Řešené příklady z kvantové mechaniky

Řešení jednotlivých příkladů budou v tomto dokumentu průběžně doplňovány - podle toho, jak je budeme počítat na cvičeních a podle volného času :o).
Postupy řešení nejsou kontrolovány žádným pedagogem, proto mi prosím napište, pokud zde naleznete nějakou tu chybičku. Pomůžete tak nejen sobě, ale i ostatním :o). Děkuji.

Příklad 1 Napište rozdělovací funkci Gaussova pravděpodobnostního rozdělení (A). Interpretujte význam jejích parametrů (B). Vypočítejte jeho momenty (C).

Řešení :

A) Gaussova rozdělovací fce :

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

Výpočet konstanty A (z normalizace) :

$$\int\limits_{-\infty}^{\infty} \rho(x)dx = 1,$$

$$\int\limits_{-\infty}^{\infty} Ae^{-\frac{(x-\alpha)^2}{2\sigma^2}}dx = 1,$$

substituce : $y = \frac{x-\alpha}{\sqrt{2}\sigma} \Rightarrow dx = \sqrt{2}\sigma dy$

$$\sqrt{2}\sigma A \int\limits_{-\infty}^{\infty} e^{-y^2}dy = 1,$$

$$\sqrt{2}\sigma A\sqrt{\pi} = 1 \Rightarrow A = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma}.$$

B) Hledáme parametry - dvakrát zderivujeme $\rho(x)$:

$$\frac{d\rho(x)}{dx} = Ae^{-\frac{(x-\alpha)^2}{2\sigma^2}}.(-\frac{x-\alpha}{\sigma^2}) = 0,$$

$$\frac{d^2\rho(x)}{dx^2} = A[e^{-\frac{(x-\alpha)^2}{2\sigma^2}}.(-\frac{x-\alpha}{\sigma^2})^2 + e^{-\frac{(x-\alpha)^2}{2\sigma^2}}.(-\frac{1}{\sigma^2})] = 0.$$

Inflexní body x_1, x_2 získáme řešením rovnice : $\frac{d^2\rho(x)}{dx^2} = 0$

$$A[e^{-\frac{(x-\alpha)^2}{2\sigma^2}}.(-\frac{x-\alpha}{\sigma^2})^2 + e^{-\frac{(x-\alpha)^2}{2\sigma^2}}.(-\frac{1}{\sigma^2})] = 0,$$

$$e^{-\frac{(x-\alpha)^2}{2\sigma^2}}.[(-\frac{x-\alpha}{\sigma^2})^2 + (-\frac{1}{\sigma^2})] = 0,$$

$$\frac{(x-\alpha)^2}{\sigma^4} - \frac{1}{\sigma^2} = 0,$$

$$(x-\alpha)^2 = \sigma^2,$$

$$x_{1,2} = \alpha \pm \sigma.$$

$|x| = |x_1 - x_2| = 2\sigma$ ... rozptyl

C) Momenty : $I(n,a,b) = \int\limits_{-\infty}^{\infty} x^n \rho(x) dx$

$$I(n,a,b) =< (x-\alpha)^n >_\rho = \int\limits_{-\infty}^{\infty} (x-\alpha)^n e^{-\frac{(x-\alpha)^2}{2\sigma^2}} dx.$$

Počítáme zvlášť pro n sudé a n liché
n = 2k - 1 :

$$\int\limits_{-\infty}^{\infty} (x-\alpha)^{2k-1} e^{-\frac{(x-\alpha)^2}{2\sigma^2}} dx,$$

substituce : $y = x - \alpha \Rightarrow dx = dy$

$$\int\limits_{-\infty}^{\infty} \underbrace{(y)^{2k-1}}_{lich.fce} \underbrace{e^{-\frac{(y)^2}{2\sigma^2}}}_{sud.fce} dy,$$

$$\int\limits_{-\infty}^{\infty} lich.fce = 0.$$

n = 2k :

$$\int\limits_{-\infty}^{\infty} (x-\alpha)^{2k} e^{-\frac{(x-\alpha)^2}{2\sigma^2}} dx,$$

substituce : $y = x - \alpha \Rightarrow dx = dy$

$$\int\limits_{-\infty}^{\infty} (y)^{2k} e^{-\frac{(y)^2}{2\sigma^2}} dy,$$

substituce : $a = \frac{1}{2\sigma^2}$

$$\int\limits_{-\infty}^{\infty} (y)^{2k} e^{-ay^2} dy,$$

$$\int\limits_{-\infty}^{\infty} (-1)^k \frac{\partial^k}{\partial a^k} (e^{-ay^2}) dy,$$

zaměníme integrál a derivaci :

$$(-1)^k \frac{\partial^k}{\partial a^k} \int\limits_{-\infty}^{\infty} (e^{-ay^2}) dy = (-1)^k \frac{\partial^k}{\partial a^k} \sqrt{\frac{\pi}{a}} = \sqrt{\pi} \frac{(2k-1)!!}{2^k} a^{(-k-\frac{1}{2})} =$$

$$=< (x-\alpha)^n >.$$

$$I(n,a,b) = \int\limits_{-\infty}^{\infty} x^n e^{-\alpha x^2 + bx} dx = \int\limits_{-\infty}^{\infty} x^n e^{-\alpha(x-\frac{b}{2\alpha})^2 + \frac{b^2}{4\alpha}} dx,$$

substituce : $c = e^{\frac{b^2}{4\alpha}}$

$$I(n,a,b) = c \int\limits_{-\infty}^{\infty} x^n e^{-\alpha(x-\frac{b}{2\alpha})^2} dx,$$

substituce : $t = x - \frac{b}{2\alpha} \Rightarrow x = t + \frac{b}{2\alpha} \Rightarrow dx = dt$

$$I(n,a,b) = c \int\limits_{-\infty}^{\infty} (t + \frac{b}{2\alpha})^n e^{-\alpha t^2} dt,$$

binomická věta :

$$I(n,a,b) = c \int\limits_{-\infty}^{\infty} \sum_{k=0}^{n} \binom{n}{k} . t^k . (\frac{b}{2\alpha})^{n-k} . e^{-\alpha t^2} dt = c \sum_{k=0}^{n} \binom{n}{k} . (\frac{b}{2\alpha})^{n-k} \int_{-\infty}^{\infty} t^k . e^{-\alpha t^2} dt = c . \sqrt{\pi} \sum_{k=0}^{[\frac{n}{2}]} \binom{n}{2k} . (\frac{b}{2\alpha})^{n-2k} . a^{(-k-\frac{1}{2})} \frac{(2k-1)!!}{2^k}.$$

Pro n = 0 : $I(0,a,b) = e^{\frac{b^2}{4\alpha}} . \sqrt{\frac{\pi}{a}}$,
pro n = 1 : $I(1,a,b) = e^{\frac{b^2}{4\alpha}} . \frac{b}{2a} . \sqrt{\frac{\pi}{a}}$,
pro n = 2 : $I(2,a,b) = e^{\frac{b^2}{4\alpha}} . \sqrt{\pi} [(\frac{b}{2a})^2 . \frac{1}{\sqrt{a}} + a^{-\frac{3}{2}} . \frac{1}{2}]$,

Příklad 2 Jaká je pravděpodobnost nalezení klasického jednorozměrného oscilátoru s energií E v intervalu (x, x + dx)? Co potřebujeme znát, chceme-li tento pravděpodobnostní výrok změnit v deterministickou předpověď?

Řešení :

Pravděpodobnost nalezení oscilátoru v bodě x :

$$\rho(x)dx = \text{doba v (x, x + dx) . } \frac{1}{\frac{T}{2}} = \frac{2dt}{T}$$

Víme :

$$\dot{x} = \frac{dx}{dt} \Rightarrow dt = \frac{dx}{\dot{x}}$$

$$E = T + U = \frac{1}{2}m\dot{x}^2 + \frac{1}{2}kx^2 \Rightarrow \dot{x} = \sqrt{\frac{2E - kx^2}{m}}$$

$$\omega^2 = \frac{k}{m}$$

$$T = \frac{1}{f} = \frac{2\pi}{\omega}$$

Pak :

$$\rho(x)dx = \frac{2dx}{\dot{x}T} = \frac{2}{T} \cdot \sqrt{\frac{m}{2E - kx^2}}dx = \frac{\omega}{\pi} \cdot \sqrt{\frac{1}{\frac{2E}{m} - \omega^2 x^2}}dx$$

Ověření normalizace :

$$\rho(x) = \int_{-a}^{a} \frac{\omega}{\pi} \cdot \sqrt{\frac{1}{\frac{2E}{m} - \omega^2 x^2}}dx$$

Kde :

$$E = \frac{1}{2}ka^2 \Rightarrow a = \pm\sqrt{\frac{2E}{k}}$$

Pak :

$$\rho(x) = \frac{\omega}{\pi} \int_{-\sqrt{\frac{2E}{k}}}^{\sqrt{\frac{2E}{k}}} \sqrt{\frac{1}{\frac{2E}{m} - \omega^2 x^2}}dx = \frac{\omega}{\pi}\sqrt{\frac{m}{2E}} \int_{-\sqrt{\frac{2E}{k}}}^{\sqrt{\frac{2E}{k}}} \frac{1}{\sqrt{1 - (\sqrt{\frac{m}{2E}}\omega x)^2}}dx$$

Substituce :

$$z = \sqrt{\frac{m}{2E}}\omega x \Rightarrow dx = \sqrt{\frac{2E}{m}}\frac{1}{\omega}dz$$

Pak :

$$\rho(x) = \frac{\omega}{\pi}\sqrt{\frac{m}{2E}}\frac{1}{\omega}\sqrt{\frac{2E}{m}} \int_{-\omega\sqrt{\frac{m}{k}}}^{\omega\sqrt{\frac{m}{k}}} \frac{1}{\sqrt{1-y^2}}dy = \frac{\omega}{\pi}\sqrt{\frac{m}{2E}}\frac{1}{\omega}\sqrt{\frac{2E}{m}} \int_{-1}^{1} \frac{1}{\sqrt{1-y^2}}dy =$$
$$\frac{1}{\pi}[arcsin(y)]_{-1}^{1} = \frac{1}{\pi}[\frac{\pi}{2} - (-\frac{\pi}{2})] = 1$$

Příklad 3 Popište jednorozměrný harmonický oscilátor Hamiltonovskou formulací klasické mechaniky (A). Napište a vyřešte pohybové rovnice (B). Napište rovnice pro fázové trajektorie (C). Hodnotou jaké fyzikální veličiny jsou určeny (D)?

Řešení :

A)

Kinetická energie :

$$T = \frac{1}{2}m\dot{q}^2$$

Potenciální energie :

$$U = \frac{1}{2}kq^2$$

Lagrangeova funkce :

$$L = T - U = \frac{m\dot{q}^2}{2} - \frac{kq^2}{2}$$

Hamiltonián :

$$H = \sum_j \frac{\partial L}{\partial \dot{q}}\dot{q} - L = \frac{m\dot{q}^2}{2} + \frac{kq^2}{2}$$

B) Pohybové rovnice :

$$\dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial q} = -kq$$

$$\dot{q} = \frac{\partial H}{\partial p} = \frac{p}{m}$$

$$\ddot{p} = -k\dot{q} = -k\frac{p}{m} \Rightarrow \ddot{p} - k\frac{p}{m} = 0$$

$$p = C[cos(\sqrt{\frac{k}{m}}t + \varphi)]$$

$$q = -\frac{\dot{p}}{k} = -\frac{1}{k}C[-sin(\sqrt{\frac{k}{m}}t + \varphi).\sqrt{\frac{k}{m}}] = \frac{C}{\sqrt{km}}sin(\sqrt{\frac{k}{m}}t + \varphi)$$

C) Fázové trajektorie :

$$sin(\sqrt{\frac{k}{m}}t + \varphi) = \frac{q\sqrt{km}}{C}$$

$$cos(\sqrt{\frac{k}{m}}t + \varphi) = \frac{p}{C}$$

$$sin^2(\sqrt{\frac{k}{m}}t + \varphi) + cos^2(\sqrt{\frac{k}{m}}t + \varphi) = 1 = \left(\frac{q\sqrt{km}}{C}\right)^2 + \left(\frac{p}{C}\right)^2 \Rightarrow$$

$$\Rightarrow C = \sqrt{q^2km + p^2}$$

Příklad 4 Spočtěte charakteristickou dobu života elektronu v atomu vodíku pokud jej považujeme za klasickou částici pohybující se po kruhové dráze o (Bohrově) poloměru $a \approx^{-10}$ m.

Řešení :

Chceme zjistit $r = r(t)$ Vyzařovací výkon elektronu :

$$P(t) = \frac{\partial E}{\partial t} = \frac{2}{3m^2c^3}\left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\right)^3\left(\frac{1}{r^4(t)}\right)$$

Vztah pro energii :

$$E = \frac{1}{2}m_e v^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\frac{1}{r(t)},$$

kde $v = \omega r(t) \Rightarrow$

$$E = \frac{1}{2}m_e\omega^2 r^2(t) - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\frac{1}{r(t)},$$

Výpočet $\omega(r) \Rightarrow \omega(t)$:

Pro $\forall t$ musí platit $F_{odstrediva} = F_{culombova} \Rightarrow$

$$r(t)m_e\omega^2 = \frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{e^2}{r^2(t)} \Rightarrow \omega^2 = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r^3(t)m_e} \Rightarrow$$

$$E = \frac{1}{2}m_e\frac{e^2r^2(t)}{4\pi\epsilon_0 r^3(t)m_e} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\frac{1}{r(t)} = -\frac{e^2}{8\pi\epsilon_0}\frac{1}{r(t)}$$

$$P(t) = \frac{\partial E}{\partial t} \Rightarrow C\frac{1}{r^4(t)} = K\frac{\partial(\frac{1}{r(t)})}{\partial t},$$

kde $C = \frac{2}{3m^2c^3}\left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\right)^3$ a $K = -\frac{e^2}{8\pi\epsilon_0}$

$$C\frac{1}{r^4(t)} = K\left(-\frac{1}{r^2(t)}\right)\frac{\partial r(t)}{\partial t}$$

$$\frac{C}{K}dt = -r^2 dr$$

$$\frac{C}{K}t = -\frac{r^3}{3} + \frac{B}{3} \Rightarrow r = \sqrt[3]{-3\frac{C}{K}t + B} = \sqrt[3]{\frac{e^2}{4\pi^2m^2c^3e^2\epsilon_0^2}t + B}$$

Počáteční podmínky : $r(T) = 0$ a $r(t_0) = a \Rightarrow T \approx 10^{-10}$ s.

Příklad 5 Nechť statistická rozdělovací funkce stavů klasického mechanického oscilátoru je dána Gibbsovou formulí $P = Ae^{-\frac{E}{kT}}$. Spočtěte střední hodnotu energie.

Řešení :

Statistická rozdělovací fce : $\rho(p,q) = Ae^{-\frac{E(p,q)}{kT}}$
Střední hodnota energie : $< E >$ = ?
Energie harmonického oscilátoru : $E(p,q) = \frac{p^2}{2m} + \omega^2 \frac{mq^2}{2}$
Určení konstanty A :

$$1 = A \int\limits_{-\infty}^{\infty} \int\limits_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{E(p,q)}{kT}} dpdq = A \int\limits_{-\infty}^{\infty} \int\limits_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{\frac{p^2}{2m}+\omega^2 \frac{mq^2}{2}}{kT}} dpdq =$$
$$A \int\limits_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{p^2}{2mkT}} dp. \int\limits_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{\omega^2 mq^2}{2kT}} dq = A.\sqrt{2\pi mkT}.\sqrt{\frac{2\pi kT}{\omega^2 m}}$$

$$A = \frac{\omega}{2\pi kT}$$

Výpočet střední hodnoty :

$$< E >= A \int\limits_{-\infty}^{\infty} \int\limits_{-\infty}^{\infty} (\frac{p^2}{2m} + \frac{\omega^2 mq^2}{2}).e^{-\frac{\frac{p^2}{2m}\omega^2 \frac{mq^2}{2}}{kT}} dpdq =$$

$$= \frac{\omega}{2\pi kT}[\int \int \frac{p^2}{2m} e^{-\frac{\frac{p^2}{2m}+\omega^2 \frac{mq^2}{2}}{kT}} dpdq + \int \int \frac{\omega^2 mq^2}{2} e^{-\frac{\frac{p^2}{2m}+\omega^2 \frac{mq^2}{2}}{kT}} dpdq =$$

$$= \frac{\omega}{2\pi kT}[\int \frac{p^2}{2m} e^{-\frac{p^2}{2mkT}} dp. \int e^{-\frac{\omega^2 mq^2}{2kT}} dq + \int e^{-\frac{p^2}{2mkT}} dp. \int \frac{\omega^2 mq^2}{2} e^{-\frac{\omega^2 mq^2}{2kT}} dq] =$$

$$= \frac{\omega}{2\pi kT}[\frac{1}{2m}.\frac{1}{2}.\sqrt{\pi 2^3 m^3 k^3 T^3}.\sqrt{\frac{2\pi kT}{\omega^2 m}} + \sqrt{2\pi mkT}.\frac{m\omega^2}{2}.\frac{1}{2}.\sqrt{\frac{\pi 2^3 k^3 T^3}{\omega^6 m^3}} =$$

$$= \frac{\omega}{2\pi kT}[\frac{\pi k^2 T^2}{\omega} + \frac{\pi k^2 T^2}{\omega}] = kT$$

Příklad 6 Jakou vlnovou délku má elektromagnetické záření, jehož zdrojem je elektron - pozitronová anihilace $e^+ + e^- \to \gamma + \gamma$ v klidu?

Řešení :

Vyjdeme ze zákona zachování energie :

$$E = mc^2 = h\nu \Rightarrow \nu = \frac{mc^2}{h}$$

$$\lambda = \frac{c}{\nu} = \frac{h}{mc} = \frac{6{,}62620.10^{-34}}{9{,}10956.10^{-31}.2{,}99793.10^8} = 2,426.10^{-12} \text{ m} = 2{,}426 \text{ pm}$$

Nutné ještě ověrit zákon zachování hybnosti :

$$P_{celk} = P_{\gamma_1} + P_{\gamma_2} = 0$$

$$E = pc = h\nu \Rightarrow p = \frac{h\nu}{c}$$

$$0 = \frac{h\nu_1}{c} - \frac{h\nu_2}{c} \text{ /*}$$

$$\Rightarrow \nu_1 = \nu_2$$

/* Mají opačnou orientaci ⇒ znaménko -

Příklad 7 Určete vlnovou délku a frekvenci de Broglieovy vlny pro molekulu kyslíku ve vzduchu vašeho pokoje (A) a pro částici o hmotnosti $10\mu g$ pohybující se rychlostí zvuku (B).

Řešení :

A) Pro molekulu kyslíku platí (viz. termika - hledáme vlnovou délku v závislosti na rychlosti, tedy uvažujeme pouze přímočarý pohyb bez rotace)

$$E = \frac{3}{2}kT$$

Kinetická energie ve vztahu k hybnosti :

$$E = \frac{mv^2}{2} = \frac{m^2v^2}{2m} = \frac{p^2}{2m}$$

Máme tedy :

$$\frac{3}{2}kT = \frac{p^2}{2m} \Rightarrow p = \sqrt{3kTm}$$

Vlnová délka je nepřímo úměrná hybnosti (de Broglieho vztah) :

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{3kTm}} = \frac{6{,}6262.10^{-34}}{\sqrt{1{,}38062.10^{-23}293{,}15.\frac{32.10^{-3}}{6{,}02217.10^{23}}}} = 4,52.10^{-11} \text{ m}$$

B) I pro částici platí de Broglieho vztah :

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv} = \frac{6{,}6262.10^{-34}}{10^{-8}.343} = 1,93.10^{-28} \text{ m}$$

Příklad 8 Podle de Broglieovy hypotézy určete ohyb způsobený průletem tenisového míčku ($m = 0,1$ kg) rychlostí $v = 0,5$ m.s^{-1} s obdélníkovitým otvorem ve zdi o rozměrech 1 x 1,5 m.

Řešení :

Rozptyl světla na mřížce s délkou štěrbiny L:

$$sin\Theta = \frac{\lambda}{L}$$

Aproximace :

$$\Theta = \frac{\lambda}{L}$$

Víme :

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv}$$

Tedy :

$$\Theta = \frac{h}{mvL}$$

V našem případě :

$$\Theta_x = \frac{h}{mvL_x} = \frac{6{,}6262.10^{-34}}{0{,}1.0{,}5.1} = 1,325.10^{-32} \text{ rad}$$

$$\Theta_y = \frac{h}{mvL_y} = \frac{6{,}6262.10^{-34}}{0{,}1.0{,}5.1{,}5} = 8,835.10^{-33} \text{ rad}$$

Příklad 9 Na jakou rychlost je třeba urychlit elektrony aby bylo možno pozorovat jejich difrakci na krystalové mříži s charakteristickou vzdáleností atomů 0,1 nm?

Řešení :

K difrakci může dojít, pokud $\lambda \approx a$, kde a je vzdálenost atomů v krystalové mřížce.

De Broglieho vztah :

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{m_e v} \Rightarrow v = \frac{h}{m_e \lambda} = \frac{6{,}6262.10^{-34}}{9{,}10956.10^{-31}.10^{-10}} = 7,274.10^{6} \text{ m.s}^{-1}$$

Příklad 10 Nechť $V(x) = 0$ (volná částice). Pomocí Fourierovy transformace určete řešení Schrödingerovy rovnice, které v čase t_0 má tvar

$$\Psi(\vec{x}, t_0) = g(\vec{x}) = Ce^{-Ax^2 + \vec{B}\vec{x}},$$

kde $Re(A) > 0, \vec{B} \in C^3, C \in \mathbf{C}$

Řešení :

Pro volnou částici (nepůsobí na ní žádné pole) má Schrödingerova rovnice tvar

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{x},t)}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2M} \Delta \Psi(\vec{x}, t) = 0$$

Řešení je velice obtížné - řešení pomocí fourierovy transformace. Nejprve si musíme přetransformovat Schrödingerovu rovnici $\Psi(\vec{x}, t) \;\rightarrow\; \tilde{\Psi}(\vec{p}, t)$:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{x},t)}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2M} \Delta \Psi(\vec{x}, t) = 0$$

Víme : $\tilde{\Psi}(\vec{p}, t) = \hat{F}\Psi(\vec{x}, t)$, $\Psi(\vec{x}, t) = \hat{F}^{-1}\tilde{\Psi}(\vec{p}, t)$ a $\hat{F}\hat{P}\hat{F}^{-1} = \hat{X} \Rightarrow$

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{x},t)}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2M} \Delta \Psi(\vec{x}, t) = 0 \;/.\hat{F}$$

$$i\hbar \frac{\partial \hat{F}\Psi(\vec{x},t)}{\partial t} = -\hat{F} \frac{\hbar^2}{2M} \Delta \Psi(\vec{x}, t)$$

$$i\hbar \frac{\partial \hat{F}\Psi(\vec{x},t)}{\partial t} = \frac{1}{2M} \underbrace{\hat{F}(-\hbar^2\Delta)\hat{F}^{-1}}_{\vec{p}^2} \underbrace{\hat{F}\Psi(\vec{x}, t)}_{\tilde{\Psi}(\vec{p},t)}$$

$$i\hbar \frac{\partial \tilde{\Psi}(\vec{p},t)}{\partial t} - \frac{\tilde{\vec{p}}^2}{2M} \tilde{\Psi}(\vec{p}, t) = 0$$

$$\frac{d\tilde{\Psi}(\vec{p},t)}{\tilde{\Psi}(\vec{p},t)} = -\frac{i\vec{p}^2}{2M\hbar} \; dt$$

$$\tilde{\Psi}(\vec{p}, t) = C(\vec{p}) \; e^{-\frac{i\vec{p}^2}{2M\hbar}(t-t_0)}$$

Tato funkce nezávisí na $dp \Rightarrow$ pokud bychom tuto fci vynásobili hybností, bude také řešením Schrödingerovy rovnice.
Fourierova transfotmace (zde pro jednorozměrný případ) :

$$\hat{F}\Psi(\vec{x}, t) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi\hbar)^3}} \int\limits_{R^3} e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{p}\vec{x}} \Psi(\vec{x}, t) \; d\vec{x}$$

$$\hat{F}^{-1}\Psi(\vec{x}, t) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi\hbar)^3}} \int\limits_{R^3} e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\vec{x}} \Psi(\vec{x}, t) \; d\vec{x}$$

$$\tilde{\Psi}_0(\vec{p}, t_0) = \hat{F}\Psi(\vec{x}, t_0) = \hat{F}\left[Ce^{-Ax^2+\vec{B}\vec{x}}\right] = \frac{1}{\sqrt{(2\pi\hbar)^3}} \int\limits_{R^3} Ce^{-\frac{i}{\hbar}\vec{p}\vec{x}} e^{-Ax^2+\vec{B}\vec{x}} \; d^3x =$$
$$\frac{C^{\frac{1}{3}}}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int\limits_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{p}\vec{x}} e^{-Ax^2+\vec{B}\vec{x}} \; d^3x$$

$$\tilde{\Psi}_{0j}(\vec{p},t_0) = \frac{C^{\frac{1}{3}}}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int\limits_{-\infty}^{\infty} e^{-Ax_j^2+\left(B_j-\frac{i}{\hbar}p_j\right)x_j}\, dx_j =$$

$$\triangleright \left| \int\limits_{-\infty}^{\infty} e^{-ax^2+bx}\, dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}}\, e^{\frac{b^2}{4a}} \right| \triangleright$$

$$= \frac{C^{\frac{1}{3}}}{\sqrt{2\pi\hbar}} \sqrt{\frac{\pi}{A}}\, e^{\frac{\left(B_j-\frac{i}{\hbar}p_j\right)^2}{4A}}$$

Chceme aby $\tilde{\Psi}(\vec{p},t=0) = \tilde{\Psi}(\vec{p},t_0) \Rightarrow C(\vec{p}) = \tilde{\Psi}(\vec{p},t_0)$

Zpětná transformace :

$$\Psi(\vec{x},t) = \hat{F}^{-1}\tilde{\Psi}(\vec{p},t) =$$
$$\frac{1}{\sqrt{(2\pi\hbar)^3}} \int\limits_{R^3} \prod_{j=1}^{3} \left\{ \frac{C^{\frac{1}{3}}}{\sqrt{2\pi\hbar}} \sqrt{\frac{\pi}{A}}\, e^{\left[\frac{\left(B_j-\frac{i}{\hbar}p_j\right)^2}{4A} - \frac{i\vec{p}^2}{2M\hbar}(t-t_0) - \frac{i}{\hbar}p_j x_j\right]} \right\} =$$
$$\underbrace{\frac{C\left(\frac{\pi}{A}\right)^{\frac{3}{2}}}{(2\pi\hbar)^3}}_{K} \int\limits_{R^3} \prod_{j=1}^{3} e^{\left[\frac{B_j^2}{4A} - \left(\frac{i}{2M\hbar}(t-t_0) + \frac{1}{4A\hbar^2}\right)\vec{p}^2 + \left(\frac{i}{\hbar}x_j - \frac{2i}{4A\hbar}B_j\right)p_j\right]} d^3p_j =$$
$$K \int\limits_{R^3} e^{\left[\frac{\vec{B}^2}{4A} - \left(\frac{i}{2M\hbar}(t-t_0) + \frac{1}{4A\hbar^2}\right)\vec{p}^2 + \left(\frac{i}{\hbar}\vec{x} - \frac{2i}{4A\hbar}\vec{B}\right)\vec{p}\right]} d^3\vec{p} =$$
$$K e^{\frac{\vec{B}^2}{4A}} \int\limits_{R^3} e^{\left[-\left(\frac{i}{2M\hbar}(t-t_0) + \frac{1}{4A\hbar^2}\right)\vec{p}^2 + \left(\frac{i}{\hbar}\vec{x} - \frac{2i}{4A\hbar}\vec{B}\right)\vec{p}\right]} d^3\vec{p} =$$
$$K e^{\frac{\vec{B}^2}{4A}} \sqrt{\left(\frac{\pi}{\frac{i}{2M\hbar}(t-t_0) + \frac{1}{4A\hbar^2}}\right)^3}\, e^{\left[\frac{\left(\frac{i}{\hbar}\vec{x} - \frac{2i}{4A\hbar}\vec{B}\right)^2}{4\left(\frac{i}{2M\hbar}(t-t_0) + \frac{1}{4A\hbar^2}\right)}\right]}$$

Po konečné úpravě dostáváme :

$$\Psi(\vec{x},t) = C e^{\frac{\vec{B}^2}{4A}} \left(\chi(t)\right)^{-\frac{3}{2}} e^{\left[-\frac{A\left(\vec{x}-\frac{\vec{B}}{2A}\right)^2}{\chi(t)}\right]}, \text{ kde}$$

$$\chi(t) = 1 + \frac{2i\hbar A}{M}(t-t_0)$$

Příklad 11 Nechť $\Psi(x,y,z,t)$ je řešením Schrödingerovi rovnice pro volnou částici. Ukžte, že

$$\tilde{\Psi}(x,y,z,t) = e^{-i\frac{Mg}{\hbar}(zt+\frac{gt^3}{6})}\Psi(x,y,z+\tfrac{gt^2}{2},t)$$

je řešením Schrödingerovy rovnice pro částici v homogenním poli se zrychlením g.

Řešení :

Máme vlnovou funkci : $\tilde{\Psi}(x,y,z,t) = \underbrace{e^{-i\frac{Mg}{\hbar}(zt+\frac{gt^3}{6})}}_{A(z,t)}\Psi(x,y,z+\frac{gt^2}{2},t)$, kde $\Psi(x,y,\underbrace{z+\frac{gt^2}{2}}_{\acute{z}},t)$ splňuje Schrödingerovu rovnici pro volnou částici.

Schrödingerova rovnice :

$$\underbrace{i\hbar\frac{\partial\tilde{\Psi}(\vec{x},t)}{\partial t}}_{L} = \underbrace{-\frac{\hbar^2}{2M}\Delta\tilde{\Psi}(\vec{x},t) + \underbrace{V(\vec{x})}_{Mgz}\tilde{\Psi}}_{P}$$

Pomocné výpočty : $\frac{\partial\acute{z}}{\partial z} = 1$; $\frac{\partial\acute{z}}{\partial t} = gt$

L :

$$i\hbar\tfrac{\partial A}{\partial t}\Psi + i\hbar A\tfrac{\partial\Psi}{\partial t} = i\hbar\left(-i\tfrac{Mg}{\hbar}\right)\left(z+\tfrac{gt^2}{2}\right)A\Psi + i\hbar A\left(\tfrac{\partial\Psi}{\partial\acute{z}}\tfrac{\partial\acute{z}}{\partial t}+\tfrac{\partial\Psi}{\partial t}\right) =$$
$$iA\hbar\left[-i\tfrac{Mg}{\hbar}\left(z+\tfrac{gt^2}{2}\right)\Psi + gt\tfrac{\partial\Psi}{\partial\acute{z}}+\tfrac{\partial\Psi}{\partial t}\right] = AMgz\Psi + \tfrac{AMg^2t^2}{2}\Psi + iA\hbar gt\tfrac{\partial\Psi}{\partial\acute{z}} + iA\hbar\tfrac{\partial\Psi}{\partial t}$$

P :

$$-\tfrac{\hbar^2}{2M}\left[A(z,t)\left(\tfrac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}+\tfrac{\partial^2\Psi}{\partial y^2}\right)+\tfrac{\partial}{\partial z}\left(\tfrac{\partial A}{\partial z}\Psi\ + A\tfrac{\partial\Psi}{\partial\acute{z}}\tfrac{\partial\acute{z}}{\partial z}\right)\right] + Mgz\tilde{\Psi} =$$
$$-\tfrac{\hbar^2}{2M}\left[A\left(\tfrac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}+\tfrac{\partial^2\Psi}{\partial y^2}\right)+\tfrac{\partial}{\partial z}\left(-i\tfrac{Mgt}{\hbar}A\Psi\ + A\tfrac{\partial\Psi}{\partial\acute{z}}\right)\right] + Mgz\tilde{\Psi} =$$
$$-\tfrac{\hbar^2}{2M}\left[A\left(\tfrac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}+\tfrac{\partial^2\Psi}{\partial y^2}\right)+\left(-i\tfrac{Mgt}{\hbar}\right)^2A\Psi\ - 2i\tfrac{Mgt}{\hbar}A\tfrac{\partial\Psi}{\partial\acute{z}} + A\tfrac{\partial^2\Psi}{\partial\acute{z}^2}\right] + Mgz\tilde{\Psi} =$$
$$-\tfrac{\hbar^2}{2M}\left[\underbrace{A\left(\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\Psi}{\partial y^2}+\frac{\partial^2\Psi}{\partial\acute{z}^2}\right)}_{A\Delta\Psi}+\left(-i\tfrac{Mgt}{\hbar}\right)^2A\Psi\ - 2i\tfrac{Mgt}{\hbar}A\tfrac{\partial\Psi}{\partial\acute{z}}\right] + Mgz\tilde{\Psi} =$$
$$\underbrace{A\left(-\frac{\hbar^2}{2M}\right)\Delta\Psi}_{i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}} + \tfrac{AMg^2t^2}{2}\Psi + iA\hbar gt\tfrac{\partial\Psi}{\partial\acute{z}} + AMgz\Psi$$

$$L = P$$

Příklad 12 Čemu je úměrná pravděpodobnost nalezení částice popsané de Broglieovou vlnou

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

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

Řešení : De Broglieova vlna :

$$\Psi_{\vec{E},\vec{p}} = Ae^{\left[\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\vec{x}-\vec{E}t)\right]}$$

Hustota pravděpodobnosti :

$$\rho(\vec{x}) = \left|\Psi_{\vec{E},\vec{p}}\right|^2 = \left|Ae^{\left[\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\vec{x}-\vec{E}t)\right]}\right|^2 = \left|Acos\left[\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\vec{x}-\vec{E}t)\right] + iAsin\left[\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\vec{x}-\vec{E}t)\right]\right|^2 = \left[\sqrt{A^2cos^2\left[\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\vec{x}-\vec{E}t)\right] + A^2sin^2\left[\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\vec{x}-\vec{E}t)\right]}\right]^2 = |A|^2$$

Pravděpodobnost výskytu částice v objemu V :

$$\int_V \rho(\vec{x})d^3x = |A|^2\,V.$$

Příklad 13 Čemu je úměrná hustota pravděpodobnosti pro řešení

$$\Psi(\vec{x},t) = C\,[\chi(t)]^{-\frac{3}{2}}\, e^{\frac{\vec{B}^2}{4A}} e^{-A\frac{\left[\vec{x}-\frac{\vec{B}}{2A}\right]^2}{\chi(t)}}, \text{ kde}$$

$$\chi(t) = 1 + i\frac{2A\hbar}{m}(t-t_0)$$

(C je konstanta ovlivňující normalizaci) z příkladu 10. pro $A > 0$ (A)? Jak se mění poloha jejího maxima s časem (B)? Čemu je rovna její střední kvadratická odchylka (C)? Jak se mění s časem (D)? Za jak dlouho se zdvojnásobí "šířka" vlnového balíku pro elektron lokalizovaný s přesností 1 cm (E) a pro hmotný bod o hmotě $m = 1$ g, jehož těžiště je lokalizováno s přesností 10^{-6} m (F)?

Řešení :

A)

Hustota pravděpodobnosti :

$$\rho(\vec{x}) = \left|\Psi_{\vec{E},\vec{p}}\right|^2 = \underbrace{|C_1|^2}_{C_2} . \left|1 + i\frac{2A\hbar}{m}(t-t_0)\right|^2 . \left|e^{\frac{\vec{B}^2}{4A}}\right|^2 . \left|e^{-A\frac{\left[\vec{x}-\frac{\vec{B}}{2A}\right]^2}{\chi(t)}}\right|^2 =$$

$$\underbrace{C_2\left(1 + \frac{4A^2\hbar^2}{m^2}(t-t_0)^2\right)}_{C_3(t^2)} . \left|e^{\frac{\vec{B}^2}{4A}}\right|^2 . \left|e^{-A\frac{\left[\vec{x}-\frac{\vec{B}}{2A}\right]^2}{\chi(t)}}\right|^2$$

Pomocné výpočty :

$$e^z = e^{Re(z)+iIm(z)} = e^{Re(z)}[cos(Im(z)) + isin(Im(z))] \Rightarrow$$
$$\left|\begin{array}{c} Re(e^z) = e^{Re(z)}cos(Im(z)) \\ Im(e^z) = e^{Re(z)}sin(Im(z)) \end{array}\right|$$

$$|e^z|^2 = (Re(e^z) + iIm(e^z))\,(Re(e^z) - iIm(e^z)) = (Re(e^z))^2 + (Im(e^z))^2 =$$
$$e^{2Re(z)}cos^2(Im(z)) + e^{2Re(z)}sin^2(Im(z)) = e^{2Re(z)}$$

$$\frac{-A\left[\vec{x}-\frac{\vec{B}}{2A}\right]^2}{\chi(t)} = \frac{z_1}{z_2} = \frac{Re(z_1)+iIm(z_1)}{Re(z_2)+iIm(z_2)} =$$
$$\frac{Re(z_1)Re(z_2)+Im(z_1)Im(z_2)+i(Re(z_2)Im(z_1)-Re(z_1)Im(z_2))}{Re^2(z_2)+Im^2(z_2)} =$$
$$\frac{Re(-A\left[\vec{x}-\frac{\vec{B}}{2A}\right]^2)Re(\chi(t))+Im(-A\left[\vec{x}-\frac{\vec{B}}{2A}\right]^2)Im(\chi(t))+i\left(Re(\chi(t))Im(-A\left[\vec{x}-\frac{\vec{B}}{2A}\right]^2)-Re(-A\left[\vec{x}-\frac{\vec{B}}{2A}\right]^2)Im(\chi(t))\right)}{Re^2(\chi(t))+Im^2(\chi(t))}$$

$$\left[\vec{x} - \frac{\vec{B}}{2A}\right]^2 = \left[\vec{x} - \frac{Re(\vec{B})+iIm(\vec{B})}{2A}\right]^2 = \left[\vec{x} - \frac{Re(\vec{B})}{2A} - i\frac{Im(\vec{B})}{2A}\right]^2 =$$
$$\vec{x}^2 - 2\vec{x}\frac{Re(\vec{B})}{2A} + \frac{Re^2(\vec{B})}{4A^2} - i2\frac{Im(\vec{B})}{2A}\left[\vec{x} - \frac{Re(\vec{B})}{2A}\right] - \frac{Im^2(\vec{B})}{4A^2} \Rightarrow$$
$$\left|\begin{array}{c} Re(\left[\vec{x} - \frac{\vec{B}}{2A}\right]^2) = \vec{x}^2 - \vec{x}\frac{Re(\vec{B})}{A} + \frac{Re^2(\vec{B})}{4A^2} - \frac{Im^2(\vec{B})}{4A^2} \\ Im(\left[\vec{x} - \frac{\vec{B}}{2A}\right]^2) = -\frac{Im(\vec{B})}{A}\vec{x} - \frac{Re(\vec{B})Im(\vec{B})}{2A^2} \end{array}\right|$$

Použití v našem příkladě (nezajímá nás časový vývoj, pouze faktory závisející na $\vec{x}$) :

$$\rho(\vec{x}) = \underbrace{C_3(t^2).e^{\frac{Re(\vec{B}^2)}{2A}}}_{C_4(t^2)}.\left|e^{-A\frac{\left[\vec{x}-\frac{\vec{B}}{2A}\right]^2}{\chi(t)}}\right|^2 =$$

$$C_4(t^2).e^{2\frac{Re(-A\left[\vec{x}-\frac{\vec{B}}{2A}\right]^2)Re(\chi(t))+Im(-A\left[\vec{x}-\frac{\vec{B}}{2A}\right]^2)Im(\chi(t))}{Re^2(\chi(t))+Im^2(\chi(t))}} =$$

$$C_4(t^2).e^{-2A\frac{Re(\left[\vec{x}-\frac{\vec{B}}{2A}\right]^2).1+Im(\left[\vec{x}-\frac{\vec{B}}{2A}\right]^2)\frac{2A\hbar}{m}(t-t_0)}{1+\frac{4A^2\hbar^2}{m^2}(t-t_0)^2}} =$$

$$C_4(t^2).e^{-2A\frac{\left[\vec{x}-\frac{Re(\vec{B})}{2A}\right]^2-\left[\frac{Im(\vec{B})}{2A}\right]^2+2\frac{Im(\vec{B})}{2A}\left[\vec{x}-\frac{Re(\vec{B})}{2A}\right]\frac{2A\hbar}{m}(t-t_0)}{1+\frac{4A^2\hbar^2}{m^2}(t-t_0)^2}} =$$

$$C_4(t^2).e^{-2A\frac{\left[\vec{x}-\frac{Re(\vec{B})}{2A}\right]^2-\left[\frac{Im(\vec{B})}{2A}\right]^2+2\frac{\hbar Im(\vec{B})}{m}\left[\vec{x}-\frac{Re(\vec{B})}{2A}\right](t-t_0)}{1+\frac{4A^2\hbar^2}{m^2}(t-t_0)^2}} =$$

$$C_4(t^2).e^{-2A\frac{\left[\vec{x}-\frac{Re(\vec{B})}{2A}+\frac{\hbar Im(\vec{B})}{m}(t-t_0)\right]^2-C_5(t^2)-C_6}{1+\frac{4A^2\hbar^2}{m^2}(t-t_0)^2}} =$$

$$\underbrace{C_4(t^2).e^{\frac{-C_5(t^2)-C_6}{1+\frac{4A^2\hbar^2}{m^2}(t-t_0)^2}}}_{C_7(t^2)}.e^{-2A\frac{\left[\vec{x}-\frac{Re(\vec{B})}{2A}+\frac{\hbar Im(\vec{B})}{m}(t-t_0)\right]^2}{1+\frac{4A^2\hbar^2}{m^2}(t-t_0)^2}} =$$

$$C_7(t^2).e^{-\frac{\left[\vec{x}-\left(\frac{Re(\vec{B})}{2A}-\frac{\hbar Im(\vec{B})}{m}(t-t_0)\right)\right]^2}{2\frac{1+\frac{4A^2\hbar^2}{m^2}(t-t_0)^2}{4A}}} \approx e^{-\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma^2}}, \text{ kde}$$

$x_0 = \frac{Re(\vec{B})}{2A} - \frac{\hbar Im(\vec{B})}{m}(t-t_0)$
$\sigma^2 = \frac{1+\frac{4A^2\hbar^2}{m^2}(t-t_0)^2}{4A}$
$C_5(t^2) = \left[\frac{\hbar Im(\vec{B})}{m}(t-t_0)\right]^2$
$C_6 = \left[\frac{Im(\vec{B})}{2A}\right]^2$
$\Rightarrow Re(\vec{B})$ odpovídá poč. poloze částice
$\Rightarrow Im(\vec{B})$ odpovídá poč. hybnosti částice

B)

S časem se zvětšuje rozptyl částice (poloha maxima klesá) - je obtížnější určit polohu částice - jedná se o tzv. rozplývající se vlnový balík

C)

$$\sigma^2 = \frac{1+\frac{4A^2\hbar^2}{m^2}(t-t_0)^2}{4A}$$

D)

$$\sigma^2 = \sigma^2(t^2)$$

E)

$$\sigma(\Delta t) = 2\sigma(\Delta t = 0) = 2\frac{1}{\sqrt{4A}} \Rightarrow A = \frac{1}{4\sigma^2(\Delta t=0)}$$

$$\sqrt{\frac{1+\frac{4A^2\hbar^2}{m^2}(\Delta t)^2}{4A}} = 2\frac{1}{\sqrt{4A}} \Rightarrow$$

$$\Delta t = \frac{\sqrt{3}}{2}\frac{m}{A\hbar} = 2\sqrt{3}\frac{m\sigma^2(\Delta t=0)}{\hbar} = 2\sqrt{3}\frac{9{,}10956.10^{-31}.10^{-4}}{1{,}05459.10^{-34}} = 2,99\text{s} \approx \text{sekundy}$$

F)

$$\Delta t = 2\sqrt{3}\frac{10^{-3}.10^{-6}}{1{,}05459.10^{-34}} = 3,28.10^{19}\text{s} \approx 10^{12}\text{ let}$$

Příklad 14 Jaká je pravděpodobnost nalezení elektronu vodíkového obalu ve vzdálenosti $(r, r+dr)$ od jádra, je-li popsán (v čase t_0) funkcí

$$g(x,y,z) = Ae^{-\sqrt{\frac{x^2+y^2+z^2}{a_0}}}$$

kde $a_0 = 0,53.10^{-8}$ cm je tzv. Bohrův poloměr?

Řešení :

Pravděpodobnost nalezení částice :

$$P(r) = \int\limits_0^\infty |g|^2 \; dr$$

Potřebujeme vyjádřit závislost na r - převedeme do sférických souřadnic a integrujeme pouze přes ϑ a φ.

Sférické souřadnice :

$$x = r.cos\vartheta.cos\varphi$$
$$y = r.cos\vartheta.sin\varphi$$
$$z = r.sin\vartheta$$

Jakobián :

$$det\frac{D(x,y,z)}{D(r,\vartheta,\varphi)} = \begin{vmatrix} cos\vartheta.cos\varphi & -r.sin\vartheta.cos\varphi & -r.cos\vartheta.sin\varphi \\ cos\vartheta.sin\varphi & -r.sin\vartheta.sin\varphi & r.cos\vartheta.cos\varphi \\ sin\vartheta & r.cos\vartheta & 0 \end{vmatrix} = -r^2cos\vartheta$$

Výpočet integrálu :

$$P(r) = -\int\limits_{-\pi}^{\pi} d\varphi \int\limits_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} cos\vartheta \; d\vartheta r^2 \, |g|^2 = -2\pi.\underbrace{(sin(\frac{\pi}{2}) - sin(-\frac{\pi}{2}))}_{2} r^2 \, |A|^2 \, e^{-\frac{2r}{a_0}}$$

Konstantu A určíme z normalizace :

$$1 = -\int\limits_{-\pi}^{\pi} d\varphi \int\limits_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} cos\vartheta \; d\vartheta \int\limits_0^\infty r^2 \, |A|^2 \, e^{-\frac{2r}{a_0}} = -4\pi A^2 \frac{a_0^3}{4} \Rightarrow A^2 = -\frac{1}{\pi a_0^3}$$

Dosadíme do rovnice :

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

Průběh této fce :

- maximum $\Rightarrow \left(\frac{4}{a_0^3} r^2 e^{-\frac{2r}{a_0}}\right)' = \left(2re^{-\frac{2r}{a_0}} - \frac{2}{a_0} r^2 e^{-\frac{2r}{a_0}}\right) = 0 \Rightarrow r = a_0$
- pro $r \to \infty \Rightarrow P(r) \to 0$
- pro $r = 0 \Rightarrow P(r) = 0$

Tyto hodnoty odpovídají předpokladu - Gaussovo rozdělení.

Příklad 15 Nalezněte vlastní hodnoty energie kvantové částice pohybující se v jednorozměrné konstantní nekonečně hluboké potenciálové jámě t.j. v potenciálu $V(x) = 0$ pro $|x| < a$ (B) a $V(x) = \infty$ pro $|x| > a$ (A).
Návod : Předpokládejte, že vlnové funkce jsou všude spojité a nulové pro $|x| \geq a$.

Řešení :

A)

Z předpokladu spojitosti vlnové funkce platí pro $|x| \geq a$:

$$\Psi(x) = 0,$$

B)

Pro $|x| < a$ platí Schrödingerova rovnice pro volnou částici :

$$i\hbar\frac{\partial\Psi(\vec{x})}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2M}\Delta\Psi(\vec{x}) = 0$$

Pro naše zadání pak speciálně :

$$i\hbar\frac{\partial\Psi(x)}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2M}\frac{\partial^2\Psi(x)}{\partial x^2} = 0$$

Hledáme :

$$\hat{H}\Psi(\vec{x}) = \lambda\Psi(\vec{x}) = E\Psi(\vec{x})$$

Dále upravujeme pro $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2M}\Delta = -\frac{\hbar^2}{2M}\frac{\partial^2}{\partial x^2}$:

$$-\frac{\hbar^2}{2M}\frac{\partial^2\Psi(x)}{\partial x^2} = E\Psi(x),$$

$$\frac{\partial^2\Psi(x)}{\partial x^2} = -\frac{2EM}{\hbar^2}\Psi(x),$$

$$\Psi''(x) + \frac{2EM}{\hbar^2}\Psi(x) = 0$$

$$\Psi(x) = C_1 sin\left(\sqrt{\frac{2EM}{\hbar^2}}x\right) + C_2 cos\left(\sqrt{\frac{2EM}{\hbar^2}}x\right)$$

Konstanty C_1 a C_2 určíme z počátečních podmínek :

$$\Psi(a) = 0 \Rightarrow C_1 sin\left(\sqrt{\frac{2EM}{\hbar^2}}a\right) + C_2 cos\left(\sqrt{\frac{2EM}{\hbar^2}}a\right) = 0$$

$$\Psi(-a) = 0 \Rightarrow C_1 sin\left(-\sqrt{\frac{2EM}{\hbar^2}}a\right) + C_2 cos\left(-\sqrt{\frac{2EM}{\hbar^2}}a\right) = 0$$

Máme soustavu dvou rovnic o dvou neznámých - řešení pomocí determinantu :

$$\begin{vmatrix} cos\left(\sqrt{\frac{2EM}{\hbar^2}}a\right) & sin\left(\sqrt{\frac{2EM}{\hbar^2}}a\right) \\ cos\left(\sqrt{\frac{2EM}{\hbar^2}}a\right) & -sin\left(\sqrt{\frac{2EM}{\hbar^2}}a\right) \end{vmatrix} = 0$$

$$-2cos\left(\sqrt{\frac{2EM}{\hbar^2}}a\right)sin\left(\sqrt{\frac{2EM}{\hbar^2}}a\right)=0$$

$$sin\left(2\sqrt{\frac{2EM}{\hbar^2}}a\right)=0$$

$$2\sqrt{\frac{2EM}{\hbar^2}}a=k\pi, \text{ kde } k\in\mathbf{Z}$$

$$E=\frac{\pi^2k^2\hbar^2}{8ma^2}$$

Energie musí být kladné číslo, pokud by $E<0$, dostali bychom jiné řešení s hyperbolickým sin a cos $\Rightarrow$ nedokázali bychom splnit podmínky $\Psi(a)=0$ a $\Psi(-a)=0$.

Příklad 16 Nalezněte vlastní hodnoty energie kvantové částice pohybující se v jednorozměrné konstantní potenciálové jámě t.j. v potenciálu $V(x) = \; -V_0 < 0$ pro $|x| < a$ (B) a $V(x) = 0$ pro $|x| > a$ (A).
Návod : Předpokládejte, že vlnové funkce jsou všude spojité a mají spojité derivace pro $x \in$ **R**.

Řešení :

Vycházíme z rovnice :

$$\hat{H}\Psi = E\Psi$$

$$\triangleright \left| \hat{H}\Psi = -\frac{\hbar^2}{2M}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi + V(x)\Psi \right| \triangleright$$

$$-\frac{\hbar^2}{2M}\Psi'' + (V(x) - E)\Psi = 0$$

$$\Psi'' + \underbrace{\frac{(E - V(x))}{\frac{\hbar^2}{2M}}}_{\omega^2}\Psi = 0$$

Dostáváme tak :

$x \in (-\infty, -a)$ ... ω_0^2 ... $\Psi_0 = A_0 e^{i\omega_0 x} + B_0 e^{-i\omega_0 x}$
$x \in (-a, a)$ ... ω_1^2 ... $\Psi_1 = A_1 e^{i\omega_1 x} + B_1 e^{-i\omega_1 x}$
$x \in (a, \infty)$ ... ω_2^2 ... $\Psi_2 = A_2 e^{i\omega_2 x} + B_2 e^{-i\omega_2 x}$

Ze symetrie platí :

$$\omega_0^2 = \omega_2^2$$

- pro $E < V_0$ není kvadraticky integrabilní řešení
- pro $E > 0$ vede na řešení ve tvaru De Broglieovy vlny
- pro $0 > E > V_0$ částice se pohybuje bez ohledu na potenciálovou jámu - nepůsobí na ní žádný potenciál. Získáme řešení - zajímá nás pouze kladná osa, jelikož zápornou získáme jako kombinaci lichého nebo sudého řešení pro kladnou poloosu $\Rightarrow$ $\Psi'' + E\frac{2M}{\hbar^2}\Psi = 0$ získáme komplexní řešení

Řešení :

$$\omega_1 = \frac{\sqrt{2M(E+V_0)}}{\hbar} \ldots \Psi_1 = A_1 e^{i\frac{\sqrt{2M(E+V_0)}}{\hbar}x} + B_1 e^{-i\frac{\sqrt{2M(E+V_0)}}{\hbar}x}$$

$$\omega_2 = \frac{\sqrt{2M|E|}}{\hbar} \ldots \Psi_2 = A_2 e^{\frac{\sqrt{2M(E)}}{\hbar}x} + B_2 e^{-\frac{\sqrt{2M(E)}}{\hbar}x}$$

Aby fce Ψ_2 byla integrabilní, musí $A_2 = 0$ ($exp(-) \to \; 0$ a $A_2 exp(+) \; \to \; 0$)
Fce musí být spojité a musí mít spojitou první derivaci $\Rightarrow$ $\Psi_1(a) = \Psi_2(a)$ a $\Psi_1'(a) = \Psi_2'(a)$:

$$A_1 e^{i\omega_1 a} + B_1 e^{-i\omega_1 a} = \underbrace{A_2 e^{\omega_2 a}}_{0} + B_2 e^{-\omega_2 a}$$

$$i\omega_1 A_1 e^{i\omega_1 a} - i\omega_1 B_1 e^{-i\omega_1 a} = \underbrace{\omega_2 A_2 e^{\omega_2 a}}_{0} - \omega_2 B_2 e^{-\omega_2 a}$$

Převedeme na sinus a cosinus :

$$\underbrace{(-A_1 + B_1)}_{A} sin(\omega_1 a) + \underbrace{(iA_1 - iB_1)}_{B} cos(\omega_1 a) = B_2 e^{-\omega_2 a}$$

$$\omega_1 \underbrace{(-A_1 - B_1)}_{A} cos(\omega_1 a) - \omega_1 \underbrace{(iA_1 + iB_1)}_{B} sin(\omega_1 a) = -\omega_2 B_2 e^{\omega_2 a}$$

Pro sudá řešení je A = 0 :

$$Bcos(\omega_1 a) = B_2 e^{-\omega_2 a}$$

$$\underbrace{-\omega_1 Bsin(\omega_1 a) = -\omega_2 B_2 e^{\omega_2 a}}_{\Downarrow}$$

$$\underbrace{tg(\omega_1 a) = \frac{\omega_2}{\omega_1}}_{\Downarrow}$$

$$tg(\tfrac{\sqrt{2M(E+V_0)}}{\hbar}) = \sqrt{\tfrac{|E|}{E+V_0}}$$

Pro lichá řešení je B = 0 :

$$cotg(\tfrac{\sqrt{2M(E+V_0)}}{\hbar}) = \sqrt{\tfrac{|E|}{E+V_0}}$$

Příklad 17 Najděte ortonormální basi v $\mathbf{C}^2$, jejíž prvky jsou vlastními vektory matice

$$\sigma_1 := \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

Řešení :

Vlastní čísla získáme z rovnice $det(\sigma_1 - \lambda I) = 0$:

$$det(\sigma_1 - \lambda I) = \begin{pmatrix} -\lambda & 1 \\ 1 & -\lambda \end{pmatrix} = \lambda^2 - 1 = 0 \Rightarrow \begin{vmatrix} \lambda_1 = 1 \\ \lambda_2 = -1 \end{vmatrix}$$

Vlastní vektory jsou pak :

Pro $\lambda_1 = 1$

$$\begin{pmatrix} -1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \approx \begin{pmatrix} -1 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \Rightarrow \tilde{\vec{x}}_1 = (1, 1)$$

Pro $\lambda_2 = -1$

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \approx \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \Rightarrow \tilde{\vec{x}}_2 = (1, -1)$$

V normalizovaném tvaru :

$$\vec{x}_1 = \tfrac{1}{\sqrt{2}}(1, 1)$$

$$\vec{x}_2 = \tfrac{1}{\sqrt{2}}(1, -1)$$

Příklad 18 Ukažte, že Hermitovy polynomy lze definovat též způsobem

$$H_n(z) := (-)^n e^{z^2} \left(\frac{d}{dz}\right)^n e^{-z^2} \qquad *$$

Návod: Ukažte že pravá strana této rovnice splňuje rovnici :

$$u'' = 2zu' - 2nu. \qquad **$$

Řešení :

Víme že :

$$H_n(z) = \sum_{k=0}^{\left[\frac{n}{2}\right]} (-)^n (2z)^{n-2k} \frac{n!}{k!(n-2k)!} \qquad ***$$

Musíme dokázat, že * řeší **. Nalezneme dvě ření - musíme ale dokázat, že je přípustné v tomto případě pouze jedno a navíc toto řešení je stejné jako ***.

Dosadíme * do ** :

$$\frac{d^2}{dz^2}\left[(-)^n e^{z^2}\left(\frac{d}{dz}\right)^n e^{-z^2}\right] = 2z\frac{d}{dz}\left[(-)^n e^{z^2}\left(\frac{d}{dz}\right)^n e^{-z^2}\right] - 2n\left[(-)^n e^{z^2}\left(\frac{d}{dz}\right)^n e^{-z^2}\right]$$

Spočítáme 2. derivaci podle z :

$$\frac{d}{dz}\left[2ze^{z^2}\left(\frac{d}{dz}\right)^n e^{-z^2} + e^{z^2}\left(\frac{d}{dz}\right)^{n+1} e^{-z^2}\right] =$$
$$2z\left[2ze^{z^2}\left(\frac{d}{dz}\right)^n e^{-z^2} + e^{z^2}\left(\frac{d}{dz}\right)^{n+1} e^{-z^2}\right] - 2n\left[e^{z^2}\left(\frac{d}{dz}\right)^n e^{-z^2}\right]$$

$$2e^{z^2}\left(\frac{d}{dz}\right)^n e^{-z^2} + 2z\left[2ze^{z^2}\left(\frac{d}{dz}\right)^n e^{-z^2} + e^{z^2}\left(\frac{d}{dz}\right)^{n+1} e^{-z^2}\right] + 2ze^{z^2}\left(\frac{d}{dz}\right)^{n+1} e^{-z^2} +$$
$$e^{z^2}\left(\frac{d}{dz}\right)^{n+2} e^{-z^2} = 2z\left[2ze^{z^2}\left(\frac{d}{dz}\right)^n e^{-z^2} + e^{z^2}\left(\frac{d}{dz}\right)^{n+1} e^{-z^2}\right] - 2n\left[e^{z^2}\left(\frac{d}{dz}\right)^n e^{-z^2}\right]$$

$$2(n+1)\left(\frac{d}{dz}\right)^n e^{-z^2} + 2z\left(\frac{d}{dz}\right)^{n+1} e^{-z^2} + \left(\frac{d}{dz}\right)^{n+2} e^{-z^2} = 0$$

Pro další výpočet použijeme Leibnitzovo pravidlo pro n-tou derivaci :

$$(uv)^{(n)} = \sum_{k=0}^{n} \left(\begin{array}{c} n \\ k \end{array}\right) u^{(k)} v^{(n-k)}$$

(n +2)-tou derivaci můžeme tedy vyjádřit jako :

$$\left(\frac{d}{dz}\right)^{n+2} e^{-z^2} = \left(\frac{d}{dz}\right)^{n+1}\left(-2ze^{-z^2}\right) =$$
$$-2\sum_{k=0}^{n+1}\left(\begin{array}{c} n+1 \\ k \end{array}\right) \underbrace{\left(\frac{d}{dz}\right)^{(k)} z}_{=0 pro \forall k - \{0,1\}} \left(\frac{d}{dz}\right)^{(n+1-k)} e^{-z^2} =$$
$$-2z\left(\frac{d}{dz}\right)^{(n+1)} e^{-z^2} - 2(n+1)\left(\frac{d}{dz}\right)^{(n)} e^{-z^2}$$

Dosadíme zpět :

$$2(n+1)\left(\frac{d}{dz}\right)^{n} e^{-z^2} + 2z\left(\frac{d}{dz}\right)^{n+1} e^{-z^2} - 2z\left(\frac{d}{dz}\right)^{(n+1)} e^{-z^2} - 2(n+1)\left(\frac{d}{dz}\right)^{(n)} e^{-z^2} = 0$$

Nyní musíme dokázat, že se toto řešení rovná *** :
Jelikož se jedná o diferenciální rovnici 2. řádu, získáme 2 řešení. Jedno řešení je polynomem (má konečný počet členů ⇒ *** = polynom) a druhé řešení je rozvoj (má nekonečně mnoho členů). Naše řešení, tzn. * je polynom. Jelikož lineární kombinací polynomu a rozvoje lze získat pouze rozvoj, musí tedy platit : * = ***.

$* = \underbrace{\alpha * **}_{polynom} + \underbrace{\beta u(x)}_{rozvoj} \Rightarrow$
$\beta \neq 0 \ldots *$ je rozvoj
$\beta = 0 \ldots *$ je polynom $\Rightarrow * = \alpha * **$
vypočítáním libovolného členu dostaneme $\alpha = 1 \Rightarrow * = * * *$

Příklad 19 Ukažte, že

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{H_n(x)}{n!}\xi^n = e^{x^2-(x-\xi)^2}$$

Řešení :

Vyjdeme ze zadání :

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{H_n(x)}{n!}\xi^n = e^{x^2-(x-\xi)^2} \quad |\cdot \frac{\partial^n}{\partial \xi^n}$$

$$H_n(x) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\partial^n}{\partial \xi^n} \frac{1}{n!}\xi^n = \frac{\partial^n}{\partial \xi^n} e^{x^2-(x-\xi)^2}$$

$$H_n(x) = \frac{\partial^n}{\partial \xi^n} e^{x^2-(x-\xi)^2}$$

Z příkladu č. 18 víme, že :

$$H_n(x) := (-1)^n e^{x^2} \left(\frac{d}{dx}\right)^n e^{-x^2}$$

Stačí tedy dokázat rovnost

$$H_n(x) = \left(\frac{d}{d\xi}\right)^n e^{x^2-(x-\xi)^2} \ |_{\xi=0} \overbrace{=}^{?} (-1)^n e^{x^2} \left(\frac{d}{dx}\right)^n e^{-x^2}$$

Zavedeme další proměnnou η :

$$\eta = x - \xi \Rightarrow \frac{\partial}{\partial \xi} = -\frac{\partial}{\partial \eta} \Rightarrow \frac{\partial^n}{\partial \xi^n} = (-1)^n \frac{\partial^n}{\partial \eta^n}$$

$$H_n(x) = \left(\frac{d}{d\xi}\right)^n e^{x^2-(x-\xi)^2} \ |_{\xi=0} = (-1)^n \left(\frac{d}{d\eta}\right)^n e^{x^2-\eta^2} \ |_{x=\eta} =$$
$$(-1)^n e^{x^2} \left(\frac{d}{d\eta}\right)^n e^{-\eta^2} \ |_{x=\eta}$$

Dosadíme zpět $\eta = x - \xi, \xi = 0$:

$$H_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \left(\frac{d}{dx}\right)^n e^{-x^2}$$

Příklad 20 Použitím vytvořující funkce ze cvičení 19 ukažte, že

$$\int\limits_{-\infty}^{\infty} H_n(x)H_m(x)e^{-x^2}dx = 2^n n! \pi^{\frac{1}{2}}\delta_{nm}$$

Ukažte, že odtud plyne ortonormalita vlastních funkcí harmonického oscilátoru.

Řešení :

Stavy harmonického oscilárotu jsou popsány fcí :

$$\psi_n(x) = e^{-\frac{x^2}{2}}H_n(x)$$

Z příkladu č. 19 víme :

$$H_n(x) = \frac{\partial^n}{\partial\xi^n}e^{x^2-(x-\xi)^2}|_{\xi=0}$$

Řešíme rovnici :

$$\int\limits_{-\infty}^{\infty} H_n(x)H_m(x)e^{-x^2}dx = \int\limits_{-\infty}^{\infty} \psi_n(x).\psi_m(x)\ dx =$$
$$\int\limits_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial^n}{\partial\xi^n}e^{x^2-(x-\xi)^2}\frac{\partial^m}{\partial\eta^m}e^{x^2-(x-\eta)^2}e^{-x^2}dx\ |_{\xi,\eta=0} =$$
$$\int\limits_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial^n}{\partial\xi^n}\frac{\partial^m}{\partial\eta^m}e^{-\left[x^2-2x(\xi+\eta)+(\xi^2+\eta^2)\right]}dx\ |_{\xi,\eta=0} = \int\limits_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial^n}{\partial\xi^n}\frac{\partial^m}{\partial\eta^m}e^{-\left[(x-(\xi+\eta))^2-2\xi\eta\right]}dx\ |_{\xi,\eta=0}$$

Přehodíme integrál a derivaci (lze to - říkal to p. cvičící :o)

$$\frac{\partial^n}{\partial\xi^n}\frac{\partial^m}{\partial\eta^m}e^{2\xi\eta}\underbrace{\int\limits_{-\infty}^{\infty} e^{-\left[(x-(\xi+\eta)^2\right]}dx}_{\sqrt{\pi}}\ |_{\xi,\eta=0} = \sqrt{\pi}\frac{\partial^n}{\partial\xi^n}\frac{\partial^m}{\partial\eta^m}e^{2\xi\eta}\ |_{\xi,\eta=0} =$$
$$\sqrt{\pi}2^m\frac{\partial^n}{\partial\xi^n}\xi^m e^{2\xi\eta}\ |_{\xi,\eta=0}$$

Protože ξ a $\eta = 0 \Rightarrow e^{2\xi\eta} = 1 \Rightarrow \frac{\partial^n}{\partial\xi^n}\xi^m e^{2\xi\eta} = 0$ pro $m \neq n \Rightarrow$ abychom dostali nenulové řešení musí $m = n \Rightarrow \sqrt{\pi}2^m\frac{\partial^n}{\partial\xi^n}\xi^m e^{2\xi\eta}\ |_{\xi,\eta=0,n=m} = \sqrt{\pi}2^m n!\underbrace{\xi^{m-n}}_{\xi^0=1}\delta_{nm} =$

$\sqrt{\pi}2^m n!\delta_{nm}$

Příklad 21 Jaká je hustota pravděpodobnosti nalezení kvantového jednorozměrného oscilátoru s energií $h\omega(n+\frac{1}{2})$ v bodě x ? Spočítejte a nakreslete grafy této hustoty pro $n = 0, l, 2, \dots$ a srovnejte je s hustototu pravděpodobnosti výskytu klasického oscilátoru v daném místě.

Řešení :

Při řešení vycházíme z těchto vztahů :

$$\psi_n(\xi) = A_n e^{-\frac{\xi^2}{2}} H_n(\xi)$$

$$\xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \frac{1}{x}$$

$$H_n(\xi) := (-)^n e^{\xi^2} \left(\frac{d}{d\xi}\right)^n e^{-\xi^2}$$

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

Pro n = 0 získáme tato řešení :

$$E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$$

$$H_0(\xi) = 1$$

$$\rho_0(\xi) = |\psi_0(\xi)|^2 = |A_0|^2 e^{-\xi^2} \underbrace{=}_{normalizace} \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-\xi^2}$$

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

Pro n = 1 získáme tato řešení :

$$E_1 = \frac{3}{2}\hbar\omega$$

$$H_1(\xi) = 2\xi$$

$$\rho_1(\xi) = |\psi_1(\xi)|^2 = |A_1|^2 e^{-\xi^2} 4\xi^2 = \frac{1}{2\sqrt{\pi}} e^{-\xi^2} 4\xi^2 = \frac{2\xi^2}{\sqrt{\pi}} e^{-\xi^2}$$

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

Pro n = 2 získáme tato řešení :

$$E_2 = \frac{5}{2}\hbar\omega$$

$$H_2(\xi) = 4\xi^2 - 2$$

$$\rho_2(\xi) = |\psi_2(\xi)|^2 = |A_2|^2 e^{-\xi^2}\left(16\xi^2 - 16\xi + 4\right) = \frac{1}{8\sqrt{\pi}} e^{-\xi^2}\left(16\xi^2 - 16\xi + 4\right) = \frac{4\xi^2-4\xi+1}{2\sqrt{\pi}} e^{-\xi^2}$$

$$\psi_2(\xi) = \frac{\sqrt{2}}{4\sqrt[4]{\pi}}\left(4\xi^2 - 2\right) e^{-\frac{\xi^2}{2}}$$

Pro n = 3 získáme tato řešení :

$$E_3 = \frac{7}{2}\hbar\omega$$

$$H_3(\xi) = -8\xi^3 + 12\xi$$

$$\rho_3(\xi) = |\psi_3(\xi)|^2 = |A_3|^2 e^{-\xi^2}\left(64\xi^6 - 192\xi^4 + 144\xi^2\right) = \frac{1}{48\sqrt{\pi}} e^{-\xi^2}\left(64\xi^6 - 192\xi^4 + 144\xi^2\right) = \frac{4\xi^6-12\xi^4+9\xi^2}{3\sqrt{\pi}} e^{-\xi^2}$$

$$\psi_3(\xi) = \frac{\sqrt{3}}{12\sqrt[4]{\pi}}\left(-8\xi^3 + 12\xi\right) e^{-\frac{\xi^2}{2}}$$

Pro n = 4 získáme tato řešení :

$$E_4 = \frac{9}{2}\hbar\omega$$

$$H_4(\xi) = 16\xi^4 - 48\xi^2 + 12$$

$$\rho_4(\xi) = |\psi_4(\xi)|^2 = |A_4|^2 e^{-\xi^2}\left(256\xi^8 - 1536\xi^6 + 2688\xi^4 - 1152\xi^2 + 144\right) = \frac{1}{384\sqrt{\pi}} e^{-\xi^2}\left(64\xi^6 - 192\xi^4 + 144\xi^2\right) = \frac{16\xi^8-96\xi^6+168\xi^4-72\xi^2+9}{24\sqrt{\pi}} e^{-\xi^2}$$

$$\psi_4(\xi) = \frac{\sqrt{6}}{48\sqrt[4]{\pi}}\left(16\xi^4 - 48\xi^2 + 12\right) e^{-\frac{\xi^2}{2}} \text{ atd.}$$

Pro srovnání - hustota pravděpodobnosti výskytu klasického oscilátoru v daném místě (viz. příklad č. 5) :

$$\rho(\xi) = \frac{\omega}{\pi\sqrt{\frac{2}{m}\left(E - \frac{m\omega^2}{2}\xi^2\right)}}$$

Příklad 22 Spočítejte komutátory

$$\left[\hat{L}_j,\hat{X}_k\right],\left[\hat{L}_j,\hat{P}_k\right],\left[\hat{L}_j,\hat{L}_k\right],$$

kde

$$\hat{L}_j := \epsilon_{jkl}\hat{X}_k\hat{P}_l$$

Řešení :

Vycházíme ze vztahů :

$$[A,BC] = [A,B]\,C + B\,[A,C]$$

$$[AB,C] = [A,C]\,B + A\,[B,C]$$

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

$$\left[\hat{X}_j,\hat{X}_k\right] = 0$$

$$\left[\hat{P}_j,\hat{P}_k\right] = 0$$

$$\left[\hat{A},\hat{B}\right] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$$

Nyní můžeme snadno vypočítat :

$$\left[\hat{L}_j,\hat{X}_k\right] = \left[\epsilon_{jab}\hat{X}_a\hat{P}_b,\hat{X}_k\right] = \epsilon_{jab}\left(\hat{X}_a\underbrace{\left[\hat{P}_b,\hat{X}_k\right]}_{-\left[\hat{X}_k,\hat{P}_b\right]} + \underbrace{\left[\hat{X}_a,\hat{X}_k\right]}_{0}\hat{P}_b\right) =$$
$$-\epsilon_{jab}\hat{X}_a\left[\hat{X}_k,\hat{P}_b\right] = -\epsilon_{jab}\hat{X}_a i\hbar\delta_{bk} = -i\hbar\epsilon_{jak}\hat{X}_a$$

$$\left[\hat{L}_j,\hat{P}_k\right] = \left[\epsilon_{jab}\hat{X}_a\hat{P}_b,\hat{P}_k\right] = \epsilon_{jab}\left(\hat{X}_a\underbrace{\left[\hat{P}_b,\hat{P}_k\right]}_{0} + \left[\hat{X}_a,\hat{P}_k\right]\hat{P}_b\right) = \epsilon_{jab}\left[\hat{X}_a,\hat{P}_k\right]\hat{P}_b =$$
$$\epsilon_{jab}\hat{P}_b i\hbar\delta_{ak} = i\hbar\epsilon_{jkb}\hat{P}_b$$

$$\left[\hat{L}_j,\hat{L}_k\right] = \left[\epsilon_{jab}\hat{X}_a\hat{P}_b,\epsilon_{klm}\hat{X}_l\hat{P}_m\right] = \epsilon_{jab}\epsilon_{klm}\left[\hat{X}_a\hat{P}_b,\hat{X}_l\hat{P}_m\right] =$$
$$\epsilon_{jab}\epsilon_{klm}\left(\hat{P}_b\left[\hat{X}_a,\hat{X}_l\hat{P}_m\right] + \hat{X}_a\left[\hat{P}_b,\hat{X}_l\hat{P}_m\right]\right) =$$
$$\epsilon_{jab}\epsilon_{klm}\left(\hat{P}_b\underbrace{\left[\hat{X}_a,\hat{X}_l\right]}_{0}\hat{P}_m + \hat{X}_l\hat{P}_b\underbrace{\left[\hat{X}_a,\hat{P}_m\right]}_{i\hbar\delta_{am}} + \hat{X}_a\underbrace{\left[\hat{P}_b,\hat{X}_l\right]}_{-i\hbar\delta_{bl}}\hat{P}_m + \hat{X}_l\hat{X}_a\underbrace{\left[\hat{P}_b,\hat{P}_m\right]}_{0}\right) =$$
$$\epsilon_{jab}\epsilon_{klm}\left(i\hbar\delta_{am}\hat{X}_l\hat{P}_b - i\hbar\delta_{bl}\hat{X}_a\hat{P}_m\right) = \epsilon_{jmb}\epsilon_{klm}i\hbar\hat{X}_l\hat{P}_b - \epsilon_{jal}\epsilon_{klm}i\hbar\hat{X}_a\hat{P}_m =$$

$$\Rightarrow |\epsilon_{ijk}\epsilon_{lmk} = \delta_{il}\delta_{jm} - \delta_{im}\delta_{lj}|;$$

Pozn. sčítací index musí být na 3. pozici, pokud ne, násobíme (- 1) $\Rightarrow$

$$= -(\delta_{jk}\delta_{bl} - \delta_{jl}\delta_{kb})i\hbar\hat{X}_l\hat{P}_b + (\delta_{jk}\delta_{am} - \delta_{jm}\delta_{ka})i\hbar\hat{X}_a\hat{P}_m =$$
$$-i\hbar(\delta_{jk}\delta_{bl}\hat{X}_l\hat{P}_b - \delta_{jl}\delta_{kb}\hat{X}_l\hat{P}_b) + i\hbar(\delta_{jk}\delta_{am}\hat{X}_a\hat{P}_m - \delta_{jm}\delta_{ka}\hat{X}_a\hat{P}_m) =$$
$$-i\hbar(\delta_{jk}\hat{X}_l\hat{P}_l - \delta_{jl}\delta_{kb}\hat{X}_l\hat{P}_b) + i\hbar(\delta_{jk}\hat{X}_m\hat{P}_m - \delta_{jm}\delta_{ka}\hat{X}_a\hat{P}_m) =$$
$$i\hbar(\delta_{jl}\delta_{kb}\hat{X}_l\hat{P}_b - \delta_{jm}\delta_{ka}\hat{X}_a\hat{P}_m) \Rightarrow |m \rightarrow b,\ a \rightarrow l| \Rightarrow$$
$$i\hbar(\delta_{jl}\delta_{kb}\hat{X}_l\hat{P}_b - \delta_{jb}\delta_{kl}\hat{X}_l\hat{P}_b) = i\hbar(\delta_{jl}\delta_{kb} - \delta_{jb}\delta_{kl})\hat{X}_l\hat{P}_b = i\hbar\epsilon_{jkm}\epsilon_{lbm}\hat{X}_l\hat{P}_b = i\hbar\epsilon_{jkm}\hat{L}_m$$

Příklad 23 Ukažte, že vzájemně komutují operátory $\hat{H} = \frac{1}{2m}\hat{P}^2 + V(|\vec{x}|), \hat{L}_3$ a $\hat{L}^2 = \hat{L}_1^2 + \hat{L}_2^2 + \hat{L}_3^2$

Řešení :

Vycházíme ze vztahů :

$$\left[\hat{L}_i, \hat{L}_j\right] = ih\epsilon_{ijk}\hat{L}_k$$

$$\left[\hat{P}_i, \hat{L}_j\right] = -ih\epsilon_{ijk}\hat{P}_k$$

$$\hat{L}_3 = -ih\frac{\partial}{\partial\varphi}$$

$$V = V(|\vec{x}|) = V(r)$$

Zkoumáme vzájemnou komutaci :

$\left[\hat{L}^2, \hat{L}_3\right] =$
$= \left[\hat{L}_i\hat{L}_i, \hat{L}_3\right] = \hat{L}_i\left[\hat{L}_i, \hat{L}_3\right] + \left[\hat{L}_i, \hat{L}_3\right]\hat{L}_i = \hat{L}_1\left[\hat{L}_1, \hat{L}_3\right] + \left[\hat{L}_1, \hat{L}_3\right]\hat{L}_1 + \hat{L}_2\left[\hat{L}_2, \hat{L}_3\right] + \left[\hat{L}_2, \hat{L}_3\right]\hat{L}_2 = -ih\hat{L}_1\hat{L}_2 - ih\hat{L}_2\hat{L}_1 + ih\hat{L}_2\hat{L}_1 + ih\hat{L}_1\hat{L}_2 = 0$

$\left[\hat{H}, \hat{L}_3\right] =$
$= \left[\frac{1}{2m}\hat{P}_i^2, \hat{L}_3\right] + \left[V(|\vec{x}|), \hat{L}_3\right] = \frac{1}{2m}\left(\hat{P}_i\left[\hat{P}_i, \hat{L}_3\right] + \left[\hat{P}_i, \hat{L}_3\right]\hat{P}_i\right) + \left(V(|\vec{x}|)\hat{L}_3 - \hat{L}_3V(|\vec{x}|)\right) =$
$\frac{1}{2m}\left(\hat{P}_1\left[\hat{P}_1, \hat{L}_3\right] + \left[\hat{P}_1, \hat{L}_3\right]\hat{P}_1 + \hat{P}_2\left[\hat{P}_2, \hat{L}_3\right] + \left[\hat{P}_2, \hat{L}_3\right]\hat{P}_2\right) + \underbrace{\left(-ihV(|\vec{x}|)\frac{\partial}{\partial\varphi} + ih\frac{\partial}{\partial\varphi}V(|\vec{x}|)\right)}_{V\neq V(\varphi)\Rightarrow =0} =$

$\frac{1}{2m}\left(ih\hat{P}_1\hat{P}_2 + ih\hat{P}_2\hat{P}_1 - ih\hat{P}_2\hat{P}_1 - ih\hat{P}_1\hat{P}_2\right) = 0$

$\left[\hat{H}, \hat{L}^2\right] =$
$= \left[\hat{H}, \hat{L}_i\right]\hat{L}_i + \hat{L}_i\left[\hat{H}, \hat{L}_i\right] = \frac{1}{2m}\left[\hat{P}_j^2, \hat{L}_i\right]\hat{L}_i + \left[V(|\vec{x}|), \hat{L}_i\right]\hat{L}_i + \frac{1}{2m}\hat{L}_i\left[\hat{P}_j^2, \hat{L}_i\right] + \hat{L}_i\left[V(|\vec{x}|), \hat{L}_i\right] = \frac{1}{2m}\left(\hat{P}_j\left[\hat{P}_j, \hat{L}_i\right]\hat{L}_i + \left[\hat{P}_j, \hat{L}_i\right]\hat{L}_i\hat{P}_j + \hat{P}_j\hat{L}_i\left[\hat{P}_j, \hat{L}_i\right] + \hat{L}_i\left[\hat{P}_j, \hat{L}_i\right]\hat{P}_j\right) + \underbrace{\hat{L}_i\left(V(|\vec{x}|)\hat{L}_i - \hat{L}_iV(|\vec{x}|)\right) + \left(V(|\vec{x}|)\hat{L}_i - \hat{L}_iV(|\vec{x}|)\right)\hat{L}_i}_{\hat{L}_i\neq\hat{L}_i(r)-pr.24\Rightarrow =0} = \frac{ih}{2m}(\hat{P}_j\epsilon_{ijk}\hat{P}_k\hat{L}_i + \epsilon_{ijk}\hat{P}_k\hat{L}_i\hat{P}_j +$

$+\hat{P}_j\hat{L}_i\epsilon_{ijk}\hat{P}_k + \hat{L}_i\epsilon_{ijk}\hat{P}_k\hat{P}_j) = \frac{ih}{2m}\left(\hat{L}_i\hat{P}_j\hat{P}_k + \hat{L}_i\hat{P}_j\hat{P}_k - \hat{L}_i\hat{P}_j\hat{P}_k - \hat{L}_i\hat{P}_j\hat{P}_k\right) = 0$

Příklad 24 Jak vypadají operátory $\hat{X}_j, \hat{P}_j, \hat{L}_j$, kde $j = \hat{3}$ ve sférických souřadnicích?

Řešení :

Sférické souřadnice :

$$x_1 = r\ sin(\Theta)cos(\varphi)$$

$$x_2 = r\ sin(\Theta)sin(\varphi)$$

$$x_3 = r\ cos(\Theta)$$

Inverzní vztahy :

$$r = \sqrt{x_1^2 + x_2^2 + x_3^2}$$

$$\varphi = arctg\left(\frac{x_2}{x_1}\right)$$

$$\Theta = arccos\left(\frac{x_3}{\sqrt{x_1^2+x_2^2+x_3^2}}\right)$$

Pro $\hat{X}_j$ platí : $\hat{X}_j = x_j \Rightarrow$

$$\hat{X}_1 = r\ sin(\Theta)cos(\varphi)$$

$$\hat{X}_2 = r\ sin(\Theta)sin(\varphi)$$

$$\hat{X}_3 = r\ cos(\Theta)$$

Pro $\hat{P}_j$ platí : $\hat{P}_j = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x_j} \Rightarrow$

$$\hat{P}_1 = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x_1} = -i\hbar\left(\frac{\partial}{\partial r}\frac{\partial r}{\partial x_1} + \frac{\partial}{\partial \varphi}\frac{\partial \varphi}{\partial x_1} + \frac{\partial}{\partial \Theta}\frac{\partial \Theta}{\partial x_1}\right) = \left| \begin{array}{l} \frac{\partial r}{\partial x_1} = \frac{x_1}{\sqrt{x_1^2+x_2^2+x_3^2}} = sin(\Theta)cos(\varphi) \\ \frac{\partial \varphi}{\partial x_1} = -\frac{x_2}{x_1^2+x_2^2} = -\frac{sin(\varphi)}{r\ sin(\Theta)} \\ \frac{\partial \Theta}{\partial x_1} = \frac{x_1 x_3}{\left(x_1^2+x_2^2+x_3^2\right)\sqrt{x_1^2+x_2^2}} = \frac{cos(\Theta)cos(\varphi)}{r} \end{array} \right| =$$

$$-i\hbar\left(sin(\Theta)cos(\varphi)\frac{\partial}{\partial r} - \frac{sin(\varphi)}{r\ sin(\Theta)}\frac{\partial}{\partial \varphi} + \frac{cos(\Theta)cos(\varphi)}{r}\frac{\partial}{\partial \Theta}\right)$$

$$\hat{P}_2 = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x_2} = -i\hbar\left(\frac{\partial}{\partial r}\frac{\partial r}{\partial x_2} + \frac{\partial}{\partial \varphi}\frac{\partial \varphi}{\partial x_2} + \frac{\partial}{\partial \Theta}\frac{\partial \Theta}{\partial x_2}\right) = \left| \begin{array}{l} \frac{\partial r}{\partial x_2} = \frac{x_1}{\sqrt{x_1^2+x_2^2+x_3^2}} = sin(\Theta)sin(\varphi) \\ \frac{\partial \varphi}{\partial x_2} = \frac{x_1}{x_1^2+x_2^2} = \frac{cos(\varphi)}{r\ sin(\Theta)} \\ \frac{\partial \Theta}{\partial x_2} = \frac{x_2 x_3}{\left(x_1^2+x_2^2+x_3^2\right)\sqrt{x_1^2+x_2^2}} = \frac{cos(\Theta)sin(\varphi)}{r} \end{array} \right| =$$

$$-i\hbar\left(sin(\Theta)sin(\varphi)\frac{\partial}{\partial r} + \frac{cos(\varphi)}{r\ sin(\Theta)}\frac{\partial}{\partial \varphi} + \frac{cos(\Theta)sin(\varphi)}{r}\frac{\partial}{\partial \Theta}\right)$$

$$\hat{P}_3 = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x_3} = -i\hbar\left(\frac{\partial}{\partial r}\frac{\partial r}{\partial x_3} + \frac{\partial}{\partial \varphi}\frac{\partial \varphi}{\partial x_3} + \frac{\partial}{\partial \Theta}\frac{\partial \Theta}{\partial x_3}\right) = \left| \begin{array}{l} \frac{\partial r}{\partial x_3} = \frac{x_3}{\sqrt{x_1^2+x_2^2+x_3^2}} = cos(\Theta) \\ \frac{\partial \varphi}{\partial x_3} = 0 \\ \frac{\partial \Theta}{\partial x_3} = -\frac{\sqrt{x_1^2+x_2^2}}{x_1^2+x_2^2+x_3^2} = -\frac{sin(\Theta)}{r} \end{array} \right| =$$

$$-i\hbar\left(cos(\Theta)\frac{\partial}{\partial r} - \frac{sin(\Theta)}{r}\frac{\partial}{\partial \Theta}\right)$$

Pro $\hat{L}_j$ platí : $\hat{L}_j = \epsilon_{jkl}\hat{X}_k\hat{P}_l \Rightarrow$

$\hat{L}_1 = \epsilon_{jkl}\hat{X}_2\hat{P}_3 = -i\hbar\epsilon_{jkl}x_2\frac{\partial}{\partial x_3} = -i\hbar\left(x_2\frac{\partial}{\partial x_3} - x_3\frac{\partial}{\partial x_2}\right) =$
$-i\hbar\left\{r\ sin(\Theta)sin(\varphi)\left(-\frac{sin(\Theta)}{r}\frac{\partial}{\partial\Theta}\right) - r\ cos(\Theta)\left(\frac{cos(\varphi)}{r\ sin(\Theta)}\frac{\partial}{\partial\varphi} + \frac{cos(\Theta)sin(\varphi)}{r}\frac{\partial}{\partial\Theta}\right)\right\} =$
$-i\hbar\left\{-\left(\frac{r\ sin^2(\Theta)sin(\varphi)+r\ cos^2(\Theta)sin(\varphi)}{r}\right)\frac{\partial}{\partial\Theta} - \frac{cos(\Theta)cos(\varphi)}{sin(\Theta)}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right\} =$
$i\hbar\left\{sin(\varphi)\frac{\partial}{\partial\Theta} + cos(\varphi)cotg(\Theta)\frac{\partial}{\partial\varphi}\right\}$

$\hat{L}_2 = \epsilon_{jkl}\hat{X}_3\hat{P}_1 = -i\hbar\epsilon_{jkl}x_3\frac{\partial}{\partial x_1} = -i\hbar\left(x_3\frac{\partial}{\partial x_1} - x_1\frac{\partial}{\partial x_3}\right) =$
$-i\hbar\left\{r\ cos(\Theta)\left(-\frac{sin(\varphi)}{r\ sin(\Theta)}\frac{\partial}{\partial\varphi} + \frac{cos(\Theta)cos(\varphi)}{r}\frac{\partial}{\partial\Theta}\right) - r\ sin(\Theta)cos(\varphi)\left(-\frac{sin(\Theta)}{r}\frac{\partial}{\partial\Theta}\right)\right\} =$
$-i\hbar\left\{\left(\frac{r\ cos^2(\Theta)cos(\varphi)+r\ sin^2(\Theta)cos(\varphi)}{r}\right)\frac{\partial}{\partial\Theta} - \frac{cos(\Theta)sin(\varphi)}{sin(\Theta)}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right\} =$
$i\hbar\left\{-cos(\varphi)\frac{\partial}{\partial\Theta} + sin(\varphi)cotg(\Theta)\frac{\partial}{\partial\varphi}\right\}$

$\hat{L}_3 = \epsilon_{jkl}\hat{X}_1\hat{P}_2 = -i\hbar\epsilon_{jkl}x_1\frac{\partial}{\partial x_2} = -i\hbar\left(x_1\frac{\partial}{\partial x_2} - x_2\frac{\partial}{\partial x_1}\right) =$
$-i\hbar\left\{r\ sin(\Theta)\left(\frac{cos^2(\varphi)}{r\ sin(\Theta)}\frac{\partial}{\partial\varphi} + \frac{cos(\varphi)cos(\Theta)sin(\varphi)}{r}\frac{\partial}{\partial\Theta} + \frac{sin^2(\varphi)}{r\ sin(\Theta)}\frac{\partial}{\partial\varphi} - \frac{sin(\varphi)cos(\Theta)cos(\varphi)}{r}\frac{\partial}{\partial\Theta}\right)\right\} =$
$-i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}$

Příklad 25 ”Kvantové tuhé těleso” (např. dvouatomová molekula) s momentem setrvačnosti I_z volně rotuje v rovině. Najděte její možné hodnoty energie.

Řešení :

$$E = \frac{1}{2}m\dot{x}^2 \approx E = \frac{1}{2}I_z\dot{\varphi}^2$$

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\hat{P}_x^2 \approx \frac{1}{2I_z}\hat{P}_\varphi^2 \Rightarrow \left|\hat{P}_\varphi = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}; \hat{P}_\varphi^2 = -\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right| \Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2I_z}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}$$

Dále víme že :

$$\hat{H}\psi(\varphi) = \lambda\psi(\varphi)$$

$$-\hbar^2\frac{\partial^2\psi}{\partial\varphi^2} = \lambda\psi(\varphi)$$

$$\psi''(\varphi) + \underbrace{\frac{2I_z}{\hbar^2}\lambda}_{\omega^2}\psi(\varphi) = 0$$

$$\psi(\varphi) = Ae^{i\omega\varphi} + Be^{-i\omega\varphi}$$

Z požadavku jednoznačnosti $\psi(\varphi) = \psi(\varphi + 2\pi)$ plyne rovnost:

$$Ae^{i\omega\varphi} + Be^{-i\omega\varphi} = Ae^{i\omega(\varphi+2\pi)} + Be^{-i\omega(\varphi+2\pi)}$$

Aby platila tato rovnost musí se rovnat výrazy u konstant A a B, což je splněno pro $e^{i\omega 2\pi} = e^0 = 1 \Rightarrow$

$$cos\,\omega 2\pi = 1 \Rightarrow \omega 2\pi = 2k\pi \Rightarrow \omega = k \Rightarrow \sqrt{\frac{2I_z}{\hbar^2}\lambda} = k \Rightarrow \lambda = \frac{k^2\hbar^2}{2I_z}, \text{ kde } k \in Z$$

Příklad 26 S použitím vzorců pro jednotlivé složky momentu hybnosti ukažte, že operátor $\hat{L}^2$ má ve sférických souřadnicích tvar :

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

Řešení :

$$\hat{L}^2 = \hat{L}_1^2 + \hat{L}_2^2 + \hat{L}_3^2$$

Operátory $\hat{L}_i^2$ vyjádřené ve sférických souřadnicích známe z příkladu č. 24 :

$$\hat{L}_1 = i\hbar\left(cos\varphi\ cotg\Theta\frac{\partial}{\partial\varphi} + sin\varphi\frac{\partial}{\partial\Theta}\right)$$

$$\hat{L}_2 = i\hbar\left(sin\varphi\ cotg\Theta\frac{\partial}{\partial\varphi} - cos\varphi\frac{\partial}{\partial\Theta}\right)$$

$$\hat{L}_3 = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}$$

Dále řešíme již jen matematicky :

$\hat{L}_1^2 = \hat{L}_1.\hat{L}_1 = -\hbar^2[cos\varphi\ cotg\Theta\frac{\partial}{\partial\varphi}\left(cos\varphi\ cotg\Theta\frac{\partial}{\partial\varphi} + sin\varphi\frac{\partial}{\partial\Theta}\right) +$
$sin\varphi\frac{\partial}{\partial\Theta}\left(cos\varphi\ cotg\Theta\frac{\partial}{\partial\varphi} + sin\varphi\frac{\partial}{\partial\Theta}\right)] =$
$-\hbar^2[cos\varphi\ cotg\Theta\left(-sin\varphi\ cotg\Theta\frac{\partial}{\partial\varphi} + cos\varphi\ cotg\Theta\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} + cos\varphi\frac{\partial}{\partial\Theta}\right) +$
$sin\varphi\left(-\frac{cos\varphi}{sin^2\Theta}\frac{\partial}{\partial\varphi} + sin\varphi\frac{\partial^2}{\partial\Theta^2}\right)]$

$\hat{L}_2^2 = \hat{L}_2.\hat{L}_2 = -\hbar^2[sin\varphi\ cotg\Theta\frac{\partial}{\partial\varphi}\left(sin\varphi\ cotg\Theta\frac{\partial}{\partial\varphi} - cos\varphi\frac{\partial}{\partial\Theta}\right) -$
$cos\varphi\frac{\partial}{\partial\Theta}\left(sin\varphi\ cotg\Theta\frac{\partial}{\partial\varphi} - cos\varphi\frac{\partial}{\partial\Theta}\right)] =$
$-\hbar^2[sin\varphi\ cotg\Theta\left(cos\varphi\ cotg\Theta\frac{\partial}{\partial\varphi} + sin\varphi\ cotg\Theta\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} + sin\varphi\frac{\partial}{\partial\Theta}\right) -$
$cos\varphi\left(-\frac{sin\varphi}{sin^2\Theta}\frac{\partial}{\partial\varphi} - cos\varphi\frac{\partial^2}{\partial\Theta^2}\right)]$

$\hat{L}_3^2 = \hat{L}_3.\hat{L}_3 = -\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}$

Doplníme do vztahu pro $\hat{L}^2$:

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2[\left(-\frac{sin\varphi\ cos\varphi\ cos^2\Theta}{sin^2\Theta} - \frac{sin\varphi\ cos\varphi}{sin^2\Theta} + \frac{sin\varphi\ cos\varphi\ cos^2\Theta}{sin^2\Theta} + \frac{sin\varphi\ cos\varphi}{sin^2\Theta}\right)\frac{\partial}{\partial\varphi} +$$

$$\left(\frac{cos^2\varphi\ cos^2\Theta}{sin^2\Theta} + \frac{sin^2\varphi\ cos^2\Theta}{sin^2\Theta} + 1\right)\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} + \left(\frac{cos^2\varphi\ cos\Theta}{sin\Theta} + \frac{sin^2\varphi\ cos\Theta}{sin\Theta}\right)\frac{\partial}{\partial\Theta} +$$
$$(sin^2\varphi + cos^2\varphi)\frac{\partial^2}{\partial\Theta^2}] = -\hbar^2\left(\frac{1}{sin^2\Theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} + \frac{cos\Theta}{sin\Theta}\frac{\partial}{\partial\Theta} + \frac{\partial^2}{\partial\Theta^2}\right) =$$
$$-\hbar^2\left(\frac{1}{sin^2\Theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} + \frac{1}{sin\Theta}\left(cos\Theta\frac{\partial}{\partial\Theta} + sin\Theta\frac{\partial^2}{\partial\Theta^2}\right)\right) = -\hbar^2\left(\frac{1}{sin^2\Theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} + \frac{1}{sin\Theta}\frac{\partial}{\partial\Theta}sin\Theta\frac{\partial}{\partial\Theta}\right)$$

Příklad 27 Odvoďte pravděpodobnosti nalezení částice v daném prostorovém úhlu pro stavy s, p, d.

Řešení :

Vycházíme ze vztahů :

$$dw = |Y_{l,m}(\theta,\Phi)|^2 \, d\Omega$$

$$Y_{l,m}(\theta,\Phi) = \underbrace{C_{l,m}}_{cons} \underbrace{P_l^m(cos\theta)}_{polynom} \underbrace{e^{im\Phi}}_{cons} \qquad l \geq 0, |m| \leq l$$

$$P_l^m(cos\theta) = \frac{(1-cos^2\theta)^{\frac{m}{2}}}{2^l l!} \frac{d^{l+m}}{d\ cos\theta^{l+m}} (cos^2\theta - 1)^l$$

$$|C_{l,m}|^2 = \frac{(2l+1)(l-m)!}{4\pi(l+m)!}$$

Pro stavy s platí : $l = 0 \Rightarrow m = 0$

$$|C_{0,0}|^2 = \frac{(0+1)(0-0)!}{4\pi(0+0)!} = \frac{1}{4\pi}$$

$$P_0^0(cos\theta) = \frac{(1-cos^2\theta)^0}{2^0 0!} \frac{d^0}{d\ cos\theta^0} (cos^2\theta - 1)^0 = \frac{1}{1} 1 = 1$$

$$Y_{0,0}(\theta,\Phi) = C_{0,0} P_0^0(cos\theta) e^0 = \sqrt{\frac{1}{4\pi}}$$

$$dw = |Y_{0,0}(\theta,\Phi)|^2 \, d\Omega = \frac{1}{4\pi} d\Omega$$

Pro stavy p platí : $l = 1 \Rightarrow m = -1, 0, 1$

$$|C_{1,-1}|^2 = \frac{(2+1)2!}{4\pi 0!} = \frac{3}{2\pi}$$

$$|C_{1,0}|^2 = \frac{(2+1)1!}{4\pi 1!} = \frac{3}{4\pi}$$

$$|C_{1,1}|^2 = \frac{(2+1)0!}{4\pi 2!} = \frac{3}{8\pi}$$

$$P_1^{-1}(cos\theta) = \frac{(1-cos^2\theta)^{-\frac{1}{2}}}{2^1 1!} \frac{d^0}{d\ cos\theta^0} (cos^2\theta - 1)^1 = \frac{1}{2sin\theta}(-sin^2\theta) = -\frac{sin\theta}{2}$$

$$P_1^0(cos\theta) = \frac{(1-cos^2\theta)^0}{2^1 1!} \frac{d}{d\ cos\theta} (cos^2\theta - 1)^1 = \frac{1}{2} 2cos\theta = cos\theta$$

$$P_1^1(cos\theta) = \frac{(1-cos^2\theta)^{\frac{1}{2}}}{2^1 1!} \frac{d^2}{d\ cos\theta^2} (cos^2\theta - 1)^l = \frac{sin\theta}{2} 2 = sin\theta$$

$$Y_{1,-1}(\theta,\Phi) = C_{1,-1} P_1^{-1}(cos\theta) e^{-i\Phi} = -\sqrt{\frac{3}{2\pi}} \frac{sin\theta}{2} e^{-i\Phi}$$

$$Y_{1,0}(\theta,\Phi) = C_{1,0} P_1^0(cos\theta) e^0 = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} cos\theta$$

$$Y_{1,1}(\theta,\Phi) = C_{1,1}P_1^1(cos\theta)e^{i\Phi} = \sqrt{\frac{3}{8\pi}}sin\theta e^{i\Phi}$$

$$dw = \left|Y_{1,-1}(\theta,\Phi)\right|^2 d\Omega = \frac{3}{8\pi}sin^2\theta d\Omega$$

$$dw = \left|Y_{1,0}(\theta,\Phi)\right|^2 d\Omega = \frac{3}{4\pi}cos^2\theta d\Omega$$

$$dw = \left|Y_{1,-1}(\theta,\Phi)\right|^2 d\Omega = \frac{3}{8\pi}sin^2\theta d\Omega$$

Pro stavy d platí : $l = 2 \Rightarrow m = -2, -1, 0, 1, 2$

$$|C_{2,-2}|^2 = \frac{(4+1)4!}{4\pi 0!} = \frac{30}{\pi}$$

$$|C_{2,-1}|^2 = \frac{(4+1)3!}{4\pi 1!} = \frac{15}{2\pi}$$

$$|C_{2,0}|^2 = \frac{(4+1)2!}{4\pi 2!} = \frac{5}{4\pi}$$

$$|C_{2,1}|^2 = \frac{(4+1)1!}{4\pi 3!} = \frac{5}{24\pi}$$

$$|C_{2,2}|^2 = \frac{(4+1)0!}{4\pi 4!} = \frac{5}{96\pi}$$

$$P_2^{-2}(cos\theta) = \frac{(1-cos^2\theta)^{-1}}{2^2 2!}\frac{d^0}{d\ cos\theta^0}(cos^2\theta-1)^2 = \frac{1}{8sin^2\theta}(-sin^2\theta)^2 = \frac{sin^2\theta}{8}$$

$$P_2^{-1}(cos\theta) = \frac{(1-cos^2\theta)^{-\frac{1}{2}}}{2^2 2!}\frac{d}{d\ cos\theta}(cos^2\theta-1)^2 = \frac{1}{8sin\theta}(-4cos\theta sin^2\theta) = -\frac{cos\theta sin\theta}{2}$$

$$P_2^{0}(cos\theta) = \frac{(1-cos^2\theta)^{0}}{2^2 2!}\frac{d^2}{d\ cos\theta^2}(cos^2\theta-1)^2 = \frac{1}{8}(12cos^2\theta-4) = \frac{3cos^2\theta-1}{2}$$

$$P_2^{1}(cos\theta) = \frac{(1-cos^2\theta)^{\frac{1}{2}}}{2^2 2!}\frac{d^3}{d\ cos\theta^3}(cos^2\theta-1)^2 = \frac{sin\theta}{8}(24cos\theta) = 3sin\theta cos\theta$$

$$P_2^{2}(cos\theta) = \frac{(1-cos^2\theta)^{1}}{2^2 2!}\frac{d^4}{d\ cos\theta^4}(cos^2\theta-1)^2 = \frac{sin^2\theta}{8}24 = 3sin^2\theta$$

$$Y_{2,-2}(\theta,\Phi) = C_{2,-2}P_2^{-2}(cos\theta)e^{-i2\Phi} = \sqrt{\frac{30}{\pi}}\frac{sin^2\theta}{8}e^{-i2\Phi} = \sqrt{\frac{15}{32\pi}}sin^2\theta e^{-i2\Phi}$$

$$Y_{2,-1}(\theta,\Phi) = C_{2,-1}P_2^{-1}(cos\theta)e^{-i\Phi} = -\sqrt{\frac{15}{2\pi}}\frac{cos\theta}{2}e^{-i\Phi} = -\sqrt{\frac{15}{8\pi}}sin\theta cos\theta e^{-i\Phi}$$

$$Y_{2,0}(\theta,\Phi) = C_{2,0}P_2^{0}(cos\theta)e^{0} = \sqrt{\frac{5}{4\pi}}\frac{3cos^2\theta-1}{2} = \sqrt{\frac{5}{16\pi}}(3cos^2\theta-1)$$

$$Y_{2,1}(\theta,\Phi) = C_{2,1}P_2^{1}(cos\theta)e^{i\Phi} = \sqrt{\frac{5}{24\pi}}3sin\theta cos\theta e^{i\Phi} = \sqrt{\frac{15}{8\pi}}sin\theta cos\theta e^{i\Phi}$$

$$Y_{2,2}(\theta,\Phi) = C_{2,2}P_2^{2}(cos\theta)e^{i2\Phi} = \sqrt{\frac{5}{96\pi}}3sin^2\theta e^{i2\Phi} = \sqrt{\frac{15}{32\pi}}sin^2\theta e^{i2\Phi}$$

$$dw = \left|Y_{2,-2}(\theta,\Phi)\right|^2 d\Omega = \frac{15}{32\pi}sin^4\theta d\Omega$$

$$dw = \left|Y_{2,-1}(\theta,\Phi)\right|^2 d\Omega = \frac{15}{8\pi}sin^2\theta cos^2\theta d\Omega$$

$$dw = \left|Y_{2,0}(\theta,\Phi)\right|^2 d\Omega = \frac{5}{16\pi}(3cos^2\theta-1)^2 d\Omega$$

$$dw = \left|Y_{2,1}(\theta,\Phi)\right|^2 d\Omega = \frac{15}{8\pi}sin^2\theta cos^2\theta d\Omega$$

$$dw = \left|Y_{2,2}(\theta,\Phi)\right|^2 d\Omega = \frac{15}{32\pi}sin^4\theta d\Omega$$

Příklad 28 Napište všechny vlnové funkce harmonického oscilátoru pro stavy s energiemi $\frac{3}{2}\hbar\omega, \frac{5}{2}\hbar\omega, \frac{7}{2}\hbar\omega$

Řešení :

Vycházíme ze vztahu :

$$E = (n_1 + n_2 + n_3 + \tfrac{3}{2})\hbar\omega$$

Kulová funkce :

$$\begin{gathered} Y_{n_1,n_2,n_3} = Y_{n_1}(x_1).Y_{n_2}(x_2).Y_{n_3}(x_3) = C_{n_1,n_2,n_3}H_n \Rightarrow \\ \left|\xi_i = \sqrt{\tfrac{M\omega}{\hbar}}x_i; \xi^2 = \xi_1^2 + \xi_2^2 + \xi_3^2; n = n_1 + n_2 + n_3\right| \Rightarrow \\ C_{n_1,n_2,n_3}H_{n_1}(\xi_1)H_{n_2}(\xi_2)H_{n_3}(\xi_3)e^{-\frac{\xi^2}{2}}, \end{gathered}$$

kde

$$H_n(\xi_i) = \sum_{k=0}^{\left[\frac{n}{2}\right]}(-1)^k(2\xi_i)^{n-2k}\frac{n!}{k!(n-2k)!} \Rightarrow \left| \begin{array}{l} H_0(\xi_i) = 1 \\ H_1(\xi_i) = 2\xi_i \\ H_2(\xi_i) = 4\xi_i^2 - 2 \end{array} \right|$$

A) $E = \frac{3}{2}\hbar\omega \Rightarrow$

$$Y_{n_1,n_2,n_3} = Y_{0,0,0} = C_{0,0,0}H_0(\xi_1)H_0(\xi_2)H_0(\xi_3)e^{-\frac{\xi^2}{2}} = C_{0,0,0}e^{-\frac{\xi^2}{2}},$$

B) $E = \frac{5}{2}\hbar\omega \Rightarrow$

$$Y_{n_1,n_2,n_3} \Rightarrow \begin{array}{l} Y_{1,0,0} = C_{1,0,0}H_1(\xi_1)H_0(\xi_2)H_0(\xi_3)e^{-\frac{\xi^2}{2}} = 2C_{1,0,0}\xi_1 e^{-\frac{\xi^2}{2}} \\ Y_{0,1,0} = C_{0,1,0}H_0(\xi_1)H_1(\xi_2)H_0(\xi_3)e^{-\frac{\xi^2}{2}} = 2C_{0,1,0}\xi_2 e^{-\frac{\xi^2}{2}} \\ Y_{0,0,1} = C_{0,0,1}H_0(\xi_1)H_0(\xi_2)H_1(\xi_3)e^{-\frac{\xi^2}{2}} = 2C_{0,0,1}\xi_3 e^{-\frac{\xi^2}{2}} \end{array}$$

C) $E = \frac{7}{2}\hbar\omega \Rightarrow$

$$Y_{n_1,n_2,n_3} \Rightarrow \begin{array}{l} Y_{1,1,0} = C_{1,1,0}H_1(\xi_1)H_1(\xi_2)H_0(\xi_3)e^{-\frac{\xi^2}{2}} = 4C_{1,1,0}\xi_1\xi_2 e^{-\frac{\xi^2}{2}} \\ Y_{1,0,1} = C_{1,0,1}H_1(\xi_1)H_0(\xi_2)H_1(\xi_3)e^{-\frac{\xi^2}{2}} = 4C_{1,0,1}\xi_1\xi_3 e^{-\frac{\xi^2}{2}} \\ Y_{0,1,1} = C_{0,1,1}H_0(\xi_1)H_1(\xi_2)H_1(\xi_3)e^{-\frac{\xi^2}{2}} = 4C_{0,1,1}\xi_2\xi_3 e^{-\frac{\xi^2}{2}} \\ Y_{2,0,0} = C_{2,0,0}H_2(\xi_1)H_0(\xi_2)H_0(\xi_3)e^{-\frac{\xi^2}{2}} = C_{2,0,0}(4\xi_1^2 - 2)e^{-\frac{\xi^2}{2}} \\ Y_{0,2,0} = C_{0,2,0}H_0(\xi_1)H_2(\xi_2)H_0(\xi_3)e^{-\frac{\xi^2}{2}} = C_{0,2,0}(4\xi_2^2 - 2)e^{-\frac{\xi^2}{2}} \\ Y_{0,0,2} = C_{0,0,2}H_0(\xi_1)H_0(\xi_2)H_2(\xi_3)e^{-\frac{\xi^2}{2}} = C_{0,0,2}(4\xi_3^2 - 2)e^{-\frac{\xi^2}{2}} \end{array}$$

Příklad 29 Napište operátor $\hat{L}^2$ vyjádřený pomocí posunovacích operátorů $\hat{L}_\pm$ a $\hat{L}_3$

Řešení :

Platí :

$$\hat{L}^2 = \hat{L}_1^2 + \hat{L}_2^2 + \hat{L}_3^2$$

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

Vypočítáme :

$$\hat{L}_+\hat{L}_- = (\hat{L}_1 + i\hat{L}_2)(\hat{L}_1 - i\hat{L}_2) = \hat{L}_1^2 - i\hat{L}_1\hat{L}_2 + i\hat{L}_2\hat{L}_1 + \hat{L}_2^2 =$$
$$\hat{L}_1^2 + \hat{L}_2^2 + i[\hat{L}_2\hat{L}_1 - \hat{L}_1\hat{L}_2] = \hat{L}_1^2 + \hat{L}_2^2 + i[\hat{L}_2, \hat{L}_1] = \hat{L}_1^2 + \hat{L}_2^2 + i^2\hbar \underbrace{\epsilon_{2,1,3}}_{-1} \hat{L}_3 =$$
$$\hat{L}_1^2 + \hat{L}_2^2 + \hbar\hat{L}_3 \Rightarrow \hat{L}_1^2 + \hat{L}_2^2 = \hat{L}_+\hat{L}_- - \hbar\hat{L}_3$$

Dosadíme do $\hat{L}^2$:

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

Dále spočítáme :

$$[\hat{L}_+\hat{L}_-] = \hat{L}_+\hat{L}_- - \hat{L}_-\hat{L}_+ = [\hat{L}_1 + i\hat{L}_2, \hat{L}_1 - i\hat{L}_2] = \underbrace{[\hat{L}_1, \hat{L}_1]}_{0} - i[\hat{L}_1, \hat{L}_2] +$$
$$i[\hat{L}_2, \hat{L}_1] + \underbrace{[\hat{L}_2, \hat{L}_2]}_{0} = -i(i\hbar\epsilon_{1,2,3}\hat{L}_3 - i\hbar\epsilon_{2,1,3}\hat{L}_3) = 2\hbar\hat{L}_3 \Rightarrow \hat{L}_+\hat{L}_- = \hat{L}_-\hat{L}_+ + 2\hbar\hat{L}_3$$

Opět dosadíme :

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

Příklad 30 Posunovací operátory momentu hybnosti působí na kulové funkce způsobem :

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

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

Řešení :

Poznámka : $\begin{array}{l}\hat{L}_{+}\psi_{11} = 0\\ \hat{L}_{-}\psi_{1-1} = 0\end{array}$

Vycházíme ze vztahů :

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

$$\langle A\rangle_{\psi} = \frac{\langle\psi, A\psi\rangle}{\|\psi\|}$$

$$\hat{L}^2\psi_{lm} = l(l+1)\hbar\psi_{lm}$$

$$\left\langle\hat{L}^2\right\rangle_{\psi_{lm}} = l(l+1)\hbar^2$$

Na našem případě :

$$\left\langle\hat{L}^2\right\rangle_{\psi_{l,m}} = \frac{\left\langle\psi_{l,m}, \hat{L}^2\psi_{l,m}\right\rangle}{\underbrace{\|\psi_{l,m}\|}_{1}} = \left\langle\psi_{l,m}, \hat{L}^2\psi_{l,m}\right\rangle = \left\langle\psi_{l,m}, (\hat{L}_3^2 + \hat{L}_+\hat{L}_- - \hbar\hat{L}_3)\psi_{l,m}\right\rangle =$$

$$\left\langle\psi_{l,m}, \underbrace{\hat{L}_3^2\psi_{l,m}}_{m^2\hbar^2\psi_{l,m}}\right\rangle + \left\langle\psi_{l,m}, \hat{L}_+\hat{L}_-\psi_{l,m}\right\rangle - \hbar\left\langle\psi_{l,m}, \underbrace{\hat{L}_3\psi_{l,m}}_{\hbar m\psi_{l,m}}\right\rangle =$$

$$m^2\hbar^2\underbrace{\langle\psi_{l,m}, \psi_{l,m}\rangle}_{1} + \left\langle\hat{L}_-\psi_{l,m}, \hat{L}_-\psi_{l,m}\right\rangle - m\hbar^2\underbrace{\langle\psi_{l,m}, \psi_{l,m}\rangle}_{1} =$$

$$|\alpha^{-}_{lm}|^2\underbrace{\langle\psi_{l,m-1}, \psi_{l,m-1}\rangle}_{1} + m^2\hbar^2 - m\hbar^2$$

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

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

$$\left\langle\hat{L}^2\right\rangle_{\psi_{l,m}} = \left\langle\psi_{l,m}, (\hat{L}_3^2 + \hat{L}_-\hat{L}_+ + \hbar\hat{L}_3)\psi_{l,m}\right\rangle = m^2\hbar^2 + \left\langle\hat{L}_+\psi_{l,m}, \hat{L}_+\psi_{l,m}\right\rangle + m\hbar^2 =$$

$$|\alpha^{+}_{lm}|^2\underbrace{\langle\psi_{l,m+1}, \psi_{l,m+1}\rangle}_{1} + m^2\hbar^2 + m\hbar^2$$

$$|\alpha^{+}_{lm}|^2 + m^2\hbar^2 + m\hbar^2 = l(l+1)\hbar^2$$

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

Příklad 31 Kreační a anihilační operátory působící na vlastní funkce operátoru energie harmonického oscilátoru způsobem

$$\hat{a}_{\pm}\psi_n = \alpha_n^{\pm}\psi_{n\pm1}.$$

Spočítejte koeficienty $\alpha_n^{\pm}$.

Řešení :

Vycházíme ze vztahů :

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

$$\hat{H} = \tfrac{1}{2M}\hat{P}^2 + \tfrac{M\omega^2}{2}\hat{X}^2$$

$$\hat{a}_{+}^{+} = \hat{a}_{-}$$

$$\hat{a}_{-}^{+} = \hat{a}_{+}$$

$$\left[\hat{X}, \hat{X}\right] = 0$$

$$\left[\hat{P}, \hat{P}\right] = 0$$

$$\left[\hat{X}, \hat{P}\right] = -\left[\hat{P}, \hat{X}\right] = i\hbar$$

A) Vypočítáme $[\hat{a}_+, \hat{a}_-]$ a $[\hat{a}_-, \hat{a}_+]$:

$$[\hat{a}_+, \hat{a}_-] = \left(\sqrt{\tfrac{M\omega}{2\hbar}}\right)^2 \left[\hat{X} - \tfrac{i}{M\omega}\hat{P}, \hat{X} + \tfrac{i}{M\omega}\hat{P}\right] =$$

$$\tfrac{M\omega}{2\hbar}\left(\underbrace{\left[\hat{X}, \hat{X}\right]}_{0} + \tfrac{i}{M\omega}\underbrace{\left[\hat{X}, \hat{P}\right]}_{i\hbar} - \tfrac{i}{M\omega}\underbrace{\left[\hat{P}, \hat{X}\right]}_{-i\hbar} + \tfrac{1}{M^2\omega^2}\underbrace{\left[\hat{P}, \hat{P}\right]}_{0}\right) = \tfrac{M\omega}{2\hbar}\tfrac{i^2 2\hbar}{M\omega} = -1$$

$$[\hat{a}_-, \hat{a}_+] = \left(\sqrt{\tfrac{M\omega}{2\hbar}}\right)^2 \left[\hat{X} + \tfrac{i}{M\omega}\hat{P}, \hat{X} - \tfrac{i}{M\omega}\hat{P}\right] =$$

$$\tfrac{M\omega}{2\hbar}\left(\underbrace{\left[\hat{X}, \hat{X}\right]}_{0} - \tfrac{i}{M\omega}\underbrace{\left[\hat{X}, \hat{P}\right]}_{i\hbar} + \tfrac{i}{M\omega}\underbrace{\left[\hat{P}, \hat{X}\right]}_{-i\hbar} + \tfrac{1}{M^2\omega^2}\underbrace{\left[\hat{P}, \hat{P}\right]}_{0}\right) = -\tfrac{M\omega}{2\hbar}\tfrac{i^2 2\hbar}{M\omega} = 1$$

Tento výpočet je také možný z $\left[\hat{A}, \hat{B}\right] = \left(\hat{A}\hat{B} - \hat{A}\hat{B}\right)$

B) Vypočítáme $\hat{a}_+\hat{a}_-$, $\hat{a}_-\hat{a}_+$ a $(\hat{a}_+\hat{a}_- + \hat{a}_-\hat{a}_+)$:

$$\hat{a}_+\hat{a}_- = \tfrac{M\omega}{2\hbar}\left(\hat{X} - \tfrac{i}{M\omega}\hat{P}\right)\left(\hat{X} + \tfrac{i}{M\omega}\hat{P}\right) =$$
$$\tfrac{M\omega}{2\hbar}\left(\hat{X}^2 + \tfrac{i}{M\omega}\hat{X}\hat{P} - \tfrac{i}{M\omega}\hat{P}\hat{X} + \tfrac{1}{M^2\omega^2}\hat{P}^2\right) =$$
$$\tfrac{M\omega}{2\hbar}\left(\hat{X}^2 + \tfrac{i}{M\omega}\left(\hat{X}\hat{P} - \hat{P}\hat{X}\right) + \tfrac{1}{M^2\omega^2}\hat{P}^2\right) = \tfrac{M\omega}{2\hbar}\left(\hat{X}^2 + \tfrac{i}{M\omega}\underbrace{\left[\hat{X}, \hat{P}\right]}_{i\hbar} + \tfrac{1}{M^2\omega^2}\hat{P}^2\right) =$$
$$\tfrac{M\omega}{2\hbar}\left(\hat{X}^2 - \tfrac{\hbar}{M\omega} + \tfrac{1}{M^2\omega^2}\hat{P}^2\right)$$

$$\hat{a}_-\hat{a}_+ = \frac{M\omega}{2\hbar}\left(\hat{X} + \frac{i}{M\omega}\hat{P}\right)\left(\hat{X} - \frac{i}{M\omega}\hat{P}\right) =$$
$$\frac{M\omega}{2\hbar}\left(\hat{X}^2 - \frac{i}{M\omega}\hat{X}\hat{P} + \frac{i}{M\omega}\hat{P}\hat{X} + \frac{1}{M^2\omega^2}\hat{P}^2\right) =$$
$$\frac{M\omega}{2\hbar}\left(\hat{X}^2 - \frac{i}{M\omega}\left(\hat{X}\hat{P} - \hat{P}\hat{X}\right) + \frac{1}{M^2\omega^2}\hat{P}^2\right) = \frac{M\omega}{2\hbar}\left(\hat{X}^2 - \frac{i}{M\omega}\underbrace{\left[\hat{X},\hat{P}\right]}_{i\hbar} + \frac{1}{M^2\omega^2}\hat{P}^2\right) =$$
$$\frac{M\omega}{2\hbar}\left(\hat{X}^2 + \frac{\hbar}{M\omega} + \frac{1}{M^2\omega^2}\hat{P}^2\right)$$

$$\hat{a}_+\hat{a}_- + \hat{a}_-\hat{a}_+ = \frac{M\omega}{2\hbar}\left(\hat{X}^2 - \frac{\hbar}{M\omega} + \frac{1}{M^2\omega^2}\hat{P}^2\right) + \frac{M\omega}{2\hbar}\left(\hat{X}^2 + \frac{\hbar}{M\omega} + \frac{1}{M^2\omega^2}\hat{P}^2\right) =$$
$$\frac{M\omega}{\hbar}\left(\hat{X}^2 + \frac{1}{M^2\omega^2}\hat{P}^2\right) = \frac{2}{\hbar\omega}\left(\frac{M\omega^2}{2}\hat{X}^2 + \frac{1}{2M}\hat{P}^2\right) = \frac{2}{\hbar\omega}\hat{H} \Rightarrow \hat{H} = \frac{\hbar\omega}{2}\left(\hat{a}_+\hat{a}_- + \hat{a}_-\hat{a}_+\right)$$

$$[\hat{a}_+, \hat{a}_-] = \hat{a}_+\hat{a}_- - \hat{a}_-\hat{a}_+ = -1 \Rightarrow \left|\begin{array}{l} \hat{a}_-\hat{a}_+ = \hat{a}_+\hat{a}_- + 1 \\ \hat{a}_+\hat{a}_- = \hat{a}_-\hat{a}_+ - 1 \end{array}\right| \Rightarrow$$

$$\hat{H} = \hbar\omega\left(\hat{a}_+\hat{a}_- + \tfrac{1}{2}\right) = \hbar\omega\left(\hat{a}_-\hat{a}_+ - \tfrac{1}{2}\right)$$

Obložíme $\hat{H}$ vlastní funkcí harmonického oscilátoru :

$$(\psi_n, \hat{H}\psi_n) = \hbar\omega[(\psi_n, \hat{a}_+\hat{a}_-\psi_n) + \tfrac{1}{2}\underbrace{(\psi_n, \psi_n)}_{1}] = \hbar\omega[(\hat{a}_+^+\psi_n, \hat{a}_-\psi_n) + \tfrac{1}{2}] =$$
$$\hbar\omega[\underbrace{\underbrace{\underbrace{(\hat{a}_-\psi_n, \hat{a}_-\psi_n)}_{(\alpha_n^-\psi_{n-1}, \alpha_n^-\psi_{n-1})}}_{|\alpha_n^-|^2 \underbrace{(\psi_{n-1}, \psi_{n-1})}_{1}}} + \tfrac{1}{2}] = \hbar\omega[|\alpha_n^-|^2 + \tfrac{1}{2}] = \hbar\omega(n + \tfrac{1}{2}) \Rightarrow |\alpha_n^-|^2 = n \Rightarrow \alpha_n^- = \sqrt{n}$$

$$(\psi_n, \hat{H}\psi_n) = \hbar\omega[(\psi_n, \hat{a}_-\hat{a}_+\psi_n) - \tfrac{1}{2}\underbrace{(\psi_n, \psi_n)}_{1}] = \hbar\omega[(\hat{a}_-^+\psi_n, \hat{a}_+\psi_n) + \tfrac{1}{2}] =$$
$$\hbar\omega[\underbrace{\underbrace{\underbrace{(\hat{a}_+\psi_n, \hat{a}_+\psi_n)}_{(\alpha_n^+\psi_{n+1}, \alpha_n^+\psi_{n+1})}}_{|\alpha_n^+|^2 \underbrace{(\psi_{n+1}, \psi_{n+1})}_{1}}} - \tfrac{1}{2}] = \hbar\omega[|\alpha_n^+|^2 - \tfrac{1}{2}] = \hbar\omega((n+1) - \tfrac{1}{2}) \Rightarrow |\alpha_n^+|^2 =$$
$$n + 1 \Rightarrow \alpha_n^+ = \sqrt{n+1}$$

Příklad 32 Ukažte, že pro kreační a anihilační operátory energie harmonického oscilátoru platí :

$$\hat{a}_+\hat{a}_-\psi_n = n\psi_n$$

Řešení :

Vycházíme z příkladu č. 31 :

$$\hat{a}_\pm\psi_n = \alpha_n^\pm\psi_{n\pm1}$$

$$\alpha_n^- = \sqrt{n}$$

$$\alpha_n^+ = \sqrt{n+1}$$

Upravujeme :

$$\hat{a}_+(\hat{a}_-\psi_n) = \hat{a}_+(\alpha_n^-\psi_{n-1}) = \hat{a}_+(\sqrt{n}\psi_{n-1}) = \sqrt{n}(\hat{a}_+\psi_{n-1}) = \sqrt{n}(\alpha_{n-1}^+\psi_{n-1+1}) = \sqrt{n}\sqrt{n-1+1}\psi_n = n\psi_n$$

Příklad 33 Spočtěte střední hodnoty složek hybnosti kvantové částice v Coulombově poli s energií $-\frac{MQ^2}{2\hbar^2}$ a nulovým momentem hybnosti (elektron v atomu vodíku ve stavu 1s)

Řešení :

Vycházíme ze vztahů :

$$E = -\frac{MQ^2}{2\hbar^2}$$

$$V(r) = -\frac{Q}{r}$$

Bohrův poloměr : $a = \frac{\hbar^2}{|Q|M}$

$P_0^0(cos\theta) = 1$(viz. příklad č. 27)

Zobecněné Laguerrovy polynomy : $L_n^b(z) = \frac{1}{n!}e^z z^{-b}\frac{d^n}{dz^n}(e^{-z}z^{n+b})$

Stačí spočítat $\left\langle \hat{P}_1 \right\rangle_{\Psi_{100}}$, ostatní složky jsou kulově symetrické :

$$\Psi_{nlm}(r,\vartheta,\varphi) = C_{nlm}\, r^l\, e^{-\frac{r}{na}}\, L_{n-l-1}^{2l+1}\left(\frac{2r}{n\ a}\right) P_l^m(cos\vartheta)e^{im\varphi}$$

$$\Psi_{100}(r,\vartheta,\varphi) = C_{100}\, r^0\, e^{-\frac{r}{a}}\ \underbrace{L_0^1\left(\frac{2r}{a}\right)}_{1}\underbrace{P_0^0(cos\vartheta)}_{1}e^0 = C_{100}\, e^{-\frac{r}{a}}$$

$$\left\langle \hat{P}_1 \right\rangle_{\Psi_{100}} = (\Psi_{100}, \hat{P}_1\ \Psi_{100})$$

Z příkladu č. 24 víme :

$$\hat{P}_1 = -i\hbar\left(sin(\vartheta)cos(\varphi)\frac{\partial}{\partial r} - \frac{sin(\varphi)}{r\ sin(\vartheta)}\frac{\partial}{\partial\varphi} + \frac{cos(\vartheta)cos(\varphi)}{r}\frac{\partial}{\partial\vartheta}\right)$$

A tedy :

$$\hat{P}_1\Psi_{100} = \frac{i\hbar C_{100}}{a}sin(\vartheta)cos(\varphi)\ e^{-\frac{r}{a}}$$

Použitím sférických souřadnic (Jakobián = $r^2sin(\vartheta)$) získáváme rovnici :

$$\left\langle \hat{P}_1 \right\rangle_{\Psi_{100}} = \int_0^\infty\int_0^\pi\int_0^{2\pi} \overline{\Psi_{100}}\ \hat{P}_1\Psi_{100}\ r^2 sin(\vartheta)\ dr\ d\vartheta\ d\varphi =$$
$$\int_0^\infty\int_0^\pi\int_0^{2\pi} \frac{i\hbar C_{100}^2}{a}\ e^{-2\frac{r}{a}}\ r^2 sin^2(\vartheta)cos(\varphi)\ dr\ d\vartheta\ d\varphi =$$
$$[sin(\varphi)]_0^{2\pi}\int_0^\infty\int_0^\pi \frac{i\hbar C_{100}^2}{a}\ e^{-2\frac{r}{a}}\ r^2 sin^2(\vartheta)\ dr\ d\vartheta = 0$$

Tento výsledek jsme očekávali - neboť $\left\langle \hat{P}_1 \right\rangle_{\Psi_{100}} = i\int$ reálná funkce $= i$reálná fukce $=$ komplexní fukce (ryze imaginární číslo), ale $\left\langle \hat{P}_1 \right\rangle_{\Psi_{100}} \in R$ vždycky $\rightarrow$ samozdružený operátor $\rightarrow$ není význačný směr $\Rightarrow \left\langle \hat{P}_2 \right\rangle_{\Psi_{100}} = 0$ a $\left\langle \hat{P}_3 \right\rangle_{\Psi_{100}} = 0$.

Příklad 34 Spočtěte střední hodnoty složek polohy kvantové částice popsané vlnovou funkcí

$$\Psi(\vec{x}, t_0) = g(\vec{x}) = Ce^{-Ax^2+\vec{B}\vec{x}}$$

Řešení :

Předpokládáme :

$$A \in C$$

$$Re(A) > 0$$

Vycházíme ze vztahů :

$$\int_R |C|^2 e^{-(Ax^2-\vec{B}\vec{x})}\ d^3x = |C|^2 \sqrt{\tfrac{\pi}{A}} e^{\frac{\vec{B}^2}{4A}}$$

$$\int_R x_i |C|^2 e^{-(Ax^2-\vec{B}\vec{x})}\ d^3x = |C|^2 \sqrt{\tfrac{\pi}{A}} \left(\frac{\vec{B}}{2A}\right) e^{\frac{\vec{B}^2}{4A}}$$

Střední hodnoty složek polohy :

$$\left\langle \hat{X}_i \right\rangle_\Psi = \int_{R^3} x_i\ \omega(\vec{x})\ d^3x = \frac{\int_{R^3} x_i |\Psi(\vec{x})|^2\ d^3x}{\int_{R^3} |\Psi(\vec{x})|^2\ d^3x}$$

Spočteme si, čemu se rovná $|\Psi(\vec{x})|^2$:

$$|\Psi(\vec{x})|^2 = |C|^2 e^{-Ax^2+\vec{B}\vec{x}}\ .\ e^{-\bar{A}x^2+\bar{\vec{B}}\vec{x}} =$$
$$|C|^2 e^{-Re(A)x^2-Im(A)x^2+Re(B_i)\vec{x}+Im(B_i)\vec{x}-Re(A)x^2+Im(A)x^2+Re(B_i)\vec{x}-Im(B_i)\vec{x}} =$$
$$|C|^2 e^{-Re(A)x^2+Re(B_i)\vec{x}-Re(A)x^2+Re(B_i)\vec{x}} = |C|^2 e^{-2Re(Ax^2-B_i\vec{x})}$$

Dosadíme zpět a vypočteme integrál (pozor integrujeme přes R^3 !!!) :

$$\left\langle \hat{X}_i \right\rangle_\Psi = \frac{\int_{R^3} x_i |\Psi(\vec{x})|^2\ d^3x}{\int_{R^3} |\Psi(\vec{x})|^2\ d^3x} = \frac{|C|^6 \left(\sqrt{\frac{\pi}{2Re(A)}}\right)^3 \left(e^{\frac{(2Re(B_i))^2}{8Re(A)}}\right)^3 \frac{2Re(B_i)}{4Re(A)}}{|C|^6 \left(\sqrt{\frac{\pi}{2Re(A)}}\right)^3 \left(e^{\frac{(2Re(B_i))^2}{8Re(A)}}\right)^3} = \frac{Re(B_i)}{2Re(A)}$$

Příklad 35 Spočtěte střední hodnoty složek hybnosti kvantové částice popsané vlnovou funkcí

$$\Psi(\vec{x},t_0) = Ce^{-Ax^2+\vec{B}\vec{x}},$$

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

Napište tvar této funkce popisující vlnový balík se střední hodnotou hybnosti $\vec{p}_0$, který má v čase t_0 střední hodnotu polohy $\vec{x}_0$.

Řešení :

Vyjdeme ze vztahů :

$$\Psi(\vec{x},t_0) = Ce^{-Ax^2+\vec{B}\vec{x}},$$

$$\hat{P}_j\Psi = -i\hbar\frac{\partial\ \Psi}{\partial\ x_j} = -i\hbar\left(Ce^{-Ax^2+\vec{B}\vec{x}}\right)(-2Ax_j+B_j),$$

$$\left\langle \hat{A}\right\rangle_\Psi = \frac{(\Psi,\hat{A}\Psi)}{\|\Psi\|^2}$$

Dále vypočítáme $\left\langle \hat{P}_j\right\rangle_\Psi$ (musí být reálné číslo $\Rightarrow$ integrujeme přes R) :

$$\left\langle \hat{P}_j\right\rangle_\Psi = \frac{(\Psi,\hat{P}_j\Psi)}{\|\Psi\|^2} = \frac{\int\limits_{R^3}\bar{\Psi}\hat{P}_j\Psi\ dx^3}{\int\limits_{R^3}\bar{\Psi}\Psi\ dx^3} = \frac{\int\limits_{R^3}\bar{\Psi}(-i\hbar(-2Ax_j+B_j))\Psi\ dx^3}{\int\limits_{R^3}\bar{\Psi}\Psi\ dx^3}\ \ |^* =$$

$$\frac{C^2}{C^2}\frac{\int\limits_R -i\hbar(-2Ax_j+B_j)e^{-(A+\bar{A})x_j^2+\left(B_j+\bar{B}_j\right)}\ dx_j}{\int\limits_R e^{-(A+\bar{A})x_j^2+\left(B_j+\bar{B}_j\right)}\ dx_j} =$$

$$i\hbar 2A\frac{\int\limits_R x_je^{-(A+\bar{A})x_j^2+\left(B_j+\bar{B}_j\right)}\ dx_j}{\int\limits_R e^{-(A+\bar{A})x_j^2+\left(B_j+\bar{B}_j\right)}\ dx_j} - i\hbar B_j\frac{\int\limits_R e^{-(A+\bar{A})x_j^2+\left(B_j+\bar{B}_j\right)}\ dx_j}{\int\limits_R e^{-(A+\bar{A})x_j^2+\left(B_j+\bar{B}_j\right)}\ dx_j}$$

$|^*$ integrací přes ostatní složky $k \neq j$ dostaneme $1 \Rightarrow$ integrujeme pouze přes R.

Za pomoci výsledku z př. č. 34 můžeme psát :

$$\left\langle \hat{P}_j\right\rangle_\Psi = i\hbar 2A\left\langle x_j\right\rangle - i\hbar B_j = \frac{i\hbar 2A\ Re(B_j)}{2\ Re(A)} - i\hbar B_j\ \ |^* = i\hbar\left(Re(B_j - B_j\right) = \hbar\ Im(B_j)$$

$|^*$ pro A $\in R^+$

Označíme :

$$\begin{matrix}\vec{P}_0 = \left\langle \hat{P}\right\rangle \\ \vec{x}_0 = \left\langle \hat{X}\right\rangle\end{matrix}\ \Rightarrow \vec{B},$$

a tedy :

$$\begin{matrix}\vec{P}_{0j} = \hbar\ Im(B_j) \\ \vec{x}_{0j} = \frac{Re(B_j)}{2A}\end{matrix}\ \Rightarrow \vec{B} = \underbrace{2A\vec{x}_{0j}}_{Re(B_j)} + i\underbrace{\frac{\vec{P}_{0j}}{\hbar}}_{Im(B_j)}$$

$$\Psi(x_0,t_0) = CX^{-\frac{3}{2}}(t)e^{\frac{B^2}{4A}}e^{-A\frac{(\vec{x}-\frac{\vec{B}}{2A})^2}{X(t)}}$$

Příklad 36 Určete pravděpodobnost nalezení hybnosti částice popsané vlnovou funkcí

$$\Psi(x) = C\ e^{-\vec{x}^2 + ix_1}$$

v intervalu $J = (a_1, b_1) \times (a_2, b_2) \times (a_3, b_3)$. Určete hustotu pravděpodobnosti nalezení hybnosti v okolí hodnoty $\hat{p}_0$.

Řešení :

Vycházíme ze vztahů :

- de Brougliho vlna :

$$\Psi_{\vec{p}} = Ae^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\vec{x}}$$

- výpočet integrálu :

$$I(n,a,b) = \int_R x^n e^{-ax^2+bx} = e^{\frac{b^2}{4a}} \sum_{j=0}^{\left[\frac{n}{2}\right]} \left(\frac{b}{2a}\right)^{n-2j} \frac{n!\sqrt{\pi}}{(n-2j)!\ j!\ 2^{2j}\ a^{j+\frac{1}{2}}}$$

Hledáme pravděpodobnost $P_{\hat{p}\,\in J}$ (= pravděpodobnost přechodu z Ψ do Ψ_p).

- hustota pravděpodobnosti nalezení dané hybnosti $\vec{p}$:

$$\rho_{\vec{p}} = \frac{|(\Psi,\Psi_{\vec{p}})|^2}{|(\Psi,\Psi)|\ |(\Psi_{\vec{p}},\Psi_{\vec{p}})|}$$

- pravděpodobnost nalezení hybnosti z intervalu, přes který integrujeme (jednotlivé pravděpodobnosti se sčítají, zde jich je ale nekonečne mnoho, proto integrujeme; pokud bychom integrovali přes celé R^3 museli bychom dostat 1)

$$P_{\vec{p}\,\in J} = \int_J \rho_{\vec{p}}\, d^3p = \int_J \frac{|(\Psi,\Psi_{\vec{p}})|^2}{|(\Psi,\Psi)|\ |(\Psi_{\vec{p}},\Psi_{\vec{p}})|}\, d^3p =$$

$$\left|\begin{array}{l}
(\Psi,\Psi_{\vec{p}}) = \int_{R^3} Ce^{-\vec{x}^2+ix_1}\ Ae^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\vec{x}}\, d^3x = CA \int_{R^3} e^{-\vec{x}^2+i\left(x_1+\frac{1}{\hbar}\vec{p}\vec{x}\right)}\, d^3x = \\
CA \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x_1^2+i\left(1+\frac{1}{\hbar}p_1\right)x_1}\, dx_1 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x_2^2+\frac{i}{\hbar}p_2x_2}\, dx_2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x_3^2+\frac{i}{\hbar}p_3x_3}\, dx_3 = \\
CA\left(\sqrt{\pi}\right)^3 e^{i^2\frac{\left(1+\frac{1}{\hbar}p_1\right)^2}{4} + i^2\frac{p_2^2}{4\hbar^2} + i^2\frac{p_3^2}{4\hbar^2}} = CA\left(\sqrt{\pi}\right)^3 e^{-\frac{(\hbar+p_1)^2}{4\hbar^2} - \frac{p_2^2}{4\hbar^2} - \frac{p_3^2}{4\hbar^2}} \\
\Rightarrow |Substituce : \vec{k} = (1,0,0)| \Rightarrow CA\left(\sqrt{\pi}\right)^3 e^{-\frac{\left(\vec{k}-\frac{\vec{p}}{\hbar}\right)^2}{4}} \\
(\Psi_{\vec{p}},\Psi_{\vec{p}}) = \int_{R^3} |A|^2 e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\vec{x}}\overline{e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\vec{x}}}\, d^3x \to \infty\ ...\ nelze,\ ale\ z\ w_{\vec{p}\in R^3} = 1 \\
(\Psi_{\vec{p}},\Psi_{\vec{p}}) = |A|^2 8\hbar^3\pi^3 \\
(\Psi,\Psi) = \int_{R^3} |C|^2 e^{-x_1^2+i\left(1+\frac{1}{\hbar}p_1\right)x_1}\overline{e^{-x_1^2+i\left(1+\frac{1}{\hbar}p_1\right)x_1}}\, d^3x = \int_{R^3} |C|^2 e^{-2\vec{x}^2} = \\
|C|^2\left(\sqrt{\frac{\pi}{2}}\right)^3
\end{array}\right| =$$

$$\int_J \frac{|C|^2|A|^2\ \left(\sqrt{\pi}\right)^6 e^{-2\frac{\left(\vec{k}-\frac{\vec{p}}{\hbar}\right)^2}{4}}}{|C|^2\left(\sqrt{\frac{\pi}{2}}\right)^3\ |A|^2 8\hbar^3\pi^3}\, d^3\vec{p} = \int_J \frac{e^{-2\frac{\left(\vec{k}-\frac{\vec{p}}{\hbar}\right)^2}{4}}}{\left(\sqrt{2\pi}\hbar\right)^2}\, d^3\vec{p}$$

Příklad 37 Nechť "jednorozměrná" částice s hmotou M v potenciálu harmonického oscilátoru s vlastní frekvencí $\omega = \frac{h}{M}$ je ve stavu popsaném vlnovou funkcí

$$\Psi(x) = C\ e^{-x^2+ix}.$$

S jakou pravděpodobností naměříme hodnoty její energie rovné $\frac{1}{2}h\omega$ (1) resp. $h\omega$ (2), $\frac{3}{2}h\omega$ (3)?

Řešení :

Jedná se o úlohu jednorozměrného harmonického oscilátoru.

Vycházíme ze vztahů :

$$\Psi_n = A_n e^{-\frac{\xi^2}{2}} H_n(\xi) = \left| \xi = \sqrt{\frac{M\omega}{\hbar}} x = \sqrt{\frac{M\hbar}{\hbar M}} x = x \right| = A_n e^{-\frac{x^2}{2}} H_n(x)$$

$$H_n(x) = \sum_{k=0}^{\left[\frac{n}{2}\right]} (-1)^k (2x)^{n-2k} \frac{n!}{k!(n-2k)!} \Rightarrow \left| \begin{array}{l} H_0(x) = 1 \\ H_1(x) = 2x \\ H_2(x) = 4x^2 - 2 \end{array} \right|$$

$$I(0,a,b) = \int_R e^{-ax^2+bx} = e^{\frac{b^2}{4a}} \sqrt{\frac{\pi}{a}}$$

$$I(1,a,b) = \int_R x e^{-ax^2+bx} = e^{\frac{b^2}{4a}} \left(\frac{b}{2a}\right) \sqrt{\frac{\pi}{a}}$$

1 .

$$E_1 = \frac{1}{2}\hbar\omega$$

$$\Psi_0 = A_0 e^{-\frac{x^2}{2}}$$

$$P_1 = \frac{|(\Psi,\Psi_0)|^2}{(\Psi,\Psi)(\Psi_0,\Psi_0)} = \frac{\left|\int C e^{-x^2+ix} A_0 e^{-\frac{x^2}{2}}\ dx\right|^2}{\int |C|^2 e^{-2x^2}\ dx\ \int |A_0|^2 e^{-x^2}\ dx} = \frac{\left|\int e^{-\frac{3}{2}x^2+ix}\ dx\right|^2}{\sqrt{\frac{\pi}{2}}\sqrt{\pi}} = \frac{2\sqrt{2}}{3} e^{-\frac{1}{3}}$$

2 .

$P_2 = 0 \Rightarrow$ energie $E_2 = \hbar\omega$ neleží ve spektru.

3 .

$$E_3 = \frac{3}{2}\hbar\omega$$

$$\Psi_1 = A_1 e^{-\frac{x^2}{2}} 2x$$

$$P_3 = \frac{|(\Psi,\Psi_1)|^2}{(\Psi,\Psi)(\Psi_1,\Psi_1)} = \frac{\left|\int C e^{-x^2+ix} A_1 e^{-\frac{x^2}{2}} 2x\ dx\right|^2}{\int |C|^2 e^{-2x^2}\ dx\ \int |A_1|^2 4x^2 e^{-x^2}\ dx} = \frac{\left|\int 2x e^{-\frac{3}{2}x^2+ix}\ dx\right|^2}{\sqrt{\frac{\pi}{2}} 2\sqrt{\pi}} = \frac{4\sqrt{2}}{27} e^{-\frac{1}{3}}$$

Příklad 38 Nechť částice s hmotou M v potenciálu harmonického osciátoru s vlastní frekvencí $\omega = \frac{\hbar}{M}$ je ve stavu popsaném vlnovou funkcí :

$$\Psi(x) = C\ e^{-x^2+ix_1}.$$

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

Řešení :

Jedná se o úlohu trojrozměrného harmonického oscilátoru. $\Rightarrow E = \left(n_1 + n_2 + n_3 + \frac{3}{2}\right)\hbar\omega$

V úvahu připadají tyto možnosti :

$$\vec{k} = \{n_1, n_2, n_3\} = \{(1,0,0); (0,1,0); (0,0,1)\}$$

Celková pravděpodobnost je pak :

$$P = \sum_k \frac{|(\Psi, \Psi_k)|^2}{(\Psi,\Psi)(\Psi_k,\Psi_k)}$$

Z příkladu č. 28 víme :

$$\Psi_{100} = 2\ C_{100}\ x_1\ e^{-\frac{x^2}{2}}$$

$$\Psi_{010} = 2\ C_{010}\ x_2\ e^{-\frac{x^2}{2}}$$

$$\Psi_{001} = 2\ C_{001}\ x_3\ e^{-\frac{x^2}{2}}$$

Neboť :

$$\xi = \sqrt{\frac{M\omega}{\hbar}}x = \sqrt{\frac{M\hbar}{\hbar M}}x = x$$

Abychom vypočítali celkovou pravděpodobnost musíme určit :

$$(\Psi_{100}, \Psi_{100}) = \int\limits_{R^3} |C_{100}|^2 4x_1^2 \left(e^{-\frac{x^2}{2}}\right)^2 d^3x = 4|C_{100}|^2 \int\limits_{R^3} x_1^2 e^{-x^2} d^3x =$$
$$4|C_{100}|^2 \int\limits_{-\infty}^{\infty} x_1^2 e^{-x_1^2} dx_1 \int\limits_{-\infty}^{\infty} e^{-x_2^2} dx_2 \int\limits_{-\infty}^{\infty} e^{-x_3^2} dx_3 = 4|C_{100}|^2 \frac{1}{2}\sqrt{\pi}(\sqrt{\pi})^2$$

Stejně tak :

$$(\Psi_{010}, \Psi_{010}) = 4|C_{010}|^2 \frac{1}{2}\sqrt{\pi}(\sqrt{\pi})^2$$

$$(\Psi_{001}, \Psi_{001}) = 4|C_{001}|^2 \frac{1}{2}\sqrt{\pi}(\sqrt{\pi})^2$$

Dále určíme :

$$(\Psi,\Psi) = |C|^2 \int\limits_{R^3} e^{-x^2+ix_1} e^{-x^2-ix_1} d^3x = |C|^2 \int\limits_{R^3} e^{-2x^2} d^3x =$$
$$|C|^2 \int\limits_{-\infty}^{\infty} e^{-2x_1^2} dx_1 \int\limits_{-\infty}^{\infty} e^{-2x_2^2} dx_2 \int\limits_{-\infty}^{\infty} e^{-2x_3^2} dx_3 = |C|^2 \left(\sqrt{\tfrac{\pi}{2}}\right)^3$$

$$(\Psi,\Psi_{100}) = \int\limits_{R^3} Ce^{-x^2-ix_1} 2C_{100} x_1 e^{-\frac{x^2}{2}} d^3x = 2CC_{100} \int\limits_{R^3} x_1 e^{-\frac{3}{2}x^2-ix_1} d^3x =$$
$$2CC_{100} \int\limits_{-\infty}^{\infty} x_1 e^{-\frac{3}{2}x_1^2-ix_1} dx_1 \int\limits_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{3}{2}x_2^2} dx_2 \int\limits_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{3}{2}x_3^2} dx_3 \triangleright \left| \int\limits_{\infty}^{-\infty} xe^{-ax^2+bx}\, dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}} \frac{b}{2a} e^{\frac{b^2}{4a}} \right| \triangleright$$
$$2CC_{100} \sqrt{\tfrac{2\pi}{3}} \left(-\tfrac{i}{3}\right) e^{-\frac{1}{6}} \left(\sqrt{\tfrac{2\pi}{3}}\right)^2$$

$$|(\Psi,\Psi_{100})|^2 = 4|C|^2 |C_{100}|^2 \tfrac{2\pi}{3} \tfrac{1}{9} e^{-\frac{1}{3}} \left(\tfrac{2\pi}{3}\right)^2 = |C|^2 |C_{100}|^2 \tfrac{32\pi^3}{243} e^{-\frac{1}{3}}$$

$$(\Psi,\Psi_{010}) = \int\limits_{R^3} Ce^{-x^2-ix_1} 2C_{010} x_2 e^{-\frac{x^2}{2}} d^3x = 2CC_{010} \int\limits_{R^3} x_2 e^{-\frac{3}{2}x^2-ix_1} d^3x =$$
$$2CC_{010} \int\limits_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{3}{2}x_1^2-ix_1} dx_1 \underbrace{\int\limits_{-\infty}^{\infty} x_2 e^{-\frac{3}{2}x_2^2} dx_2}_{0} \int\limits_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{3}{2}x_3^2} dx_3 = 0$$

$$(\Psi,\Psi_{001}) = \int\limits_{R^3} Ce^{-x^2-ix_1} 2C_{001} x_3 e^{-\frac{x^2}{2}} d^3x = 2CC_{001} \int\limits_{R^3} x_3 e^{-\frac{3}{2}x^2-ix_1} d^3x =$$
$$2CC_{001} \int\limits_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{3}{2}x_1^2-ix_1} dx_1 \int\limits_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{3}{2}x_2^2} dx_2 \underbrace{\int\limits_{-\infty}^{\infty} x_3 e^{-\frac{3}{2}x_3^2} dx_3}_{0} = 0$$

A tedy :

$$P = \frac{|(\Psi,\Psi_{100})|^2}{(\Psi,\Psi)(\Psi_{100},\Psi_{100})} = \frac{|C|^2 |C_{100}|^2 \frac{32\pi^3}{243} e^{-\frac{1}{3}}}{|C|^2 \left(\sqrt{\frac{\pi}{2}}\right)^3 4|C_{100}|^2 \frac{1}{2}\sqrt{\pi}(\sqrt{\pi})^2} = \frac{\frac{32\pi^3}{243}}{\frac{2\sqrt{\pi^6}}{2\sqrt{2}}} e^{-\frac{1}{3}} = \frac{32}{243}\sqrt{2} e^{-\frac{1}{3}}$$

Příklad 39 Nechť částice je ve stavu popsaném vlnovou funkcí

$$\Psi = \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \left(e^{i\Phi} sin\theta + cos\theta \right) g(r).$$

Jaké hodnoty L_z můžeme naměřit a s jakou pravděpodobností? Jaká je střední hodnota L_z v tomto stavu?

Řešení :

$$l = 1 \Rightarrow \begin{array}{l} m = -1 \\ m = 0 \\ m = 1 \end{array} \Rightarrow \text{viz. příklad č. 27} \Rightarrow \begin{array}{l} Y_{1,-1}(\theta, \Phi) = -\sqrt{\frac{3}{2\pi}} \frac{sin\theta}{2} e^{-i\Phi} \\ Y_{1,0}(\theta, \Phi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} cos\theta \\ Y_{1,1}(\theta, \Phi) = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} sin\theta e^{i\Phi} \end{array}$$

A tedy :

$$\Psi = \left(\sqrt{\tfrac{2}{3}} Y_{1,1} + \tfrac{1}{\sqrt{3}} Y_{1,0} \right) g(r) \Rightarrow$$

můžeme naměřit pouze stavy L_z odpovídající stavům $l = 1$, $m = 1$ a $l = 1$, $m = 0$ tj. $L_z\Psi = m\hbar\Psi = m\hbar\frac{1}{\sqrt{3}}Y_{1,0} + m\hbar\sqrt{\frac{2}{3}}Y_{1,1} = 0\hbar\frac{1}{\sqrt{3}}Y_{1,0} + 1\hbar\sqrt{\frac{2}{3}}Y_{1,1} = \sqrt{\frac{2}{3}}\hbar Y_{1,1}$. Pro vlastní stavy L^2 platí : $L^2\Psi = l(l+1)\hbar^2\Psi = 1(1+1)\hbar^2\frac{1}{\sqrt{3}}Y_{1,0} + 1(1+1)\hbar^2\sqrt{\frac{2}{3}}Y_{1,1} = 2\hbar^2\Psi$

Pravděpodobnost naměření stavu odpovídající $l = 1$, $m = 0$:

$$w_{1,0} = \frac{|(\Psi, Y_{1,0})|^2}{(\Psi,\Psi)\underbrace{(Y_{1,0}, Y_{1,0})}_{1}} = \frac{|(\sqrt{\frac{2}{3}}Y_{1,1} + \frac{1}{\sqrt{3}}Y_{1,0}, Y_{1,0})|^2}{\left\| \sqrt{\frac{2}{3}}Y_{1,1} + \frac{1}{\sqrt{3}}Y_{1,0} \right\|^2} =$$

$$\frac{\left| \underbrace{\int \sqrt{\frac{2}{3}} Y_{1,1} \bar{Y}_{1,0}}_{OG\ fce \Rightarrow 0} + \underbrace{\int \frac{1}{\sqrt{3}} Y_{1,0} \bar{Y}_{1,0}}_{\frac{1}{\sqrt{3}}} \right|^2}{\underbrace{\int \frac{2}{3} Y_{1,1} \bar{Y}_{1,1}}_{\frac{2}{3}} + \underbrace{\int \frac{1}{\sqrt{3}} \sqrt{\frac{2}{3}} (Y_{1,0} Y_{1,1} + Y_{1,1} Y_{1,0})}_{OG\ fce \Rightarrow 0} + \underbrace{\int \frac{1}{3} Y_{1,0} \bar{Y}_{1,0}}_{\frac{1}{3}}} = \frac{1}{3}$$

Jiný stav než $Y_{1,0}$ a $Y_{1,1}$ nemůže nastat $\Rightarrow w_{1,1} = 1 - w_{1,0} = \frac{2}{3}$

Střední hodnota L_z v tomto stavu :

$$\langle L_z \rangle = \frac{(\Psi, L_z\Psi)}{\underbrace{\|\Psi\|^2}_{1}} = (\sqrt{\tfrac{2}{3}} Y_{1,1} + \tfrac{1}{\sqrt{3}} Y_{1,0}, \sqrt{\tfrac{2}{3}} \hbar Y_{1,1}) =$$

$$\underbrace{\int \sqrt{\frac{2}{3}} \sqrt{\frac{2}{3}} \hbar Y_{1,1} Y_{1,1}}_{\frac{2}{3}\hbar} + \underbrace{\int \frac{1}{\sqrt{3}} \sqrt{\frac{2}{3}} \hbar Y_{1,0} Y_{1,1}}_{0} = \tfrac{2}{3}\hbar$$

Příklad 40 Nechť částice je popsáná vlnovou funkcí

$$\Psi = (x + y + 2z)e^{-\alpha\sqrt{x^2+y^2+z^2}}$$

Jaká je pravděpodobnost nalezení částice v prostorovém úhlu $(\Theta, \Theta + d\Theta) \times (\Phi, \Phi + d\Phi)$, kde Θ, Φ jsou polární, respektive azimutální úhel? Jaké hodnoty kvadrátu momentu hybnosti můžeme naměřit? Jaká je střední hodnota z-ové složky momentu hybnosti? Jaká je pravděpodobnost naměření z-ové složky momentu hybnosti $L_z = +h$?
Návod: zapište Ψ pomocí kulových funkcí.

Řešení :

Sférické souřadnice :

$$x_1 = r\ sin\Theta cos\Phi$$

$$x_2 = r\ sin\Theta sin\Phi$$

$$x_3 = r\ cos\Theta$$

A tedy :

$$\Psi = r(sin\Theta cos\Phi + sin\Theta sin\Phi + 2cos\Theta)e^{-\alpha r}$$

Z příkladu č. 27 víme :

$$Y_{1,-1}(\theta, \Phi) = -\sqrt{\tfrac{3}{8\pi}} sin\Theta e^{-i\Phi} = -\sqrt{\tfrac{3}{8\pi}}\,(sin\Theta cos\Phi - isin\Theta sin\Phi)$$

$$Y_{1,0}(\theta, \Phi) = \sqrt{\tfrac{3}{4\pi}} cos\Theta$$

$$Y_{1,1}(\theta, \Phi) = \sqrt{\tfrac{3}{8\pi}} sin\Theta e^{i\Phi} = \sqrt{\tfrac{3}{8\pi}}\,(sin\Theta cos\Phi + isin\Theta sin\Phi)$$

A tedy :

$$\Psi = r\left(\sqrt{\tfrac{2\pi}{3}}(Y_{1,1} - Y_{1,-1}) - i\sqrt{\tfrac{2\pi}{3}}(Y_{1,1} + Y_{1,-1}) + \sqrt{\tfrac{16\pi}{3}} Y_{1,0}\right) e^{-\alpha r}$$

Označíme :

$$K = \int\limits_0^\infty r^4 e^{-2\alpha r} = \left| \begin{array}{c} t = 2\alpha r \\ r = \frac{t}{2\alpha} \\ dr = \frac{1}{2\alpha} td \end{array} \right| = \tfrac{1}{(2\alpha)^5} \int\limits_0^\infty t^4 e^{-t} = \tfrac{1}{(2\alpha)^5}\Gamma(5) = \tfrac{4!}{(2\alpha)^5}$$

Jelikož nás nezajímá r vyintegrujeme přes něj a tedy :

$$P_{d\Omega}(\Theta,\Phi) = \int_0^\infty |\Psi(r,\Theta,\Phi)|^2 r^2 \underbrace{sin\Theta\, d\Phi\, d\Theta}_{d\Omega}\, dr = K(sin\Theta cos\Phi + sin\Theta sin\Phi +$$
$$2cos\Theta)^2\, d\Omega = K\left(\sqrt{\tfrac{2\pi}{3}}(Y_{1,1} - Y_{1,-1}) - i\sqrt{\tfrac{2\pi}{3}}(Y_{1,1} + Y_{1,-1}) + \sqrt{\tfrac{16\pi}{3}}Y_{1,0}\right)^2 =$$
$$K\left(4\sqrt{\tfrac{\pi}{3}}Y_{1,0} + (1-i)\sqrt{\tfrac{2\pi}{3}}Y_{1,1} - (1+i)\sqrt{\tfrac{2\pi}{3}}Y_{1,-1}\right)^2 =$$
$$K(\tfrac{16\pi}{3}|Y_{1,0}|^2 + (1-i)(1+i)\tfrac{2\pi}{3}|Y_{1,1}|^2 + (1+i)(1-i)\tfrac{2\pi}{3}|Y_{1,-1}|^2 + \text{nulové členy}\ ) =$$
$$K\left(\tfrac{16\pi}{3}|Y_{1,0}|^2 + \tfrac{4\pi}{3}|Y_{1,1}|^2 + \tfrac{4\pi}{3}|Y_{1,-1}|^2\right)$$

Konstantu K určíme z normalizace :

$$1 = \|\Psi\|^2 = \int_{R^3} |\Psi|^2\, d^3x = K\int\int\left(\tfrac{16\pi}{3}|Y_{1,0}|^2 + \tfrac{4\pi}{3}|Y_{1,1}|^2 + \tfrac{4\pi}{3}|Y_{1,-1}|^2\right) sin\Theta\, d\Phi\, d\Theta =$$
$$K\left(\tfrac{16\pi}{3} + \tfrac{4\pi}{3} + \tfrac{4\pi}{3}\right) = 8\pi K \Rightarrow K = \tfrac{1}{8\pi}$$

A tedy :

$$P_{d\Omega}(\Theta,\Phi) = \tfrac{1}{8\pi}\left(\tfrac{16\pi}{3}|Y_{1,0}|^2 + \tfrac{4\pi}{3}|Y_{1,1}|^2 + \tfrac{4\pi}{3}|Y_{1,-1}|^2\right)$$

Hohnoty $\hat{L}^2$, které můžeme naměřit :

$$\hat{L}^2 Y_{l,m} = l(l+1)\hbar^2 Y_{l,m}$$

Můžeme naměřit pouze hodnotu $l = 1 \Rightarrow$ naměříme pouze jedno vlastní čílo (jeden vlastní stav) :

$$\hat{L}^2 Y_{l,m} = 1(1+1)\hbar^2 Y_{l,m} = 2\hbar^2 Y_{l,m},$$

kde $2\hbar^2$ je vlastní číslo.

Z-tová složka momentu hybnosti :

$$\left\langle \hat{L}_z \right\rangle_\Psi = \left(\Psi, \hat{L}_z\Psi\right) =$$
$$\tfrac{\hbar}{(8\pi)^2}((1-i)(1+i)\tfrac{2\pi}{3}\underbrace{\|Y_{1,1}\|^2}_{1} - (1+i)(1-i)\tfrac{2\pi}{3}\underbrace{\|Y_{1,-1}\|^2}_{1} + \text{nulové členy}\ )\ =\ 0$$

Neboť platí :

$$\hat{L}_z\Psi = m\hbar\Psi = \hbar\tfrac{1}{8\pi}\left(0.4\sqrt{\tfrac{\pi}{3}}Y_{1,0} + 1.(1-i)\sqrt{\tfrac{2\pi}{3}}Y_{1,1} - (-1).(1+i)\sqrt{\tfrac{2\pi}{3}}Y_{1,-1}\right)$$

Pravděpodobnost naměření z-ové složky momentu hybnosti $L_z = +\hbar \Rightarrow m = \frac{L_z}{\hbar} = 1$ ($l = 1$ vždy) :

$$P_{m=1} = |(\Psi, Y_{1,1})|^2 = \tfrac{1}{8\pi}|(4\sqrt{\tfrac{\pi}{3}}Y_{1,0} + (1-i)\sqrt{\tfrac{2\pi}{3}}Y_{1,1} - (1+i)\sqrt{\tfrac{2\pi}{3}}Y_{1,-1}, Y_{1,1})|^2 =$$
$$\tfrac{1}{8\pi}|(1-i)\sqrt{\tfrac{2\pi}{3}}\underbrace{\|Y_{1,1}\|^2}_{1} + \text{nulové členy}\ |^2 = \tfrac{1}{6}$$

Příklad 41 Spočtěte střední kvadratické odchylky složek polohy a hybnosti kvantové částice při měření na stavu popsaném vlnovou funkcí

$$\Psi(\vec{x}, t_0) = Ce^{-Ax^2+\vec{B}\vec{x}},$$

kde $A > 0$. Ukažte, že pro tento stav platí

$$\Delta_\Psi(\hat{X}_k)\Delta_\Psi(\hat{P}_k) = \tfrac{\hbar}{2}$$

Řešení :

Vycházíme ze vztahu :

$$\left(\Delta_\Psi(\hat{A})\right)^2 = \left\langle \hat{A}^2 - \left\langle \hat{A} \right\rangle_\Psi^2 \right\rangle_\Psi = \left\langle \hat{A}^2 \right\rangle_\Psi - \left\langle \hat{A} \right\rangle_\Psi^2$$

Z příkladu č. 34 víme :

$$\left\langle \hat{X}_j \right\rangle_\Psi = \tfrac{Re(B_j)}{2A}$$

Z příkladu č. 35 víme :

$$\left\langle \hat{P}_j \right\rangle_\Psi = \hbar \; Im(B_j)$$

Dále víme :

$$\hat{P}_j\Psi = -i\hbar \tfrac{\partial \Psi}{\partial x_j} = -i\hbar Ce^{-Ax^2+\vec{B}\vec{x}}(-2Ax_j + B_j)$$

A tedy :

$$\hat{P}_j^2\Psi = (-i\hbar)^2 \tfrac{\partial^2\Psi}{\partial x_j^2} = -\hbar^2 C \tfrac{\partial}{\partial x_j}\left[e^{-Ax^2+\vec{B}\vec{x}}(-2Ax_j+B_j)\right] =$$
$$-\hbar^2 C\left[e^{-Ax^2+\vec{B}\vec{x}}(-2Ax_j+B_j)^2 + e^{-Ax^2+\vec{B}\vec{x}}(-2A)\right] =$$
$$-\hbar^2 Ce^{-Ax^2+\vec{B}\vec{x}}\left[4A^2x_j^2 - 4Ax_jB_j + B_j^2 - 2A\right]$$

A dále :

$$\left\langle \hat{X}_j^2 \right\rangle_\Psi = \frac{\left\langle \Psi, \hat{X}_j^2\Psi \right\rangle}{\|\Psi\|^2} = \frac{C^2 \int\limits_{R^3} x_j^2 e^{-Ax^2+Re(\vec{B})\vec{x}+iIm(\vec{B})\vec{x}} e^{-Ax^2+Re(\vec{B})\vec{x}-iIm(\vec{B})\vec{x}}}{C^2 \int\limits_{R^3} e^{-Ax^2+Re(\vec{B})\vec{x}+iIm(\vec{B})\vec{x}} e^{-Ax^2+Re(\vec{B})\vec{x}-iIm(\vec{B})\vec{x}}} \; d^3x =$$
$$\frac{\int\limits_{R^3} x_j^2 e^{-2Ax^2+2Re(\vec{B})\vec{x}}}{\int\limits_{R^3} e^{-2Ax^2+2Re(\vec{B})\vec{x}}} \; d^3x =$$
$$\frac{\int\limits_{-\infty}^{\infty} x_j^2 e^{-2Ax_j^2+2Re(\vec{B})x_j} \; dx_j \int\limits_{-\infty}^{\infty} e^{-2Ax_k^2+2Re(\vec{B})x_k} \; dx_k \int\limits_{-\infty}^{\infty} e^{-2Ax_l^2+2Re(\vec{B})x_l} \; dx_l}{\int\limits_{-\infty}^{\infty} e^{-2Ax_j^2+2Re(\vec{B})x_j} \; dx_j \int\limits_{-\infty}^{\infty} e^{-2Ax_k^2+2Re(\vec{B})x_k} \; dx_k \int\limits_{-\infty}^{\infty} e^{-2Ax_l^2+2Re(\vec{B})x_l} \; dx_l} =$$

$$
\frac{\int\limits_{-\infty}^{\infty} x_j^2 e^{-2Ax_j^2+2Re(\vec{B})x_j}\ dx_j}{\int\limits_{-\infty}^{\infty} e^{-2Ax_j^2+2Re(\vec{B})x_j}\ dx_j} \Rightarrow \left| \begin{array}{c} \int\limits_R e^{-ax^2+bx}dx = e^{\frac{b^2}{2a}}\sqrt{\frac{\pi}{a}} \\ \int\limits_R x^2e^{-ax^2+bx}dx = e^{\frac{b^2}{2a}}\sqrt{\pi}\left[(\frac{b}{2a})^2\frac{1}{\sqrt{a}} + a^{-\frac{3}{2}}\frac{1}{2}\right] \\ a = 2A,\ b = 2Re(B_j) \end{array} \right| \Rightarrow
$$

$$
\frac{e^{\frac{4Re(B_j)^2}{4A}}\sqrt{\pi}\left[\frac{4Re(B_j)^2}{16A^2}\frac{1}{\sqrt{2A}}+\frac{1}{2A\sqrt{2A}}\frac{1}{2}\right]}{e^{\frac{4Re(B_j)^2}{4A}}\sqrt{\frac{\pi}{2A}}} = \frac{\sqrt{\pi}\left[\frac{4Re(B_j)^2}{16\sqrt{2}A^2\sqrt{A}}+\frac{1}{4\sqrt{2}A\sqrt{A}}\right]}{\sqrt{\frac{\pi}{2A}}} = \frac{Re(B_j)^2+A}{4A^2}
$$

Ze vztahu pro $\left(\Delta_\Psi(\hat{A})\right)^2$ vypočítáme $\Delta_\Psi(\hat{X}_j)$:

$$
\Delta_\Psi(\hat{X}_j) = \sqrt{\left\langle \hat{X}_j^2 \right\rangle_\Psi - \left\langle \hat{X}_j \right\rangle_\Psi^2} = \sqrt{\frac{Re(B_j)^2+A}{4A^2} - \left(\frac{Re(B_j)}{2A}\right)^2} = \sqrt{\frac{1}{4A}}
$$

Nyní můžeme určit $\left\langle \hat{P}_j^2 \right\rangle_\Psi$:

$$
\begin{gathered}
\left\langle \hat{P}_j^2 \right\rangle_\Psi = \frac{\left\langle \Psi, \hat{P}_j^2\Psi \right\rangle}{\|\Psi\|^2} = \\
\frac{-\hbar^2C^2 \int\limits_{R^3}\left[4A^2x_j^2-4Ax_jB_j+B_j^2-2A\right]e^{-Ax^2+Re(\vec{B})\vec{x}+iIm(\vec{B})\vec{x}}e^{-Ax^2+Re(\vec{B})\vec{x}-iIm(\vec{B})\vec{x}}}{C^2\int\limits_{R^3} e^{-Ax^2+Re(\vec{B})\vec{x}+iIm(\vec{B})\vec{x}}e^{-Ax^2+Re(\vec{B})\vec{x}-iIm(\vec{B})\vec{x}}}\ d^3x = \\
-\hbar^2\frac{\int\limits_{R^3}\left[4A^2x_j^2-4Ax_jB_j+B_j^2-2A\right]e^{-2Ax^2+2Re(\vec{B})\vec{x}}}{\int\limits_{R^3} e^{-2Ax^2+2Re(\vec{B})\vec{x}}}\ d^3x = -\hbar^2 4A^2\frac{\int\limits_{R^3} x_j^2e^{-2Ax^2+2Re(\vec{B})\vec{x}}}{\int\limits_{R^3} e^{-2Ax^2+2Re(\vec{B})\vec{x}}}\ d^3x + \\
\hbar^2 4AB_j\frac{\int\limits_{R^3} x_je^{-2Ax^2+2Re(\vec{B})\vec{x}}}{\int\limits_{R^3} e^{-2Ax^2+2Re(\vec{B})\vec{x}}}\ d^3x - \hbar^2(B_j^2-2A)\frac{\int\limits_{R^3} e^{-2Ax^2+2Re(\vec{B})\vec{x}}}{\int\limits_{R^3} e^{-2Ax^2+2Re(\vec{B})\vec{x}}}\ d^3x = \\
-\hbar^2\left[4A^2\left\langle \hat{X}_j^2 \right\rangle_\Psi - 4A\left\langle \hat{X}_j \right\rangle_\Psi B_j + B_j^2 - 2A\right] = \\
-\hbar^2\left[4A^2\frac{Re(B_j)^2+A}{4A^2} - 4A\frac{Re(B_j)}{2A}B_j + B_j^2 - 2A\right] = \\
-\hbar^2\left[Re(B_j)^2 - 2Re(B_j)B_j + B_j^2 - A\right] = -\hbar^2\left[(Re(B_j)-B_j)^2 - A\right] = \\
\hbar^2Im(B_j)^2 + \hbar^2A
\end{gathered}
$$

Ze vztahu pro $\left(\Delta_\Psi(\hat{A})\right)^2$ vypočítáme $\Delta_\Psi(\hat{P}_j)$:

$$
\Delta_\Psi(\hat{P}_j) = \sqrt{\left\langle \hat{P}_j^2 \right\rangle_\Psi - \left\langle \hat{P}_j \right\rangle_\Psi^2} = \sqrt{\hbar^2Im(B_j)^2 + \hbar^2A - \hbar^2Im(B_j)^2} = \hbar\sqrt{A}
$$

A tedy konečně :

$$
\Delta_\Psi(\hat{X}_j)\Delta_\Psi(\hat{P}_j) = \sqrt{\frac{1}{4A}}\hbar\sqrt{A} = \frac{\hbar}{2}
$$

Příklad 42 Ukažte, že v jednorozměrném případě podmínka

$$\left[\hat{A} - \left\langle \hat{A} \right\rangle_{\Psi} - i\alpha(\hat{B} - \left\langle \hat{B} \right\rangle_{\Psi})\right] \Psi = 0$$

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

$$g(x) = Ce^{-Ax^2+Bx},$$

které jsme nazvali minimální vlnové balíky.

Řešení :

Vycházíme ze vztahů :

$$\hat{P} = -i\hbar\tfrac{\partial}{\partial x}$$

$\left\langle \hat{X} \right\rangle_{\Psi} = \int \bar{\Psi}\hat{X}\Psi \rightarrow$ označíme jako **X** (= konstanta závislá na Ψ)

$\left\langle \hat{P} \right\rangle_{\Psi} = \int \bar{\Psi}\hat{P}\Psi \rightarrow$ označíme jako **P** (= konstanta závislá na Ψ)

Potom :

$$\left[\hat{X} - \left\langle \hat{X} \right\rangle_{\Psi} - i\alpha(\hat{P} - \left\langle \hat{P} \right\rangle_{\Psi})\right] \Psi = 0$$

$$\hat{X}\Psi - \mathbf{X}\Psi + i\alpha\mathbf{P}\Psi - \alpha\hbar\tfrac{\partial}{\partial x}\Psi = 0$$

$$\hat{X} + (i\alpha\mathbf{P} - \mathbf{X}) = \tfrac{1}{\Psi}\alpha\hbar\tfrac{\partial}{\partial x}\Psi$$

$$\int \hat{X} + \underbrace{(i\alpha\mathbf{P} - \mathbf{X})}_{konstanta}\ dx = \int \tfrac{1}{\Psi}\alpha\hbar\ d\Psi$$

$$\tfrac{x^2}{2} + (i\alpha\mathbf{P} - \mathbf{X})\,x = \alpha\hbar\ ln(\Psi) - C$$

$$\Psi = e^{\frac{1}{\alpha\hbar}\left(\frac{x^2}{2} + \left(i\alpha\mathbf{P} - \mathbf{X}\right)x\right) + C} \approx De^{-Ax^2+Bx},$$

kde $A = -\frac{1}{2\alpha\hbar}$, $B = \frac{\left(i\alpha\mathbf{P} - \mathbf{X}\right)}{\alpha\hbar}$ a $D = e^C$

$\alpha < 0$ aby bylo Ψ integrabilní.

Z příkladu č. 34 víme :

$$\left\langle \hat{X}_j \right\rangle_{\Psi} = \tfrac{Re(B)}{2A} = \frac{-\frac{\mathbf{X}}{\alpha\hbar}}{-\frac{2}{2\alpha\hbar}} = \mathbf{X}$$

Z příkladu č. 35 víme :

$$\left\langle \hat{P}_j \right\rangle_\Psi = \hbar\, Im(B) = \hbar \frac{\alpha \mathbf{P}}{\alpha\hbar} = \mathbf{P}$$

A tedy :

$$|\Psi|^2 = \int\limits_R \bar{\Psi}\Psi = \int\limits_R D^2 e^{\frac{x^2}{2\alpha\hbar} + \frac{i\mathbf{P}}{\hbar}x - \frac{\mathbf{X}}{\alpha\hbar}x}\ e^{\frac{x^2}{2\alpha\hbar} - \frac{i\mathbf{P}}{\hbar}x - \frac{\mathbf{X}}{\alpha\hbar}x}\, dx = \int\limits_R D^2 e^{\frac{x^2}{\alpha\hbar} - \frac{2\mathbf{X}}{\alpha\hbar}x}\, dx \Rightarrow$$

$$\left| \int\limits_R e^{-ax^2+bx} = e^{\frac{b^2}{4a}} \sqrt{\frac{\pi}{a}} \right| \Rightarrow D^2 e^{\frac{\frac{4\mathbf{X}^2}{\alpha^2\hbar^2}}{-\frac{4}{\alpha\hbar}}} \sqrt{-\frac{\pi}{\frac{1}{\alpha\hbar}}} = D^2 e^{\frac{-\mathbf{X}^2}{\alpha\hbar}} \sqrt{-\pi\alpha\hbar}$$

Konstantu D určíme z normalizace :

$$1 = |\Psi|^2 = D^2 e^{\frac{-\mathbf{X}^2}{\alpha\hbar}} \sqrt{-\pi\alpha\hbar} \Rightarrow D = \sqrt{\frac{e^{\frac{-\mathbf{X}^2}{\alpha\hbar}}}{\sqrt{-\pi\alpha\hbar}}}$$

A tedy :

$$|\Psi|^2 = \frac{e^{-\frac{\mathbf{X}^2}{\alpha\hbar}}}{\sqrt{-\pi\alpha\hbar}} e^{-\frac{\mathbf{X}^2}{\alpha\hbar}} \sqrt{-\pi\alpha\hbar} = e^{-\frac{2\mathbf{X}^2}{\alpha\hbar}}$$

Příklad 43 Nechť Hamiltonián kvantového systému má čistě bodové spektrum. Na systému byla naměřena hodnota a pozorovatelné $\hat{A}$, která má čistě bodové spektrum a a je nedegenerovaná vlastní hodnota. Jaká je pravděpodobnost, že naměříme stejnou hodnotu, budeme-li měření opakovat po čase t?

Řešení :

Platí :

$$\hat{A}\Psi_a = a\Psi_a$$

Víme, že hamiltonián má číste bodové spektrum, neboli :

$$\hat{H}\Psi_k = E_k\Psi_k,$$

potom platí :

$$\Psi_a = \Psi(0) = \sum_k c_k\Psi_k(\vec{x},0)$$

Časový vývoj :

$$\Psi_k(\vec{x},t) = e^{-\frac{i}{\hbar}E_k t}\Psi_k(\vec{x},0)$$

A tedy :

$$\Psi(t) = \sum_k c_k\Psi_k(\vec{x},t) = \sum_k c_k e^{-\frac{i}{\hbar}E_k t}\Psi_k(\vec{x},0)$$

Pravděpodobnost, že naměříme hodnotu a v čase t :

$$P_{\hat{A}\to a}(t) = |(\Psi(0),\Psi(t))|^2 = |\sum_{j,k} c_k\bar{c}_j e^{-\frac{i}{\hbar}E_k t}\underbrace{(\Psi_k,\Psi_j)}_{\delta_{kj}}|^2 = |\sum_k c_k^2 e^{-\frac{i}{\hbar}E_k t}|^2 \Rightarrow$$

$$||c|^2 = c.\bar{c}| \Rightarrow \sum_{k,j} |c_k|^2|c_j|^2 e^{-\frac{i}{\hbar}(E_k-E_j)t}$$

Příklad 45 Nechť jednorozměrná částice v poli harmonického oscilátoru je v čase $t = 0$ ve stavu

$$\Psi(x,0) = A\Psi_0 + B\Psi_1$$

kde $A, B \in R, \Psi_n$ vlastní stavy energie normalizované k 1. V jakém stavu je v libovolném čase $t > 0$?

Řešení :

Pro $t > 0$ platí (časový vývoj) :

$$\Psi(x,t) = \sum_n C_n \Psi_n e^{-i\frac{E_n}{\hbar}(t-t_0)}$$

Hamiltonián HO :

$$\hat{H} = \frac{1}{2M}\hat{P}^2 + \frac{1}{2}M\omega^2\hat{X}^2$$

Dále platí :

$$\hat{H}\Psi_n = E_n\Psi_n$$

$$E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right) \Rightarrow \begin{array}{l} E_0 = \frac{\hbar\omega}{2} \\ E_1 = \frac{3\hbar\omega}{2} \end{array}$$

V libovolném čase je tedy :

$$\Psi(x,t) = A\Psi_0 e^{-i\frac{\frac{\hbar\omega}{2}}{\hbar}(t-t_0)} + B\Psi_1 e^{-i\frac{\frac{3\hbar\omega}{2}}{\hbar}(t-t_0)} = A\Psi_0 e^{-i\frac{\omega}{2}(t-t_0)} + B\Psi_1 e^{-i\frac{3\omega}{2}(t-t_0)}$$

Příklad 47 Nalezněte operátor rychlosti pro částici v elektromagnetickém poli.

Řešení :

Hledáme $\hat{\dot{\vec{X}}}$ pro částici v el-ma poli.

Víme :

$$\dot{\hat{X}}_j = \frac{i}{\hbar}[\hat{H}, \hat{X}_j],$$

kde :

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2M}\Delta + \frac{i\hbar}{M}\vec{A}(\vec{x},t)\vec{\nabla} + \frac{i\hbar e}{2M}div\vec{A}(\vec{x},t) + \frac{e^2}{2M}\vec{A}_2(\vec{x},t) + e\Phi(\vec{x},t)$$

Maxwellovy rovnice :

$$\vec{E} = -grad\Phi - \frac{\partial\vec{A}}{\partial t}$$

$$\vec{B} = rot\vec{A}$$

Platí :

$$[\hat{H}, \hat{X}_j]f = \left(\hat{H}\hat{X}_j - \hat{X}_j\hat{H}\right) f =$$
$$-\frac{\hbar^2}{2M}\Delta x_j f + \frac{\hbar^2}{2M}x_j\Delta f + \frac{i\hbar}{M}\vec{A}(\vec{x},t)\vec{\nabla}x_j f - \frac{i\hbar}{M}x_j\vec{A}(\vec{x},t)\vec{\nabla}f + \frac{i\hbar e}{2M}div\vec{A}(\vec{x},t)x_j f -$$
$$\frac{i\hbar e}{2M}x_j div\vec{A}(\vec{x},t)f + \frac{e^2}{2M}\vec{A}_2(\vec{x},t)x_j f - \frac{e^2}{2M}x_j\vec{A}_2(\vec{x},t)f + e\Phi(\vec{x},t)x_j f - ex_j\Phi(\vec{x},t)f$$

$$\Delta(x_j f) = \frac{\partial^2}{\partial x_j^2}fx_j + \frac{\partial^2}{\partial x_k^2}fx_j + \frac{\partial^2}{\partial x_l^2}fx_j = \frac{\partial^2}{\partial x_j^2}f + \frac{\partial}{\partial x_j}f + \frac{\partial^2}{\partial x_k^2}f + \frac{\partial^2}{\partial x_l^2}f = \Delta f + \frac{\partial}{\partial x_j}f$$

$$\vec{\nabla}(x_j, f) = \left(\frac{\partial}{\partial x_j}; \frac{\partial}{\partial x_k}; \frac{\partial}{\partial x_l}\right)(x_j, f) = x_j\vec{\nabla}f + f$$

$$\hat{\dot{\vec{X}}}_j = \frac{i}{\hbar}\left(\frac{\hbar}{M}\frac{\partial}{\partial x_j}\right) = \frac{i}{\hbar}\left(\frac{\hbar^2}{M}\frac{\partial}{\partial x_j} + \frac{i\hbar e}{2M}A_j\right) = \frac{\hat{P}_j}{M} - \frac{e}{2M}A_j$$

Příklad 48 Ukažte, že vlastní čísla operátoru $\hat{\vec{\mu}}\vec{B}$ jsou $\pm\mu_0|\vec{B}|$. Najděte vlastní funkce.

Řešení :

Vycházíme ze vstahu :

$$\hat{\vec{\mu}} = \mu_0\hat{\vec{\sigma}}$$

kde $\vec{\sigma}$ jsou Pauliho matice.

A tedy :

$$\hat{\vec{\mu}}_i\vec{B} = \mu_0\hat{\vec{\sigma}}\vec{B} = \sum_{i=1}^{3}\sigma_i B_i = \mu_0\begin{pmatrix} B_3 & B_1 - iB_2 \\ B_1 + iB_2 & -B_3 \end{pmatrix}$$

Vlastní číla :

$$\det\begin{pmatrix} \mu_0 B_3 - \lambda & \mu_0(B_1 - iB_2) \\ \mu_0(B_1 + iB_2) & -\mu_0 B_3 - \lambda \end{pmatrix} = \lambda^2 - \mu_0^2 B_3^2 - \mu_0^2(B_1^2 + B_2^2) \Rightarrow \lambda = \pm\mu_0\sqrt{\sum_i B_i^2} = \pm\mu_0|\vec{B}|$$

Vlastní stavy :

pro $\lambda = +\mu_0|\vec{B}|$:

$$\begin{pmatrix} \mu_0 B_3 - \mu_0|\vec{B}| & \mu_0(B_1 - iB_2) \\ \mu_0(B_1 + iB_2) & -\mu_0 B_3 - \mu_0|\vec{B}| \end{pmatrix} \Rightarrow \Psi_+ = \begin{pmatrix} \mu_0(B_1 - iB_2) \\ \mu_0(-B_3 + |\vec{B}|) \end{pmatrix}$$

pro $\lambda = -\mu_0|\vec{B}|$:

$$\begin{pmatrix} \mu_0 B_3 + \mu_0|\vec{B}| & \mu_0(B_1 - iB_2) \\ \mu_0(B_1 + iB_2) & -\mu_0 B_3 + \mu_0|\vec{B}| \end{pmatrix} \Rightarrow \Psi_- = \begin{pmatrix} \mu_0(B_1 - iB_2) \\ \mu_0(-B_3 - |\vec{B}|) \end{pmatrix}$$

Příklad 49 Ukažte že $\hat{\vec{S}}^2 = \frac{3}{4}\hbar^2\mathbf{I}$. Porovnejte tento výsledek s $\hat{\vec{L}}^2$.

Řešení :

Vycházíme ze vztahu :

$$\hat{S}_j = \frac{\hbar}{2}\sigma_j,$$

kde σ_j jsou Pauliho matice.

A tedy :

$$\hat{\vec{S}}^2 = \hat{S}_j.\hat{S}_j = \frac{\hbar^2}{4}\sigma_j\sigma_j = \frac{\hbar^2}{4}\left[\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}\right] = \frac{3\hbar^2}{4}\mathbf{I}$$

Porovnání :

$$\hat{\vec{L}}^2 Y_{l,m} = l(l+1)\hbar^2 Y_{l,m},$$

$$l(l+1) = \frac{3}{4} \Rightarrow l = \frac{1}{2}$$

Příklad 50 Nechť pro volnou částici se spinemje naměřena hodnota z-ové složky spinu $s_z = \frac{\hbar}{2}$. Jestliže vzápětí měříme hodnotu spinu ve směru, který se z-ovou osou svírá úhel , jaké můžeme naměřit hodnoty a s jakou pravděpodobností?

Řešení :

Po měření je částice ve stavu $\begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix}$:

$$\begin{pmatrix} \frac{\hbar}{2} & 0 \\ 0 & -\frac{\hbar}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix} \Rightarrow -\frac{\hbar}{2}\Psi_2 = \frac{\hbar}{2}\Psi_2 \Rightarrow \Psi_2 = 0$$

Spin pod úhlem Θ S_Θ - osu x zvolíme v rovině (z, Θ) :

$$S_\Theta = cos\Theta S_z + sin\Theta S_x = \frac{\hbar}{2} \left[cos\Theta \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} + sin\Theta \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \right] =$$
$$\frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} cos\Theta & sin\Theta \\ sin\Theta & -cos\Theta \end{pmatrix}$$

Vlastní čísla S_Θ :

$$\begin{vmatrix} cos\Theta - \lambda & sin\Theta \\ sin\Theta & -cos\Theta - \lambda \end{vmatrix} = \lambda^2 - cos^2\Theta - sin^2\Theta = \lambda^2 - 1 = (\lambda + 1)(\lambda - 1) \Rightarrow$$
$$\lambda = \pm 1 \Rightarrow s_\Theta = \pm\frac{\hbar}{2}$$

Odpovídající vlastní vektory (nejsou normalizované):

$$s_\Theta = +\frac{\hbar}{2} : C_1 \begin{pmatrix} sin\Theta \\ 1 - cos\Theta \end{pmatrix}$$

$$s_\Theta = -\frac{\hbar}{2} : C_2 \begin{pmatrix} sin\Theta \\ 1 + cos\Theta \end{pmatrix}$$

Vlastní funkce (nejsou normalizované):

$$u_1 = C_1 \begin{pmatrix} sin\Theta \\ 1 - cos\Theta \end{pmatrix} \Psi$$

$$u_2 = C_2 \begin{pmatrix} sin\Theta \\ 1 + cos\Theta \end{pmatrix} \Psi$$

Normalizace :

$$\|u_1\|^2 = C_1^2 \left(sin^2\Theta + (1 - cos\Theta)^2\right) \underbrace{\|\Psi\|^2}_{1} = C_1^2(2 - 2cos\Theta) = 1 \Rightarrow C_1^2 = \frac{1}{2(1 - cos\Theta)}$$

$$\left\|u_2\right\|^2 = C_2^2 \left(sin^2\Theta + (1+cos\Theta)^2\right) \underbrace{\left\|\Psi\right\|^2}_{1} = C_2^2(2+2cos\Theta) = 1 \Rightarrow C_2^2 = \frac{1}{2(1+cos\Theta)}$$

Víme v jakém stavu se nachází, ale neznáme výchozí stav :

$$w_{+\frac{\hbar}{2}} = \frac{|(\Psi,u_1)|^2}{\underbrace{\left\|\Psi\right\|^2}_{1}\underbrace{\left\|u_1\right\|^2}_{1}} = \frac{1}{2(1-cos\Theta)}\left\|\Psi\right\|^2 \left|\begin{pmatrix} sin\Theta \\ 1-cos\Theta \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}\right|^2 = \frac{sin^2\Theta}{2(1-cos\Theta)} = \frac{1+cos\Theta}{2}$$

$$w_{-\frac{\hbar}{2}} = \frac{|(\Psi,u_2)|^2}{\underbrace{\left\|\Psi\right\|^2}_{1}\underbrace{\left\|u_2\right\|^2}_{1}} = \frac{1}{2(1+cos\Theta)}\left\|\Psi\right\|^2 \left|\begin{pmatrix} sin\Theta \\ 1+cos\Theta \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}\right|^2 = \frac{sin^2\Theta}{2(1+cos\Theta)} = \frac{1-cos\Theta}{2}$$

Příklad 51 Uvažujte systém (tzv. supersymetrický harmonický oscilátor) popsaný na Hilbertovu prostoru $L^2(R,\ dx) \otimes C^2$ hamiltoniánem

$$\hat{H} = -\tfrac{h^2}{2m}\Delta \otimes \mathbf{I} + \tfrac{m\omega^2}{2}x^2 \otimes \mathbf{I} + \tfrac{h\omega}{2}\mathbf{I} \otimes \sigma_3.$$

Dále je dán operátor

$$\hat{Q} = \tfrac{1}{2\sqrt{m}}\sigma_1(\hat{P} + i\omega m\sigma_3\hat{X}).$$

Nalezněte $\hat{Q}^+$, $\hat{Q}^2$, $[\hat{H}, \hat{Q}]$ a výsledky vyjádřete pomocí operátorů $\hat{H}, \hat{Q}$. Jaké omezení lze vyvodit z těchto relací na spektrum hamiltoniánu (tj. zda je shora či zdola omezené a čím)? (Postačí uvažovat bodovou část spektra.)

Řešení :

σ_1 a σ_3 jsou Pauliho matice a tedy :

$$\hat{Q} = \tfrac{1}{2\sqrt{m}}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}(\hat{P} + i\omega m\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}\hat{X}) =$$
$$\tfrac{1}{2\sqrt{m}}\begin{pmatrix} 0 & \hat{P} - i\omega m\hat{X} \\ \hat{P} + i\omega m\hat{X} & 0 \end{pmatrix} = \hat{Q}^+$$

$\hat{Q}^+$ je samozdružený operátor - pokud uděláme z této matice transponovanou a komplexně sdruženou, získáme opět tuto matici.

A dále :

$$\hat{H} = \tfrac{1}{2m}\hat{P}^2\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + \tfrac{m\omega^2}{2}\hat{X}^2\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + \tfrac{h\omega}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} =$$
$$\tfrac{1}{2m}\begin{pmatrix} \hat{P}^2 + m^2\omega^2\hat{X}^2 + m\hbar\omega & 0 \\ 0 & \hat{P}^2 + m^2\omega^2\hat{X}^2 - m\hbar\omega \end{pmatrix}$$

$$\hat{Q}^2 = \tfrac{1}{4m}\begin{pmatrix} 0 & \hat{P} - i\omega m\hat{X} \\ \hat{P} + i\omega m\hat{X} & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & \hat{P} - i\omega m\hat{X} \\ \hat{P} + i\omega m\hat{X} & 0 \end{pmatrix} \Rightarrow$$
$$\left|\begin{array}{c} \pm\hat{P}i\omega m\hat{X} \mp i\omega m\hat{X}\hat{P} = \\ -i\omega m(\pm\hat{X}\hat{P} \mp \hat{P}\hat{X}) = -i\omega m\underbrace{\pm[\hat{X}, \hat{P}]}_{\pm i\hbar} = \\ \pm\hbar\omega m \end{array}\right| \Rightarrow$$
$$\tfrac{1}{4m}\begin{pmatrix} \hat{P}^2 + m^2\omega^2\hat{X}^2 + m\hbar\omega & 0 \\ 0 & \hat{P}^2 + m^2\omega^2\hat{X}^2 - m\hbar\omega \end{pmatrix} = \tfrac{1}{2}\hat{H}$$

$$[\hat{H}, \hat{Q}] = [2\hat{Q}^2, \hat{Q}] = 2Q\underbrace{[\hat{Q}, \hat{Q}]}_{0} - 2\underbrace{[\hat{Q}, \hat{Q}]}_{0}Q = 0$$

Příklad 52 Částice se spinem $\frac{\hbar}{2}$ je umístěna v konstantním magnetickém poli směřujícímím ve směru osy $x \Rightarrow \vec{B} = (B_x, 0, 0)$. V čase $t = 0$ byla naměřena hodnota její z-ové složky spinu $+\frac{\hbar}{2}$. S jakou pravděpodobností nalezneme v libovolném dalším čase hodnotu její y-ové složky spinu $+\frac{\hbar}{2}$?

Řešení :

V čase $t = 0$ je $s_z = \frac{\hbar}{2}$.

V čase $t > 0$ je $s_y = \frac{\hbar}{2}$ a platí :

$$\frac{\hbar}{2}\sigma_y \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix}$$

$$\frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix}$$

Určení vlastních čísel a vlastního vektoru :

$$\begin{vmatrix} -\lambda & -i \\ i & -\lambda \end{vmatrix} = \lambda^2 - 1 = (\lambda + 1)(\lambda - 1) \Rightarrow \lambda = \pm 1$$

$\lambda = -1$

$$\begin{pmatrix} 1 & -i \\ i & 1 \end{pmatrix} |.i \approx \begin{pmatrix} 1 & -i \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \Rightarrow \text{vl. v. :} \begin{pmatrix} -1 \\ i \end{pmatrix} \Psi \Rightarrow \text{normovaný :} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -1 \\ i \end{pmatrix} \Psi$$

Časový vývoj (řešení Pauliho rovnice):

$$\begin{pmatrix} \Psi_1(\vec{x}, t) \\ \Psi_2(\vec{x}, t) \end{pmatrix} = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{\vec{\mu}}.\vec{B}t} \begin{pmatrix} \Phi_1(\vec{x}, t) \\ \Phi_2(\vec{x}, t) \end{pmatrix},$$

kde $e^{\frac{i}{\hbar}\hat{\vec{\mu}}.\vec{B}t} = cos\left(\frac{\mu_0}{\hbar}|\vec{B}|t\right) + i\frac{\vec{B}\vec{\sigma}}{|\vec{B}|}sin\left(\frac{\mu_0}{\hbar}|\vec{B}|t\right)$

V našem případě :

$$\begin{pmatrix} \Phi_1(\vec{x}, t) \\ \Phi_2(\vec{x}, t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \Phi_1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

A tedy :

$$\begin{pmatrix} \Psi_1(\vec{x}, t) \\ \Psi_2(\vec{x}, t) \end{pmatrix} = \left[cos\left(\underbrace{\frac{\mu_0}{\hbar}|\vec{B}|}_{\omega_0}t\right)\mathbf{I} + i\frac{\vec{B}\vec{\sigma}}{|\vec{B}|}sin\left(\underbrace{\frac{\mu_0}{\hbar}|\vec{B}|}_{\omega_0}t\right)\right] \begin{pmatrix} \Phi_1 \\ 0 \end{pmatrix} \Rightarrow$$

$$\left|\frac{\vec{B}\vec{\sigma}}{|\vec{B}|} = \frac{B_x\sigma_1 + \underbrace{B_y}_{0}\sigma_2 + \underbrace{B_z}_{0}\sigma_3}{|\vec{B}|} = \frac{B_x\sigma_1}{|\vec{B}|} = \sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\right| \Rightarrow$$

$$\left[cos(\omega_0 t) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + i \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} sin(\omega_0 t)\right] \begin{pmatrix} \Phi_1 \\ 0 \end{pmatrix} =$$

$$\begin{pmatrix} cos(\omega_0 t) & isin(\omega_0 t) \\ isin(\omega_0 t) & cos(\omega_0 t) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Phi_1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} cos(\omega_0 t) \\ isin(\omega_0 t) \end{pmatrix} \Phi_1$$

Pravděpodobnost nalezní y-ové složky spinu $+\frac{\hbar}{2}$ v libovolném čase :

$$w_{S_y=\frac{\hbar}{2}} = w_{\Psi(t)\rightarrow\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} -1 \\ i \end{pmatrix}\Psi} = \frac{\left| \begin{pmatrix} cos\,(\omega_0 t) \\ isin\,(\omega_0 t) \end{pmatrix}_{\Phi_1,\frac{\Psi}{\sqrt{2}}}\begin{pmatrix} -1 \\ i \end{pmatrix} \right|^2}{\underbrace{\left\| \begin{pmatrix} cos\,(\omega_0 t) \\ isin\,(\omega_0 t) \end{pmatrix} \Phi_1 \right\|^2}_{1} \underbrace{\left\| \frac{\Psi}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -1 \\ i \end{pmatrix} \right\|^2}_{1}}$$

Doteď byla $\Psi(\vec{x},t)$ libovolná normovaná, kvadraticky integrabilní funkce. Nyní zvolíme $\Psi(\vec{x},t) = \Phi_1(\vec{x},t)$:

$$w_{S_y} = \left| \begin{pmatrix} cos\,(\omega_0 t) \\ isin\,(\omega_0 t) \end{pmatrix} \Phi_1, \frac{\Phi}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -1 \\ i \end{pmatrix} \right|^2 = \underbrace{\|\Phi_1\|^2}_{1} \left| \begin{pmatrix} cos\,(\omega_0 t) \\ isin\,(\omega_0 t) \end{pmatrix}, \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -1 \\ i \end{pmatrix} \right|^2 =$$
$$\frac{1}{2}(cos\omega_0 t + sin\omega_0 t)^2 = \frac{1}{2}\left[cos\left(\frac{\mu_0}{\hbar}|\vec{B}|t\right) + sin\left(\frac{\mu_0}{\hbar}|\vec{B}|t\right)\right]^2$$

Pozn. Pro $t = 0$ je $w_{S_y} = \frac{1}{2}\left[1+0\right]^2 = \frac{1}{2}$

Příklad 53 Ukažte, že pokud výraz $e^{[i\vec{a}.\vec{\sigma}]}$ definujeme pomocí řady

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

pak platí

$$e^{[i\vec{a}.\vec{\sigma}]} = cos(|\vec{a}|) + i\frac{\vec{a}.\vec{\sigma}}{|\vec{a}|} sin(|\vec{a}|)$$

Řešení :

Vycházíme ze vztahu :

$$\vec{a}\vec{\sigma} = a_1\sigma_1 + a_2\sigma_2 + a_3\sigma_3,$$

$$(\vec{a}\vec{\sigma})^2 = (\vec{a}\vec{\sigma})(\vec{\vec{a}}\vec{\vec{\sigma}}) = a_1^2\sigma_1^2 + a_1a_2\sigma_1\sigma_2 + a_1a_3\sigma_1\sigma_3 + a_1a_2\sigma_2\sigma_1 + a_2^2\sigma_2^2 + a_2a_3\sigma_2\sigma_3 + a_1a_3\sigma_3\sigma_1 + a_2a_3\sigma_3\sigma_2 + a_3^2\sigma_3^2 = a^2\mathbf{I}$$

Potom :

$$(i\vec{a}\vec{\sigma})^{2k} = (-1)^k|\vec{a}|^{2k}\mathbf{I}^k = (-1)^k a^{2k}\mathbf{I},$$

$$(i\vec{a}\vec{\sigma})^{2k+1} = i(-1)^k a^{2k}\mathbf{I}\vec{a}\vec{\sigma} = i(-1)^k \frac{a^{2k+1}}{a}\mathbf{I}\vec{a}\vec{\sigma},$$

A tedy :

$$e^{[i\vec{a}.\vec{\sigma}]} = \underbrace{\sum_{n=0}^{\infty}(-1)^k \frac{a^{2k}}{(2k)!}}_{cos(a)} + i \underbrace{\sum_{n=0}^{\infty}(-1)^k \frac{a^{2k+1}}{(2k+1)!}}_{sin(a)} \frac{\vec{a}\vec{\sigma}}{a} = cos(a) + i\frac{\vec{a}\vec{\sigma}}{a} sin(a)$$

Příklad 54 Napište vlnovou funkci $\Psi(\vec{x},\xi)$ základního stavu částice v poli Coulom-bova potenciálu s hodnotou z-ové, resp. x-ové, resp. y-ové složky spinu rovné $\frac{h}{2}$.

Řešení :

Vycházíme ze vztahů :
Základní stav elektronu v coulumbově poli :

$$\Psi(\vec{x}) = Ce^{-\frac{r}{a}} = \frac{1}{\sqrt{2\pi a^3}}e^{-\frac{r}{a}} \in L^2$$

Dále :

$$\begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} \in C^2,$$

a tedy :

$$\Psi(\vec{x},\xi) = \Psi(\vec{x}) \otimes \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha e^{-\frac{r}{a}} \\ \beta e^{-\frac{r}{a}} \end{pmatrix} \in L^2(R^3) \otimes C^2$$

Dále víme :

$$\hat{S}_n \Psi = \frac{\hbar}{2}\Psi,$$

kde $\hat{S}_n = \frac{\hbar}{2}\sigma_n$, kde σ_n jsou Pauliho matice :

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

$$\sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

x-ová složka spinu :

$$\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} \beta \\ \alpha \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} \Rightarrow \alpha = \beta$$

$$\Psi(\vec{x}) = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2\pi a^3}}e^{-\frac{r}{a}} \\ \frac{1}{\sqrt{2\pi a^3}}e^{-\frac{r}{a}} \end{pmatrix}$$

y-ová složka spinu :

$$\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} -i\beta \\ i\alpha \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{array}{c} \alpha = 1 \\ \beta = i \end{array}$$

$$\Psi(\vec{x}) = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2\pi a^3}} e^{-\frac{r}{a}} \\ \frac{i}{\sqrt{2\pi a^3}} e^{-\frac{r}{a}} \end{pmatrix}$$

z-ová složka spinu :

$$\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} \alpha \\ -\beta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{array}{c} \alpha = 1 \\ \beta = 0 \end{array}$$

$$\Psi(\vec{x}) = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2\pi a^3}} e^{-\frac{r}{a}} \\ 0 \end{pmatrix}$$

Příklad 56 Atom uhlíku má čtyři valenční elektrony (přesvědčte se). Můžeme na něj tedy nahlížet jako na systém čtyř elektronů ve sféricky symetrickém poli. Jaká je pak degenerace jeho základního stavu?

Řešení :

Jedná se o nerozlišitelné částice :
1 elektron $\Rightarrow$ 6 možností
2 elektrony $\Rightarrow$ 5 možností
oba elektrony $\Rightarrow$ $\frac{6.5}{2} = 15$