Zápočtová písemka z kvantové mechaniky I

čas na řešení: 90min

Úloha 1(5 bodů)
Spočítejte komutátor $[L_j, 1/r]$, kde $L_j = \varepsilon_{jkl} x_k p_l$ je operátor orbitálního momentu hybnosti a $r = \sqrt{\sum_k x_k^2}$ je operátor délky polohového vektoru bodové částice ve 3D.

Poznámka: V příštím semestru uvidíte, že nulovost komutátoru s momentem hybnosti definuje skalární operátor. Délka polohového vektoru je skalár, takže očekáváme, že vyjde nula. Úlohu můžete chápat jako ověření, že operátor Coulombova potenciálu je skalární.

Řešení 1: (finta) Kdo si pamatuje z přednášky, že všechny složky operátoru momentu hybnosti obsahují jen derivace podle úhlových proměnných má vyhráno, protože $1/r$ ve sférických souřadnicích úhly neobsahuje.

Řešení 2: (doporučené) Postupně upravujeme komutátor. Je použita Einsteinova sumační konvence, netřeba říkat, že všechna x_k, p_k jsou operátory složek polohového vektoru a hybnosti

$$[L_j, 1/r] = \varepsilon_{jkl} \left[x_k p_l, 1/\sqrt{x_m x_m}\right] = \varepsilon_{jkl} \left(x_k \left[p_l, 1/\sqrt{x_m x_m}\right] + \left[x_k, 1/\sqrt{x_m x_m}\right] p_l\right),$$

kde jsme užili vzorce $[AB, C] = A[B, C] + [A, C]B$. Druhý člen v posledním výrazu je nula. Dále použijeme vzorce $[p_l, f(x_1, x_2, x_3)] = -i\hbar \partial/\partial x_l f(x_1, x_2, x_3)$, takže

$$\varepsilon_{jkl} x_k \left[p_l, 1/\sqrt{x_m x_m}\right] = -i\hbar \varepsilon_{jkl} x_k \frac{\partial}{\partial x_l} (x_m x_m)^{-\frac{1}{2}} = -i\hbar \varepsilon_{jkl} x_k (-\tfrac{1}{2}) r^{-\frac{3}{2}} 2 x_m \delta_{lm} = i\hbar r^{-\frac{3}{2}} \varepsilon_{jkl} x_k x_l.$$

Poslední výraz je kontrakcí antisymetrického a symetrického tenzoru přes dva indexy, takže 0.

Řešení 3: Někteří z vás se rozhodli, počítat komutátor přímo z definice. To je v pořádku, ale nesmíte zapomenout, že jde o operátor, který působí na vektor z Hilbertova prostoru. Nejvhodnější je pracovat v x-reprezentaci, takže vektor je vlnovou funkcí $\psi(x_1, x_2, x_3)$. V následujícím už tedy x_k nejsou operátory, ale prostě číselné hodnoty souřadnic. Samozřejmě je můžeme libovolně prohazovat mezi sebou a také s libovolnou jejich funkcí. Operátory složek hybnosti napíšeme jako $p_k = -i\hbar \partial/\partial x_k$ takže

$$\begin{aligned}
\left[L_j, \tfrac{1}{r}\right] \psi(\vec{r}) &= -i\hbar \varepsilon_{jkl} \left\{ x_k \frac{\partial}{\partial x_l} \left(\frac{1}{r} \psi(\vec{r}) \right) - \frac{1}{r} x_k \frac{\partial}{\partial x_l} \psi(\vec{r}) \right\} \\
&= -i\hbar \varepsilon_{jkl} \left\{ x_k \psi(\vec{r}) \frac{\partial}{\partial x_l} \frac{1}{r} + x_k \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial x_l} \psi(\vec{r}) - \frac{1}{r} x_k \frac{\partial}{\partial x_l} \psi(\vec{r}) \right\} \\
&= -i\hbar \varepsilon_{jkl} x_k \psi(\vec{r}) \frac{\partial}{\partial x_l} (x_m x_m)^{-\frac{1}{2}} \\
&= -i\hbar \varepsilon_{jkl} x_k \psi(\vec{r}) (-\tfrac{1}{2}) (x_m x_m)^{-\frac{3}{2}} 2 x_m \delta_{lm} \\
&= i\hbar r^{-\frac{3}{2}} \psi(\vec{r}) \varepsilon_{jkl} x_k x_l = 0.
\end{aligned}$$

Opět jsme použili faktu, že kontrakce symetrického a antisymetrického tenzoru je 0.

Úloha 2(10 bodů)
Jednorozměrný harmonický oscilátor je připraven ve stavu, který je lineární kombinací základního a prvního excitovaného stavu s maximální možnou střední hodnotou hybnosti $\langle p \rangle$. Nalezněte časovou závislost střední hodnoty polohy částice $\langle x \rangle$ v tomto stavu.

Poznámka: Opět jde o standardní úlohu, kterou by měl ke zkoušce každý umět hladce vyřešit. Je rovněž dobré si uvědomit, že snazší bude algebraické řešení pomocí kreačních a anihilačních operátorů, než se počítat s integrály v x-reprezentaci. Budeme používat standardní označení z přednášky, mimo jiné $x_0 = \sqrt{\hbar/m\omega}$ je charakteristická délková škála a $p_0 = \hbar/x_0$ charakteristická hybnost pro lineární harmonický oscilátor.

Řešení 1: (doporučené) Stavový vektor v čase $t = 0$ je podle zadání $|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$, kde $|0\rangle$, $|1\rangle$ jsou stavové vektory základního a prvního excitovaného stavu oscilátoru. Nezapomeňte na to, že koeficienty α a β mohou být komplexní! Nejdříve spočteme střední hodnotu operátoru hybnosti $p = p_0(a - a^\dagger)/i\sqrt{2}$

$$\langle\psi|p|\psi\rangle = \frac{p_0}{i\sqrt{2}}(\alpha^*\langle 0| + \beta^*\langle 1|)(a - a^\dagger)(\alpha|0\rangle + \beta|1\rangle).$$

Teď je potřeba si uvědomit, že kreační operátor zvyšuje stav o jedničku, zatímco anihilační operátor stav o jedna snižuje. V posledním výrazu, kde by se po roznásobení vyskytovalo 8 členů tedy přežijí jen členy úměrné $\langle 0|a|1\rangle$ a $\langle 1|a^\dagger|0\rangle$ (pokud vám tato úvaha činí obtíže rozepište si všech osm členů!). Tyto maticové elementy jsou navíc rovny 1 (v obecném případě nezapomeňte na faktor $\sqrt{n}$), takže

$$\langle\psi|p|\psi\rangle = \frac{p_0}{i\sqrt{2}}\left(\alpha^*\beta - \alpha\beta^*\right).$$

Pro určení vektoru máme zadáno, že tato hodnota má být největší možná. Předpokládáme, že vektor ψ je normalizovaný, takže bez újmy na obecnosti $\alpha = \cos\phi$, $\beta = \sin\phi e^{i\theta}$, kde ϕ, θ jsou libovolné úhly. Výraz pro hybnost je

$$\langle\psi|p|\psi\rangle = \sqrt{2}p_0\frac{\cos\phi\sin\phi e^{i\theta} - \cos\phi\sin\phi e^{-i\theta}}{2i} = \frac{p_0}{\sqrt{2}}\sin 2\phi\sin\theta = \frac{p_0}{\sqrt{2}},$$

kde jsme využili toho, že maximální hodnota funkce sinus je 1 a to pro $\phi = \pi/4$ a $\theta = \pi/2$, takže $\alpha = 1/\sqrt{2}$, $\beta = i/\sqrt{2}$ a tedy

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + i|1\rangle).$$

Finta: Pokud si z přednášky pamatujete, že střední hodnoty v harmonickém oscilátoru se podle Ehrenfestových rovnic v čase chovají jako klasický harmonický oscilátor jste hotovi, neboť v našem případě maximální hybnosti v počátečním čase je $\langle p \rangle = p_0\cos\omega t/\sqrt{2}$ a tedy $\langle x \rangle = x_0\sin\omega t/\sqrt{2}$. Zde budu předpokládat, že si to nepamatujete a pokračuji ve výpočtu dál.

Časový vývoj stacionárních stavů harmonického oscilátoru $|n\rangle$ je dán faktorem $\exp(-iE_nt/\hbar)$, kde $E_n = \hbar\omega(n + 1/2)$, takže

$$|\psi(t)\rangle = \frac{e^{-i\omega t/2}}{\sqrt{2}}\left(|0\rangle + ie^{-i\omega t}|1\rangle\right).$$

Nyní doporučuji si uvědomit, že fázový faktor vytknutý před celý vektor se na výpočtu střední hodnoty neprojeví, je důležitá jen relativní fáze obou členů. Výpočet střední hodnoty polohy už probíhá stejně jako pro hybnost

$$\langle\psi|x|\psi\rangle = \frac{x_0}{2\sqrt{2}}(\langle 0| - ie^{i\omega t}\langle 1|)(a+a^\dagger)(|0\rangle + ie^{-i\omega t}|1\rangle) = \frac{x_0}{\sqrt{2}}\frac{e^{i\omega t} - e^{-i\omega t}}{2i} = \frac{x_0}{\sqrt{2}}\sin\omega t$$

Řešení 2: Pro srovnání uvedu i řešení v x-reprezentaci, které někteří z vás začali, ale myslím, že nikdo jej nedokončil. Začneme opět tím, že stavový vektor je $\psi(x) = \alpha\phi_0(x) + \beta\phi_1(x)$, kde $\phi_0(x)$, $\phi_1(x)$ jsou nejnižší stacionární stavy pro daný oscilátor. Dosazením explicitního tvaru těchto funkcí máme

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{x_0\sqrt{\pi}}}\left(\alpha + \frac{\beta 2q}{\sqrt{2}}\right)e^{-q^2/2},$$

kde $q = x/x_0$ je bezrozměrná souřadnice pro harmonický oscilátor. Operátor hybnosti v x-reprezentaci je $p = -i\hbar\frac{d}{dx} = -ip_0\frac{d}{dq}$, takže

$$\begin{aligned}\langle\psi|p|\psi\rangle &= \frac{-ip_0}{x_0\sqrt{\pi}}\int dx\left(\alpha + \sqrt{2}\beta q\right)^*\frac{d}{dq}\left(\alpha + \sqrt{2}\beta q\right)e^{-q^2}\\ &= \frac{-ip_0}{\sqrt{\pi}}\int dq\left(\alpha^* + \sqrt{2}\beta^* q\right)\left(-q\alpha + \sqrt{2}\beta(1-q^2)\right)e^{-q^2}.\end{aligned}$$

Nyní je dobré si uvědomit, že integrand má tvar *(polynom stupně 3)(sudá funkce)*, integrál bude tedy nenulový jen pro sudé mocniny

$$\langle\psi|p|\psi\rangle = \frac{-ip_0}{\sqrt{\pi}}\alpha^*\beta\sqrt{2}\int dq e^{-q^2} - \frac{-ip_0}{\sqrt{\pi}}\sqrt{2}(\alpha^*\beta + \alpha\beta^*)\int dq q^2 e^{-q^2}.$$

Každý matfyzák ví, že nejdůležitější integrál k zapamatování je Gaussův

$$\int e^{-aq^2}dq = \sqrt{\frac{\pi}{a}}.$$

Derivací tohoto vztahu podle parametru a dostaneme druhý integrál který potřebujeme pro vyčíslení střední hodnoty

$$\int q^2 e^{-aq^2}dq = \frac{1}{2a}\sqrt{\frac{\pi}{a}},$$

a tedy

$$\langle\psi|p|\psi\rangle = -ip_0\sqrt{2}\alpha^*\beta + \frac{ip_0\sqrt{2}}{2}(\alpha^*\beta + \alpha\beta^*) = \frac{p_0}{\sqrt{2}}i(\alpha\beta^* - \alpha^*\beta),$$

což je totéž co jsme dostali algebraickou metodou. Maximum tohoto výrazu najdeme jako v **řešení 1** a časově závislá vlnová funkce v x-reprezentaci je

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{x_0\sqrt{\pi}}}\left(\frac{1}{\sqrt{2}} + iqe^{-i\omega t}\right)e^{-q^2/2}e^{-i\omega t/2},$$

ze stejných důvodů jako v **řešení 1**. Střední hodnotu polohy spočteme podobně jako pro hybnost

$$\begin{aligned}\langle\psi|p|\psi\rangle &= \frac{1}{x_0\sqrt{\pi}}\int dx\left(\frac{1}{\sqrt{2}} + iqe^{-i\omega t}\right)^* x\left(\frac{1}{\sqrt{2}} + iqe^{-i\omega t}\right)e^{-q^2}\\ &= \frac{x_0}{\sqrt{\pi}}\int dq\left(\frac{1}{\sqrt{2}} - iqe^{i\omega t}\right)q\left(\frac{1}{\sqrt{2}} + iqe^{-i\omega t}\right)e^{-q^2}\\ &= \frac{ix_0}{\sqrt{2\pi}}\left(e^{-i\omega t} - e^{i\omega t}\right)\int dq q^2 e^{-q^2} = \frac{x_0}{\sqrt{2}}\sin\omega t.\end{aligned}$$

Úloha 3(10 bodů)
Částice se spinem 1 je připravena v čase $t = 0$ ve stavu s hodnotou z-tové složky vnitřního momentu hybnosti (spinu) $s_z = \hbar$. Časový vývoj jejího stavu je určen hamiltoniánem

$$H = \frac{\omega_0}{\hbar}(S_x^2 - S_y^2),$$

kde $\omega_0 > 0$ je konstanta a S_x, S_y jsou operátory složek vnitřního momentu hybnosti (spinu) částice. Jaké hodnoty S_z a s jakou pravděpodobností můžeme nalézt při měření v pozdějším čase $t > 0$.

Poznámka: Myslím, že i toto by měla být standardní úloha, ale skoro nikdo si v zadání nevšiml, že jde o částici se spinem 1, tj. operátory složek vnitřního momentu (spinu) nejsou úměrné Pauliho maticím, ale jsou (jak jsme si psali na přednášce):

$$S_x = \frac{\hbar}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \; S_y = \frac{\hbar}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}, \; S_z = \hbar\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Jakmile toto víme spočteme přímočaře matici 3×3 opovídající hamiltoniánu a dál pokračujeme standardní cestou (viz doporučené řešení). Protože nepředpokládám, že byste si tyto vzorce pamatovali uvedu řešení nezávislé na tom. Použijeme vzorce, které jste dostali v nápovědě a které platí obecně pro libovolné operátory momentu hybnosti

$$J_\pm|jm\rangle = \hbar\sqrt{(j \mp m)(j \pm m + 1)}|jm \pm 1\rangle.$$

V našem případě $J_\pm \equiv S_\pm = S_x \pm iS_y$ a $j = s = 1$, tj. značení bázových vektorů můžeme zjednodušit na $|jm\rangle \equiv |m\rangle$, $m = -1, 0, 1$ a odmocninový faktor ve vzorci výše vyjde vždy 0 nebo $\sqrt{2}$.

Řešení 1: (finta) Nejdříve použijeme vyjádření $S_x = (S_+ + S_-)/2$, $S_x = (S_+ - S_-)/2i$, k úpravě hamiltoniánu

$$H = \frac{\omega_0}{4\hbar}\left\{(S_+ + S_-)^2 + (S_+ - S_-)^2\right\} = \frac{\omega_0}{2\hbar}\left(S_+^2 + S_-^2\right).$$

Zkusíme spočítat působení hamiltoniánu na počáteční stav $|1\rangle$ ze znalosti vzorce z poznámky výše

$$H|1\rangle = \frac{\omega_0}{2\hbar}S_-^2|1\rangle = \omega_0\hbar|-1\rangle.$$

kde jsme použili faktu, že $S_+|1\rangle = 0$. Podobně

$$H|-1\rangle = \frac{\omega_0}{2\hbar}S_+^2|-1\rangle = \omega_0\hbar|1\rangle.$$

Teď už je jasné že jsme schopni přímo najít časový vývoj působením evolučního operátoru na počáteční vektor

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle &= \exp\left\{-\frac{i}{\hbar}Ht\right\}|1\rangle = \sum_n \frac{1}{n!}\left(-\frac{it}{\hbar}\right)^n H^n|1\rangle \\ &= \sum_{n \text{ liché}} \frac{(-i\omega_0 t)^n}{n!}|-1\rangle + \sum_{n \text{ sudé}} \frac{(-i\omega_0 t)^n}{n!}|1\rangle = \cos(\omega_0 t)|1\rangle - i\sin(\omega_0 t)|-1\rangle \end{aligned}$$

Pravděpodobnost nalézt jednotlivé hodnoty S_z pak je rovna kvadrátu absolutních hodnot koeficientů v tomto rozvoji: $p_\hbar = \cos(\omega_0 t)^2$, $p_{-\hbar} = \sin(\omega_0 t)^2$ a $p_0 = 0$.

Řešení 2: (doporučené) Podobně jako výše zjistíme

$$
\begin{aligned}
H|1\rangle &= \frac{\omega_0}{2\hbar} S_-^2 |1\rangle = \omega_0 \hbar |-1\rangle, \\
H|0\rangle &= 0, \\
H|-1\rangle &= \frac{\omega_0}{2\hbar} S_+^2 |-1\rangle = \omega_0 \hbar |1\rangle.
\end{aligned}
$$

Matice hamiltoniánu tedy je

$$
H = \omega_0 \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}.
$$

Standardním způsobem najdeme její vlastní čísla $E_\pm = \pm\hbar\omega_0$ a $E_0 = 0$ a příslušné normované vlastní vektory $|\phi_\pm\rangle = (|1\rangle \pm |-1\rangle)/\sqrt{2}$ a $|\phi_0\rangle = |0\rangle$. Počáteční stavový vektor je $|\psi\rangle = |1\rangle = (|\phi_+\rangle + |\phi_-\rangle)/\sqrt{2}$ a jeho časový vývoj tedy je

$$
\begin{aligned}
|\psi\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|\phi_+\rangle e^{-iE_+ t/\hbar} + |\phi_-\rangle e^{-iE_- t/\hbar} \right) \\
&= \cos(\omega_0 t)|1\rangle - i \sin(\omega_0 t)|-1\rangle.
\end{aligned}
$$

To je stejný výsledek jako výše a opět vede k předpovědi pravděpodobnosti měření:
$p_\hbar = \cos(\omega_0 t)^2$, $p_{-\hbar} = \sin(\omega_0 t)^2$ a $p_0 = 0$.

Úloha 4(10 bodů)
Izotropní harmonický oscilátor ve 3D je připraven ve stavu popsaném vlnovou funkcí $\psi(x, y, z) = xye^{-r^2/2}$. Jaké hodnoty x-vé složky orbitálního momentu hybnosti L_x můžeme naměřit v tomto stavu a s jakou pravděpodobností?

Poznámka: Opět existuje několik možností. K vyřešení celé písemky v zadaném čase je podle mého názoru tentokrát nezbytné oprostit se od zavedené konvence a udělat následující:

Řešení 1: (finta-doporučená) Jak už to ve fyzice bývá, člověk si ušetří spoustu času vhodnou volbou souřadného systému. V tomto příkladě je vhodné převést problém na měření složky L_z přeznačením souřadných os $x \to z \to y \to x$. Nové souřadnice nazveme pro větší přehlednost $x' = y, y' = z, z' = x$. V úloze jde tedy o měření L_x, tj. $L_{z'}$. Jeho vlastní vektory jsou prostě sférické harmoniky (vynásobené libovolnou funkcí radiální proměnné r) v čárkovaných souřadnicích. Vlnovou funkci v čárkovaných souřadnicích dostaneme prostě cyklickým přeznačením os

$$\psi(x', y', z') = z'x'e^{-r^2/2} = konst(Y_{21} - Y_{2-1})r^2e^{-r^2/2},$$

kde jsme použili tabulku sférických harmonik

$$\begin{aligned} Y_{21} &= -\frac{15}{8\pi}\frac{(x' + iy')z'}{r^2}, \\ Y_{2-1} &= \frac{15}{8\pi}\frac{(x' - iy')z'}{r^2}. \end{aligned}$$

Vidíme, že v rozkladu zadané vlnové funkce se vyskytují jen stavy odpovídající $m = \pm 1$ a to se stejným (až na fázi) koeficientem. Můžeme tedy naměřit jen hodnoty $L_x = \pm\hbar$ a to se stejnou pravděpodobností 1/2.

Řešení 2 atd: Existují samozřejmě další možnosti (někteří z vás se o ně v písemce pokusili), které vedou ke správnému výsledku, ale jsou zdlouhavější. Zájemcům doporučuji rozmyslet si detaily, aby získali do problematiky větší vhled.

1. Člověk si může všimnout, že vlnová funkce je homogenní polynom druhého stupně (až na radiální závislost) a tudíž odpovídá $l = 2$. V tomto podprostoru je možno zvolit bázi složenou z vlastních vektorů L_z, tj. $|lm\rangle$, $m = 0, \pm 1, \pm 2$. V této bázi lze vyjádřit operátor L_x a najít jeho vlastní vektory. Odpověď na otázku formulovanou v úloze lze potom získat projekcí vlnové funkce (její úhlové části -normované integrálem přes jednotkovou sféru) na tyto vlastní vektory.

2. Stejný postup lze provést tak že vše vyjádříme v bazi polynomů xy, xz, yz, $x^2 - y^2$ a $2z^2 - x^2 - y^2$. Maticové elementy operátoru L_x na této množině lze získat z jeho kartézského vyjádření.

Úloha 5(15 bodů)
Částice se nachází v (1D) potenciálové jámě

$$V(x) = \begin{cases} \lambda\delta(x), & \text{pro } |x| < a \\ \infty, & \text{pro } |x| > a, \end{cases}$$

kde $a > 0$ a $\lambda > 0$ jsou konstanty. Najděte střední hodnotu $\langle x^2 \rangle$ v prvním excitovaném stavu.

Nápověda: Diskutujte vlnové funkce vázaných stavů a najděte podmínku k určení energie. Není třeba nalézt explicitně energie všech stavů, ale identifikujte první excitovaný stav a najděte jeho vlnovou funkci. Při počítání střední hodnoty se vám může hodit následující integrál:

$$\int_{-\pi}^{\pi} x^2 \sin(x)^2 dx = \frac{\pi^3}{3} - \frac{\pi}{2}.$$

Řešení 1: (finta)
Úloha je opět standardní i když trochu zdlouhavá, proto jsem ji ohodnotil více body a položil otázku, která se dá poměrně snadno zodpovědět i bez úplného nalezení všech stavů. Klíčem k úspoře času je oscilační věta. Ta nám říká, že vlnová funkce prvního excitovaného stavu má právě jeden uzlový bod. Symetrie úlohy navíc říká, že tento nulový bod je uprostřed, tj. $\psi(0) = 0$. Díky tomu se delta-funkční člen pro liché stavy neprojeví (podívejte se na napojovací podmínku v **řešení 2** a rozmyslete, že je to pravda). První (a všechny liché) excitovaný stav je tudíž stejný jako v nekonečně hluboké potenciálové jámě bez delta-funkčního členu a vlnová funkce je prostě sinus jehož perioda je $2a$. Zbytek výpočtu je jen vyčíslení integrálu jako poslední část **řešení 2** níže.

Řešení 2: (podrobný rozbor stacionárních stavů)
Jde o nekonečně hlubokou potenciálovou jámu konečného rozměru. Spektrum energií bude diskrétní. Vlnová funkce smí být nenulová jen v intervalu $(-a, a)$. Řešení uvnitř tohoto intervalu je stejné jako pro volnou částici, tj. lineární kombinace funkcí $\exp(\pm ikx)$, kde $k = \sqrt{2mE}/\hbar$. Na okrajích tohoto intervalu je potřeba splnit okrajovou podmínku $\psi(x) = 0$ a v bodě $x = 0$ bude nespojitost derivace $\psi'(x)$ kvůli δ-funkčnímu členu v potenciálu. Okrajové podmínky v bodech $x = \pm a$ splníme volbou

$$\begin{aligned} \psi(x) &= A_- \sin\left[k(x+a)\right], \quad \text{pro } x < 0, \\ \psi(x) &= A_+ \sin\left[k(x-a)\right], \quad \text{pro } x > 0. \end{aligned}$$

V počátku musí být vlnová funkce spojitá, tj.

$$\begin{aligned} \psi(0+) - \psi(0-) &= 0, \\ A_- \sin(ka) - A_+ \sin(-ka) = (A_- + A_+)\sin(ka) &= 0. \end{aligned}$$

Tuto podmínku lze splnit dvěma způsoby. Za 1) $A_- = -A_+$ a nebo za 2) $\sin(ka) = 0$. Další postup se bude lišit pro tyto dvě možnosti.

1. Všimněte si, že v prvním případě lze vlnovou funkci psát jako

   $$\psi_s(x) = N \sin\left[k(|x| - a)\right]$$

   a vlnová funkce je tedy sudá. Druhá podmínka na napojování v bodě $x = 0$ souvisí s δ-funkčním členem v potenciálu a určuje skok derivace vlnové funkce:

   $$\psi'(0+) - \psi'(0-) = \frac{2m}{\hbar^2}\lambda\psi(0)$$

neboli

$$2Nk\cos(ka) = \frac{2m}{\hbar^2}\lambda N \sin(-ka.)$$

To je podmínka na energie $\hbar^2 k^2/2m$ vázaných stavů se sudou vlnovou funkcí, kterou lze rovněž psát jako

$$\tan(ka) = -\frac{\hbar^2}{m\lambda}k.$$

Namalujte si závislost levé a pravé strany této rovnice na k! Vidíme, pro $\lambda > 0$ bude pro základní stav hodnota $k \in (\frac{\pi}{2a}, \frac{\pi}{a})$ a další stav se sudou vlnovou funkcí má $k \in (\frac{3\pi}{2a}, \frac{2\pi}{a})$

2. V druhém případě označíme vlnovou funkci $\psi_l(x)$ a zatím o ní víme jen, že $\psi(0) = 0$. Podmínka pro napojování derivace nyní zní

$$\psi'(0+) - \psi'(0-) = \frac{2m}{\hbar^2}\lambda\psi(0) = 0$$

Vidíme, že v tomto případě bude ve bodě $x = 0$ spojitá jak funkce sama tak její derivace. To je možné jen tak, že

$$\psi_l(x) = A\sin\left[k(x+a)\right]$$

na celém intervalu $(-a, a)$. Uvědomte si, že díky podmínce $\sin(ka) = 0$ je $\sin\left[k(x+a)\right] = \sin\left[k(x-a)\right]$, navíc až na znaménko, které se schová do volby konstanty A lze tuto funkci napsat též jako $\sin(kx)$ (rozmyslete!!). Podmínka $\sin(ka) = 0$, pak je kvantovací podmínkou pro energie vázaných stavů s lichou funkcí, tj. $k = n\pi/a$, kde $n = 1, 2, 3, \ldots$

Z analýzy výše je zřejmé, že vlnová funkce prvního excitovaného stavu je

$$\psi_1(x) = \frac{1}{\sqrt{a}}\sin(\pi x/a).$$

Tato funkce je současně správně normalizovaná, takže

$$\langle\psi_1|\psi_1\rangle = \int_{-a}^{a}\frac{dx}{a}\sin^2(\pi x/a) = \int_{-1}^{1}dq\sin^2(\pi q) = 1.$$

Nyní už snadno spočteme požadovanou střední hodnotu

$$\langle\psi_1|x^2|\psi_1\rangle = \int_{-a}^{a}\frac{dx}{a}x^2\sin^2(\pi x/a) = \frac{a^2}{\pi^3}\int_{-\pi}^{\pi}q^2 dq\sin^2(q) = a^2\left(\frac{1}{3} - \frac{1}{2\pi^2}\right).$$