

Zkouškové příklady z KVANtofy

Áňa Mouková

6. února 2019

Obsah

1	Lineární harmonický oscilátor	4
2	Izotropní harmonický oscilátor	12
3	Volná částice	20
4	Potenciálová jáma	23
5	Částice v magnetickém poli, spin	25
6	Kvantové tuhé těleso	32
7	Integrály pohybu	33
8	Hamiltonián	35

Úvod

Příklady, které se často objevují u zkoušky z 02KVAN a mně letos stačili k tomu, abych písémkou bez problému prošla. Jsou v tom chyby, možná dokonce spousty chyb. Když mi o nich napíšete, asi je i opravím. Necht' vám poznámky dobře slouží.

1 Lineární harmonický oscilátor

Příklad 1 Lineární harmonický oscilátor s frekvencí $\omega = \hbar/M$ je v čase $t = 0$ ve stavu

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

Jaké hodnoty energie můžeme naměřit a s jakou pravděpodobností? Určete $\psi(x, t)$ pro $t > 0$. Jak se mění střední hodnota polohy oscilátoru s časem?

Řešení Nejprve určíme, jaké hodnoty energie můžeme naměřit a s jakou pravděpodobností.

$$\psi = a\psi_0 + b\psi_1$$

Členy ψ_1 a ψ_2 vyjádříme podle obecného vztahu z taháku $\psi_n(x) = \left(\frac{M\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{n!2^n}} H_n(x) e^{-\frac{x^2}{2}}$, kde H_n jsou Hermitovy polynomy

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

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

Dosadíme nové členy do vztahu $\psi = a\psi_0 + b\psi_1$:

$$c(1+x)e^{-\frac{x^2}{2}} = a \frac{1}{\sqrt[4]{\pi}} e^{-\frac{x^2}{2}} + 2bx \frac{1}{\sqrt[4]{\pi}} \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-\frac{x^2}{2}}$$

Tuto rovnici vydělíme $e^{-\frac{x^2}{2}}$ a zavedeme novou konstantu $\tilde{c} = c\sqrt[4]{\pi}$ a dostaneme

$$\tilde{c}(1+x) = a + \sqrt{2}bx.$$

Z toho dostaneme vztahy pro konstanty

$$a = \tilde{c}$$

$$\tilde{c} = \sqrt{2}b \rightarrow b = \frac{\tilde{c}}{\sqrt{2}}$$

Z toho plyne, že

$$\psi(x) = \tilde{c}\psi_0 + \frac{\tilde{c}}{\sqrt{2}}\psi_1.$$

Z podmínky na skalární součin $(\psi, \psi) = 1$ plyne, že $\tilde{c}^2 + \frac{\tilde{c}^2}{2} = 1$, a tedy $\tilde{c} = \sqrt{\frac{2}{3}}$.

Dosazením dostaneme

$$\psi = \sqrt{\frac{2}{3}}\psi_0 + \frac{1}{\sqrt{3}}\psi_1.$$

Dále spočteme skalární součiny $(\psi_0, \psi) = \sqrt{\frac{2}{3}}$; $(\psi_1, \psi) = \frac{1}{\sqrt{3}}$.

To mám říkát, že můžeme naměřit hodnoty energií $E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}$, $E_1 = \frac{3\hbar\omega}{2}$ s pravděpodobnostmi $P_\psi(E_0) = |(\psi_0, \psi)|^2 = \frac{2}{3}$, $P_\psi(E_1) = |(\psi_1, \psi)|^2 = \frac{1}{3}$.

Nyní se budeme zabývat stavem oscilátoru v čase $t > 0$.

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

Střední hodnota polohy je dána vztahem $\langle \hat{Q} \rangle = \langle \psi(x, t) | \hat{Q} | \psi(x, t) \rangle$, přičemž $\hat{Q} = \sqrt{\frac{\hbar}{2M\omega}} (\hat{a}_+ + \hat{a}_-)$.
Z toho dostaneme

$$\begin{aligned} \langle \hat{Q} \rangle &= \left\langle \psi(x, t) \left| \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{a}_+ + \hat{a}_-) \right| \psi(x, t) \right\rangle = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \langle \psi(x, t) | \hat{a}_+ | \psi(x, t) \rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} \langle \psi(x, t) | \hat{a}_- | \psi(x, t) \rangle \end{aligned}$$

Ze vztahu $\hat{a}_\pm |n\rangle = \alpha_n^\pm |n \pm 1\rangle$, $\alpha_n^- = \sqrt{n}$, $\alpha_n^+ = \sqrt{n+1}$, $|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} \hat{a}_+^n$ dostáváme

$$\begin{aligned} \hat{a}_+ |\psi(t)\rangle &= \sqrt{\frac{2}{3}} e^{-\frac{i}{2}\omega t} \psi_1(x) \\ \hat{a}_- |\psi(t)\rangle &= \frac{1}{\sqrt{3}} e^{-\frac{3i}{2}\omega t} \psi_0(x). \end{aligned}$$

Máme tedy

$$\begin{aligned} \langle \hat{Q} \rangle_{\psi(t)} &= \left(\psi(x, t), \hat{Q} \psi(x, t) \right) = \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{1}{\sqrt{3}} \sqrt{\frac{2}{3}} e^{\frac{3i}{2}\omega t - \frac{i}{2}\omega t} + \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{\frac{2}{3}} \frac{1}{\sqrt{3}} e^{\frac{i}{2}\omega t - \frac{3i}{2}\omega t} = \\ &= \frac{1}{3} e^{i\omega t} + \frac{1}{3} e^{-i\omega t} = \cos(\omega t) \end{aligned}$$

Příklad 2 Lineární harmonický oscilátor je v čase $t = 0$ v koherentním stavu $|\alpha\rangle, \alpha \in \mathbb{R}$. Jak se mění střední hodnota kinetické energie oscilátoru s časem?

Řešení Kinetická energie je dána jako $\hat{H}_{kin} = \frac{\hat{P}^2}{2M}$, takže

$$\begin{aligned}\hat{H}_{kin} &= i^2 \frac{M\hbar\omega}{2} \frac{1}{2M} (\hat{a}_+ - \hat{a}_-) = -\frac{\hbar\omega}{4} (\hat{a}_+^2 - \hat{a}_+ \hat{a}_- - \hat{a}_- \hat{a}_+ + \hat{a}_-^2) = \\ &= -\frac{\hbar\omega}{4} (\hat{a}_+^2 - 2\hat{a}_+ \hat{a}_- - \mathbb{I} + \hat{a}_-^2).\end{aligned}$$

Střední hodnota je pak rovna

$$\langle \hat{H}_{kin} \rangle_{|\alpha(t)\rangle} = -\frac{\hbar\omega}{4} [\langle \alpha(t) | \hat{a}_+^2 | \alpha(t) \rangle - 2 \langle \alpha(t) | \hat{a}_+ \hat{a}_- | \alpha(t) \rangle - 1 + \langle \alpha(t) | \hat{a}_-^2 | \alpha(t) \rangle].$$

Potom

$$\langle H_{kin} \rangle_{\alpha(t)} = -\frac{\hbar\omega}{4} [\bar{\alpha}^2(t) - 2|\alpha(t)|^2 - 1 + \alpha^2(t)]$$

Alternativa 1 Existuje i verze s celkovou energií a spočtením střední kvadratické odchylky. Tu ale snadno určíme ze vzorce

$$\Delta_\psi \hat{H} = \sqrt{\langle \hat{H}^2 \rangle - \langle \hat{H} \rangle^2}.$$

Výsledek by měl být $\Delta_\psi \hat{H} = \hbar\omega|\alpha|$.

Alternativa 2 Další verze je nikoli s kinetickou, nýbrž potenciální. Zde však jedinou změnou je, že $\hat{H}_{pot} = \frac{1}{2}M\omega^2\hat{Q}^2$.

Příklad 3 Uvažujte lineární harmonický oscilátor ve stavu

$$|\psi\rangle = \rho |0\rangle + \sqrt{1-\rho^2}e^{i\varphi} |1\rangle,$$

kde $|n\rangle$ jsou vlastní vektory hamiltoniánu. Určete parametry ρ a φ tak, aby střední hodnota energie byla $\hbar\omega$ a střední hodnota hybnosti byla rovna nule.

Řešení Střední hodnota energie oscilátoru je

$$\langle \hat{H} \rangle_\psi = \langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle = \left\langle \psi \left| \hbar\omega \left(\hat{a}_+ \hat{a}_- + \frac{1}{2} \right) \right| \psi \right\rangle = \hbar\omega \langle \psi | (\hat{a}_+ \hat{a}_-) | \psi \rangle + \frac{\hbar\omega}{2} \langle \psi | \psi \rangle.$$

Spočtěme, čemu je rovno $(\hat{a}_- |\psi\rangle)^+$:

$$(\hat{a}_- |\psi\rangle)^+ = \left(0 + \sqrt{1-\rho^2}e^{i\varphi} |0\rangle \right)^+ = \langle 0 | \sqrt{1-\rho^2}e^{-i\varphi}.$$

Proto můžeme střední hodnotu energie oscilátoru upravit následovně. Dále za střední hodnotu zvolíme požadovanou hodnotu $\hbar\omega$ k vypočtení parametru ρ

$$\begin{aligned} \langle \hat{H} \rangle_\psi &= \hbar\omega (1-\rho^2) \cdot 1 + \frac{\hbar\omega}{2} (\rho^2 + 1 - \rho^2) \stackrel{!}{=} \hbar\omega \\ 1-\rho^2 + \frac{1}{2} &\stackrel{!}{=} 1 \quad \rightarrow \quad \rho = \frac{1}{\sqrt{2}}. \end{aligned}$$

Nyní spočteme střední hodnotu hybnosti. Využijeme faktu, že $\hat{P} = i\sqrt{\frac{M\hbar\omega}{2}} (\hat{a}_+ - \hat{a}_-)$. Potom ji dle požadavků ze zadání položíme rovnou nule.

$$\langle \hat{P} \rangle_\psi = \langle \psi | \hat{P} | \psi \rangle = i\sqrt{\frac{M\hbar\omega}{2}} \langle \psi | \hat{a}_+ - \hat{a}_- | \psi \rangle = i\sqrt{\frac{M\hbar\omega}{2}} (\langle \psi | \hat{a}_+ | \psi \rangle - \langle \psi | \hat{a}_- | \psi \rangle)$$

Pro závěrečnou úpravu budeme potřebovat vyjádřit, čemu se rovnají $\hat{a}_+ |\psi\rangle, \hat{a}_- |\psi\rangle$

$$\begin{aligned} \hat{a}_+ |\psi\rangle &= \rho |1\rangle + \sqrt{1-\rho^2}e^{i\varphi}\sqrt{2} |2\rangle \\ \hat{a}_- |\psi\rangle &= 0 \cdot \rho | -1\rangle + 1 \cdot \sqrt{1-\rho^2}e^{i\varphi}\sqrt{2} |0\rangle \end{aligned}$$

To nyní dosadíme:

$$\langle \hat{P} \rangle_\psi = \sqrt{1-\rho^2}e^{-i\varphi}\rho - \rho\sqrt{1-\rho^2}e^{i\varphi} \stackrel{!}{=} 0 \quad \rightarrow \quad e^{-i\varphi} \stackrel{!}{=} e^{i\varphi} \quad \rightarrow \quad \varphi = m\pi, \quad m \in \mathbb{Z}$$

Příklad 4 Lineární harmonický oscilátor s hmotností $M = \hbar/\omega$ je v čase $t = 0$ ve stavu popsaném vlnovou funkcí

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

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

Řešení Nejprve určíme, jaké hodnoty energie můžeme naměřit a s jakou pravděpodobností.

$$\psi = a\psi_1 + b\psi_2$$

Členy ψ_1 a ψ_2 vyjádříme podle obecného vztahu z taháku $\psi_n(x) = \left(\frac{M\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{n!2^n}} H_n(x) e^{-\frac{x^2}{2}}$, kde H_n jsou Hermitovy polynomy

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

$$\psi_2(x) = 2(2x^2 - 1) \frac{1}{\sqrt[4]{\pi}} \frac{1}{\sqrt{8}} e^{-\frac{x^2}{2}}$$

Dosadíme nové členy do vztahu $\psi = a\psi_1 + b\psi_2$:

$$c \left(x^2 + x - \frac{1}{2} \right) e^{-\frac{x^2}{2}} = a 2x \frac{1}{\sqrt[4]{\pi}} \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-\frac{x^2}{2}} + b 2(2x^2 - 1) \frac{1}{\sqrt[4]{\pi}} \frac{1}{\sqrt{8}} e^{-\frac{x^2}{2}}.$$

Tuto rovnici vydělíme $e^{-\frac{x^2}{2}}$ a zavedeme novou konstantu $\tilde{c} = c \frac{\sqrt[4]{\pi}}{\sqrt{2}}$ a dostaneme

$$\tilde{c} \left(x^2 + x - \frac{1}{2} \right) = ax + \frac{2bx^2}{2} - \frac{b}{2}.$$

Z toho dostaneme vztahy pro konstanty

$$a = \tilde{c}$$

$$\tilde{c} = b$$

$$-\frac{1}{2}\tilde{c} = -\frac{1}{2}b$$

Z toho plyne, že

$$\psi = \tilde{c}(\psi_1 + \psi_2).$$

Z podmínky na skalární součin $(\psi, \psi) = 1$ plyne, že $\tilde{c}^2 + \tilde{c}^2 = 1$, a tedy $\tilde{c} = \frac{1}{\sqrt{2}}$.

Dosazením dostaneme

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{2}}\psi_1 + \frac{1}{\sqrt{2}}\psi_2.$$

Dále spočteme skalární součiny $(\psi_1, \psi) = 1 \cdot \frac{1}{\sqrt{2}} + 0 \cdot \frac{1}{\sqrt{2}} = \frac{1}{\sqrt{2}}$; $(\psi_2, \psi) = \frac{1}{\sqrt{2}}$.

To mám říkat, že můžeme naměřit hodnoty energií $E_1 = \frac{3\hbar\omega}{2}$, $E_2 = \frac{5\hbar\omega}{2}$ s pravděpodobnostmi $P_\psi(E_1) = |(\psi_1, \psi)|^2 = \frac{1}{2}$, $P_\psi(E_2) = |(\psi_2, \psi)|^2 = \frac{1}{2}$.

Nyní se budeme zabývat stavem oscilátoru v čase $t > 0$.

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{3}{2} \hbar \omega t} \psi_1(x) + \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{5}{2} \hbar \omega t} \psi_2(x).$$

Střední hodnota hybnosti je dána vztahem $\langle \hat{P} \rangle = \left(\psi(x, t), \hat{P} \psi(x, t) \right)$, přičemž $\hat{P} = i \sqrt{\frac{M \hbar \omega}{2}} (\hat{a}_+ - \hat{a}_-)$.

Ze vztahu $\hat{a}_\pm |n\rangle = \alpha_n^\pm |n \pm 1\rangle$, $\alpha_n^- = \sqrt{n}$, $\alpha_n^+ = \sqrt{n+1}$, $|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} \hat{a}_+^n$ dostáváme hodnoty $\alpha_1^+ = \sqrt{2}$, $\alpha_1^- = 1$, $\alpha_2^+ = \sqrt{3}$, $\alpha_2^- = \sqrt{2}$.

Dosadíme do vztahu pro $\hat{P} \psi(x, t)$ a dostaneme

$$\begin{aligned} \hat{P} \psi(x, t) &= i \sqrt{\frac{\hbar^2}{2}} (\hat{a}_+ \psi(x, t) - \hat{a}_- \psi(x, t)) = \\ &= i \sqrt{\frac{\hbar^2}{2}} \frac{1}{\sqrt{2}} \left[e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{3}{2} \hbar \omega t} \sqrt{2} \psi_2 + e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{5}{2} \hbar \omega t} \sqrt{3} \psi_3 - e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{3}{2} \hbar \omega t} \psi_0 - e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{5}{2} \hbar \omega t} \sqrt{2} \psi_1 \right], \end{aligned}$$

a konečně pak

$$\begin{aligned} \langle \hat{P} \rangle_{\psi(t)} &= \left(\psi(x, t), \hat{P} \psi(x, t) \right) = i \frac{\hbar}{2} \left[-e^{\frac{3}{2} i \omega t - \frac{5}{2} i \omega t} + e^{\frac{5}{2} i \omega t - \frac{3}{2} i \omega t} \right] = \\ &= i \frac{\hbar}{2} [e^{i \omega t} - e^{-i \omega t}] = -\hbar \sin(\omega t) \end{aligned}$$

Příklad 5 Lineární harmonický oscilátor s hmotností $M = \hbar/\omega$ je v čase $t = 0$ ve stavu popsaném vlnovou funkcí

$$\psi(x, 0) = C(1 + 3x^2)e^{-\frac{x^2}{2}}.$$

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

Řešení Nejprve určíme, jaké hodnoty energie můžeme naměřit a s jakou pravděpodobností.

$$\psi = a\psi_0 + b\psi_2$$

Členy ψ_0 a ψ_2 vyjádříme podle obecného vztahu z taháku $\psi_n(x) = \left(\frac{M\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{n!2^n}} H_n(x) e^{-\frac{x^2}{2}}$, kde H_n jsou Hermitovy polynomy

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

$$\psi_2(x) = 2(2x^2 - 1) \frac{1}{\sqrt[4]{\pi}} \frac{1}{\sqrt{8}} e^{-\frac{x^2}{2}}$$

Dosadíme nové členy do vztahu $\psi = a\psi_0 + b\psi_2$:

$$c(1 + 3x^2)e^{-\frac{x^2}{2}} = a \frac{1}{\sqrt[4]{\pi}} e^{-\frac{x^2}{2}} + 2b(2x^2 - 1) \frac{1}{\sqrt[4]{\pi}} \frac{1}{\sqrt{8}} e^{-\frac{x^2}{2}}$$

Tuto rovnici vydělíme $e^{-\frac{x^2}{2}}$ a zavedeme novou konstantu $\tilde{c} = c\sqrt[4]{\pi}$ a dostaneme

$$\tilde{c}(1 + 3x^2) = a - \frac{1}{\sqrt{2}}b + \sqrt{2}x^2b.$$

Z toho dostaneme vztahy pro konstanty

$$a - \frac{1}{\sqrt{2}}b = \tilde{c}$$

$$3\tilde{c} = \sqrt{2}b \quad \rightarrow \quad b = \frac{3\tilde{c}}{\sqrt{2}} \quad \rightarrow \quad a = \frac{5\tilde{c}}{2}$$

Z toho plyne, že

$$\psi(x) = \frac{5\tilde{c}}{2}\psi_0 + \frac{3\tilde{c}}{\sqrt{2}}\psi_2.$$

Z podmínky na skalární součin $(\psi, \psi) = 1$ plyne, že $\frac{25\tilde{c}^2}{4} + \frac{9\tilde{c}^2}{2} = 1$, a tedy $\tilde{c} = \frac{2}{\sqrt{43}}$.

Dosazením dostaneme

$$\psi = \frac{5}{\sqrt{43}}\psi_0 + 3\sqrt{\frac{2}{43}}\psi_2.$$

Dále spočteme skalární součiny $(\psi_0, \psi) = \frac{5}{\sqrt{43}}$; $(\psi_2, \psi) = 3\sqrt{\frac{2}{43}}$.

To mám říkat, že můžeme naměřit hodnoty energií $E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}$, $E_2 = \frac{5\hbar\omega}{2}$ s pravděpodobnostmi $P_\psi(E_0) = |(\psi_0, \psi)|^2 = \frac{25}{43}$, $P_\psi(E_2) = |(\psi_2, \psi)|^2 = \frac{18}{43}$.

Nyní se budeme zabývat stavem oscilátoru v čase $t > 0$.

$$\psi(x, t) = \frac{5}{\sqrt{43}} e^{-\frac{i}{2}\omega t} \psi_0(x) + 3\sqrt{\frac{2}{43}} e^{-\frac{5i}{2}\omega t} \psi_2(x).$$

Střední hodnota hybnosti je dána vztahem $\langle \hat{P} \rangle = \left(\psi(x, t), \hat{P} \psi(x, t) \right)$, přičemž $\hat{P} = i\sqrt{\frac{M\hbar\omega}{2}} (\hat{a}_+ - \hat{a}_-)$.

Ze vztahu $\hat{a}_\pm |n\rangle = \alpha_n^\pm |n \pm 1\rangle$, $\alpha_n^- = \sqrt{n}$, $\alpha_n^+ = \sqrt{n+1}$, $|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} \hat{a}_+^n$ dostáváme hodnoty $\alpha_0^+ = 1$, $\alpha_0^- = 0$, $\alpha_2^+ = \sqrt{3}$, $\alpha_2^- = \sqrt{2}$.

Dosadíme do vztahu pro $\hat{P}\psi(x, t)$ a dostaneme

$$\begin{aligned} \hat{P}\psi(x, t) &= i\sqrt{\frac{\hbar^2}{2}} (\hat{a}_+ \psi(x, t) - \hat{a}_- \psi(x, t)) = \\ &= i\sqrt{\frac{\hbar^2}{2}} \frac{1}{\sqrt{43}} \left[e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{1}{2}\hbar\omega t} 5\psi_1 + e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{5}{2}\hbar\omega t} 3\sqrt{6}\psi_3 - e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{5}{2}\hbar\omega t} 12\psi_1 \right], \end{aligned}$$

a konečně pak

$$\langle \hat{P} \rangle_{\psi(t)} = \left(\psi(x, t), \hat{P} \psi(x, t) \right) = 0$$

2 Izotropní harmonický oscilátor

Příklad 1 Izotropní oscilátor s vlastní frekvencí $\omega = \hbar/M$ je ve stavu popsaném vlnovou funkcí

$$\psi(\vec{x}) = C((2+i)x + y) \left(\frac{5}{2} - x^2 - y^2 - z^2 \right) \exp\left(-\frac{x^2 + y^2 + z^2}{2}\right).$$

Jaká je energie částice? Jakou hodnotu kvadrátu momentu hybnosti můžeme naměřit? Jaké hodnoty projekce orbitálního momentu hybnosti částice do osy z můžeme naměřit a s jakou pravděpodobností?

Řešení Nejprve si převedeme úlohu do sférických souřadnic.

$$x = r \sin \theta \cos \varphi$$

$$y = r \sin \theta \sin \varphi$$

$$z = r \cos \theta$$

$$\begin{aligned} \psi(r, \theta, \varphi) &= C \cdot ((2+i)r \sin \theta \cos \varphi + r \sin \theta \sin \varphi) \left(\frac{5}{2} - r^2 \right) e^{-\frac{r^2}{2}} = \\ &= C \cdot \left((2+i) \sin \theta \frac{e^{i\varphi} + e^{-i\varphi}}{2} + \sin \theta \frac{e^{i\varphi} - e^{-i\varphi}}{2i} \right) \left(\frac{5}{2} - r^2 \right) r e^{-\frac{r^2}{2}} = \\ &= C \cdot \left[\sin \theta e^{i\varphi} \left(\frac{2+i}{2} + \frac{1}{2i} \right) + \sin \theta e^{-i\varphi} \left(\frac{2+i}{2} - \frac{1}{2i} \right) \right] \left(\frac{5}{2} - r^2 \right) r e^{-\frac{r^2}{2}} = \\ &= \left\| \frac{2+i}{2} + \frac{1}{2i} = \frac{2i-1+1}{2i} = 1, \quad \frac{2+i}{2} - \frac{1}{2i} = \frac{2i-1-1}{2i} = 1 - \frac{2}{2i} = 1+i \right\| = \\ &= C \cdot [\sin \theta e^{i\varphi} + \sin \theta e^{-i\varphi} (1+i)] \left(\frac{5}{2} - r^2 \right) r e^{-\frac{r^2}{2}} \end{aligned}$$

Budeme se zajímat tím, jaké hodnoty projekce orbitálního momentu hybnosti do osy z můžeme naměřit a s jakou pravděpodobností.

Nejprve ze vztahu $Y_{lm}(\theta, \varphi) = C_{lm} P_l^m(\cos \theta) e^{im\varphi}$, $|C_{ml}|^2 = \frac{(2l+1)(l-m)!}{4\pi(m+l)!}$ spočteme kulové funkce

$$Y_{11} = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{i\varphi}$$

$$Y_{10} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta$$

$$Y_{1-1} = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{-i\varphi},$$

z čehož dostaneme vztahy pro součin goniometrických funkcí s exponenciálou

$$\sin \theta e^{i\varphi} = -\sqrt{\frac{8\pi}{3}} Y_{11}, \quad \cos \theta = \sqrt{\frac{8\pi}{3}} \frac{1}{\sqrt{2}} Y_{10}, \quad \sin \theta e^{-i\varphi} = \sqrt{\frac{8\pi}{3}} Y_{1-1}.$$

Tyto vztahy dosadíme do rovnice výše, přičemž uvažujeme $r = \text{konst.}$:

$$\Psi(\theta, \varphi) = \tilde{C} [-Y_{11} + (1+i) Y_{1-1}].$$

Dále potřebujeme určit konstantu $\tilde{C}$, což jako obvykle uděláme z rovnosti $(\Psi, \Psi) = 1$, tedy

$$1 = |\tilde{c}|^2 [|1|^2 + |1 + i|^2] = |\tilde{c}|^2 [1 + 2] = 3|\tilde{c}|^2,$$

takže $\tilde{c} = \frac{1}{\sqrt{3}}$.

Máme tedy

$$\Psi(\theta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{3}} (-Y_{11} + (1 + i) Y_{1-1}).$$

Můžeme naměřit hodnoty $m = \pm 1$, z čehož dostaneme hodnoty projekce orbitálního momentu hybnosti do osy z $L_z = 0, \pm \hbar$, přičemž pravděpo-dobnosti jednotlivých stavů jsou

$$P_1 = |(Y_{11}, \Psi)|^2 = \frac{1}{3},$$

$$P_1 = |(Y_{1-1}, \Psi)|^2 = \frac{2}{3}.$$

Nyní nás bude zajímat hodnota kvadrátu momentu hybnosti $\langle \hat{L}^2 \rangle$. Neboť máme $l = 1$, dostáváme ze vztahu $\hat{L}^2 Y_{lm} = \hbar^2 l(l + 1) Y_{lm}$:

$$\hat{L}^2 = 2\hbar^2.$$

Nyní ještě určíme energie částice. To uděláme tak, že do našeho předpisu vrátíme závislost na r , tedy uvažujeme

$$\psi(r, \theta, \varphi) = \left(\frac{5}{2} - r^2\right) r e^{-\frac{r^2}{2}} \cdot \frac{1}{\sqrt{3}} (-Y_{11} + (1 + i) Y_{1-1}).$$

Rozebereme si nyní část $\left(\frac{5}{2} - r^2\right) r e^{-\frac{r^2}{2}}$, pomocí níž určíme hodnoty n, l . Neboť $\xi = r \sqrt{\frac{M\omega}{\hbar}}$, máme ze zadání $\xi = r$. Neboť se v obecném vztahu pro vlnovou funkci (viz. tahák) vyskytuje ξ^l a ve zkoumané části r^1 máme, že $l = 1$. Nyní ještě potřebujeme vystihnout člen $\left(\frac{5}{2} - r^2\right)$ pomocí Lagguerových polynomů. Neboť je $l = 1$ a zajímá nás $L_n^{l+\frac{1}{2}}(\xi^2)$, uvažujeme $L_n^{\frac{3}{2}}(r^2)$. Proto očividně $n = 1$.

Hledaná hodnota energie ve tvaru $E = \hbar\omega \left(2n + l + \frac{3}{2}\right)$ je tedy zřejmě $E = \frac{9}{2}\hbar\omega$.

Příklad 2 Izotropní oscilátor s vlastní frekvencí $\omega = \hbar/M$ je ve stavu popsaném vlnovou funkcí

$$\psi(\vec{x}) = C (ix + y + 3iz) \exp\left(-\frac{x^2 + y^2 + z^2}{2}\right).$$

Jaké hodnoty projekce orbitálního momentu hybnosti částice do osy z můžeme naměřit a s jakou pravděpodobností? Jaká je střední hodnota projekce momentu hybnosti do osy x ?

Řešení Nejprve si převedeme úlohu do sférických souřadnic.

$$x = r \sin \theta \cos \varphi$$

$$y = r \sin \theta \sin \varphi$$

$$z = r \cos \theta$$

$$\begin{aligned} \psi(r, \theta, \varphi) &= C \cdot (ir \sin \theta \cos \varphi + r \sin \theta \sin \varphi + 3ir \cos \theta) e^{-\frac{r^2}{2}} = \\ &= C \cdot \left(i \sin \theta \frac{e^{i\varphi} + e^{-i\varphi}}{2} + \sin \theta \frac{e^{i\varphi} - e^{-i\varphi}}{2i} + 3i \cos \theta \right) r e^{-\frac{r^2}{2}} = \\ &= C \cdot \left[\sin \theta e^{i\varphi} \left(\frac{i}{2} + \frac{1}{2i} \right) + \sin \theta e^{-i\varphi} \left(\frac{i}{2} - \frac{1}{2i} \right) + 3i \cos \theta \right] r e^{-\frac{r^2}{2}} = \\ &= C \cdot \left[\sin \theta e^{i\varphi} \left(\frac{-1+1}{2i} \right) + \sin \theta e^{-i\varphi} \left(\frac{-1-1}{2i} \right) + 3i \cos \theta \right] r e^{-\frac{r^2}{2}} \end{aligned}$$

Nejprve ze vztahu $Y_{lm}(\theta, \varphi) = C_{lm} P_l^m(\cos \theta) e^{im\varphi}$, $|C_{ml}|^2 = \frac{(2l+1)(l-m)!}{4\pi(m+l)!}$ spočteme kulové funkce

$$Y_{11} = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{i\varphi}$$

$$Y_{10} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta$$

$$Y_{1-1} = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{-i\varphi},$$

z čehož dostaneme vztahy pro součin goniometrických funkcí s exponenciálou

$$\sin \theta e^{i\varphi} = -\sqrt{\frac{8\pi}{3}} Y_{11}, \quad \cos \theta = \sqrt{\frac{8\pi}{3}} \frac{1}{\sqrt{2}} Y_{10}, \quad \sin \theta e^{-i\varphi} = \sqrt{\frac{8\pi}{3}} Y_{1-1}.$$

Tyto vztahy dosadíme do rovnice výše, přičemž uvažujeme $r = \text{konst.}$:

$$\Psi(\theta, \varphi) = \tilde{C} \left[i \cdot Y_{1-1} + \frac{3i}{\sqrt{2}} Y_{10} \right].$$

Dále potřebujeme určit konstantu $\tilde{C}$, což jako obvykle uděláme z rovnosti $(\Psi, \Psi) = 1$, tedy

$$1 = |\tilde{C}|^2 \left[|i|^2 + \left| \frac{3i}{\sqrt{2}} \right|^2 \right] = |\tilde{C}|^2 \left[1 + \frac{9}{2} \right] = \frac{11}{2} |\tilde{C}|^2,$$

takže $\tilde{c} = \sqrt{\frac{2}{11}}$.
Máme tedy

$$\Psi(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{2}{11}} i \cdot Y_{1-1} + \frac{3i}{\sqrt{11}} Y_{10}.$$

Můžeme naměřit hodnoty $m = 0, \pm 1$, z čehož dostaneme hodnoty projekce orbitálního momentu hybnosti do osy z $L_z = 0, \pm \hbar$, přičemž pravděpo-dobnosti jednotlivých stavů jsou

$$P(0) = |(Y_{10}, \Psi)|^2 = \frac{2}{11},$$

$$P(-\hbar) = |(Y_{1-1}, \Psi)|^2 = \frac{9}{11}.$$

Střední hodnotu projekce orbitálního momentu hybnosti do osy x $\langle \hat{L}_1 \rangle_\Psi$ určíme za pomoci vztahů $\hat{L}_+ = \hat{L}_1 + i\hat{L}_2$, $\hat{L}_- = \hat{L}_1 - i\hat{L}_2$, z čehož nám plyne $\hat{L}_1 = \frac{1}{2}(\hat{L}_+ + \hat{L}_-)$. Proto

$$\langle \hat{L}_1 \rangle_\Psi = (\Psi, \hat{L}_1 \Psi) = \frac{1}{2} [(\Psi, \hat{L}_+ \Psi) + (\Psi, \hat{L}_- \Psi)]$$

Jelikož platí $m = 0, -1$ a $\alpha_{lm}^\pm = \hbar \sqrt{l(l+1) - m(m \pm 1)}$, dostaneme (nenulové) hodnoty

$$\alpha_{1-1}^+ = \sqrt{2}\hbar, \quad \alpha_{10}^+ = \sqrt{2}\hbar, \quad \alpha_{10}^- = \sqrt{2}\hbar$$

A podle $\hat{L}_\pm |l, m\rangle = \alpha_{lm}^\pm |l, m \pm 1\rangle$ dostaneme

$$\hat{L}_+ \Psi = \frac{2}{\sqrt{11}} \hbar Y_{10} + 3i\hbar \sqrt{\frac{2}{11}} Y_{11}$$

$$\hat{L}_- \Psi = 0 + 3i\hbar \sqrt{\frac{2}{11}} Y_{1-1}$$

Požadované skalární součiny jsou tedy

$$(\Psi, \hat{L}_+ \Psi) = \frac{6i}{11} \hbar$$

$$(\Psi, \hat{L}_- \Psi) = -3\frac{2}{11} \hbar$$

Z toho tedy dostáváme, že střední hodnota projekce orbitálního momentu hybnosti do osy x je

$$\langle \hat{L}_1 \rangle_\Psi = 0.$$

Příklad 3 Elektron v atomu vodíku je ve stavu popsaném vlnovou funkcí

$$\psi(\vec{x}) = C(x + 2y + z) \exp\left(-\frac{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}}{2a}\right).$$

Jaké hodnoty projekce orbitálního momentu hybnosti elektronu do osy z můžeme naměřit a s jakou pravděpodobností? Jaká je střední hodnota projekce orbitálního momentu hybnosti do osy x ?

Řešení Nejprve si převedeme úlohu do sférických souřadnic.

$$\begin{aligned}x &= r \sin \theta \cos \varphi \\y &= r \sin \theta \sin \varphi \\z &= r \cos \theta\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\psi(r, \theta, \varphi) &= C \cdot (r \sin \theta \cos \varphi + 2r \sin \theta \sin \varphi + r \cos \theta) e^{-\frac{r^2}{2a}} = \\&= C \cdot \left(\sin \theta \frac{e^{i\varphi} + e^{-i\varphi}}{2} + 2 \sin \theta \frac{e^{i\varphi} - e^{-i\varphi}}{2i} + \cos \theta \right) r e^{-\frac{r^2}{2a}} = \\&= C \cdot \left[\sin \theta e^{i\varphi} \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{i} \right) + \sin \theta e^{-i\varphi} \left(\frac{1}{2} - \frac{1}{i} \right) + \cos \theta \right] r e^{-\frac{r^2}{2a}}\end{aligned}$$

Nejprve ze vztahu $Y_{lm}(\theta, \varphi) = C_{lm} P_l^m(\cos \theta) e^{im\varphi}$, $|C_{ml}|^2 = \frac{(2l+1)(l-m)!}{4\pi(m+l)!}$ spočteme kulové funkce

$$Y_{11} = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{i\varphi}$$

$$Y_{10} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta$$

$$Y_{1-1} = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{-i\varphi},$$

z čehož dostaneme vztahy pro součin goniometrických funkcí s exponenciálou

$$\sin \theta e^{i\varphi} = -\sqrt{\frac{8\pi}{3}} Y_{11}, \quad \cos \theta = \sqrt{\frac{8\pi}{3}} \frac{1}{\sqrt{2}} Y_{10}, \quad \sin \theta e^{-i\varphi} = \sqrt{\frac{8\pi}{3}} Y_{1-1}.$$

Tyto vztahy dosadíme do rovnice výše, přičemž uvažujeme $r = \text{konst.}$:

$$\Psi(\theta, \varphi) = \tilde{C} \left[-Y_{11} \left(\frac{i+2}{2i} \right) + Y_{1-1} \left(\frac{i-2}{2i} \right) + \frac{1}{\sqrt{2}} Y_{10} \right].$$

Dále potřebujeme určit konstantu $\tilde{C}$, což jako obvykle uděláme z rovnosti $(\Psi, \Psi) = 1$, tedy

$$1 = |\tilde{C}|^2 \left[\left| \frac{-1+2i}{2} \right|^2 + \left| \frac{1+2i}{2} \right|^2 + \frac{1}{2} \right] = |\tilde{C}|^2 \left[\frac{5}{4} + \frac{5}{4} + \frac{1}{2} \right] = |\tilde{C}|^2 \frac{12}{4},$$

takže $\tilde{c} = \frac{1}{\sqrt{3}}$.
Máme tedy

$$\Psi(\theta, \varphi) = -\left(\frac{-1+2i}{2\sqrt{3}}\right)Y_{11} + \left(\frac{-1-2i}{2\sqrt{3}}\right)Y_{1-1} + \frac{1}{\sqrt{6}}Y_{10}.$$

Můžeme naměřit hodnoty $m = 0, \pm 1$, z čehož dostaneme hodnoty projekce orbitálního momentu hybnosti do osy z $L_z = 0, \pm \hbar$, přičemž pravděpodobnosti jednotlivých stavů jsou

$$P_1 = |(Y_{11}, \Psi)|^2 = \frac{5}{12},$$

$$P_2 = |(Y_{10}, \Psi)|^2 = \frac{1}{6},$$

$$P_1 = |(Y_{1-1}, \Psi)|^2 = \frac{5}{12}.$$

Střední hodnotu projekce orbitálního momentu hybnosti do osy x $\langle \hat{L}_1 \rangle_\Psi$ určíme za pomoci vztahů $\hat{L}_+ = \hat{L}_1 + i\hat{L}_2$, $\hat{L}_- = \hat{L}_1 - i\hat{L}_2$, z čehož nám plyne $\hat{L}_1 = \frac{1}{2}(\hat{L}_+ + \hat{L}_-)$. Proto

$$\langle \hat{L}_1 \rangle_\Psi = (\Psi, \hat{L}_1 \Psi) = \frac{1}{2} [(\Psi, \hat{L}_+ \Psi) + (\Psi, \hat{L}_- \Psi)]$$

Jelikož platí $|m| \leq l$ a $\alpha_{lm}^\pm = \hbar\sqrt{l(l+1) - m(m \pm 1)}$, dostaneme (nenulové) hodnoty

$$\alpha_{1-1}^+ = \sqrt{2}\hbar, \quad \alpha_{11}^- = \sqrt{2}\hbar, \quad \alpha_{10}^+ = \sqrt{2}\hbar, \quad \alpha_{10}^- = \sqrt{2}\hbar$$

A podle $\hat{L}_\pm |l, m\rangle = \alpha_{lm}^\pm |l, m \pm 1\rangle$ dostaneme

$$\hat{L}_+ \Psi = 0 - \frac{1+2i}{2\sqrt{3}}\sqrt{2}\hbar Y_{10} + \hbar \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{6}}Y_{11}$$

$$\hat{L}_- \Psi = -\frac{-1+2i}{2\sqrt{3}}\sqrt{2}\hbar Y_{10} + \frac{\hbar}{\sqrt{3}}Y_{1-1}$$

Požadované skalární součiny jsou tedy

$$(\Psi, \hat{L}_+ \Psi) = \frac{\hbar}{\sqrt{3}} \left(-\frac{1+2i}{2\sqrt{3}} \right) - \frac{-1-2i}{2\sqrt{3}} \frac{\hbar}{\sqrt{3}} = 0$$

$$(\Psi, \hat{L}_- \Psi) = -\frac{1}{\sqrt{6}} \frac{\sqrt{2}\hbar}{2\sqrt{3}} (-1+2i) + \frac{-1+2i}{2\sqrt{3}} \frac{\hbar}{\sqrt{3}} = 0$$

Z toho tedy dostáváme, že střední hodnota projekce orbitálního momentu hybnosti do osy x je

$$\langle \hat{L} \rangle_\Psi = 0.$$

Příklad 4 Elektron v atomu vodíku je ve stavu popsaném vlnovou funkcí

$$\psi(\vec{x}) = C(2x + 3y + z) \exp\left(-\frac{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}}{2a}\right).$$

Jaké hodnoty projekce orbitálního momentu hybnosti elektronu do osy z můžeme naměřit a s jakou pravděpodobností? Jaká je střední hodnota projekce orbitálního momentu hybnosti do osy y ?

Řešení Nejprve si převedeme úlohu do sférických souřadnic.

$$\begin{aligned}x &= r \sin \theta \cos \varphi \\y &= r \sin \theta \sin \varphi \\z &= r \cos \theta\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\psi(r, \theta, \varphi) &= C \cdot (2r \sin \theta \cos \varphi + 3r \sin \theta \sin \varphi + r \cos \theta) e^{-\frac{r}{2a}} = \\&= C \cdot \left(2 \sin \theta \frac{e^{i\varphi} + e^{-i\varphi}}{2} + 3 \sin \theta \frac{e^{i\varphi} - e^{-i\varphi}}{2i} + \cos \theta\right) r e^{-\frac{r}{2a}} = \\&= C \cdot \left[\sin \theta e^{i\varphi} \left(1 + \frac{3}{2i}\right) + \sin \theta e^{-i\varphi} \left(1 - \frac{3}{2i}\right) + \cos \theta\right] r e^{-\frac{r}{2a}}\end{aligned}$$

Nejprve ze vztahu $Y_{lm}(\theta, \varphi) = C_{lm} P_l^m(\cos \theta) e^{im\varphi}$, $|C_{ml}|^2 = \frac{(2l+1)(l-m)!}{4\pi(m+l)!}$ spočteme kulové funkce

$$\begin{aligned}Y_{11} &= -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{i\varphi} \\Y_{10} &= \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta \\Y_{1-1} &= \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{-i\varphi},\end{aligned}$$

z čehož dostaneme vztahy pro součin goniometrických funkcí s exponenciálou

$$\sin \theta e^{i\varphi} = -\sqrt{\frac{8\pi}{3}} Y_{11}, \quad \cos \theta = \sqrt{\frac{8\pi}{3}} \frac{1}{\sqrt{2}} Y_{10}, \quad \sin \theta e^{-i\varphi} = \sqrt{\frac{8\pi}{3}} Y_{1-1}.$$

Tyto vztahy dosadíme do rovnice výše, přičemž uvažujeme $r = \text{konst.}$:

$$\Psi(\theta, \varphi) = \tilde{C} \left[-Y_{11} \left(\frac{2i+3}{2i} \right) + Y_{1-1} \left(\frac{2i-3}{2i} \right) + \frac{1}{\sqrt{2}} Y_{10} \right].$$

Dále potřebujeme určit konstantu $\tilde{C}$, což jako obvykle uděláme z rovnosti $(\Psi, \Psi) = 1$, tedy

$$1 = |\tilde{C}|^2 \left[\left| \frac{2i+3}{2i} \right|^2 + \left| \frac{2i-3}{2i} \right|^2 + \frac{1}{2} \right] = |\tilde{C}|^2 \left[\frac{13}{4} + \frac{13}{4} + \frac{1}{2} \right] = |\tilde{C}|^2 \frac{28}{4},$$

takže $\tilde{c} = \frac{1}{\sqrt{7}}$.
Máme tedy

$$\Psi(\theta, \varphi) = -\left(\frac{2i+3}{2\sqrt{7}i}\right)Y_{11} + \left(\frac{2i-3}{2\sqrt{7}i}\right)Y_{1-1} + \frac{1}{\sqrt{14}}Y_{10}.$$

Můžeme naměřit hodnoty $m = 0, \pm 1$, z čehož dostaneme hodnoty projekce orbitálního momentu hybnosti do osy z $L_z = 0, \pm\hbar$, přičemž pravděpodobnosti jednotlivých stavů jsou

$$P_1 = |(Y_{11}, \Psi)|^2 = \frac{13}{28},$$

$$P_2 = |(Y_{10}, \Psi)|^2 = \frac{1}{14},$$

$$P_1 = |(Y_{1-1}, \Psi)|^2 = \frac{13}{28}.$$

Střední hodnotu projekce orbitálního momentu hybnosti do osy y $\langle \hat{L}_2 \rangle_\Psi$ určíme za pomoci vztahů $\hat{L}_+ = \hat{L}_1 + i\hat{L}_2$, $\hat{L}_- = \hat{L}_1 - i\hat{L}_2$, z čehož nám plyne $\hat{L}_2 = \frac{1}{2i}(\hat{L}_+ - \hat{L}_-)$. Proto

$$\langle \hat{L}_2 \rangle_\Psi = (\Psi, \hat{L}_2 \Psi) = \frac{1}{2i} [(\Psi, \hat{L}_+ \Psi) - (\Psi, \hat{L}_- \Psi)]$$

Jelikož platí $|m| \leq l$ a $\alpha_{lm}^\pm = \hbar\sqrt{l(l+1) - m(m \pm 1)}$, dostaneme (nenulové) hodnoty

$$\alpha_{1-1}^+ = \sqrt{2}\hbar, \quad \alpha_{11}^- = \sqrt{2}\hbar, \quad \alpha_{10}^+ = \sqrt{2}\hbar, \quad \alpha_{10}^- = \sqrt{2}\hbar$$

A podle $\hat{L}_\pm |l, m\rangle = \alpha_{lm}^\pm |l, m \pm 1\rangle$ dostaneme

$$\hat{L}_+ \Psi = 0 + \frac{2i-3}{2\sqrt{7}i}\sqrt{2}\hbar Y_{10} + \hbar \frac{1}{\sqrt{7}}Y_{11}$$

$$\hat{L}_- \Psi = -\frac{2i+3}{2\sqrt{7}i}\sqrt{2}\hbar Y_{10} + \frac{\hbar}{\sqrt{7}}Y_{1-1}$$

Požadované skalární součiny jsou tedy

$$(\Psi, \hat{L}_+ \Psi) = \frac{\hbar}{\sqrt{7}} \left(\frac{2i-3}{2\sqrt{7}i} \right) - \frac{2i+3}{2\sqrt{7}i} \frac{\hbar}{\sqrt{7}} = -\frac{6\hbar}{14i}$$

$$(\Psi, \hat{L}_- \Psi) = -\frac{2i+3}{2\sqrt{7}i} \frac{\hbar}{\sqrt{7}} + \frac{\hbar}{\sqrt{7}} \frac{2i-3}{2\sqrt{7}i} = -\frac{6\hbar}{14i}$$

Z toho tedy dostáváme, že střední hodnota projekce orbitálního momentu hybnosti do osy x je

$$\langle \hat{L}_2 \rangle_\Psi = 0.$$

3 Volná částice

Příklad 1 Volná částice na přímce je ve stavu popsaném vlnovou funkcí

$$\psi(x) = C \exp\left(-\frac{(x-x_0)^2}{4\sigma^2} + \frac{i}{\hbar}p_0x\right), \quad x_0, p_0 \in \mathbb{R}, \sigma > 0.$$

Určete střední hodnotu hybnosti a energie částice.

Řešení Pro střední hodnotu hybnosti platí $\langle \hat{P} \rangle_\psi = (\psi, \hat{P}\psi)$, kde $\hat{P} = -i\hbar \frac{d}{dx}$. Na základě toho můžeme určit $\hat{P}\psi$:

$$\begin{aligned} \hat{P}\psi &= -i\hbar \frac{d}{dx} \left[C \exp\left(-\frac{(x-x_0)^2}{4\sigma^2} + \frac{i}{\hbar}p_0x\right) \right] = \\ &= -i\hbar \left(-\frac{x-x_0}{2\sigma^2} + \frac{i}{\hbar}p_0 \right) C \exp\left(-\frac{(x-x_0)^2}{4\sigma^2} + \frac{i}{\hbar}p_0x\right) = \\ &= \left(i\hbar \frac{x-x_0}{2\sigma^2} + p_0 \right) C \exp\left(-\frac{(x-x_0)^2}{4\sigma^2} + \frac{i}{\hbar}p_0x\right) \end{aligned}$$

Skalární součin $(\psi, \hat{P}\psi)$ je dán jako $\int_{\mathbb{R}} \psi \cdot \overline{\hat{P}\psi} dx$, takže

$$\begin{aligned} &(\psi, \hat{P}\psi) = \\ &= \int_{\mathbb{R}} C \exp\left(-\frac{(x-x_0)^2}{4\sigma^2} + \frac{i}{\hbar}p_0x\right) \cdot \left(i\hbar \frac{x-x_0}{2\sigma^2} + p_0 \right) \overline{C} \exp\left(-\frac{(x-x_0)^2}{4\sigma^2} - \frac{i}{\hbar}p_0x\right) dx = \\ &= |C|^2 \int_{\mathbb{R}} \left(i\hbar \frac{x-x_0}{2\sigma^2} + p_0 \right) \exp\left(-\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma^2}\right) dx = |y = x - x_0 \rightarrow dy = dx| = \\ &= |C|^2 \int_{\mathbb{R}} \left(i\hbar \frac{y}{2\sigma^2} + p_0 \right) \exp\left(-\frac{y^2}{2\sigma^2}\right) dy = 0 + |C|^2 p_0 \sqrt{2\pi\sigma^2}. \end{aligned}$$

Konstantu C určíme pomocí normalizace, tedy z $(\psi, \psi) = 1$.

$$1 = |C|^2 \int_{\mathbb{R}} \exp\left(-\frac{y^2}{2\sigma^2}\right) dy = |C|^2 \sqrt{2\pi\sigma^2},$$

z čehož

$$C = \frac{1}{\sqrt[4]{2\pi\sigma^2}}.$$

Konečně tedy dostáváme střední hodnotu hybnosti jako

$$\langle \hat{P} \rangle_\psi = |C|^2 p_0 \sqrt{2\pi\sigma^2} = p_0.$$

Nyní spočteme střední hodnotu energie částice. Pro tu platí $\langle \hat{H} \rangle_\psi = (\psi, \hat{H}\psi)$, kde $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2M} \frac{d^2}{dx^2}$. To však můžeme vyjádřit jako $\hat{H} = \frac{\hat{P}^2}{2M}$. Takže máme

$$\begin{aligned}
\langle \hat{H} \rangle_\psi &= \left(\psi, \frac{\hat{P}^2}{2M} \psi \right) = \frac{1}{2M} (\hat{P}\psi, \hat{P}\psi) = \\
&= \frac{1}{2M} |C|^2 \int_{\mathbb{R}} \left[i\hbar \frac{x-x_0}{2\sigma^2} + p_0 \right] \cdot \exp \left(-\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma^2} \right) \cdot \left[-i\hbar \frac{x-x_0}{2\sigma^2} + p_0 \right] dx = \\
&= \frac{1}{2M} |C|^2 \int_{\mathbb{R}} \exp \left(-\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma^2} \right) \cdot \left[\hbar^2 \frac{(x-x_0)^2}{4\sigma^4} + p_0^2 \right] dx = \\
&= \frac{1}{2M} |C|^2 \left[\hbar^2 \int_{\mathbb{R}} \frac{(x-x_0)^2}{4\sigma^4} \exp \left(-\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma^2} \right) dx + p_0^2 \int_{\mathbb{R}} \exp \left(-\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma^2} \right) dx \right] = \\
&= |y = x - x_0 \rightarrow dy = dx| = \frac{1}{2M} |C|^2 \left[\frac{\hbar^2}{4\sigma^2} \int_{\mathbb{R}} y^2 \exp \left(-\frac{y^2}{2\sigma^2} \right) dy + p_0 \sqrt{2\pi\sigma^2} \right] = \\
&= \frac{1}{2M} |C|^2 \left[\frac{\hbar^2}{4\sigma^2} \frac{1}{2} 2\sigma^2 \sqrt{2\pi\sigma^2} + p_0 \sqrt{2\pi\sigma^2} \right] = \left| C = \frac{1}{\sqrt{4\pi\sigma^2}} \right| = \frac{1}{2M} \left[\frac{\hbar^2}{4\sigma^2} + p_0^2 \right]
\end{aligned}$$

Příklad 2 Částice je ve stavu popsaném vlnovou funkcí

$$\psi(\vec{x}) = C \exp\left(-\frac{(\vec{x} - \vec{y})^2}{4\sigma^2} + \frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{x}\right), \quad \vec{y}, \vec{p} \in \mathbb{R}^3, \sigma > 0.$$

Jaká je střední hodnota první složky momentu hybnosti částice?

Pro jednotlivé složky momentu hybnosti platí $\hat{L}_j = \epsilon_{jkl} \hat{Q}_k \hat{P}_l$, tedy pro první složku máme

$$\hat{L}_1 = \epsilon_{123} \hat{Q}_2 \hat{P}_3 + \epsilon_{132} \hat{Q}_3 \hat{P}_2 = \hat{Q}_2 \hat{P}_3 - \hat{Q}_3 \hat{P}_2 = x_2 (-i\hbar) \frac{\partial}{\partial x_3} - x_3 (-i\hbar) \frac{\partial}{\partial x_2}$$

Pro střední hodnotu složky momentu hybnosti tedy platí

$$\langle \hat{L}_1 \rangle_\psi = (\psi, \hat{L}_1 \psi) = (\psi, \hat{Q}_2 \hat{P}_3 \psi) - (\psi, \hat{Q}_3 \hat{P}_2 \psi).$$

První člen v rozdílu nyní upravíme

$$\begin{aligned} (\psi, \hat{Q}_2 \hat{P}_3 \psi) &= |C|^2 \int_{\mathbb{R}^3} \exp\left(-\frac{(\vec{x} - \vec{y})^2}{2\sigma^2}\right) x_2 \cdot (-i\hbar) \left[\frac{x_3 - y_3}{2\sigma^2} + \frac{i}{\hbar} p_3\right] d^3x = \\ &= |C|^2 \left[\int_{\mathbb{R}^3} \exp\left(-\frac{(\vec{x} - \vec{y})^2}{2\sigma^2}\right) p_3 x_2 d^3x - \int_{\mathbb{R}^3} \exp\left(-\frac{(\vec{x} - \vec{y})^2}{2\sigma^2}\right) i\hbar \frac{x_3 - y_3}{2\sigma^2} x_2 d^3x \right], \end{aligned}$$

přičemž druhý integrál bude roven 0.

Z normalizace určíme konstantu C :

$$1 = |C|^2 \int_{\mathbb{R}^3} \exp\left(-\frac{(\vec{x} - \vec{y})^2}{2\sigma^2}\right) d^3x = |C|^2 (2\pi\sigma^2)^{3/2},$$

z čehož

$$|C|^2 = \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{3/2}}.$$

Dostáváme tedy

$$(\psi, \hat{Q}_2 \hat{P}_3 \psi) = |C|^2 \cdot (2\pi\sigma^2)^{3/2} y_2 p_3 = y_2 p_3.$$

Obdobně dostaneme i

$$(\psi, \hat{Q}_3 \hat{P}_2 \psi) = |C|^2 \cdot (2\pi\sigma^2)^{3/2} y_3 p_2 = y_3 p_2.$$

Střední hodnota první složky momentu hybnosti je tedy rovna

$$\langle \hat{L}_1 \rangle_\psi = y_2 p_3 - y_3 p_2.$$

4 Potenciálová jáma

Příklad 1 Uvažujte částici s hmotností M v nekonečné potenciálové jámě šířky $2a$. V čase $t = 0$ je částice ve stavu

$$\psi(x, 0) = C \left[\sin\left(\frac{\pi}{a}(x-a)\right) + 2 \sin\left(\frac{3\pi}{2a}(x-a)\right) \right].$$

Jaké hodnoty energie můžeme v tomto stavu naměřit a s jakou pravděpodobností? Nalezněte $\psi(x, t)$ pro $t > 0$. Jak se mění s časem pravděpodobnost nalezení částice v intervalu $(0, a)$?

Může se hodit (pro $m \neq n$):

$$\int_0^a \sin\left(\frac{n\pi}{2a}(x-a)\right) \sin\left(\frac{m\pi}{2a}(x-a)\right) dx = \frac{a}{\pi} \left(\frac{\sin\left(\frac{\pi}{2}(m-n)\right)}{m-n} - \frac{\sin\left(\frac{\pi}{2}(m+n)\right)}{m+n} \right).$$

Řešení Určeme nejprve hodnoty a pravděpodobnosti energií. Neboť platí $\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{2a}(x-a)\right)$, máme

$$\psi(x, 0) = C [\sqrt{a}\psi_2(x) + 2\sqrt{a}\psi_3(x)] = \tilde{C} [\psi_2(x) + 2\psi_3(x)]$$

Provedeme normalizaci

$$1 = \tilde{C}^2 + 4\tilde{C}^2 = 5\tilde{C}^2.$$

Můžeme naměřit hodnoty energie

$$E_2 = \frac{1}{2M} \left(\frac{\pi\hbar}{a} \right)^2,$$

$$E_3 = \frac{1}{2M} \left(\frac{3\pi\hbar}{2a} \right)^2.$$

Neboť $\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{5}}\psi_2 + \frac{2}{\sqrt{5}}\psi_3$, dostáváme pravděpodobnosti naměření zmíněných energií

$$P(E_2) = |(\psi_2, \psi)|^2 = \frac{1}{5},$$

$$P(E_3) = |(\psi_3, \psi)|^2 = \frac{4}{5}.$$

Průběh pro $t > 0$ tedy je

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{5}} \left(e^{-\frac{i}{\hbar}E_2t}\psi_2(x) + e^{-\frac{i}{\hbar}E_3t}\psi_3(x) \right).$$

Nakonec určíme pravděpodobnost nalezení částice v intervalu $(0, a)$ v čase t , přičemž platí $P_{x \in (0, a)}(t) = \int_0^a |\psi(x, t)|^2 dx$.

Určeme nejprve

$$\begin{aligned} |\psi(x, t)|^2 &= \frac{1}{5} \left(e^{-\frac{i}{\hbar}E_2t}\psi_2(x) + e^{-\frac{i}{\hbar}E_3t}\psi_3(x) \right) \cdot \left(e^{\frac{i}{\hbar}E_2t}\psi_2(x) + e^{\frac{i}{\hbar}E_3t}\psi_3(x) \right) = \\ &= \frac{1}{5} \left[\psi_2^2(x) + \psi_3^2(x) + e^{\frac{i}{\hbar}(E_3-E_2)t}\psi_2\psi_3 + e^{\frac{i}{\hbar}(E_2-E_3)t}\psi_3\psi_2 \right]. \end{aligned}$$

Potom integrál z toho je

$$\begin{aligned}
 \int_0^a |\psi(x, t)|^2 dx &= \frac{1}{5} \left[\int_0^a (\psi_2^2(x) + \psi_3^2(x)) dx + 2 \cos\left(\frac{E_3 - E_2}{\hbar} t\right) \int_0^a \psi_2 \psi_3 dx \right] = \\
 &= \frac{1}{5} \cdot 1 + \frac{1}{5} \int_0^a \frac{1}{a} \sin\left(\frac{\pi}{a}(x - a)\right) \sin\left(\frac{3\pi}{2a}(x - a)\right) dx = \\
 &= \frac{a}{\pi} \left[\frac{\sin \frac{\pi}{2}}{1} - \frac{\sin\left(\frac{5}{2}\pi\right)}{5} \right] = \frac{a}{\pi} \left[1 - \frac{1}{5} \right] = \frac{a}{\pi} \frac{4}{5}
 \end{aligned}$$

5 Částice v magnetickém poli, spin

Příklad 1 Částice se spinem $\frac{1}{2}$ je v homogenním magnetickém poli $\vec{B} = (0, 0, B)$. V čase $t = 0$ byla naměřena kladná projekce spinu částice do osy x . Určete vektor polarizace částice

$$\vec{p}(t) = \left(\langle \sigma_1 \rangle_\psi(t), \langle \sigma_2 \rangle_\psi(t), \langle \sigma_3 \rangle_\psi(t) \right)$$

v čase $t > 0$.

Řešení Neboť v čase $t = 0$ byla naměřena kladná projekce spinu částice do osy x . Víme, že $\hat{S}_j = \frac{\hbar}{2}\sigma_j$ a hodnoty σ_j jsou uvedeny v taháku. To nám říká, že

$$\hat{S}_x \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} b \\ a \end{pmatrix}.$$

Z toho dostáváme vztah

$$\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b \\ a \end{pmatrix},$$

takže $a = b \stackrel{vol.}{=} 1$.

Tudíž máme vlnovou funkci v $t = 0$

$$\psi_{x,+} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Pro časový vývoj vlnové funkce máme obecný vztah v taháku v sekci Spin, konkrétně máme

$$\begin{aligned} \psi_{x,+}(t) &= \frac{1}{\sqrt{2}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \mu_0 \vec{B} \vec{\sigma} t\right) \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\cos(\omega t) \mathbb{I} + i \frac{\sin(\omega t)}{B} B \sigma_3 \right] \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\begin{pmatrix} \cos(\omega t) & 0 \\ 0 & \cos(\omega t) \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} i \sin(\omega t) & 0 \\ 0 & i \sin(\omega t) \end{pmatrix} \right] \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{i\omega t} \\ e^{-i\omega t} \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Pro jednotlivé složky polarizace platí

$$\begin{aligned} \langle \sigma_1 \rangle_\psi(t) &= (\psi(t), \sigma_1 \psi(t)) = \frac{1}{2} (e^{-i\omega t}, e^{i\omega t}) \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{i\omega t} \\ e^{-i\omega t} \end{pmatrix} = \\ &= \frac{1}{2} (e^{-i\omega t}, e^{i\omega t}) \begin{pmatrix} e^{-i\omega t} \\ e^{i\omega t} \end{pmatrix} = \frac{1}{2} (e^{-2i\omega t} + e^{2i\omega t}) = \cos(2\omega t) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \langle \sigma_2 \rangle_\psi(t) &= (\psi(t), \sigma_2 \psi(t)) = \frac{1}{2} (e^{-i\omega t}, e^{i\omega t}) \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{i\omega t} \\ e^{-i\omega t} \end{pmatrix} = \\ &= \frac{1}{2} (e^{-i\omega t}, e^{i\omega t}) \begin{pmatrix} -ie^{-i\omega t} \\ ie^{i\omega t} \end{pmatrix} = \frac{1}{2} (-ie^{-2i\omega t} + ie^{2i\omega t}) = -\sin(2\omega t) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\langle \sigma_3 \rangle_\psi(t) &= (\psi(t), \sigma_3 \psi(t)) = \frac{1}{2} (e^{-i\omega t}, e^{i\omega t}) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{i\omega t} \\ e^{-i\omega t} \end{pmatrix} = \\ &= \frac{1}{2} (e^{-i\omega t}, e^{i\omega t}) \begin{pmatrix} e^{i\omega t} \\ -e^{-i\omega t} \end{pmatrix} = \frac{1}{2} (1 - 1) = 0\end{aligned}$$

Vektor polarizace má tedy tvar

$$\vec{p}(t) = (\cos(2\omega t), -\sin(2\omega t), 0).$$

Příklad 2 Částice se spinem $\frac{1}{2}$ je v homogenním magnetickém poli $\vec{B} = (0, B, 0)$. V čase $t = 0$ byla naměřena kladná projekce spinu částice do osy z . Určete, jak se s časem mění střední hodnota projekce spinu částice do obecného směru $\vec{n} = (\sin \theta \cos \varphi, \sin \theta \sin \varphi, \cos \theta)$?

Řešení Neboť v čase $t = 0$ byla naměřena kladná projekce spinu částice do osy z . Víme, že $\hat{S}_j = \frac{\hbar}{2}\sigma_j$ a hodnoty σ_j jsou uvedeny v taháku. To nám říká, že

$$\hat{S}_z \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} a \\ -b \end{pmatrix}.$$

Z toho dostáváme vztah

$$\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a \\ -b \end{pmatrix},$$

takže $a = a \stackrel{vol.}{=} 1$, $b = -b \stackrel{!}{=} 0$.

Tudíž máme vlnovou funkci v $t = 0$

$$\psi_{z,+} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Pro časový vývoj vlnové funkce máme obecný vztah v taháku v sekci Spin, konkrétně máme

$$\begin{aligned} \psi_{z,+}(t) &= \exp\left(\frac{i}{\hbar}\mu_0\vec{B}\vec{\sigma}t\right) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \left[\cos(\omega t)\mathbb{I} + i\frac{\sin(\omega t)}{B}B\sigma_2\right] \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \\ &= \left[\begin{pmatrix} \cos(\omega t) & 0 \\ 0 & \cos(\omega t) \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & \sin(\omega t) \\ \sin(\omega t) & 0 \end{pmatrix}\right] \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \\ &= \begin{pmatrix} \cos(\omega t) & \sin(\omega t) \\ -\sin(\omega t) & \cos(\omega t) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos(\omega t) \\ -\sin(\omega t) \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Střední hodnotu projekce spinu částice do obecného směru $\langle \hat{S}_{\vec{n}} \rangle_{\psi_{z,+}(t)}$ určíme ze vztahu pro střední hodnotu $\langle \hat{S}_{\vec{n}} \rangle_{\psi_{z,+}(t)} = (\psi_{z,+}(t), \hat{S}_{\vec{n}}\psi_{z,+}^T(t))$, takže nejprve potřebujeme určit S_n .

$$\begin{aligned} S_n = \vec{n} \cdot \vec{S} &= \frac{\hbar}{2}n_j\sigma_j = \frac{\hbar}{2} \left(\sin \theta \cos \varphi \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} + \sin \theta \sin \varphi \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} + \cos \theta \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \right) = \\ &= \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta e^{-i\varphi} \\ e^{i\varphi} \sin \theta & -\cos \theta \end{pmatrix} \frac{\hbar}{2} \end{aligned}$$

Ještě potřebujeme určit hodnotu $S_n\psi_{z,+}(t)$.

$$\begin{aligned} S_n\psi_{z,+}(t) &= \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta e^{-i\varphi} \\ e^{i\varphi} \sin \theta & -\cos \theta \end{pmatrix} \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \cos(\omega t) \\ -\sin(\omega t) \end{pmatrix} = \\ &= \dots \end{aligned}$$

Na závěr provedeme skalární součin a konečně dostaneme hledanou střední hodnotu

$$\langle \hat{S}_{\vec{n}} \rangle_{\psi_{z,+}(t)} = (\psi_{z,+}(t), \hat{S}_{\vec{n}}\psi_{z,+}^T(t)) = \left(\begin{pmatrix} \cos(\omega t) \\ -\sin(\omega t) \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \cos(\omega t) \\ -\sin(\omega t) \end{pmatrix} \right) = \dots$$

Příklad 3 Částice se spinem $\frac{1}{2}$ je v homogenním magnetickém poli $\vec{B} = (0, 0, B)$. V čase $t = 0$ byla naměřena kladná projekce spinu částice do osy x . Určete, jak se s časem mění střední hodnota projekce spinu částice do osy x . Jaká je pravděpodobnost naměření kladné projekce spinu částice do osy y v čase t ?

Řešení Neboť v čase $t = 0$ byla naměřena kladná projekce spinu částice do osy x . Víme, že $\hat{S}_j = \frac{\hbar}{2}\sigma_j$ a hodnoty σ_j jsou uvedeny v taháku. To nám říká, že

$$\hat{S}_x \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} b \\ a \end{pmatrix}.$$

Z toho dostáváme vztah

$$\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b \\ a \end{pmatrix},$$

takže $a = b \stackrel{vol.}{=} 1$.

Tudíž máme vlnovou funkci v $t = 0$

$$\psi_{x,+} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Pro časový vývoj vlnové funkce máme obecný vztah v taháku v sekci Spin, konkrétně máme

$$\begin{aligned} \psi_{x,+}(t) &= \frac{1}{\sqrt{2}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \mu_0 \vec{B} \vec{\sigma} t\right) \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\cos(\omega t) \mathbb{I} + i \frac{\sin(\omega t)}{B} B \sigma_3 \right] \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\begin{pmatrix} \cos(\omega t) & 0 \\ 0 & \cos(\omega t) \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} i \sin(\omega t) & 0 \\ 0 & i \sin(\omega t) \end{pmatrix} \right] \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{i\omega t} \\ e^{-i\omega t} \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Nyní určíme střední hodnotu projekce spinu do osy x .

$$\begin{aligned} \langle \hat{S}_x \rangle_{\psi(t)} &= \left(\psi(t), \hat{S}_x \psi(t) \right) = \frac{1}{2} (e^{-i\omega t}, e^{i\omega t}) \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{i\omega t} \\ e^{-i\omega t} \end{pmatrix} = \\ &= \frac{\hbar}{4} (e^{-i\omega t}, e^{i\omega t}) \begin{pmatrix} e^{-i\omega t} \\ e^{i\omega t} \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{4} (e^{-2i\omega t}, e^{2i\omega t}) = \frac{\hbar}{2} \cos(2\omega t). \end{aligned}$$

Ještě určíme pravděpodobnost naměření kladné projekce spinu částice do osy y . K tomu potřebujeme $\psi_{y,+}$. Mějme

$$S_y \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -ib \\ ia \end{pmatrix}$$

Takže máme $b = \frac{i}{\sqrt{2}}, a = \frac{1}{\sqrt{2}}$, proto

$$\phi_{y,+} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{i}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}$$

Dále spočteme potřebný skalární součin:

$$(\psi_{y,+}, \psi(t)) = \frac{1}{2} (1, -i) \begin{pmatrix} e^{i\omega t} \\ e^{-i\omega t} \end{pmatrix} = \frac{1}{2} (e^{i\omega t} - ie^{-i\omega t})$$

$$\begin{aligned} P\left(S_y = \frac{\hbar}{2}\right) &= P_{\psi(t) \rightarrow \psi_{y,+}} = |(\psi_{y,+}, \psi(t))|^2 = \left|\frac{1}{2} (e^{i\omega t} - ie^{-i\omega t})\right|^2 = \\ &= \frac{1}{4} (e^{i\omega t} - ie^{-i\omega t}) \cdot (e^{-i\omega t} + ie^{i\omega t}) = \end{aligned}$$

Příklad 4 Uvažujte částici se spinem 1. Určete matice operátorů projekce spinu do os x, y, z v bázi vlastních vektorů operátoru $\hat{S}_z$.

Řešení Nejprve určíme vlastní vektory operátoru $\hat{S}_z$. Protože spin je 1 a $m = 0, \pm 1$. Protože jsme v $\mathbb{C}^3$, dostáváme vektory

$$|1, 1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |1, 0\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |1, -1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Nyní na tyto vektory necháme zapůsobit operátor $\hat{S}_z$. Víme, že $\hat{S}_z |1, m\rangle = m\hbar |1, m\rangle$. Dostáváme tedy

$$\begin{aligned} m = 1 : \hat{S}_z \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} &= \hbar \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \\ m = 0 : \hat{S}_z \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} &= \hbar \cdot 0 \cdot \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \\ m = -1 : \hat{S}_z \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} &= -\hbar \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Z toho dostáváme jednotlivé řádky matice operátoru $\hat{S}_z$ a celkem máme

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

Pro $\hat{S}_x$ platí obdobné vztahy jako pro L , takže $\hat{S}_x = \frac{1}{2} (\hat{S}_+ + \hat{S}_-)$. Musíme tedy určit $\hat{S}_+$ a $\hat{S}_-$, která se určí stejně jako $\hat{L}_+$ a $\hat{L}_-$. Tyto matice pak necháváme působit na m , takže se nám řádky v matici posouvají příslušným směrem (tj. nahoru či dolů).

$$\hat{S}_+ = \alpha_{1,m}^+ |1, m+1\rangle,$$

kde $\alpha_{1,n}^+ = \hbar\sqrt{2-n(n+1)}$, takže

$$\alpha_{1,1}^+ = 0, \quad \alpha_{1,0}^+ = \sqrt{2}\hbar, \quad \alpha_{1,-1}^+ = \sqrt{2}\hbar.$$

Dostáváme tedy

$$S_+ = \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{2}\hbar & 0 \\ 0 & 0 & -\sqrt{2}\hbar \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Stejně pro $\hat{S}_-$:

$$\hat{S}_- = \alpha_{1,m}^- |1, m-1\rangle,$$

kde $\alpha_{1,n}^+ = \hbar\sqrt{2-n(n+1)}$, takže

$$\alpha_{1,1}^+ = 0, \quad \alpha_{1,0}^+ = \sqrt{2}\hbar, \quad \alpha_{1,-1}^+ = \sqrt{2}\hbar.$$

Dostáváme tedy

$$S_+ = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ \sqrt{2}\hbar & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{2}\hbar & 0 \end{pmatrix}$$

Konečně tak ze vztahů $\hat{S}_x = \frac{1}{2}(\hat{S}_+ + \hat{S}_-)$, $\hat{S}_y = \frac{1}{2i}(\hat{S}_+ - \hat{S}_-)$ dostáváme kýžené hodnoty:

$$\hat{S}_x = \frac{1}{2}\sqrt{2}\hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix},$$

$$\hat{S}_y = \frac{1}{2i}\sqrt{2}\hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & -1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}.$$

6 Kvantové tuhé těleso

Příklad 1 Kvantové tuhé těleso s momentem setrvačnosti I je v čase $t = 0$ ve stavu $\psi(\varphi, 0) = C(1 + \cos \varphi)$. Jaké hodnoty energie a s jakou pravděpodobností je možné naměřit? Jak bude vypadat stav v čase $t > 0$? Jak se s časem mění pravděpodobnost nalezení tělesa ve stavu $\psi(\varphi, 0)$?

Řešení

7 Integrály pohybu

Příklad 1 Uvažujte částici na přímce v homogenním poli s hamiltoniánem

$$\hat{H} = \frac{\hat{P}^2}{2M} + F\hat{Q}.$$

Pro jakou funkci $g(t)$ je pozorovatelná

$$\hat{\Pi}(t) = \hat{P} + g(t)$$

integrálem pohybu?

Řešení Platí, že $\hat{A}$ je integrálem pohybu, právě tehdy když $\frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{A}] + \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} = 0$.

$$\begin{aligned} [\hat{H}, \hat{A}] &= \left[\frac{\hat{P}^2}{2M}, \hat{P} + g(t) \right] + [F\hat{Q}, \hat{P} + g(t)] = \\ &= \left[\frac{\hat{P}^2}{2M}, g(t) \right] + [F\hat{Q}, \hat{P}] + [F\hat{Q}, g(t)] = \\ &= \frac{1}{2M} [\hat{P} [\hat{P}, g(t)]] + [\hat{P}, g(t) \hat{P}] + Fi\hbar = Fi\hbar \end{aligned}$$

Takže

$$\frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{A}] = -F \stackrel{!}{=} -\frac{\partial \hat{A}}{\partial t} = -g(t),$$

z čehož plyne

$$g(t) = F \cdot t + C.$$

Příklad 2 Ukažte, že operátor $\hat{\Pi}$ je integrálem pohybu (IP) pro lineární harmonický oscilátor (LHO).

Řešení Je třeba ukázat, že

$$\frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{\Pi}] + \frac{\partial \hat{\Pi}}{\partial t} = 0.$$

Hamiltonián lineárního harmonického oscilátoru má tvar

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2M} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{M}{2} \omega^2 x^2 = \frac{\hat{P}^2}{2M} + \frac{M}{2} \omega^2 \hat{Q}^2.$$

Pro úpravy platí následující rovnosti (jedná se o operátory, stříšky jsou z lenosti vynechány)

$$\begin{aligned} [A, B] &= AB - BA, \\ [AB, C] &= A[B, C] + [A, C]B, \\ [A + B, C + D] &= [A, C] + [A, D] + [B, C] + [B, D], \\ [A, B] &= -[B, A]. \end{aligned}$$

8 Hamiltonián

Příklad 1 Pro $\mathcal{H} = \mathbb{C}^3$ je Hamiltonián dán maticí

$$\hat{H} = \frac{i}{\sqrt{2}}\epsilon \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}$$

V čase $t = 0$ je kvantová částice ve stavu $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$. Jaké hodnoty energie je v tomto stavu možné naměřit a s jakou pravděpodobností? Jak vypadá stav částice pro $t > 0$?

Řešení Nejprve nalezneme vlastní vektory. Tedy nejprve vezmeme matici Hamiltoniánu a nalezneme její spektrum $\sigma(\hat{H})$. To pro připomenutí provedeme na základě rovnosti $\det(\hat{H} - \lambda \mathbb{I}) = 0$.

$$\begin{vmatrix} -\lambda & 1 & 0 \\ -1 & -\lambda & 1 \\ 0 & -1 & -\lambda \end{vmatrix} = -\lambda^3 - \lambda - \lambda = -\lambda(\lambda^2 + 2) \stackrel{!}{=} 0 \Leftrightarrow \lambda = 0 \vee \lambda = \sqrt{2}i \vee \lambda = -\sqrt{2}i$$

Máme tedy 3 vlastní čísla, všechna o násobnosti 1. Spektrum je tedy

$$\sigma(\hat{H}) = \left\{ 0, -\sqrt{2}i \cdot \frac{i}{\sqrt{2}}\epsilon, \sqrt{2}i \cdot \frac{i}{\sqrt{2}}\epsilon \right\} = \{0, \epsilon, -\epsilon\}$$

. To nám říká, že můžeme naměřit hodnoty energií $E = 0, \pm\epsilon$.

Nyní přistoupíme k hledání vlastních vektorů. Vlastní vektory jsou vektory z jádra (tj. hledáme takový vektor, který pokud násobíme maticí operátoru zleva, výsledkem bude nulový vektor).

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \rightarrow b = 0 \wedge a - c = 0$$

$$|0\rangle = \begin{pmatrix} a \\ 0 \\ a \end{pmatrix} = a \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Nyní použijeme normalizační podmínku $\langle 0|0\rangle \stackrel{!}{=} 1$:

$$a^2 (1, 0, 1) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} = a^2 (1 + 0 + 1) = 2a^2 \stackrel{!}{=} 1 \rightarrow a = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

A dostáváme tedy

$$|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

$$\begin{pmatrix} -\sqrt{2}i & 1 & 0 \\ -1 & -\sqrt{2}i & 1 \\ 0 & -1 & -\sqrt{2}i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \\
\rightarrow -\sqrt{2}ia + b = 0 \wedge -a - \sqrt{2}ib + c = 0 \wedge -b - \sqrt{2}ic = 0 \\
|-\epsilon\rangle = c \begin{pmatrix} -1 \\ -\sqrt{2}i \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Nyní použijeme normalizační podmínku $\langle -\epsilon | -\epsilon \rangle \stackrel{!}{=} 1$:

$$c^2 \begin{pmatrix} -1, -\sqrt{2}i, 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -1 \\ -\sqrt{2}i \\ 1 \end{pmatrix} = c^2 (1 - 2i^2 + 1) = 4c^2 \stackrel{!}{=} 1 \rightarrow c = \frac{1}{2}$$

A dostáváme tedy

$$|-\epsilon\rangle = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} -1 \\ -\sqrt{2}i \\ 1 \end{pmatrix}.$$

$$\begin{pmatrix} \sqrt{2}i & 1 & 0 \\ -1 & \sqrt{2}i & 1 \\ 0 & -1 & \sqrt{2}i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \\
\rightarrow \sqrt{2}ia + b = 0 \wedge -a + \sqrt{2}ib + c = 0 \wedge -b + \sqrt{2}ic = 0 \\
|\epsilon\rangle = c \begin{pmatrix} -1 \\ \sqrt{2}i \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Nyní použijeme normalizační podmínku $\langle \epsilon | \epsilon \rangle \stackrel{!}{=} 1$:

$$c^2 \begin{pmatrix} -1, \sqrt{2}i, 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -1 \\ \sqrt{2}i \\ 1 \end{pmatrix} = c^2 (1 - 2i^2 + 1) = 4c^2 \stackrel{!}{=} 1 \rightarrow c = \frac{1}{2}$$

A dostáváme tedy

$$|\epsilon\rangle = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} -1 \\ \sqrt{2}i \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Ortonormální báze $\hat{H}$ má tedy podobu

$$\left\{ \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \frac{1}{2} \begin{pmatrix} -1 \\ -\sqrt{2}i \\ 1 \end{pmatrix}, \frac{1}{2} \begin{pmatrix} -1 \\ \sqrt{2}i \\ 1 \end{pmatrix} \right\}.$$

Pro stav částice v čase $t > 0$ tedy platí

$$|\psi(t)\rangle = a|0\rangle + b|\epsilon\rangle + c|-\epsilon\rangle,$$

kde platí

$$\begin{aligned} a &= \langle 0|\psi(0)\rangle = \left\langle \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \middle| \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (1, 0, 1) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} (0 + 0 + 0) = 0, \\ b &= \langle \epsilon|\psi(0)\rangle = \left\langle \frac{1}{2} \begin{pmatrix} -1 \\ \sqrt{2}i \\ 1 \end{pmatrix} \middle| \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \right\rangle = \frac{1}{2} (-1, -\sqrt{2}i, 1) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} (0 - \sqrt{2}i + 0) = -\frac{\sqrt{2}i}{2}, \\ c &= \langle -\epsilon|\psi(0)\rangle = \left\langle \frac{1}{2} \begin{pmatrix} -1 \\ -\sqrt{2}i \\ 1 \end{pmatrix} \middle| \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \right\rangle = \frac{1}{2} (-1, \sqrt{2}i, 1) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} (0 + \sqrt{2}i + 0) = \frac{\sqrt{2}i}{2}. \end{aligned}$$

Tudíž dostáváme

$$|\psi(t)\rangle = \frac{\sqrt{2}i}{2} |-\epsilon\rangle - \frac{\sqrt{2}i}{2} |\epsilon\rangle,$$

Zbývá nám dopočítat pravděpodobnosti naměření daných energií.

$$\begin{aligned} P(E=0) &= |\langle 0, \psi(t) \rangle|^2 = 0, \\ P(E=\epsilon) &= |\langle \epsilon, \psi(t) \rangle|^2 = \frac{(\sqrt{2})^2}{4} = \frac{1}{2}, \\ P(E=-\epsilon) &= |\langle -\epsilon, \psi(t) \rangle|^2 = \frac{(\sqrt{2})^2}{4} = \frac{1}{2}. \end{aligned}$$