Úvod

V tomto dokumentu naleznete zadání a vzorové řešení zápočtové písemky z přednášky "Kvantová teorie I"za ZS 2024/25. Úlohy byly voleny tak, že by je měl být schopen beze zbytku vyřešit každý, kdo absolvoval přednášku a cvičení pokud by měl dost času, ale k vyřešení úloh v časovém limitu (90min) je potřeba ještě trochu tvůrčí invence a porozumění různým souvislostem v látce přednášky. Tento rok jsem nakonec navíc pro všechny rozšířil čas o cca další hodinu.

Na získání zápočtu by vám mělo stačit získat pár bodů, ke kompenzaci případných bodových ztrát z domácích úloh. Snažil jsem se úlohy volit tak, aby každý kdo se věnoval hlouběji přípravě a spočítal si předem pár úloh, byl v časovém limitu schopen získat alespoň polovinu bodů, což (spolu s domácími úlohami) stačí na odpuštění řešení dalších úloh při zkoušce. Letos se mi po prezenčně sešlo 50 řešení, z nichž 28 bylo úspěšných (alespoň polovina bodů). Nejlepší tři řešení byly 44 bodů (čas odevzdání 18:00), 41 bodů (17:48) a 40 bodů (17:25). Následně mi přišlo domácí řešení od dalších 20 studentů, z nichž nejlepší bodová ohodnocení byla 48, 48, 46 a 45.

V následujícím textu naleznete vzorové řešení. Doporučuji si je pečlivě přečíst pro přípravu ke zkoušce.

Poznámka: řešení pro každou úlohu by se mělo vejít na jednu stránku (včetně zadání). Na první stránce je vždy takové vzorové řešení. Případná další stránka ukazuje další možnosti, souvislosti a komentáře k Vašim řešením.

Úloha 1(10 bodů)
V prostoru stavů částice v 1D máme operátor $\hat{A} = \alpha\{|0\rangle\langle 0| + |1\rangle\langle 1| - |0\rangle\langle 1| - |1\rangle\langle 0|\}$ vyjádřený pomocí stacionárních stavů $|n\rangle$ harmonického oscilátoru s konstantou $x_0 = \sqrt{\hbar/m\omega} = 1$. Je tento operátor pro $\alpha > 0$ pozitivně definitní? Jedná se o omezený operátor? Najděte nějakou netriviální (tj. ne násobek $\hat{I}$) pozorovatelnou, která je kompatibilní s pozorovatelnou $\hat{A}$. Najděte konstantu α tak, aby byl $\hat{A}$ projekčním operátorem a vypočtěte $\cos(\frac{\pi}{2}\hat{A})$.

Řešení:
Nejrychlejším řešením je pokud si všimnete, že zadaný operátor je vnějším součinem vektoru $|\phi\rangle = |0\rangle - |1\rangle$ sama se sebou

$$\hat{A} = \alpha|\phi\rangle\langle\phi| = \alpha\{|0\rangle - |1\rangle\}\{\langle 0| - \langle 1|\}.$$

Kritérium pozitivní definitnosti $\langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle = \alpha|\langle\psi|\phi\rangle|^2 > 0$, které by mělo být splněno pro všechny nenulové vektory $|\psi\rangle$ je tedy splněno jen pokud má vektor $|\psi\rangle$ nenulovou projekci na $|\phi\rangle$. Naopak libovolná lineární kombinace vektorů $\mathcal{L}\{|0\rangle + |1\rangle, |2\rangle, |3\rangle, \ldots, |n\rangle, \ldots\} = Ker\hat{A}$ patří do nulového prostoru operátoru $\hat{A}$ a dá ve výrazu nulu. Operátor tedy *není pozitivně definitní* ale je *pozitivně semi-definitní*. Operátor tudíž *je omezený* neboť má konečný rank (obor hodnot je konečně dimenzionální) a tedy musí mít konečný počet vlastních čísel, z nichž nelze udělat divergentí posloupnost. Tento prostor je dokonce jednodimenzionální a příslušný vlastní vektor je $|\phi\rangle$ přičemž vidíme, že

$$\hat{A}|\phi\rangle = \alpha||\phi||^2\,|\phi\rangle = 2\alpha|\phi\rangle$$

a tedy příslušné vlastní číslo je $\lambda = 2\alpha$. Pokud má být $\hat{A}$ *projektorem* musí být toto vlastní číslo rovno 1, tj. $\alpha = \frac{1}{2}$ (případ $\alpha = 0$ striktně řečeno také vyhovuje – projektor na nulový vektor – ale není moc zajímavý). Příkladů *pozorovatelných kompatibilních* k $\hat{A}$ lze najít bezpočet a může to být třeba libovolný operátor působící jen v $Ker\hat{A}$ což je například $|2\rangle\langle 2|$. Zbývá nám jen vypočíst funkci $\cos(\frac{\pi}{2}\hat{A})$. To lze nejsnáze spektrálním rozkladem, když si vzpomenete, že libovolný projektor je sám sobě spektrálním rozkladem, přesněji $\hat{A}$ je projektorem na vlastní podprostor odpovídající vlastnímu číslu $\lambda = 1$ a jeho doplněk $\hat{I} - \hat{A}$ je projektorem na nulový podprostor, tj. pro $\lambda = 0$ a tedy

$$\cos(\tfrac{\pi}{2}\hat{A}) = \sum_{\lambda} \hat{P}_\lambda \cos\tfrac{\pi}{2}\lambda = \hat{A}\cos\tfrac{\pi}{2} + (\hat{I} - \hat{A})\cos 0 = \hat{I} - \hat{A}.$$

Další poznámky:
Úloha byla poměrně úspěšná. Ze 49 odevzdaných řešení bylo 42 úspěšných (5 a více) bodů z 10 a 33 řešení bylo hodnoceno 7 a více body, na druhou stranu jen dva řešitelé dosáhli plného počtu bodů. Častým nedostatkem bylo, že si řešitel nemohl vzpomenout na definici omezeného operátoru a mnoho řešitelů si neuvědomovalo roli dalších stavů $|n\rangle$, pro $n > 1$. Úlohu proto řešili pro maticovou reprezentaci operátoru

$$\hat{A} = \alpha\begin{pmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix},$$

což je v pořádku, ale je třeba si uvědomit, že jde o vyjádření $\hat{A}$ V podprostoru daném lineárním obalem vektorů $|0\rangle$ a $|1\rangle$ a ve zbytku Hilbertova prostoru působí jako nulový operátor. Vlastní čísla této matice a vlastní vektory lze spočíst standardní cestou, ale vlastně lze ihned ze symetrie vidět, že $|\phi_1\rangle = (1,1)^T$ je vlastní vektor odpovídající vlastnímu číslu $\lambda = 0$ a vektor $|\phi_2\rangle = (1,-1)^T$ je vlastní vektor odpovídající vlastnímu číslu $\lambda = 2\alpha$. Ještě je dobré si uvědomit, že ostatní vektory báze $|n\rangle$, pro $n = 2, 3, ..$ jsou rovněž vlastní vektory s nulovou vlastní hodnotou. Po tomto obecném úvodu ještě pár poznámek k jednotlivým bodům:

- *Pozitivní definitnost.* Kromě argumentace vlastními čísly výše, lze postupovat přímo z definice, tj. snažit se dokázat, že $\langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle > 0$ pro všechny nenulové vektory $|\psi$. Dosazením rozvoje v bázi $\sum_n \psi_n|n\rangle$ do definice a použitím tvaru operátoru dostaneme $\langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle = \alpha|\psi_1 - \psi_0|^2 \geq 0$ a vidíme opět, že jde o semidefinitní operátor. Někteří řešitelé, kteří aplikovali tento postup, si neuvědomili, že výraz může být nulový pro $\psi_0 = \psi_1$, o přítomnosti vyšších příspěvků ψ_n ani nemluvě, takže mylně deklarovali pozitivní definitnost operátoru.

- *Omezenost.* Opět kromě spektrálního argumentu, že operátor je omezený, protože má jen dvě vlastní čísla, tj. spektrum je podmnožinou intervalu $\langle 0, 2\alpha\rangle$, lze alternativně vyjít z definice a použít vyjádření výše $\langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle = \alpha|\psi_1 - \psi_0|^2 \leq \alpha(|\psi_0| + |\psi_1|)^2 = \alpha(|\psi_0|^2 + |\psi_1|^2 + 2|\psi_0|.|\psi_1|) \leq \alpha 2||\psi||^2$, kde jsme použili trojúhelníkovou nerovnost a nerovnost mezi geometrickým a harmonickým průměrem. Z toho je vidět, že norma operátoru je nejvýše 2α.

- Kompatibilních pozorovatelných $\hat{B}$ existuje nekonečně mnoho. Můžeme třeba vyjít z toho, že všechny vektory $|n\rangle$, $n > 1$ leží v nulovém podprostoru a tak třeba vzít operátor $\hat{B} = |n\rangle\langle n|$ pro libovolné $n > 1$. Mnozí jste hledali operátor $\hat{B}$ jako matici 2×2 z podmínky $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$. To vede na obecný tvar $\begin{pmatrix} a & b \\ b & a \end{pmatrix}$, kde a, b jsou reálné konstanty. K tomuto tvaru lze rovněž dospět ze symetrie (záměna vektorů $|0\rangle$ a $|1\rangle$). Nikdo bohužel nenašel nějakou originální volbu jako třeba $\hat{I} + \hat{a} + \hat{a}^+ + \sqrt{2}(|0\rangle\langle 2| + |2\rangle\langle 0|)$, nebo $\hat{N} - \hat{N}^2$ ($\hat{N} = \hat{a}^+\hat{a}$), ale to přičítám nedostatku času.

- Někteří řešitelé určili, *zda jde o projektor* přímo z definice ověřením relace $\hat{A}^2 = \hat{A}$ a to buď algebraicky přímo z původního výrazu pro operátor nebo z maticové reprezentace. Každopádně vyjde, že operátor se nezmění až na prefaktor α, který se změní na $2\alpha^2$. Tyto dva výrazy jsou tedy shodné pro $\alpha = 0$ nebo $\frac{1}{2}$.

- Kromě *určení funkce operátoru* spektrálním rozkladem můžeme v případě analytické funkce jako je cosinus, použít Taylorova rozvoje. Přitom aplikace pozorování z předchozího bodu vidíme, že $\hat{A}^n = (2\alpha)^n \frac{\hat{A}}{2\alpha}$ s výjimkou nulového členu kde $\hat{A}^0 = \hat{I} - \frac{\hat{A}}{2\alpha} + (2\alpha)^0 \frac{\hat{A}}{2\alpha}$, takže
$$\cos(\tfrac{\pi}{2}\hat{A}) = \sum_{n=0}^{\infty} \tfrac{1}{2n!}(\tfrac{\pi}{2})^{2n}\hat{A}^n = \hat{I} - \tfrac{\hat{A}}{2\alpha} + \tfrac{\hat{A}}{2\alpha}\sum_{n=0}^{\infty} \tfrac{1}{2n!}(\tfrac{\pi}{2}2\alpha)^{2n} = \hat{I} - \tfrac{\hat{A}}{2\alpha} + \tfrac{\hat{A}}{2\alpha}\cos\alpha\pi$$
což se pro $\alpha = \frac{1}{2}$ zjednoduší prostě na $\hat{I} - \hat{A}$.

Úloha 2(10 bodů)
Na prostoru kvantové trojtečky daném lineárním obalem tří ortonormálních vektorů $\{|1\rangle, |2\rangle, |3\rangle\}$ je (pro $\omega > 0$) dán operátor hamiltoniánu $\hat{H} = \hbar\omega\sqrt{2}\left(|1\rangle\langle 2| + |2\rangle\langle 1| + |2\rangle\langle 3| + |3\rangle\langle 2|\right)$ a pozorovatelná $\hat{P} = |2\rangle\langle 2| + |1\rangle\langle 3| + |3\rangle\langle 1|$. V čase $t = 0$ připravíme částici ve stavu $|\psi\rangle = |1\rangle$. V jakém čase je maximální pravděpodobnost nalézt částici ve druhé tečce? V jakém ve třetí? Jaká je střední hodnota pozorovatelné $\hat{P}$ v těchto časech?

Řešení:
Pro začátek je užitečné si uvědomit, že $\hat{H}$ a $\hat{P}$ jsou kompatibilní pozorovatelné, neboť vynásobením (násobení $\hat{P}$ zleva způsobí výměnu krajních členů v $\hat{H}$ a násobení zprava výměnu členů prostředních) si snadno ověříme, že $\hat{H}\hat{P} = \hat{P}\hat{H} = \hat{H}$ Evidentně budeme potřebovat časový vývoj vlnové funkce, takže si jako první najdeme vlastní čísla a vlastní vektory matice

$$\hat{H} = \hbar\omega\sqrt{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Můžeme postupovat standardně, jak jste se naučili na lineární algebře, nebo vektory uhodneme. V tomto případě dostaneme vektor $|v_0\rangle = (1, 0, -1)^T$ (ten se dá uhodnout ze symetrie, jako vlastní vektor $\hat{P}$) a evidentně odpovídá vlastnímu číslu 0 a energii $E_0 = 0$. Z charakteristickáho polynomu $\lambda(2-\lambda^2)$ matice s jedničkami najdeme další dvě vlastní čísla $\lambda_\pm = \pm\sqrt{2}$ odpovídající energiím $E_\pm = \pm 2\hbar\omega$ a vlastním vektorům $|v_\pm\rangle = (1, \pm\sqrt{2}, 1)^T$. Součet těchto dvou vektorů evidentně neobsahuje příspěvek stavu $|2\rangle$ a když k tomu přičteme ještě dvojnásobek $|v_0\rangle$ zmizí i $|3\rangle$, takže

$$|\psi\rangle \equiv |1\rangle = \frac{1}{4}(2|v_0\rangle + |v_+\rangle + |v_-\rangle).$$

Časová závislost pak jen obsahuje příslušný oscilující faktor $\exp(E_k t/\hbar i)$ v každám členu, neboli

$$|\psi\rangle(t) \equiv= \frac{1}{4}(2|v_0\rangle + |v_+\rangle e^{-2i\omega t} + |v_-\rangle e^{2i\omega t}).$$

Dosazením za vektory $|v_k\rangle$ a pak dostáváme

$$|\psi(t)\rangle = \frac{1}{2}\Big(\cos 2\omega t + 1,\ -i\sqrt{2}\sin 2\omega t,\ \cos 2\omega t - 1,\Big)^T.$$

Všiměte si, že ačkoli jsme vlastní vektory nenormovali, $|\psi(t)\rangle$ zůstává normované díky unitaritě časového vývoje, takže kvadráty absolutních hodnot složek $p_1 = \frac{1}{4}(\cos 2\omega t + 1)^2$, $p_2 = \frac{1}{2}(\sin 2\omega t)^2$, $p_3 = \frac{1}{4}(\cos 2\omega t - 1)^2$ jsou hledané pravděpodobnosti obsazení teček $|1\rangle$, $|2\rangle$, $|3\rangle$. Z toho vidíme, že maximální pravděpodobnost nalezení částice v druhé respektive ve třetí tečce je určena podmínkou

$$2\omega t = \frac{\pi}{2} + n\pi, \qquad \text{resp.} \qquad 2\omega t = \pi + 2n\pi,$$

což odpovídá časům $\frac{\pi}{4\omega}$ a $\frac{\pi}{2\omega}$ (vybral jsem jen ty nejdřívější).

Pro zodpovězení poslední otázky si stačí vzpomenout, že veličina $\hat{P}$ je integrálem pohybu, nemění se a můžeme tedy její střední hodnotu spočíst v jakémkoli čase. Z vlnové funkce v čase 0 pak vidíme $\langle\hat{P}\rangle = \langle 1|\hat{P}|1\rangle = 0$.

Další poznámky:
Také tato úloha byla úspěšná. Tentokrát se mi sešlo 50 řešení, z niž 42 dostalo alespoň 5 bodů a 33 dokonce 8 a více bodů. Nejčastější byly prostě numerické chyby ve výpočtu, někdy pramenící z volby postupu, který byl sice správný, ale zbytečně komplikovaný.

Několik komentářů k alternativním postupům....
- komentář k normování vektorů
- použití symetrie
- matice U(t)
- výpočet řadou
- aplikace řady jen na potřebné vektory

Úloha 3(10 bodů)
Dvě částice se spinem 1/2 jsou připraveny ve stavu $|\psi\rangle = |\mathtt{x+}\rangle\otimes|\mathtt{z-}\rangle + |\mathtt{z-}\rangle\otimes|\mathtt{x+}\rangle$. Měřením z-složky spinu první částice nalezneme hodnotu $\frac{1}{2}\hbar$. Jaké hodnoty a s jakou pravděpodobností můžeme naměřit následným měřením z-složky spinu druhé částice? Jak se změní odpověď na tuto otázku pokud v prvním měření nalezneme hodnotu $-\frac{1}{2}\hbar$.

Řešení:
Jako přípravu na řešení úlohy si převedeme všechny stavy do reprezentace $z-$tové složky spinu. Připomínám, že stav $|\mathtt{x+}\rangle = |\mathtt{z+}\rangle + |\mathtt{z-}\rangle$ je vlastním stavem Pauliho matice σ_x. Ignoroval jsem normovací konstantu, ale tím se můžeme zabývat později. Zadaný stav tedy máme ve tvaru

$$|\psi\rangle = (|\mathtt{z+}\rangle + |\mathtt{z-}\rangle)\otimes|\mathtt{z-}\rangle + |\mathtt{z-}\rangle\otimes(|\mathtt{z+}\rangle + |\mathtt{z-}\rangle) = |\mathtt{+-}\rangle + |\mathtt{-+}\rangle + 2|\mathtt{--}\rangle,$$

kde v posledním výrazu jsem použil stručnější notace. Nyní postup rozdělíme na dva případy zmíněné v zadání.

A) z-složka spinu první částice je $\frac{\hbar}{2}$. Tímto měřením redukujeme vlnovou funkci projektorem $\hat{P}_{1\mathtt{+}} = |\mathtt{+}\rangle\langle\mathtt{+}| \otimes \hat{I}$ takže $|\psi'\rangle = \hat{P}_{1\mathtt{+}}|\psi'\rangle = |\mathtt{+-}\rangle$, tj. ve vlnové funkci zůstane jen člen s první složkou pozitivní. Nyní je zjevné, že pro z-složku spinu druhé částice již musíme s jistotou (pravnděpodobnost $p = 1$) dostat hodnotu $-\frac{1}{2}\hbar$.

B) z-složka spinu první částice je $-\frac{\hbar}{2}$. Tímto měřením redukujeme vlnovou funkci projektorem $\hat{P}_{1\mathtt{-}} = |\mathtt{-}\rangle\langle\mathtt{-}| \otimes \hat{I}$ takže $|\psi'\rangle = \hat{P}_{1\mathtt{+}}|\psi\rangle = |\mathtt{-+}\rangle + 2|\mathtt{--}\rangle$. Pokud chceme pravděpodobnosti dalšího měření musíme funkci normovat, neboli $|\psi'\rangle = \frac{1}{\sqrt{5}}\left(|\mathtt{-+}\rangle + 2|\mathtt{--}\rangle\right)$. Pravděpodobnosti pro měření různých složek spinu druhé částice pak jsou dány kvadráty koeficientů před jednotivými členy, tj. u druhé částice nalezneme z-složku $\frac{\hbar}{2}$ s pravděpodobností $p_+ = \frac{1}{5}$ a z-složku $-\frac{\hbar}{2}$ s pravděpodobností $p_- = \frac{4}{5}$.

Další poznámky:
Úlohu jsem záměrně formuloval tak, že při správném porozumění problému se dala vyřešit snadno téměř bez počítání. Tomu také odpovídá vysoká úspěšnost, alespoň pět bodů 43 ze 49 odevzdaných řešení a dokonce 20 řešení s plným počtem 10 bodů. Většina řešení probíhala podobně jako výše, s různými variantami provedení projekce a případně s normováním mezivýsledků, které se ovšem nijak neprojeví. Nejčastější chybou bylo zapomenutí normování poslední vlnové funkce případně interpretace koeficientů a ne jejich kvadrátů jako pravděpodobností. Objevilo se rovněž pár řešení pomocí maticové reprezentace v bázi $\{|\mathtt{--}\rangle, |\mathtt{-+}\rangle, |\mathtt{+-}\rangle, |\mathtt{++}\rangle\}$, v níž je vlnová funkce počátečního stavu $(2, 1, 1, 0)^T$ a projektory pro měření první a druhé částice jsou dány maticemi

$$\hat{P}_{1\mathtt{+}} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \hat{P}_{1\mathtt{-}} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \hat{P}_{2\mathtt{+}} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \hat{P}_{2\mathtt{-}} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Úloha 4(10 bodů)
V prostoru stavů bodové částice $L^2(\mathbb{R}^3)$ mějme bázi ze společných vlastních vektorů $|k,l,m\rangle$ operátorů kinetické energie, kvadrátu a z-složky orbitálního momentu hybnosti $\{\hat{H}_0, \hat{L}^2, \hat{L}_z\}$ odpovídající vlastním číslům $\{\frac{\hbar^2 k^2}{2m}, \hbar^2 l(l+1), \hbar m\}$. Navíc předpokládáme stavy normalizovány jako $\langle k,l,m|k',l',m'\rangle = \delta(k-k')\delta_{ll'}\delta_{mm'}$. V této reprezentaci je částice popsána vlnovou funkcí $\psi(k,l,m) = \frac{1}{\sqrt{k_0}}\chi_{\langle 0,k_0\rangle}(k)\delta_{l0},\delta_{m0}$, kde $\chi_{\langle 0,k_0\rangle}(k)$ je charakteristická funkce intervalu, rovná 1 na intervalu $\langle 0,k_0\rangle$ a 0 jinde. Najděte hustotu pravděpodobnosti výskytu částice v místě $\vec{r} = (x,y,z)$. V okolí kterých bodů je nulová pravděpodobnost nalézt tuto částici? Konstanta k_0 má hodnotu $2\pi/a_0$, kde a_0 je Bohrův poloměr.

Řešení:
V úloze jde o určení hustoty pravděpodobnosti výskytu částice v daném místě, musíme proto nalézt vlnovou funkci $\psi(x,y,z)$ v souřadnicové reprezentaci. Vzhledem k tomu, že stav $|\psi\rangle$ máme zadaný pomocí koeficientů v bázi $|k,l,m\rangle$, platí

$$|\psi\rangle = \sum_l \sum_m \int_0^\infty \psi(k,l,m)\,|k,l,m\rangle\,\mathrm{d}k = \frac{1}{\sqrt{k_0}}\int_0^{k_0} |k,0,0\rangle\,\mathrm{d}k.$$

Stačí tedy najít vyjádření bázové funkce $\phi_{klm}(x,y,z) = \langle x,y,z|k,l,m\rangle$ v souřadnicové reprezentaci. Z přednášky víme, že tato funkce je separovaná ve sférických souřadnicích $\phi_{klm}(x,y,z) = NR_{k,l}(r)Y_{l,m}(\theta,\varphi) = Nj_l(kr)Y_{l,m}(\theta,\varphi)$, speciálně $\phi_{k,0,0}(x,y,z) = Nj_0(kr)\frac{1}{\sqrt{4\pi}}$. Z taháku si můžeme připomenout, že $j_0(z) = \frac{1}{z}\sin z$. Co zbývá je určit normalizační konstantu N. Ta je důležitá protože může záviset na vlnovém vektoru k, což má vliv na integraci výše. Normalizace je definovaná v zadání, speciálně

$$\begin{aligned}
\delta(k-k') &= \langle k,0,0|k',0,0\rangle = N^2\int |Y_{00}|^2\mathrm{d}\Omega\int_0^\infty j_0(kr)j_0(k'r)r^2\mathrm{d}r \\
&= \frac{N^2}{kk'}\int_0^\infty \sin(kr)\sin(k'r)\mathrm{d}r = \frac{N^2}{4kk'}\int_0^\infty (e^{ikr}-e^{-ikr})(e^{-ik'r}-e^{ik'r})\mathrm{d}r \\
&= \frac{N^2}{4kk'}\int_0^\infty \left(e^{i(k-k')r}+e^{-i(k-k')r}-e^{i(k+k')r}-e^{-i(k+k')r}\right)\mathrm{d}r \\
&= \frac{N^2}{4kk'}\int_{-\infty}^\infty \left(e^{i(k-k')r}-e^{i(k+k')r}\right)\mathrm{d}r = \frac{2\pi N^2}{4kk'}[\delta(k-k')+\delta(k+k')].
\end{aligned}$$

V integraci jsme použili integrální reprezentaci delta funkce z taháku. Druhou z delta funkcí můžeme nahradit nulou, protože $k,k'>0$. Takže správná normalizační konstanta je $N = k\sqrt{\frac{2}{\pi}}$. Nyní můžeme dopočítat vlnovou funkci

$$\psi(r) = \tfrac{1}{\sqrt{k_0}}\int_0^{k_0}\phi_{k,0,0}(r)\,\mathrm{d}k = \tfrac{1}{\sqrt{k_0}}\int_0^{k_0} k\sqrt{\tfrac{2}{\pi}}\tfrac{1}{kr}\sin kr\,\tfrac{1}{\sqrt{4\pi}}\,\mathrm{d}k = \tfrac{1}{\sqrt{2k_0}}\tfrac{1}{\pi r}\int_0^{k_0}\sin kr\,\mathrm{d}k = \frac{1-\cos k_0 r}{\pi r^2\sqrt{2k_0}}.$$

Mimochodem, tato vlnová funkce je normovaná na jedničku, jak si můžete ověřit integrálem z nápovědy. Hustota pravděpodobnosti je tedy úměrná výrazu $\frac{1}{r^4}[1-\cos k_0 r]^2$. Tato funkce má konečnou limitu v okolí počátku $r\to 0$, ale je nulová v bodech $r = 2\pi n/k_0 = na_0$, kde $n = 1,2,3,\ldots$.

Další poznámky:
Tato úloha byla nejméně úspěšná. Plný počet bodů jsem udělil jen řešením, které mi přišly dodatečně. Z prezenční písemky se mi sešlo jen 26 řešení, z nichž jen 3 byly hodnoceny 5 body, a ostatní ještě menším počtem bodů. Nejúspěšnější řešení šla sice správným směrem, ale neuvědomili jste si, že je potřeba získat k-závislou normovací konstantu a bez té se nedal dopočíst finální integrál a zodpovědět závěrečnou otázku. Na druhé straně pro nalezení radiální části jste vlastně nepotřebovali tabulku sférických Besselových funkcí, pokud jste si vzpomněli na řešení radiální Schrodingerovy rovnice, které je po substituci $R(r) = \frac{1}{r}\chi(r)$ ekvivalentní jednorozměrnému problému s okrajovou podmínkou $\chi(0) = 0$, takže $\chi(r) = \sin kr$. Vzhledem k tomu, že jediným problematickým bodem byla normalizace mi úloha nepřišla tak obtížná, ale možná hrál roli čas a to, že šlo o předposlední úlohu.

Úloha 5(10 bodů)
Spin-orbitální moment hybnosti $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$ elektronu definujeme jakou součet orbitálního a spinového momentu hybnosti. Uvažujme elektron v atomu vodíku ve stavu s hlavním kvantovým číslem $n = 2$, s orbitálním kvantovým číslem $l = 1$, s minimální možnou hodnotou J^2 a s jeho projekcí na osu z $J_z = \frac{1}{2}\hbar$. Kterým směrem od protonu je nejpravděpodobnější nalézt tento elektron? Jakou z-složku spinu a s jakou pravděpodobností u něj můžeme naměřit?

Řešení:
Za prvé je potřeba si uvědomit v jaký stav elektronu úloha popisuje. Jde o sčítání orbitálního momentu hybnosti $l = 1$ a spinového $\frac{1}{2}$, takže výsledná hodnota kvantového čísla J splňuje nerovnost $1 - \frac{1}{2} \leq J \leq 1 + \frac{1}{2}$. Tomu vyhovují jen dvě hodnoty $J = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}$. Z nich nejmenší je $J = \frac{1}{2}$. Takže elektron je kaplovaném stavu

$$|l, s, J, M\rangle = \left|1, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle = \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} Y_{11} |\texttt{-}\rangle - \frac{1}{\sqrt{3}} Y_{10} |\texttt{+}\rangle,$$

kde pro pravou stranu jsme použili tabulku Clebschových-Gordanových koeficientů pro rozvoj do separované báze, která je zde součinem úhlové části orbitální vlnové funkce Y_{lm} a spinové části $|\texttt{s}\rangle$. Pro úplnost dodejme, že výše zmíněná funkce udává jen úhlovou část a plná vlnová funkce obsahuje ještě radiální část $R_{nl}(r) = R_{21}(r)$, takže

$$|\psi\rangle = \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} R_{21}(r) Y_{11} |\texttt{-}\rangle - \frac{1}{\sqrt{3}} R_{21}(r) Y_{10} |\texttt{+}\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} R_{21}(r) \begin{pmatrix} -Y_{10}(\theta, \varphi) \\ \sqrt{2}\, Y_{11}(\theta, \varphi) \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} \psi_+(r, \theta, \varphi) \\ \psi_-(r, \theta, \varphi) \end{pmatrix}.$$

Místo kde se nachází elektron je dáno polohovým vektorem $\vec{r} = (r, \theta, \varphi)$ (ve sférických souřadnicích) a otázka tedy směřuje k měření této polohy. Nesmíme zapomenout, že elektron má, jak prostorové, tak spinové stupně volnosti, takže hustota pravděpodobnosti je dána střední hodnotou projektoru $\hat{P} = |\vec{r}\rangle\langle\vec{r}| \otimes \hat{I}_{spin}$, kde $\hat{I}_{spin} = |\texttt{+}\rangle\langle\texttt{+}| + |\texttt{-}\rangle\langle\texttt{-}|$

$$\rho(\vec{r}) = \langle\psi|\hat{P}|\psi\rangle = |\psi_+|^2 + |\psi_-|^2 = \tfrac{1}{3}|R_{21}(r)|^2 (Y_{10}^2 + 2|Y_{11}|^2) = \tfrac{1}{3}|R_{21}(r)|^2 \tfrac{1}{r^2} (\tfrac{3}{4\pi} z^2 + 2 \tfrac{3}{8\pi} [x^2 + y^2]),$$

kde jsme využili tabulku sférických harmonik z taháku $Y_{10} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \frac{z}{r}$, $Y_{11} = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \frac{x+iy}{r}$. Takže hustotu pravděpodobnosti můžeme upravit na $\rho(\vec{r}) = \frac{1}{4\pi}|R_{21}(r)|^2$. Tato hustota vůbec nezávisí na směru a výskyt elektronu je tudíž stejně pravděpodobný všemi směry od protonu. Druhá otázka se týkala pravděpodobnosti naměření různých hodnot z-složky spinu. Na to lze odpovědět rovnou pohledem na vlnovou funkci, že stav $|\texttt{+}\rangle$ je tam s amplitudou pravděpodobnosti $\frac{1}{\sqrt{3}}$, takže pravděpodobnost je $p_+ = \frac{1}{3}$ a podobně $p_- = \frac{2}{3}$. Alternativně lze formálně použít projektory $\hat{P}_+ = \hat{I} \otimes |\texttt{+}\rangle\langle\texttt{+}|$ a $\hat{P}_- = \hat{I} \otimes |\texttt{-}\rangle\langle\texttt{-}|$, kde $\hat{I} = \int |\vec{r}\rangle\langle\vec{r}| \mathrm{d}^3\vec{r}$ takže

$$p_+ = \langle\psi|\hat{P}_+|\psi\rangle = \frac{1}{3}, \qquad p_- = \langle\psi|\hat{P}_-|\psi\rangle = \frac{2}{3},$$

přičemž se využije faktu, že prostorová část vlnové funkce je normovaná $\int |R_{nl} Y_{lm}|^2 \mathrm{d}^3\vec{r} = 1$.

Další poznámky:
Tato úloha byla poměrně úspěšná i když se na ní asi podepsalo, že byla poslední, takže už Vám nezbývalo moc času. Z odevzdaných 38-7 (na sedmi bylo v podstatě jen opsáno zadání) řešení bylo 21 úspěšných (tentokrát 7 a více bodů, protože hodnocení 5 a 6 body se nevyskytlo). Na druhou stranu jen 3 řešitelé dostali plný počet 10 bodů. Hlavním kamenem úrazu byl správný výpočet hustoty pravděpodobnosti výskytu elektronu. Mnoho z Vás nesprávně nejdříve sestavilo "prostorovou vlnovou funkci" $\psi(\vec{r}) = \psi_+(\vec{r}) + \psi_-(\vec{r})$ a pak teprve počítali $\rho(\vec{r}) = |\psi(\vec{r})|^2 = |\psi_+(\vec{r}) + \psi_-(\vec{r})|^2$. Tento postup nesprávně obsahuje interferenční člen $\psi_+(\vec{r})^*\psi_-(\vec{r}) + \psi_+(\vec{r})\psi_-(\vec{r})^*$, který by tam neměl být, protože příspěvky $\psi_+(\vec{r})$ a $\psi_-(\vec{r})$ jsou rozlišitelné spinovou částí.

Možnou nuancí řešení, která se vyskytla, je že kaplovanou vlnovou funkci si místo použití tabulky C-G koeficientů odvodíte působením operátoru $\hat{J}_-$ na stav $Y_{11}|+\rangle$

$$\left|1, \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle = \tfrac{1}{\sqrt{3}}\hat{J}_- \left|1, \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{3}{2}\right\rangle = \tfrac{1}{\sqrt{3}}\hat{J}_- Y_{11}|+\rangle = \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}}Y_{10}|+\rangle + \frac{1}{\sqrt{3}}Y_{11}|-\rangle,$$

a následnou ortogonalizací

$$\left|1, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle = \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}}Y_{11}|-\rangle - \frac{1}{\sqrt{3}}Y_{10}|+\rangle,$$

jak jsme to trénovali na cvičení pro případ sčítání momentu hybnosti 1+1.