tvaru $\hat{H} = \hat{H}_0 + \lambda\hat{G}$, kde $\hat{H}_0$ je neporušený hamiltonián, jehož vlastní hodnoty a funkce lze nalézt snadno ($\hat{H}_0\psi_n = E_n\psi_n$) a $\lambda\hat{G}$ je malá porucha, je možné vyjádřit vlastní funkce porušeného hamiltoniánu pomocí lineární kombinace vlastních funkcí neporušeného hamiltoniánu:

$$\psi'_m = \sum_n c_{mn}\psi_n$$

Protože to vlastní funkce $\hat{H}$, tak

$$\hat{H}\psi'_m = E'_m\psi'_m$$

Předpokládejme nyní, že díky malosti poruchy lze c_{mn}, E'_m rozvinout do řady:

$$c_m n = \sum_{k=0}^{\infty}\lambda^k c_{mn}^{(k)}, \quad E'_m = \sum_{k=0}^{\infty}\lambda^k E_m^{(k)}$$

Lze bez zábran předpokládat, že bez poruchy $\lambda = 0$ bude $c_{mn}^{(0)} = \delta_{mn}$ a $E_m^{(0)} = E_m$. Po dosazení za $\hat{H}\psi'_m$ vyjde vztah:

$$\begin{aligned}
\hat{H}\psi'_m &= (\hat{H}_0 + \lambda\hat{G})\sum_n\left(\sum_{k=0}^{\infty}\lambda^k c_{mn}^{(k)}\right)\psi_n = \\
&= \sum_n \delta_{mn}E_n\psi_n + \lambda\sum_n(c_{mn}^{(1)}E_n + \delta_{mn}\hat{G})\psi_n + \lambda^2\sum_n(c_{mn}^{(2)}E_n + c_{mn}^{(1)}\hat{G})\psi_n + \cdots
\end{aligned}$$

Obdobně lze naložit i s pravou stranou:

$$\begin{aligned}
E'_m\psi'_m &= \sum_{k=0}^{\infty}\lambda^k E_m^{(k)}\sum_n\left(\sum_{l=0}^{\infty}\lambda^l c_{mn}^{(l)}\right)\psi_n = \\
&= \sum_n \delta_{mn}E_n^{(0)}\psi_n + \lambda\sum_n\left(c_{mn}^{(1)}E_m^{(0)} + \delta_{mn}E_m^{(1)}\right)\psi_n + \\
&+ \lambda^2\sum_n\left(c_{mn}^{(2)}E_m^{(0)} + c_{mn}^{(1)}E_m^{(1)} + \delta_{mn}E_m^{(2)}\right)\psi_n + \cdots
\end{aligned}$$

Porovnáním členů pro $\lambda^0, \lambda^1, \lambda^2$ vyjdou potřebné vztahy. Pro λ^0 vyjde to, co bylo předpokládáno:

$$\sum_n \delta_{mn}E_n\psi_n = \sum_n \delta_{mn}E_n^{(0)}\psi_n \Rightarrow E_m^{(0)} = E_m$$

Pro λ^1 se objeví toto:

$$\begin{aligned}
\sum_n\left(c_{mn}^{(1)}E_n\psi_n + \delta_{mn}\hat{G}\psi_n\right) &= \sum_n\left(c_{mn}^{(1)}E_m^{(0)} + \delta_{mn}E_m^{(1)}\right)\psi_n \\
\sum_n c_{mn}^{(1)}(E_n - E_m)|\psi_n\rangle &= (E_m^{(1)} - \hat{G})|\psi_m\rangle
\end{aligned}$$

Působením $\langle\psi_m|$ se vynuluje levá strana a vyjde:

$$E_m^{(1)} = \langle\psi_m|\hat{G}|\psi_m\rangle$$

Pokud to bude $\langle\psi_k|$, $k \neq m$, vyjde:

$$\sum_n c_{mn}^{(1)}(E_n - E_m)\delta_{kn} = -\langle\psi_k|\hat{G}|\psi_m\rangle \Rightarrow c_{mk}^{(1)} = \frac{\langle\psi_k|\hat{G}|\psi_m\rangle}{E_m - E_k}$$

Porovnáním členů u λ^2 vyjde toto:

$$\begin{aligned}
\sum_n\left(c_{mn}^{(2)}E_n + c_{mn}^{(1)}\hat{G}\right)\psi_n &= \sum_n\left(c_{mn}^{(2)}E_m^{(0)} + c_{mn}^{(1)}E_m^{(1)} + \delta_{mn}E_m^{(2)}\right)\psi_n \\
\sum_n\left[c_{mn}^{(2)}(E_n - E_m^{(0)}) + c_{mn}^{(1)}(\hat{G} - E_m^{(1)})\right]\psi_n &= \psi_m E_m^{(2)}
\end{aligned}$$

Za $c_{mn}^{(1)}$ lze dosadit z předešlého vzorce:

$$\sum_{n\neq m}\left[c_{mn}^{(2)}(E_n-E_m^{(0)})+\frac{\langle\psi_n|\hat{G}\psi_m\rangle}{E_m-E_n}(\hat{G}-E_m^{(1)})\right]|\psi_n\rangle=E_m^{(2)}|\psi_m\rangle$$

Opět lze zapůsobit zleva $\langle\psi_m|$, což zruší opět hodně členů:

$$\sum_n\frac{\langle\psi_n|\hat{G}|\psi_m\rangle\langle\psi_m|\hat{G}\psi_n\rangle}{E_m-E_n}=E_m^{(2)}$$

Z toho dostanene vztah pro opravu energie druhého řádu:

$$E_m^{(2)}=\sum_{n\neq m}\frac{\left|\langle\psi_n|\hat{G}|\psi_m\rangle\right|^2}{E_m-E_n}$$

Jak je uvedeno výše, je třeba vypočítat opravy energie prvního a druhého řádu. Hamiltonián má podobu $\hat{H}=\frac{\hat{p}^2}{2m}+\frac{M\Omega^2}{2}x^2+\alpha x^3+\beta x^4$. První dva členy odpovídají harmonickému oscilátoru, zbytek je porucha:

$$\hat{G}=\alpha\hat{x}^3+\beta\hat{x}^4$$

Nejprve bude potřeba nachystat nějaké pomocné vztahy. Operátor souřadnice $\hat{x}$ lze zapsat i takto:

$$\hat{x}=\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\hat{a}^++\hat{a})$$

Působení operátorů na stav $|n\rangle$ je takovéto:

$$\hat{a}^+|n\rangle=\sqrt{n+1}|n+1\rangle,\quad \hat{a}|n\rangle=\sqrt{n}|n-1\rangle$$

Lze ukázat, že platí toto:

$$\langle m|\hat{x}^3|n\rangle\cdot\left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^{-\frac{3}{2}}=\langle m|(\hat{a}^++\hat{a})^3|n\rangle=$$

$$\delta_{m,n+3}\sqrt{(n+1)(n+2)(n+3)}+\delta_{m,n-3}\sqrt{n(n-1)(n-2)}+3\delta_{m,n+1}(n+1)^{\frac{3}{2}}+3\delta_{m,n-1}n^{\frac{3}{2}}$$

$$\frac{\langle m|\hat{x}^4|n\rangle}{\left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^2}=\langle m|(\hat{a}^++\hat{a})^4|n\rangle=$$

$$\delta_{mn}\left[n^2+n(n-1)+(n+1)(n+2)+n(n+1)+n(n+1)+(n+1)^2\right]+$$
$$+\delta_{m,n+2}\left[\sqrt{n+1}(n+2)^{\frac{3}{2}}+\sqrt{(n+1)(n+2)}(n+3)+n\sqrt{(n+1)(n+2)}+(n+1)(n+2)\right]$$
$$+\delta_{m,n-2}\left[\sqrt{n+1}\sqrt{n(n-1)}+n^{\frac{3}{2}}\sqrt{n-1}+(n-2)\sqrt{n(n-1)}+\sqrt{n}(n-1)^{\frac{3}{2}}\right]$$
$$+\delta_{m,n+4}\sqrt{(n+1)(n+2)(n+3)(n+4)}+\delta_{m,n-4}\sqrt{n(n-1)(n-2)(n-3)}$$

Ze vztahů je vidět, že se v opravě pro první řád uplatní pouze operátor $\hat{x}^4$, zatímco v druhém řádu si lze s úlevou ušetřit práci díky jeho zanedbání a započítat tak jen $\hat{x}^3$. Nyní je na čase konečně něco dosadit:

$$E_m^{(1)}=\langle\psi_m|\beta\hat{x}^4|\psi_m\rangle=\beta\left(\tfrac{\hbar}{2m\omega}\right)^2\cdot 6(m^2+m+\tfrac{1}{2})$$

Toto byla oprava prvního řádu. Teď je na řadě druhý řád (i když s vypuštěním $\hat{x}^4$). Ve vztahu vystupuje E_m-E_n, což je rozdíl energetických hladin harmonického oscilátoru, tedy $(m-n)\hbar\omega$.

$$E_m^{(2)}=\sum_{n\neq m}\frac{|\langle\psi_n|\alpha\hat{x}^3|\psi_m\rangle|^2}{E_m-E_n}=\frac{\alpha^2}{\hbar\omega}\left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^3\sum_{n\neq m}\frac{|\langle m|(\hat{a}^++\hat{a})^3|n\rangle|^2}{m-n}=$$

$$-\frac{15}{4}\frac{\alpha^2}{\hbar\omega}\left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^3(m^2+m+\frac{11}{30})$$

Celková energie je v tomto případě rovna:

$$E_m=\hbar\omega(m+\tfrac{1}{2})+\tfrac{3}{2}\beta\left(\tfrac{\hbar}{m\omega}\right)^2(m^2+m+\tfrac{1}{2})-\tfrac{15}{4}\tfrac{\alpha^2}{\hbar\omega}\left(\tfrac{\hbar}{m\omega}\right)^3(m^2+m+\tfrac{11}{30})$$