Cvičení 23. 3. 2022

Téma: Gausovka, střední hodnoty, vlastní stavy

Na jedné z příštích přednášek budete probírat kvantový oscilátor, systém s potenciálem $V = \frac{1}{2}m\omega^2x^2$. Je to důležitý systém, tak se na něj začneme připravovat.

∞ Gausovky

Řešení harmonického oscilátoru obsahují gausovské funkce, e^{-Ax^2}, podíváme se na některé jejich užitečné vlastnosti.

Uvažujme dvě funkce na intervalu $(-\infty, \infty)$:

$$
\begin{aligned}
f_0(x) &= \frac{1}{\sqrt{\alpha\sqrt{\pi}}} e^{-\frac{x^2}{2\alpha^2}} \\
f_1(x) &= \sqrt{\frac{2}{\alpha\sqrt{\pi}}}\frac{x}{\alpha} e^{-\frac{x^2}{2\alpha^2}}
\end{aligned}
$$

▷ Ověřte, že jsou funkce normalizované na 1.

▷ Ověřte, že jsou funkce na sebe kolmé.

Pro tyto a další výpočty je vhodné využít následujících vzorečků:

$$
\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{\infty} e^{-Bx^2}dx &= \sqrt{\frac{\pi}{B}} \\
\int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-Bx^2}dx &= \frac{1}{2B}\sqrt{\frac{\pi}{B}} \\
\int_{-\infty}^{\infty} x^4 e^{-Bx^2}dx &= \frac{3}{4B^2}\sqrt{\frac{\pi}{B}} \\
\int_{-\infty}^{\infty} x^6 e^{-Bx^2}dx &= \frac{15}{8B^3}\sqrt{\frac{\pi}{B}}
\end{aligned}
$$

V mnoha případech potřebujeme vypočítat střední hodnoty nějakých operátorů pro danou vlnovou funkci, tedy hodnotu $\langle \hat{O} \rangle = \langle \psi | \hat{O} | \psi \rangle$. Pokud máme stavy a operátory vyjádřené v x-reprezentaci, t.j. jako funkce x a jako operátory na tyto funkce působící, použijeme $\langle \hat{O} \rangle = \int \psi^*(x) O \psi(x) dx$.

▷ Vypočtěte střední hodnoty operátorů x a x^2 pro funkce $f_0(x)$ a $f_1(x)$.

Operátor hybnosti je v x-reprezentaci roven $-i\hbar\frac{d}{dx}$, kvadrát hybnosti je potom $-\hbar^2\frac{d^2}{dx^2}$.

▷ Vypočtěte střední hodnotu operátoru p^2 pro $f_0(x)$.

Pro rychlíky: ▷ Vypočtěte střední hodnotu operátoru p^2 pro $f_1(x)$.

∞ Vlastní stavy

Hamiltonián kvantového oscilátoru je dán součtem operátorů kinetické a potenciální energie:

$$
\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2 \,.
$$

▷ Ověřte, že funkce $f_0(x)$ není ani vlastní funkcí operátoru kinetické energie ani operátoru potenciální energie.

▷ Určete, pro jakou hodnotu parametru α je $f_0(x)$ vlastní funkcí Hamiltoniánu.

$\triangleright$ Jaké je vlastní číslo?

Pro rychlíky: $\triangleright$ Ověřte, že $f_1(x)$ je vlastní funkcí Hamiltoniánu. Asi je nejlepší vypočítat akci kinetické energie na $f_1(x)$, nakonec dosadit za α, porovnat s akcí V na $f_1(x)$ a zamyslet se. Jaká je vlastní energie?

Důležitou vlastností kvantové mechaniky je variační princip: Střední hodnotu Hamiltoniánu, tedy energie, vypočtená pro různé normalizované funkce Φ (říkáme jim testovací) bude vždy vyšší nebo rovna než energie základního stavu. Přičemž rovnost nastává pouze v případě použití vlastní funkce základního stavu. Tedy

$$\langle \Phi | H | \Phi \rangle \geq E_0 \,.$$

Co s tím? Tuto vlastnost lze použít v případě, že hledáme vlastní funkci pro nějaký zadaný potenciál. Použijeme testovací funkci, která závisí na různých parametrech a hledáme hodnoty parametrů, pro které je střední hodnota Hamiltoniánu minimální. Tato energie je potom horní odhad energie základního stavu daného systému. Pokud se nám podaří dosáhnout toho, že rovnice $H\Phi = E\Phi$ platí v každém bodě, tak jsme přímo našli funkci základního stavu, jinak máme jen její přibližný tvar.

Na zamyšlení: Jak to souvisí s diagonalizací a lineární algebrou vůbec? Tedy pokud máme Hamiltonián jako matici v nějaké bázi, máme nějaké parametry, které můžeme optimalizovat? Co se stane, když bázi zvětšíme?

Ukážeme si jednoduchý příklad pro gausovku a harmonický oscilátor. Funkci $f_0(x)$ obsahuje parametr α, jehož hodnotu již známe. Nicméně předstírejme nyní, že jsme ji zapomněli, a že α je opět parametr. Zkusíme najít hodnotu α pro kterou je hodnota $\langle f_0(x,\alpha) | H | f_0(x,\alpha) \rangle$ minimální. K tomu využijeme střední hodnoty p^2 a x^2, které už máme.

$\triangleright$ Vypočtěte střední hodnotu Hamiltoniánu jako funkci parametru α, t.j. $E(\alpha)$.

$\triangleright$ Najděte hodnotu α pro kterou je $E(\alpha)$ minimální.

$\triangleright$ Jaké jsou střední hodnoty kinetické a potenciální energie pro danou hodnotu α?

Předešlý výsledek (rovnost středních hodnot) je obecný pro všechny vlastní stavy kvantového oscilátoru a je možné jej odvodit pomocí tzv. viriálového teorému.

V tomto případě by nás výsledek neměl překvapit, ale představme si, že místo potenciálu úměrného x^2 bychom měli potenciál úměrný x^4. Potom bychom mohli hledat odhad energie základního stavu variačně.

Pozn.: Variační metoda hledá energii stavu, který má stejnou symetrii jako testovací funkce. Pokud bychom jako testovací funkci použili $f_1(x)$, dostali bychom energii prvního excitovaného stavu.

∞ Bod obratu

Vlnové funkce mohou být nenulové i v bodech, kde je potenciál systému vyšší než energie daného stavu. To v klasické fyzice nejde. Místa, kde se energie systému vyrovná potenciální energii nazýváme body obratu. Bod obratu si vypočteme pro kvantový oscilátor.

$\triangleright$ Nalezněte hodnotu x pro který je potenciální energie rovna energii základního stavu $\frac{1}{2}\hbar\omega$.

∞ Opakování

$\triangleright$ Vypočtěte komutátor $[x, \frac{d}{dx}]$ pomocí aplikace na nedefinovanou testovací funkci $g(x)$.

$\triangleright$ Vypočtěte akci obou členů komutátoru na $f_0(x)$ a ověřte předešlý výsledek.