1. Elektron v atomu vodíku je ve stavu popsaném vlnovou funkcí

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

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

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

3. Volná částice na přímce je ve stavu popsaném vlnovou funkcí

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

Určete střední hodnotu polohy a energie částice.

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

Řešení

1. Vlnovou funkci převedeme do sférických souřadnic

$$\psi(r,\theta,\varphi) = re^{-\frac{r}{2a}} \underbrace{C\left(2\sin\theta\cos\varphi + 3\sin\theta\sin\varphi + \cos\theta\right)}_{\chi(\theta,\varphi)}.$$

Úhlovou část dále upravíme

$$\chi(\theta,\varphi) = C\left(-\sin\theta e^{i\varphi}(1-\frac{3}{2}i) + \sin\theta e^{-i\varphi}(1+\frac{3}{2}i) + \cos\theta\right),$$

a rozepíšeme pomocí kulových funkcí s $l = 1$

$$\chi = C\left(-(1-\frac{3}{2}i)Y_{1,1} + (1+\frac{3}{2}i)Y_{1,-1} + \frac{1}{\sqrt{2}}Y_{1,0}\right).$$

Určíme normalizační konstantu

$$1 = (\chi,\chi) = 7|C|^2 \implies C = \frac{1}{\sqrt{7}}.$$

Úhlová část stavu elektronu je tedy rovna

$$|\chi\rangle = \frac{1}{\sqrt{7}}\left(-(1-\frac{3}{2}i)|1,1\rangle + (1+\frac{3}{2}i)|1,-1\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|1,0\rangle\right)$$

Odsud vidíme, že pravděpodobnosti výsledků měření projekce momentu hybnosti do osy z jsou

$$\begin{aligned}
m = 1 \quad &\longrightarrow \quad w_1 = |\langle 1,1|\chi\rangle|^2 = \left|-\frac{1-\frac{3}{2}i}{\sqrt{7}}\right|^2 = \frac{13}{28},\\
m = -1 \quad &\longrightarrow \quad w_{-1} = |\langle 1,-1|\chi\rangle|^2 = \left|\frac{1+\frac{3}{2}i}{\sqrt{7}}\right|^2 = \frac{13}{28},\\
m = 0 \quad &\longrightarrow \quad w_0 = |\langle 1,0|\chi\rangle|^2 = \left|\frac{1}{\sqrt{14}}\right|^2 = \frac{1}{14}.
\end{aligned}$$

Pro určení střední hodnoty $\hat{L}_y$ použijeme posunovací operátory

$$\hat{L}_y = \frac{1}{2i}(\hat{L}_+ - \hat{L}_-).$$

Posunovací operátory jsou k sobě hermitovsky sdružené, stačí tedy určit střední hodnotu jednoho z nich. $\hat{L}_-$ působí na $|\chi\rangle$ následovně

$$\hat{L}_-|\chi\rangle = \sqrt{\frac{2}{7}}\hbar\left(-(1-\frac{3}{2}i)|1,0\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|1,-1\rangle\right).$$

Pro střední hodnotu $\hat{L}_-$ pak dostaneme

$$\langle\chi|\hat{L}_-|\chi\rangle = \frac{\sqrt{2}\hbar}{7}\left(\frac{1}{\sqrt{2}}(-(1-\frac{3}{2}i)) + (1-\frac{3}{2}i)\frac{1}{\sqrt{2}}\right) = 0.$$

Střední hodnota $\hat{L}_+$ je také rovna nule, takže i $\langle\hat{L}_y\rangle_\chi = 0$.

2. Koherentní stav má následující rozvoj do báze vlastních vektorů hamiltoniánu

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

Časový vývoj koherentního stavu je pak roven

$$|\alpha(t)\rangle = e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} e^{-i(n+\frac{1}{2})\omega t} |n\rangle = e^{-\frac{i}{2}\omega t} |\alpha e^{-i\omega t}\rangle,$$

tj. zůstává koherentním stavem s $\alpha(t) = \alpha e^{-i\omega t}$. Pro určení střední hodnoty potenciální energie operátor vyjádříme pomocí posunovacích operátorů

$$\hat{V} = \frac{1}{2} M\omega^2 \hat{Q}^2 = \frac{\hbar\omega}{4} (\hat{a}_+ + \hat{a}_-)^2 = \frac{\hbar\omega}{4} \left(\hat{a}_+^2 + \hat{a}_+\hat{a}_- + \hat{a}_-\hat{a}_+ + \hat{a}_-^2\right),$$

a využijeme toho, že koherentní stavy jsou vlastní vektory $\hat{a}_- = \hat{a}_+^\dagger$

$$\begin{aligned}
\langle \hat{V} \rangle_{\alpha(t)} &= \frac{\hbar\omega}{4} \left(\overline{\alpha}(t)^2 + |\alpha(t)|^2 + \langle \alpha(t)| \underbrace{\hat{a}_-\hat{a}_+}_{=1+\hat{a}_+\hat{a}_-} |\alpha(t)\rangle + \alpha(t)^2 \right) \\
&= \frac{\hbar\omega}{4} \left(\overline{\alpha}(t)^2 + 2|\alpha(t)|^2 + 1 + \alpha(t)^2 \right) = \frac{\hbar\omega}{4} \left((\overline{\alpha}(t) + \alpha(t))^2 + 1 \right) \\
&= \frac{\hbar\omega}{4} \left(\alpha^2 (e^{i\omega t} + e^{-i\omega t})^2 + 1 \right) = \frac{\hbar\omega}{4} \left(4\alpha^2 \cos^2(\omega t) + 1 \right).
\end{aligned}$$

3. Střední hodnota polohy je dána vztahem

$$\langle \hat{Q} \rangle_\psi = (\psi, \hat{Q}\psi) = \int_{\mathbb{R}} x |\psi(x)|^2 \, dx.$$

Rozdělení polohy má tvar Gaussova normálního rozdělení

$$|\psi(x)|^2 = C^2 \exp\left(-\frac{(x - x_0)^2}{2\sigma^2} \right),$$

z čehož plyne

$$\langle \hat{Q} \rangle_\psi = x_0, \quad C = \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{\frac{1}{4}}}, \quad (\Delta x)^2 = \langle (\hat{Q} - \langle \hat{Q} \rangle_\psi)^2 \rangle_\psi = \sigma^2.$$

Pro střední hodnotu energie využijeme vztah

$$\langle \hat{H} \rangle_\psi = (\psi, \frac{\hat{P}^2}{2M} \psi) = \frac{1}{2M} (\hat{P}\psi, \hat{P}\psi).$$

Operátor hybnosti působí na vlnovou funkci následovně

$$\hat{P}\psi = -i\hbar \frac{d\psi}{dx} = \left(\frac{x - x_0}{2\sigma^2} i\hbar + p_0 \right) \psi(x),$$

takže platí

$$\begin{aligned}
\langle \hat{H} \rangle_\psi &= \frac{1}{2M} \int_{\mathbb{R}} \left(-\frac{x - x_0}{2\sigma^2} i\hbar + p_0 \right) \overline{\psi(x)} \left(\frac{x - x_0}{2\sigma^2} i\hbar + p_0 \right) \psi(x) \, dx \\
&= \frac{1}{2M} \int_{\mathbb{R}} \left(p_0^2 + (x - x_0)^2 \frac{\hbar^2}{4\sigma^4} \right) |\psi(x)|^2 \, dx \\
&= \frac{1}{2M} \left(p_0^2 + \frac{\hbar^2}{4\sigma^4} (\Delta x)^2 \right) = \frac{p_0^2}{2M} + \frac{\hbar^2}{8M\sigma^2}
\end{aligned}$$

4. Počáteční stav spinu je vlastní vektor σ_1 s vlastním číslem $+1$, tj.

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

Evoluční operátor pro spin v homogenním magnetickém poli je dán maticí

$$U(t) = \cos(\omega t) I - i \sin(\omega t) \sigma_3 = \begin{pmatrix} e^{-i\omega t} & 0 \\ 0 & e^{i\omega t} \end{pmatrix},$$

kde jsme označili $\omega = \frac{\mu_0}{\hbar} B$. Stav spinu v čase t je tedy popsán vektorem

$$\psi(t) = U(t)\psi(0) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{-i\omega t} & 0 \\ 0 & e^{i\omega t} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{-i\omega t} \\ e^{i\omega t} \end{pmatrix}.$$

Střední hodnota projekce spinu částice do osy x v čase t je rovna

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

K určení pravděpodobnosti naměření kladné projekce do směru y potřebujeme nejprve určit vlastní vektor odpovídající tomuto výsledku, tj. vlastní vektor σ_2 s vlastním číslem $+1$, který je roven

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

Pravděpodobnost je potom dána vztahem

$$\begin{aligned} w_{y,+}(t) &= |\, (\psi_{y,+}, \psi(t)) \,|^2 = \frac{1}{4} \left| e^{-i\omega t} - i e^{i\omega t} \right|^2 \\ &= \frac{1}{2} (1 + \sin(2\omega t)). \end{aligned}$$