

Cvičení 21. 4. 2021

Téma: Věty

Hellmanova-Feynmanova věta

Při výpočtech týkajících se reálných systémů nás často nezajímá jen energie systému pro nějaký stav, ale také hodnota derivace energie podle nějakého parametru, tedy $\frac{dE_\lambda}{d\lambda}$. Například pro molekuly nás zajímá, jak se změní energie při změně pozice nějakého atomu, z čehož můžeme vypočítat sílu a najít strukturu s nejnižší energií. V takovém případě je $\lambda = r_{i\alpha}$, tedy komponenta α polohy atomu i . Hellmanova-Feynmanova věta nám říká, že pro vlastní stav Hamiltoniánu ψ , můžeme kýženou derivaci vypočítat jako střední hodnotu derivace Hamiltoniánu podle daného parametru, tedy

$$\frac{dE_\lambda}{d\lambda} = \langle \psi | \frac{dH_\lambda}{d\lambda} | \psi \rangle. \quad (1)$$

Toto je zjednodušení, neboť jak uvidíme, pokud ψ není vlastní stav H , bylo by třeba uvažovat i derivaci ψ podle parametru λ .

Nejprve si větu odvodíme.

▷ Dosadte $E_\lambda = \langle \psi | H | \psi \rangle$ na levou stranu rovnice 1. Rozepište derivaci pomocí pravidla pro součin funkcí a použijte $H|\psi\rangle = E|\psi\rangle$. Úpravou dostanete HF větu. (VIII-4)

Nyní použijeme základní stav LHO pro ověření platnosti HF věty. Nejprve pro $\lambda = \omega$.

▷ Vypočtete $\frac{dE}{d\omega}$ a $\frac{dH}{d\omega}$. (VIII-3)

▷ Vyjádřete $\frac{dH}{d\omega}$ pomocí anihilačních a kreačních operátorů a ověřte HF větu pro stavy $|0\rangle$, $\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle)$ a $\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |2\rangle)$.

Pro rychlíky: Uvažujme základní stav LHO centrováný na x_0 a zopakujeme předchozí kroky pro $\lambda = x_0$ a stavy $|0\rangle$ a $\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle)$. (VIII-5)

Časový vývoj střední hodnoty

Pro časový vývoj střední hodnoty operátoru A lze odvodit rovnici

$$\frac{d\langle A \rangle}{dt} = \frac{i}{\hbar} \langle [H, A] \rangle + \left\langle \frac{\partial A}{\partial t} \right\rangle. \quad (2)$$

Ověříme si jej explicitně pro částici pohybující se v poli LHO, která je ve stavu $|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}(|0\rangle + |1\rangle + |3\rangle)$ a operátor hybnosti p .

▷ Vypočtete komutátor $[H, p]$. (VIII-3)

▷ Pomocí anihilačních a kreačních operátorů vypočtete levou a pravou stranu rovnice. (VIII-3, VIII-4)

Viriálová věta

Viriálová věta udává vztah mezi střední hodnotou kinetické energie a potenciálem:

$$2\langle T \rangle = \left\langle x \frac{dV}{dx} \right\rangle. \quad (3)$$

Opět platí přesně pouze pro vlastní stavy a je možné odvodit i vícerozměrnou verzi. Pro odvození použijeme rovnici 2 a operátor $A = xp$. Odvození neprovedeme obecně, ale pro harmonický oscilátor s $V = \frac{1}{2}m\omega^2x^2$.

▷ Zamysleme se, proč jsou pro operátor xp obě časové závislosti v rovnici 2 rovny nule pro vlastní stav Hamiltoniánu.

▷ Vypočtete komutátory $[p^2, xp]$ a $[x^2, xp]$. (VIII-6)

▷ S využitím předešlého výsledku zapište komutátor $[H, xp]$ pro harmonický oscilátor. Ověřte, že dostaneme výraz $2T - x \frac{dV}{dx}$. (VIII-6)

▷ Ověřte že viriálový teorém platí pro základní stav LHO a neplatí pro stav $\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |2\rangle)$. (VIII-7)

Časový vývoj funkce

Částice je ve stavu daném vlnovou funkcí

$$\psi = \frac{2}{\sqrt{3\alpha\sqrt{\pi}}\alpha^2} x^2 e^{-\frac{x^2}{2\alpha^2}}$$

a pohybuje se v potenciálu lineárního harmonického oscilátoru $V = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$.

▷ Napište časovou závislost vlnové funkce.

Vzorečky

$$\begin{aligned} a &= \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(x + \frac{i}{m\omega} p \right) = \frac{1}{\sqrt{2}\alpha} \left(x + \alpha^2 \frac{d}{dx} \right) \\ a|n\rangle &= \sqrt{n}|n-1\rangle \\ a^+ &= \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(x - \frac{i}{m\omega} p \right) = \frac{1}{\sqrt{2}\alpha} \left(x - \alpha^2 \frac{d}{dx} \right) \\ a^+|n\rangle &= \sqrt{n+1}|n+1\rangle \\ x &= \frac{\alpha}{\sqrt{2}} (a + a^\dagger) \\ p &= \frac{\sqrt{\hbar m\omega}}{i\sqrt{2}} (a - a^\dagger) \\ [x, p] &= i\hbar \end{aligned}$$