Úvod

V tomto dokumentu naleznete zadání a vzorové řešení letošní zápočtové písemky. 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 všech úloh v časovém limitu, je potřeba ještě trochu tvůrčí invence a porozumění různým souvislostem v látce přednášky.

Pro získání zápočtu by vám mělo stačit pár bodů jako kompenzace 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.

V následujícím textu naleznete vzorové řešení. Doporučuji si je pečlivě přečíst pro přípravu ke zkoušce. Snažil jsem se ukázat, nebo alespoň naznačit, vždy několik postupů vedoucích k řešení a rovněž poukázat na různé souvislosti.

Zápočtová písemka z kvantové mechaniky I

čas na řešení: 90min

Úloha 1(10 bodů)
Ve stavovém prostoru lineárního harmonického oscilátoru je definován operátor $\hat{U} = e^{\alpha(\hat{a}-\hat{a}^\dagger)}$, kde $\hat{a}$ je anihilační operátor a $\alpha > 0$ konstanta. Ukažte, že tento operátor je unitární. Pomocí základního stavu oscilátoru $|0\rangle$ definujeme stav $|\psi\rangle = \hat{U}|0\rangle$. Jaká je střední hodnota polohy v tomto stavu?

Řešení (Část I. unitarita):
První část je přímočaré ověření definice unitárního operátoru ($\hat{U}^\dagger\hat{U} = \hat{U}\hat{U}^\dagger = \hat{I}$). Nejdříve spočteme $\hat{U}^\dagger$. Při tom je třeba si uvědomit, že při sdružení reálné funkce (s reálnými koeficienty Taylorova rozvoje) operátoru, stačí sdružit argument:

$$\hat{U}^\dagger = e^{\alpha(\hat{a}^\dagger-\hat{a})} = e^{-\alpha(\hat{a}-\hat{a}^\dagger)}.$$

Dostali jsme exponencielu stejného operátoru jen s opačným znaménkem a tedy platí

$$\hat{U}^\dagger\hat{U} = \hat{U}\hat{U}^\dagger = e^{\alpha(\hat{a}-\hat{a}^\dagger)-\alpha(\hat{a}-\hat{a}^\dagger)} = e^0 = \hat{I}.$$

Při vyčíslování součinu exponenciel, mnozí z vás zazmatkovali, protože si uvědomili, že operátory $\hat{a}$ a $\hat{a}^\dagger$ nekomutují, ale nedošlo jim, že podstatné je, že v argumenty exponenciel $(\hat{a}-\hat{a}^\dagger)$ a $-(\hat{a}-\hat{a}^\dagger)$ jako celek samozřejmě komutují. Kolega Kániský to přesto dopočítal správným užitím Glauberovy identity, ale je to zbytečná komplikace.

Řešení (Část II. střední hodnota polohy):
Na nejsnazší řešení bohužel nikdo nepřišel, ačkoli jsem se během přednášky a cvičení několikrát snažil upozornit na vlastnosti a výhodnost použití operátoru posunutí. S použitím oficiálního taháku si můžeme ověřit, že

$$(\hat{a}-\hat{a}^\dagger) = \sqrt{2}\frac{i}{p_0}\hat{p} = \sqrt{2}\frac{i}{\hbar}x_0\hat{p}.$$

Operátor

$$\hat{U} = e^{\alpha(\hat{a}-\hat{a}^\dagger)} = e^{\alpha\sqrt{2}\frac{i}{\hbar}x_0\hat{p}} \equiv e^{-\frac{i}{\hbar}d\hat{p}}$$

tedy představuje operátor posunutí o $d = -\sqrt{2}x_0\alpha$. Vlnová funkce $|\psi\rangle = \hat{U}|0\rangle$ je posunutím základního stavu harmonického oscilátoru. Střední hodnota polohy v základním stavu harmonického oscilátoru je 0 (to buď víte "by heart" nebo je to vidět z toho, že při výpočtu této střední hodnoty integrujete součin sudé a liché funkce). Střední hodnota posunuté funkce bude tedy o d větší a tedy

$$\langle\psi|x|\psi\rangle = 0 + d = -\sqrt{2}x_0\alpha.$$

Poznámka:

I když si nepamatujete vyjádření operátoru posunutí, lze využít toho, že $\hat{U}$ je jednoduchou funkcí operátoru hybnosti. Kolega Jungwirth byl jediný, který se o to pokusil, ale bohužel to nedokončil. Pro srovnání si napišme jak by to asi vypadalo. Nejdříve najdeme vlnovou funkci základního stavu harmonického oscilátoru v p-reprezentaci. Můžete to udělat Fourierovou transformací vlnové funkce v x-reprezentaci. Já to zde takto dělat nebudu, protože si pamatuji, že hamiltonián harmonického oscilátoru vypadá identicky v p- a v x- reprezentaci (viz přednáška) a tudíž i vlnová funkce základního stavu v obou reprezentacích bude identická. Můžeme tedy použít taháku a zaměnit ve vzorci x za p

$$\langle p|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{p_0\sqrt{\pi}}} e^{-\frac{p^2}{2p_0^2}}$$

Dále si vzpomenu na vyjádření operátorátoru polohy $\hat{x} = i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}p}$ v p-reprezentaci. Hledaná střední hodnota tedy je

$$\begin{aligned}
\langle\psi|\hat{x}|\psi\rangle &= \langle 0|\hat{U}^\dagger\hat{x}\hat{U}|0\rangle = \frac{1}{p_0\sqrt{\pi}}\int \exp\left\{-i\alpha\sqrt{2}\frac{p}{p_0} - \frac{p^2}{2p_0^2}\right\}\left[i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}p}\right]\exp\left\{i\alpha\sqrt{2}\frac{p}{p_0} - \frac{p^2}{2p_0^2}\right\}\mathrm{d}p \\
&= \frac{i\hbar}{p_0\sqrt{\pi}}\int \exp\left\{-i\alpha\sqrt{2}\frac{p}{p_0} - \frac{p^2}{2p_0^2}\right\}\left[i\alpha\sqrt{2} - \frac{p}{p_0}\right]\exp\left\{i\alpha\sqrt{2}\frac{p}{p_0} - \frac{p^2}{2p_0^2}\right\}\mathrm{d}\left(\frac{p}{p_0}\right) \\
&= -\alpha\sqrt{2}\frac{\hbar}{p_0\sqrt{\pi}}\int e^{-y^2}\mathrm{d}y - \frac{i\hbar}{p_0\sqrt{\pi}}\int ye^{-y^2}\mathrm{d}y = -\alpha\sqrt{2}x_0
\end{aligned}$$

Řešení (Část II. střední hodnota polohy- jiný postup):

Někteří z vás (kolegové Dvořák, Karamazov a Veselý) si vzpomněli na cvičení s komutačními relacemi a našli pěkné alternativní řešení. Nejdříve opět napíšeme hledanou střední hodnotu a upravíme je s použitím identity $\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A} + [\hat{A}, \hat{B}]$

$$\langle\psi|\hat{x}|\psi\rangle = \langle 0|\hat{U}^\dagger\hat{x}\hat{U}|0\rangle = \langle 0|\hat{U}^\dagger\hat{U}\hat{x}|0\rangle + \langle 0|\hat{U}^\dagger[\hat{x}, \hat{U}]|0\rangle.$$

Předně výraz $\hat{U}^\dagger\hat{U} = \hat{I}$, jak jsme ověřili výše. Pro úpravu druhého členu můžeme použít vztahu (vzpomeňte na cvičení 5 s komutačními relacemi)

$$[\hat{x}, f(\hat{p})] = i\hbar f'(\hat{p}),$$

takže

$$\langle\psi|\hat{x}|\psi\rangle = \langle 0|\hat{x}|0\rangle + i\hbar\langle 0|\hat{U}^\dagger\alpha\sqrt{2}\frac{i}{\hbar}x_0\hat{U}|0\rangle = -\alpha\sqrt{2}x_0\langle 0|\hat{U}^\dagger\hat{U}|0\rangle,$$

což vede na stejný výsledek jako předchozí způsob. Objevily se různé varianty tohoto řešení, které nepoužívají komutátor $[x, f(p)]$, ale například zvlášť $[a, f(a - a^\dagger)]$ a $[a^\dagger, f(a - a^\dagger)]$, ale zde prezentovaná varianta mi přijde nejrychlejší.

Úloha 2(10 bodů)
Předpokládejte, že stavový prostor částice v kvantové 4-tečce je lineárním obalem ortonormální báze $\{|1\rangle, |2\rangle, |3\rangle, |4\rangle\}$. Dále předpokládejme, že hamiltonián takové částice je

$$\hat{H} = \epsilon \sum_{m=1}^{4} |m\rangle\langle m| - t \sum_{n=1}^{4} \sum_{m\neq n} |m\rangle\langle n|.$$

Ze symetrie uhodneme, že vektor $|\psi\rangle = |1\rangle + |2\rangle + |3\rangle + |4\rangle$ je vlastním vektorem hamiltoniánu. Ověřte! Napište projekční operátor $\hat{P}_0$ na tento stav a projektor $\hat{P}_1$ na jeho ortogonální doplněk. Ukažte, že $\hat{H}$ lze vyjádřit jako lineární kombinaci $\hat{P}_0$ a $\hat{P}_1$. Nalezněte vlastní čísla a vlastní vektory $\hat{H}$.

Řešení:

Klíčem k efektivnímu řešení této úlohy bylo dobře číst a porozumět zadání. Přímá diagonalizace zadaného hamiltoniánu hledáním kořenů je sice možná, ale asi příliš časově náročná. V principu lze rovněž vlastní vektory uhodnout, pokud rozumíte symetrii úlohy, ale to je nad rámec látky probírané v rámci přednášky.

Pojďme se tedy držet zadání a prověřme vlastní vektor $|\psi\rangle = \sum |k\rangle$

$$\begin{aligned}
\hat{H}|\psi\rangle &= \epsilon \sum_m \sum_k |m\rangle\langle m|k\rangle - t \sum_n \sum_{m\neq n} \sum_k |m\rangle\langle n|k\rangle \\
&= \epsilon \sum_m \sum_k |m\rangle \delta_{mk} - t \sum_n \sum_{m\neq n} \sum_k |m\rangle \delta_{nk} \\
&= \epsilon \sum_m |m\rangle - t \sum_n \sum_{m\neq n} |m\rangle = (\epsilon - 3t) \sum_m |m\rangle,
\end{aligned}$$

kde jsme užili ortonormality báze $\langle m|n\rangle = \delta_{mn}$. Vidíme tedy, že $|\psi\rangle$ je skutečně vlastním vektorem odpovídajícím vlastnímu číslu $\epsilon - 3t$.

Je užitečné si rovněž uvědomit maticový zápis hamiltoniánu. První člen v definici $\hat{H}$ říká, že diagonální členy jsou rovny ϵ. Druhý člen definuje zase nediagonální členy, takže ověření vlastního vektoru lze provést také takto

$$\hat{H}|\psi\rangle = \begin{pmatrix} \epsilon & -t & -t & -t \\ -t & \epsilon & -t & -t \\ -t & -t & \epsilon & -t \\ -t & -t & -t & \epsilon \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \epsilon - 3t \\ \epsilon - 3t \\ \epsilon - 3t \\ \epsilon - 3t \end{pmatrix} = (\epsilon - 3t)|\psi\rangle$$

Projekční operátor $\hat{P}_0$ napíšeme snadno pokud nezapomeneme, že vektor $|\psi\rangle$ je třeba normovat. Tedy

$$\hat{P}_0 = \frac{|\psi\rangle\langle\psi|}{\langle\psi|\psi\rangle} = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 \end{pmatrix}.$$

Vzhledem k tomu, že lineární obal vektoru $|\psi\rangle$ a jeho ortogonální doplněk dají dohromady (pomocí operace direktního součtu) celý hilbertův prostor, platí relace úplnosti $\hat{P}_0 + \hat{P}_1 = \hat{I}$ a tedy

$$\hat{P}_1 = \hat{I} - \hat{P}_0 = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 3 & -1 & -1 & -1 \\ -1 & 3 & -1 & -1 \\ -1 & -1 & 3 & -1 \\ -1 & -1 & -1 & 3 \end{pmatrix}.$$

Poznámka: Pokud by vám nedošla relace $\hat{P}_1 = \hat{I} - \hat{P}_0$ pro projektor ortogonální na $\hat{P}_0$, můžete najít tři navzájem kolmé vektory, ortogonální k $|\psi\rangle$, správně je normovat a spočíst $\hat{P}_1 = |\phi_1\rangle\langle\phi_1| + |\phi_2\rangle\langle\phi_2| + |\phi_3\rangle\langle\phi_3|$. Tyto vektory nejsou určeny jednoznačně (ale $\hat{P}_1$ vyjde vždy stejně!) - najdete je jako jádro matice P_0. Lze například volit

$$|\phi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{12}}\begin{pmatrix} 3 \\ -1 \\ -1 \\ -1 \end{pmatrix} \qquad |\phi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}}\begin{pmatrix} 0 \\ 2 \\ -1 \\ -1 \end{pmatrix} \qquad |\phi_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix}$$

Poslední dvě otázky ze zadání spolu úzce souvisí. Ve hledaném rozkladu

$$\hat{H} = \alpha\hat{P}_0 + \beta\hat{P}_1$$

známe spektrální rozklad operátoru. Koeficienty lze snadno nalézt srovnáním levé a pravé strany této rovnice v maticovém tvaru (rozmyslete), ale $\alpha = \epsilon - 3t$ už známe neboť je to nalezené vlastní číslo. Druhé vlastní číslo můžeme dopočítat také takto

$$\beta\hat{P}_1 = \hat{H} - \alpha\hat{P}_0 = \begin{pmatrix} \epsilon & -t & -t & -t \\ -t & \epsilon & -t & -t \\ -t & -t & \epsilon & -t \\ -t & -t & -t & \epsilon \end{pmatrix} - \frac{\epsilon - 3t}{4}\begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 \end{pmatrix} = \frac{\epsilon + t}{4}\begin{pmatrix} 3 & -1 & -1 & -1 \\ -1 & 3 & -1 & -1 \\ -1 & -1 & 3 & -1 \\ -1 & -1 & -1 & 3 \end{pmatrix}$$

a tedy $\beta = \epsilon + t$ je druhé vlastní číslo. Vlastní vektory už známe: $|\psi\rangle$, $|\phi_1\rangle$, $|\phi_2\rangle$ a $|\phi_3\rangle$.

Úloha 3(10 bodů)
Mějme dvě částice se spinem 1/2 připravené ve stavu $|\psi\rangle = |{+}{+}\rangle$ v němž má každá z nich projekci spinového momentu hybnosti na osu z rovnu $+\hbar/2$. Uvažujme operátor $\hat{S}_e$, který udává projekci vektoru celkového spinového momentu obou částic $\vec{S} = \vec{s}^{(1)} + \vec{s}^{(2)}$ do směru $\vec{e} = \frac{1}{\sqrt{3}}(1,1,1)$. Jaká je pravděpodobnost, že měřením veličiny S_e nalezneme hodnotu 0 a jaký bude stav po měření?

Řešení:
Úloha se opírá o porozumění popisu systému dvou částic se spinem 1/2, tj. o práci v hilbertově prostoru daném direktním součinem (viz cvičení 2 a 3). Nejdříve je potřeba sestrojit operátor $\hat{S}_e$. Operátor vektoru spinového momentu hybnosti jedné částice je dán pomocí Pauliho matic. Jejich projekce na vektor $\vec{e}$ je

$$\hat{\sigma}_e = \vec{\sigma}\cdot\vec{e} = \left(\left\{\begin{array}{cc} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{array}\right\}, \left\{\begin{array}{cc} 0 & -i \\ i & 0 \end{array}\right\}, \left\{\begin{array}{cc} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{array}\right\}\right)\cdot\left(\frac{1}{\sqrt{3}}, \frac{1}{\sqrt{3}}, \frac{1}{\sqrt{3}}\right) = \frac{1}{\sqrt{3}}\left\{\begin{array}{cc} 1 & u^* \\ u & -1 \end{array}\right\},$$

kde jsme zavedli zkratku $u = 1 + i$. Operátor $\hat{S}_e$ dostaneme pomocí direktního součinu. V prostoru dvou částic se spinem 1/2 si zavedeme bázi vytvořenou z vlastních vektorů z-tové složky jednotlivých částic $\{|++\rangle, |+-\rangle, |-+\rangle, |--\rangle\}$. V této bázi vyjádříme

$$\begin{aligned}\hat{S}_e &= \frac{\hbar}{2}(\hat{\sigma}_e\otimes\hat{I} + \hat{I}\otimes\hat{\sigma}_e) = \frac{\hbar}{2}\frac{1}{\sqrt{3}}\left\{\begin{pmatrix} 1 & u^* & 0 & 0 \\ u & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & u^* \\ 0 & 0 & u & -1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1 & 0 & u^* & 0 \\ 0 & 1 & 0 & u^* \\ u & 0 & -1 & 0 \\ 0 & u & 0 & -1 \end{pmatrix}\right\} \\ &= \frac{\hbar}{2}\frac{1}{\sqrt{3}}\begin{pmatrix} 2 & u^* & u^* & 0 \\ u & 0 & 0 & u^* \\ u & 0 & 0 & u^* \\ 0 & u & u & -2 \end{pmatrix}.\end{aligned}$$

Pro předpovězení výsledků měření potřebujeme znát vlastní vektory odpovídající vlastní hodnotě 0. Ty najdeme řešením soustavy rovnic

$$\begin{pmatrix} 2 & u^* & u^* & 0 \\ u & 0 & 0 & u^* \\ u & 0 & 0 & u^* \\ 0 & u & u & -2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a \\ b \\ c \\ d \end{pmatrix} = 0.$$

Bázi v prostoru řešení můžeme volit například

$$|\phi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix}, \qquad |\phi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}}\begin{pmatrix} -u^* \\ 1 \\ 1 \\ u \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{6}}\begin{pmatrix} i-1 \\ 1 \\ 1 \\ i+1 \end{pmatrix}.$$

Hledaná pravděpodobnost je

$$p_0 = |\langle\phi_1|\psi\rangle|^2 + |\langle\phi_2|\psi\rangle|^2 = 0 + \frac{|u|^2}{6} = \frac{1}{3}.$$

Stav po měření je $|\phi_2\rangle$, protože projekce $|\psi\rangle$ na vektor $|\phi_1\rangle$ je 0.

Poznámka: Existují alternativní přístupy. Například si můžeme uvědomit, že výsledek měření na něž se ptáme, závisí jen na úhlu mezi vektorem $\vec{e}$ a osou z. Můžeme změnit souřadný systém, tak že položíme osu z do vektoru $\vec{e}$ a měřit z-tovou složku celkového spinového momentu hybnosti, jehož vyjádření v bázi $\{|++\rangle, |+-\rangle, |-+\rangle, |--\rangle\}$ je

$$\hat{S}_z = \frac{\hbar}{2}(\hat{\sigma}_z \otimes \hat{I} + \hat{I} \otimes \hat{\sigma}_z) = \hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Počáteční vektor $|\psi\rangle$ má obě částice ve stavu

$$|e+\rangle = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \equiv \frac{1}{\sqrt{6-2\sqrt{3}}} \begin{pmatrix} 1-i \\ \sqrt{3}-1 \end{pmatrix},$$

který najdeme jako vlastní vektor matice σ_e odpovídající vlastní hodnotě $+1$. Tento vektor je roven

$$|\psi\rangle = |e+\rangle \otimes |e+\rangle = \begin{pmatrix} aa \\ ab \\ ba \\ bb \end{pmatrix}.$$

Hledanou pravděpodobnost najdeme projekcí vektoru $|\psi\rangle$ na vlastní vektory matice S_z odpovídající vlastnímu číslu 0 (vyzkoušejte, že dostanete $2|a|^2|b|^2$, tj. stejný výsledek jako předchozím postupem).

Úloha 4(10 bodů)
Částice se nachází ve sférické, nekonečně hluboké, potenciálové jámě o poloměru a a její stav je popsán vlnovou funkcí

$$\psi(\vec{r}) = (x+y)^2 \sin(\tfrac{\pi}{a} r).$$

Jaké hodnoty kvadrátu momentu hybnosti $\hat{L}^2$ můžeme naměřit v tomto stavu a s jakou pravděpodobností? Jaká bude vlnová funkce pokud naměříme nejmenší z těchto hodnot?

Řešení:
Tato úloha dopadla asi ze všech nejhůře. Nikdo se nepřiblížil plnému ohodnocení a tak jsem se nakonec rozhodl zdvojnásobit počet bodů za tento příklad. To znamená, že deset bodů mohl dostat už ten kdo správně identifikoval, které sférické harmoniky budou v rozvoji vlnové funkce, bez ohledu na konkrétní hodnoty koeficientů.

Pro řešení úlohy je důležité si uvědomit, že operátory složek vektoru orbitálního momentu hybnosti závisí jen na úhlových proměnných (ve sférických souřadnicích) a proto pro zodpovězení otázky na měření momentu hybnosti, můžeme vlnovou funkci vynásobit nebo vydělit libovolnou funkcí $r \equiv \sqrt{x^2+y^2+z^2}$. Úhlová část vlnové funkce tedy je $u(\theta,\phi) = (x+y)^2/r^2$. Tuto funkci můžeme rozvést do sférických harmonik. Výraz $(x+y)^2$ je homogenní polynom druhého stupně a působením Laplaceova operátoru dostaneme $\Delta(x+y)^2 = 4 \neq 0$. Rozvoj do sférických harmonik tedy bude obsahovat nejen $l=2$, ale i $l<2$. Parita funkce $u(\theta,\phi)$, při záměně $(x,y,z) \to (-x,-y,-z)$ je sudá, a rozvoj do sférických harmonik tedy nemůže obsahovat lichá l. Odpověď na první otázku tedy zní, že můžeme naměřit hodnoty $\hat{L}^2$ rovny $\hbar^2 l(l+1)$ pro $l=0$ a $l=2$.

Pro zodpovězení dalších otázek potřebujeme koeficienty rozvoje

$$u(\theta,\phi) = c_0 Y_{00} + c_{20} Y_{20} + c_{21} Y_{21} + c_{2-1} Y_{2-1} + c_{22} Y_{22} + c_{2-2} Y_{2-2}.$$

Nahlédnutím do tabulky sférických harmonik v taháku ihned vidíme, že

$$\begin{aligned}
\sqrt{\frac{32\pi}{15}}\left(Y_{22} - Y_{2-2}\right) &= 4i\frac{xy}{r^2}, \\
\sqrt{\frac{16\pi}{5}} Y_{20} = \frac{3z^2 - r^2}{r^2} &= \frac{2z^2 - x^2 - y^2}{r^2}, \\
\sqrt{4\pi} Y_{00} = \frac{r^2}{r^2} &= \frac{x^2+y^2+z^2}{r^2}.
\end{aligned}$$

Odtud plyne

$$\begin{aligned}
\frac{2xy}{r^2} &= -\frac{i}{2}\sqrt{\frac{32\pi}{15}}\left(Y_{22} - Y_{2-2}\right), \\
\frac{x^2+y^2}{r^2} &= -\frac{1}{3}\left(\sqrt{\frac{16\pi}{5}} Y_{20} - 2\sqrt{4\pi} Y_{00}\right),
\end{aligned}$$

neboli

$$(c_{00}, c_{20}, c_{21}, c_{2-1}, c_{22}, c_{2-2}) = \left(\frac{2}{3}\sqrt{4\pi}, -\frac{1}{3}\sqrt{\frac{16\pi}{5}}, 0, 0, -\frac{i}{2}\sqrt{\frac{32\pi}{15}}, \frac{i}{2}\sqrt{\frac{32\pi}{15}}\right).$$

Kvadrát normy tohoto vektoru je

$$N = \sum |c_{lm}|^2 = \left(\frac{4}{9}4 + \frac{1}{9}\frac{16}{5} + \frac{8}{15} + \frac{8}{15}\right)\pi = \frac{16.5 + 16 + 3.16}{9.5}\pi = \frac{9.16}{9.5}\pi = \frac{16}{5}\pi.$$

Pravděpodobnost nalezení $l = 0$ je

$$p_0 = |c_{00}^2|/N = \frac{5}{9}.$$

Pravděpodobnost nalezení $l = 2$ je doplňkem do 1, tj $p_2 = 4/9$. Stav po naměření nejmenší hodnoty $l = 0$ dostaneme z rozvoje vynecháním koeficientů pro $l \neq 0$, radiální průběh zůstane zachován, tj. $\overline{\psi}(\vec{r}) = r^2 \sin\left(\frac{\pi}{a} r\right)$. (normování neřešíme)

Alternativní řešení:
Pokud si člověk uvědomí, že v rozvoji funkce $u(\theta, \phi) = (x+y)^2/r^2$ budou jen sférické harmoniky s $l = 0$ a $l = 2$, lze hledané pravděpodobnosti nalézt projekcí na sférickou harmoniku Y_{00}. Tento postup není zase tak pracný pokud jste zběhlí v integraci ve sférických souřadnicích.

Nejdříve si funkci u přepíšeme do sférických souřadnic užitím vzorců $x = r \sin\theta \cos\phi$ a $y = r \sin\theta \cos\phi$

$$u = (\cos\phi + \sin\phi)^2 \sin^2\theta = (1 + 2\cos\phi \sin\phi) \sin^2\theta.$$

Normovací konstantu najdeme integraci $|u|^2$ přes jednotkovou sféru

$$\begin{aligned} N^2 &= \int_0^\pi \sin^4\theta \sin\theta \mathrm{d}\theta \quad \int_0^{2\pi} (1 + \sin 2\phi)^2 \mathrm{d}\phi \\ &= \int_0^\pi (1 - \cos^2\theta)^2 \sin\theta \mathrm{d}\theta \int_0^{2\pi} \left[1 + 2\sin 2\phi + (\sin 2\phi)^2\right] \mathrm{d}\phi \end{aligned}$$

Druhý z integrálů vypočteme zpaměti: první člen $\int 1 \mathrm{d}\phi$ dá samozřejmě 2π, druhý člen $\int \sin 2\phi \mathrm{d}\phi$ je nula, ze symetrie funkce sinus a třetí člen $\int \sin^2 2\phi \mathrm{d}\phi$ je stejně velký jako $\int \cos^2 2\phi \mathrm{d}\phi$ a tedy půlka z $\int 1 \mathrm{d}\phi = 2\pi$. Máme tedy

$$N^2 = 3\pi \int_0^\pi (1-\cos^2\theta)^2 \sin\theta \mathrm{d}\theta = 3\pi \int_{-1}^1 (1-y^2)^2 \mathrm{d}y = 3\pi\, 2 \int_0^1 (1-2y^2+y^4) \mathrm{d}y = 6\pi \left[1 - \frac{2}{3} + \frac{1}{5}\right] = 6\pi \frac{8}{15}.$$

Pravděpodobnost naměření hodnoty kvadrátu momentu hybnosti odpovídající $l = 0$ tedy je

$$p_0 = N^{-2} |\langle Y_{00}|u\rangle|^2 = \frac{5}{16\pi} \frac{1}{4\pi} \left| \int_0^\pi \sin^2\theta \sin\theta \mathrm{d}\theta \int_0^{2\pi} (1 + \sin 2\phi) \mathrm{d}\phi \right|^2.$$

Druhý z integrálů opět vidíme zpaměti $\int (1+\sin 2\phi) \mathrm{d}\phi = 2\pi$. První integrál spočteme substitucí

$$\int_0^\pi \sin^2\theta \sin\theta \mathrm{d}\theta = \int_0^\pi [1 - \cos^2]\theta \sin\theta \mathrm{d}\theta = \int_{-1}^1 [1 - y^2] \mathrm{d}y = 2\left[1 - \frac{1}{3}\right] = \frac{4}{3}.$$

Celkově tedy máme

$$p_0 = \frac{5}{16.4\pi^2} \left[2\pi \frac{4}{3}\right]^2 = \frac{5}{9}.$$

Úloha 5(10 bodů)
Bezstrukturní částice s hmotností m je zachycena ve vázaném stavu v potenciálu, který je aproximován jednorozměrnou delta-jámou $V(x) = -\lambda\delta(x)$. Jaká je hustota pravděpodobnosti naměření hybnosti p v tomto stavu? Jaká je pravděpodobnost, že v tomto stavu naměříme hybnost $p > \frac{\lambda m}{\hbar}$?

Mohou se hodit:

$$\int_1^\infty \frac{1}{1+x^2} = \frac{\pi}{4}, \qquad \int_1^\infty \frac{1}{(1+x^2)^2} = \frac{\pi}{8} - \frac{1}{4}, \qquad \int_1^\infty \frac{1}{(1+x^2)^3} = \frac{3\pi}{32} - \frac{1}{4},$$

$$\int_{-\infty}^\infty \frac{1}{1+x^2} = \pi, \qquad \int_{-\infty}^\infty \frac{1}{(1+x^2)^2} = \frac{\pi}{2}, \qquad \int_{-\infty}^\infty \frac{1}{(1+x^2)^3} = \frac{3\pi}{8}.$$

Řešení:
Stacionární Schrödingerovu rovnici

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi'' - \lambda\delta(x)\psi = E\psi$$

nejdříve vydělením faktorem u druhé derivace přepíšeme ve tvaru

$$-\psi'' - \overline{\lambda}\delta(x)\psi = -\kappa^2\psi,$$

kde jsme si zavedli zkratky $\overline{\lambda} = 2m\lambda/\hbar^2$ a $\kappa = \sqrt{2m|E|}/\hbar$. Současně jsme použili faktu, že energie vázaného stavu je záporná. Člen s delta-funkčním potenciálem nepřispívá pro $x \neq 0$. V takových bodech je obecné řešení této rovnice $\psi = Ae^{-\kappa x} + Be^{\kappa x}$. Konstanty A a B budou mít různé hodnoty na intervalech $(-\infty, 0)$ a $(0, \infty)$ a určíme je použitím okrajových podmínek, spojitosti vlnové funkce a normováním:

1. Vlnová funkce nesmí růst exponenciálně v nekonečnu, tj. řešení pro $x > 0$ je $\psi = Ae^{-\kappa x}$.
2. Podobně chování v mínus nekonečnu dá pro $x < 0$ tvar $\psi = Be^{\kappa x}$.
3. Spojitost vlnové funkce v $x = 0$ vyžaduje $A = B$, neboli $\psi = Ae^{-\kappa|x|}$.
4. Integrací najdeme správně normovanou funkci

$$\int_{-\infty}^\infty |\psi|^2 \mathrm{d}x = 2|A|^2 \int_0^\infty e^{-2\kappa x} = \frac{|A|^2}{\kappa} = 1$$

neboli $\psi(x) = \sqrt{\kappa}e^{-\kappa|x|}$.

Zatím jsme nepoužili podmínku pro napojování derivace. Vypadá to, že už je vlnová funkce úplně určená, a nemáme další prostor pro splnění nějaké podmínky, ale tato dodatečná podmínka určuje energii vázaného stavu. Bez znalosti této energie není vlnová funkce zcela určena. Jak víme z přednášky, delta-funkční člen ve Schrödingerově rovnici znamená, že v první derivace vlnové funkce má skok

$$\Delta\psi'(x) \equiv \lim_{\epsilon\to 0+} [\psi'(\epsilon) - \psi'(-\epsilon)] = -\overline{\lambda}\psi(0)$$

Dosazením funkce $\psi(x) = \sqrt{\kappa}e^{-\kappa|x|}$ do této rovnice dostaneme podmínku $-2\kappa = -\overline{\lambda}$ neboli $\kappa = \overline{\lambda}/2$. Tato informace už stačí k dořešení úlohy, ale pro úplnost si ještě řekněme, že tato podmínka rovněž udává energii jediného vázaného stavu jako

$$E = -\frac{\hbar^2\kappa^2}{2m} = -\frac{\hbar^2\overline{\lambda}^2}{8m} = -\frac{m\lambda^2}{2\hbar^2}.$$

Pro zodpovězení otázek kladených v úloze, nejdříve přejdeme do p-reprezentace

$$\begin{aligned}\psi(p) &= \int \langle p|x\rangle\langle x|\psi\rangle \mathrm{d}x = \sqrt{\kappa}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{d}x}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{-\frac{i}{\hbar}px-\kappa|x|} \\ &= \sqrt{\frac{\kappa}{2\pi\hbar}}\left\{\int_{-\infty}^{0} e^{-\frac{i}{\hbar}px+\kappa x}\mathrm{d}x + \int_{0}^{\infty} e^{-\frac{i}{\hbar}px-\kappa x}\mathrm{d}x\right\} \\ &= \sqrt{\frac{\kappa}{2\pi\hbar}}\left\{\frac{\hbar}{\kappa\hbar - ip} + \frac{\hbar}{\kappa\hbar + ip}\right\} = \frac{1}{\sqrt{2\pi\kappa\hbar}}\,\frac{2}{1+(\frac{p}{\kappa\hbar})^2}.\end{aligned}$$

Tato vlnová funkce vznikla unitární transformací z normalizované funkce a není ji tudíž třeba více normovat. Všiměte si rovněž, že integrály v druhém řádku jsou navzájem komplexně sdružené. Stačilo tedy spočíst jen jeden z nich. Je dobré si též uvědomit, že přirozená škála hybnosti pro náš problém je dána konstantou $p_0 = \kappa\hbar = m\lambda/\hbar$. Hustota naměření hybnosti p ve stavu $|\psi\rangle$ je dána kvadrátem vlnové funkce v p-reprezentaci

$$\rho(p) = |\psi(p)|^2 = \frac{2}{\pi p_0}\left\{1 + (p/p_0)^2\right\}^{-2}.$$

Druhou otázku zodpovíme jednoduchou integrací

$$P(p > p_0) = \int_{p_0}^{\infty}\rho(p)\mathrm{d}p = \frac{2}{\pi}\int_{p_0}^{\infty}\frac{1}{[1+(p/p_0)^2]^2}\frac{\mathrm{d}p}{p_0} = \frac{2}{\pi}\left\{\frac{\pi}{8} - \frac{1}{4}\right\} = \frac{1}{4} - \frac{1}{2\pi} \doteq 0.09,$$

přičemž jsme využili hodnotu jdenoho z integrálů uvedených v nápovědě.