Kvanová mechanika 2, zápočetový příklad 1

Lukáš Vácha

14. dubna 2021

1 První část

Odhad energie částice ve sféricky symetrickém potenciálu v základním stavu variační metodou

Potenciál má tvar:

$$V(r) = kr^3; k > 0$$

na testovacích funkcích:

$$\psi_\alpha(r,\theta,\phi) = C(\alpha)e^{-\alpha\frac{r^2}{2}}$$

Výpočet potřebného integrálu:

$$\int_0^{+\infty} x^n e^{-ax^b}dx = \left| \begin{matrix} t = ax^b \\ dt = abx^{b-1} \\ x = \frac{1}{a^{\frac{1}{b}}}t^{\frac{1}{b}} \end{matrix} \right| = \frac{1}{a^{\frac{n+1}{b}}b}\int_0^{+\infty} t^{\frac{n-b+1}{b}}e^{-t}dt = \frac{1}{a^{\frac{n+1}{b}}b}\Gamma\left(\frac{n+1}{b}\right) \tag{1}$$

Normalizace testovacích funkcí:

$$\begin{aligned} 1 = \|\psi_\alpha\|^2 = \langle\psi_\alpha|\psi_\alpha\rangle = \int_0^\infty dr \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi d\theta C^2(\alpha)r^2 \sin\theta e^{-\alpha r^2} = \\ = 4\pi C^2 \int_0^\infty r^2 e^{-\alpha r^2} \overset{(1)}{=} \frac{4\pi C^2}{2\alpha^{\frac{3}{2}}}\Gamma\left(\frac{3}{2}\right) = C^2\left(\frac{\pi}{\alpha}\right)^{\frac{3}{2}} \end{aligned}$$

Tudíž je normalizační konstanta:

$$C(\alpha) = \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{\frac{3}{4}}$$

Střední hodnota Hamiltoniánu na tstovací funkci:

$$E(\alpha) = \langle\psi_\alpha|\,\hat{H}\,|\psi_\alpha\rangle = \langle\psi_\alpha| - \frac{\hbar^2}{2M}\Delta + kr^3\,|\psi_\alpha\rangle = 4\pi C^2 \int_0^\infty \left(\frac{\hbar^2}{2M}(-3\alpha + \alpha^2 r^2) + kr^3\right) r^2 e^{-\alpha r^2} dr =$$

$$4\pi C^2 \int_0^\infty \left(\frac{\hbar^2}{2M}(-3\alpha r^2 + \alpha^2 r^4) + kr^5\right) e^{-\alpha r^2} dr \overset{(1)}{=} 2\pi \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{\frac{3}{2}} \left(3\sqrt{\pi}\frac{\hbar^2}{2M\sqrt{\alpha}} - \frac{5\hbar^2\sqrt{\pi}}{8M\sqrt{\alpha}} + \frac{4k}{\alpha^3}\right) =$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2M}\alpha\left(-3 + \frac{3}{2}\right) + \frac{4k}{\alpha^{\frac{3}{2}}\sqrt{\pi}} = \frac{3\hbar^2}{4M}\alpha + \frac{4k}{\alpha^{\frac{3}{2}}\sqrt{\pi}}$$

Hledání extrému, derivace:

$$\frac{\partial E(\alpha)}{\partial \alpha} = \frac{3\hbar^2}{4M} - \frac{6k}{\sqrt{\pi}}\alpha^{-\frac{5}{2}} \overset{!}{=} 0$$

$$\alpha_0 = \left(\frac{8kM}{\hbar^2\sqrt{\pi}}\right)^{\frac{2}{5}}$$

Takže odhad základní hladiny variační metodou vychází:

$$E^{VM} = E(\alpha_0) = \frac{3\hbar^2}{2M}\left(\frac{8kM}{\hbar^2\sqrt{\pi}}\right)^{\frac{2}{5}} + \frac{4k}{\sqrt{\pi}}\left(\frac{\hbar^2\sqrt{\pi}}{8kM}\right)^{\frac{3}{5}} = \frac{2^{\frac{1}{5}}\hbar^{\frac{6}{5}}k^{\frac{2}{5}}}{M^{\frac{3}{5}}\pi^{\frac{1}{5}}}(3^5 + 2^4)^{\frac{1}{5}}$$

2 Druhá část

Jednorozměrný lineární harmonický oscilátor je po provedení měření bez znalosti výsledku ve stavu daném maticí hustoty:

$$\hat{\rho} = \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{2}{3^{n+1}}\,|n\rangle\langle n| = \frac{2}{3}\sum_{n=0}^{+\infty} 3^{-n}\,|n\rangle\langle n|$$

Ověříme zda se jedná o thermální stav:

$$\hat{\rho}_{th.} = \left(1 - e^{-\frac{\hbar\omega}{kT}}\right)\sum_{n=0}^{+\infty} e^{-\frac{\hbar\omega}{kT}n}\,|n\rangle\langle n| \overset{!}{=} \frac{2}{3}\sum_{n=0}^{+\infty} 3^{-n}\,|n\rangle\langle n| = \hat{\rho}$$

To znamená, pro jaké T platí, že ($\forall n \in \mathbb{N}_0$):

$$\left(1 - e^{-\frac{\hbar\omega}{kT}}\right)e^{-\frac{\hbar\omega}{kT}n} = \frac{2}{3}3^{-n}$$

Koeficienty před expoencielami vedou na rovnici:

$$\begin{aligned}\left(1 - e^{-\frac{\hbar\omega}{kT}}\right) &= \frac{2}{3}\\ -e^{-\frac{\hbar\omega}{kT}} &= -\frac{1}{3}\\ -\frac{\hbar\omega}{kT} &= -\ln 3\\ T &= \frac{\hbar\omega}{k\ln 3}\end{aligned}$$

A argumenty exponenciel:

$$\begin{aligned}e^{-\frac{\hbar\omega}{kT}n} = 3^{-n} &= e^{-n\ln 3}\\ -\frac{\hbar\omega}{kT}n &= -n\ln 3\\ T &= \frac{\hbar\omega}{k\ln 3}\end{aligned}$$

Což je stený výsledek, takže stav $\hat{\rho}$ je thermálním stavrm, kanonickým souborem, s teplotou $T = \frac{\hbar\omega}{k\ln 3}$. Nyní spočteme střední hodnota energie:

$$\begin{aligned}\langle E\rangle_{\hat{\rho}} = Tr(\hat{\rho}\hat{H}) = \frac{2}{3}\hbar\omega\, Tr\left(\sum_{n=0}^{+\infty} 3^{-n}\left|n\right\rangle\left\langle n\right| \sum_{m=0}^{+\infty}\left(m + \frac{1}{2}\right)\left|m\right\rangle\left\langle m\right|\right) &=\\ = \frac{2}{3}\hbar\omega\left(\sum_{n=0}^{+\infty} n3^{-n} + \frac{1}{2}\sum_{n=0}^{+\infty} 3^{-n}\right) &= \hbar\omega\end{aligned}$$

Střední hodota polohy:

$$\langle\hat{X}\rangle_{\hat{\rho}} = Tr(\hat{\rho}\hat{X}) = Tr\left(\sqrt{\frac{\hbar}{2M\omega}}(\hat{a}_+ + \hat{a}_-)\hat{\rho}\right) = 0$$

To je nula, protože $\hat{a}_+$ a $\hat{a}_-$ mají nenulové prvky jen mimo diagonálu, ale $\hat{\rho}$ má nenulové elementy pouze na diagonále v energetické reprezentaci.