Úvod

V tomto dokumentu naleznete zadání a vzorové řešení zápočtové písemky z přednášky "Kvantová mechanika I" za ZS 2016/17. 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.

Na získání zápočtu by vám mělo stačit získat pár bodů, k vykompenzování 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 ukázat, nebo alespoň naznačit vždy několik postupů vedoucích k řešení a rovněž poukázat na různé souvislosti.

Poznámka: Řešení pro každou úlohu by se mělo vejít na jednu stránku (včetně zadání). To že jsou řešení delší je dáno diskusí různých metod, které lze použít.

Úloha 1(10 bodů)
Uvažujme bezstrukturní částici ve dvou dimenzích s operátorem polohy $\vec{r} = (\hat{x}, \hat{y})$, operátorem hybnosti $\vec{p} = (\hat{p}_x, \hat{p}_y) = -i\hbar(\partial_x, \partial_y)$ a momentu hybnosti $\hat{L} = \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x$. Najděte komutátory $[\hat{x}, \hat{L}]$, $[\hat{p}_y, \hat{L}]$ a $[\hat{r}^2, \hat{L}]$.

Řešení (1. způsob):
Je dobré začít od kanonickými komutačními relacemi

$$[\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar, \quad [\hat{x}, \hat{p}_y] = 0, \quad [\hat{x}, \hat{y}] = 0,$$
$$[\hat{y}, \hat{p}_y] = i\hbar, \quad [\hat{y}, \hat{p}_x] = 0, \quad [\hat{p}_x, \hat{p}_y] = 0,.$$

Dále postupujeme přímočaře užitím pravidla $[\hat{A}\hat{B}, \hat{C}] = \hat{A}[\hat{B}, \hat{C}] + [\hat{A}, \hat{C}]\hat{B}$. Tedy

$$[\hat{x}, \hat{L}] \;=\; [\hat{x}, \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x] = \hat{x}\underbrace{[\hat{x}, \hat{p}_y]}_{0} + \underbrace{[\hat{x}, \hat{x}]}_{0}\hat{p}_y - \hat{y}\underbrace{[\hat{x}, \hat{p}_x]}_{i\hbar} - \underbrace{[\hat{x}, \hat{y}]}_{0}\hat{p}_x = -i\hbar\hat{y},$$

$$[\hat{p}_y, \hat{L}] \;=\; [\hat{p}_y, \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x] = \hat{x}\underbrace{[\hat{p}_y, \hat{p}_y]}_{0} + \underbrace{[\hat{p}_y, \hat{x}]}_{0}\hat{p}_y - \hat{y}\underbrace{[\hat{p}_y, \hat{p}_x]}_{0} - \underbrace{[\hat{p}_y, \hat{y}]}_{-i\hbar}\hat{p}_x = -i\hbar\hat{p}_x,$$

$$[\hat{x}^2 + \hat{y}^2, \hat{L}] \;=\; \hat{x}[\hat{x}, \hat{L}] + \underbrace{[\hat{x}, \hat{L}]}_{-i\hbar\hat{y}}\hat{x} + \hat{y}[\hat{y}, \hat{L}] + \underbrace{[\hat{y}, \hat{L}]}_{i\hbar\hat{x}}\hat{y} = i\hbar(-\hat{x}\hat{y} - \hat{y}\hat{x} + \hat{y}\hat{x} + \hat{x}\hat{y}) = 0,$$

Jiné řešení:
Mnozí z Vás zřejmě nemají rádi kanonické komutační relace a postupovali tak, že zapůsobili komutační relací na vlnovou funkci a výsledek se snažili upravit pomocí Leibnitzova pravidla:

$$[\hat{x}, \hat{L}]\psi(x, y) \;=\; [\hat{x}, \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x]\psi = -i\hbar(x^2\partial_y\psi - xy\partial_x\psi - x\underbrace{\partial_y x\psi}_{x\partial_y\psi} + y\underbrace{\partial_x x\psi}_{\psi + x\partial_x\psi}) = -i\hbar\hat{y}\psi,$$

$$[\hat{p}_y, \hat{L}]\psi \;=\; [\hat{p}_y, \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x]\psi = (-i\hbar)^2(\partial_y x\partial_y\psi - \underbrace{\partial_y y\partial_x\psi}_{y\partial_y\partial_x\psi + \partial_x\psi} - x\partial_y\partial_y\psi + y\partial_x\partial_y\psi) = -i\hbar\hat{p}_x\psi,$$

Podobně se dá spočíst i poslední komutátor, i když je tam ještě více členů, ale ty se nakonec vynulují. Mnoho z Vás si uvědomilo, že operátor $\hat{L}$ má jednodušší vyjádření v polárních souřadnicích

$$\hat{L} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\phi}.$$

Toto vyjádření je nezávislé na souřadnici r, a proto musí tento operátor komutovat s operátorem $\hat{r}^2$. Většinou jste nezdůvodnili proč je toto vyjádření operátoru $\hat{L}$ správné. Operátor $\hat{L}$ je formálně totožný s operátorem $\hat{L}_z$ pro částici ve třech dimenzích, jehož tvar jsme si odvozovali ve sférických souřadnicích. Operátor $\hat{L}$ pak představuje restrikci třírozměrného $\hat{L}_z$ do roviny $z = 0$.

Poznámka:
Kolega ??? si všiml, že hledané komutátory jsou vyjádřením obecných relací

$$[\hat{V}_\alpha, \hat{L}_\beta] = i\hbar\epsilon_{\alpha\beta\gamma}\hat{V}_\gamma$$

platící pro libovolný vektorový operátor a napsal rovnou výsledek. Tento postup jsem považoval rovněž za správný, i když je to opět s výhradou, že striktně řečeno bychom měli zdůvodnit podrobněji restrikci operátorů ze tří dimenzí do roviny $z = 0$.

Úloha 2(10 bodů)
Předpokládejte, že stavový prostor částice v kvantové 6-tečce je lineárním obalem ortonormální báze $\{|n\rangle, n = 1, ..., 6\}$. Na tomto prostoru definujeme operátory

$$\hat{C} = \sum_{n=1}^{6} |n+1\rangle\langle n|, \qquad \hat{H} = -t\sum_{n=1}^{6} \left(|n+1\rangle\langle n| + |n\rangle\langle n+1|\right),$$

přičemž používáme konvenci ($|n+6\rangle = |n\rangle$, tj. např. $|7\rangle = |1\rangle$). Ukažte, že $\hat{C}$ je unitární (3 body). Dále najděte čísla α a β tak, aby operátor $\hat{P} = \alpha\hat{I} + \beta\hat{C}^3$ byl proječním operátorem (3 body). Ukažte, že $[\hat{H}, \hat{C}] = 0$ a najděte reálnou funkci $f(x)$ takovou, aby $\hat{H} = f(\hat{C})$ (4 body).

Řešení 1 (působením operátorů na bázi):
Platí

$$\hat{C}|m\rangle = \sum_n |n+1\rangle\langle n|m\rangle = \sum_n |n+1\rangle\delta_{nm} = |m+1\rangle \tag{1}$$

dále

$$\hat{C}^\dagger|m\rangle = \sum_n |n\rangle\langle n+1|m\rangle = \sum_n |n\rangle\delta_{n+1,m} = |m-1\rangle$$

neboli $\hat{C}^\dagger\hat{C}|m\rangle = |m\rangle$, tj. akce operátoru $\hat{C}^\dagger$ vrací akci $\hat{C}$ tj. $\hat{C}^\dagger = \hat{C}^{-1}$ a operátor $\hat{C}$ je tedy unitární. Dále je vhodné si uvědomit, že z rovnice (1) výše plyne

$$\hat{C}^n|m\rangle = |m+n\rangle \tag{2}$$

přičemž tato relace platí pro kladná i záporná celá n. Navíc z cyklické podmínky $|n+6\rangle = |n\rangle$ plyne $\hat{C}^6 = \hat{I}$. Nyní už můžeme najít hodnoty konstant α a β pro něž je operátor $\hat{P}$ projekční. Budeme vycházet z výrazu

$$\hat{P}^2 = \alpha^2\hat{I} + 2\alpha\beta\hat{C}^3 + \beta^2\hat{C}^6 = (\alpha^2+\beta^2)\hat{I} + 2\alpha\beta\hat{C}^3.$$

Podmínka $\hat{P}^2 = \hat{P}$ definující projekční operátor je splněna pro

$$\begin{aligned} \alpha &= \alpha^2 + \beta^2, \\ \beta &= 2\alpha\beta. \end{aligned}$$

Tato soustava rovnic má právě 4 řešení. Triviální řešení $\alpha = 0$, $\beta = 0$ a $\alpha = 1$, $\beta = 0$ odpovídají volbě $\hat{P} = 0$ a $\hat{P} = \hat{I}$, tj. projektorům na nulový vektor a na celý Hilbertův prostor. Mnoho z Vás tyto řešení přehlédlo, protože vydělilo druhou rovnici konstantou β, která může být nulová, ale tuto chybu jsem toleroval bez ztráty bodu. Dvě netriviální řešení lze shrnout vzorcem $\alpha = 1/2$ a $\beta = \pm 1/2$ neboli

$$\hat{P} = \tfrac{1}{2}(\hat{I} \pm \hat{C}^3).$$

Kolega Guth Jarkovský si navíc správně uvědomil, že jde o projektory na stavy symetrické/antisymetrické vůči působení operátoru $\hat{C}^3|\psi\rangle = \pm|\psi\rangle$. Většina z Vás zapoměla ověřit podnímku $\hat{P}^\dagger = \hat{P}$, která je splněna automaticky pro reálné hodnoty α a β. Vzhledem k tomu, že všechna nalezená řešení jsou skutečně reálná, jsem toto opomenutí nepenalizoval ztrátou bodů.

Dalším úkolem bylo ověřit, že operátory $\hat{C}$ a $\hat{H}$ komutují. Nejjednodušší je uvědomit si vztah

$$\hat{H} = -t(\hat{C} + \hat{C}^\dagger). \tag{3}$$

Z něj je již jasné, že operátory komutují, neboť každý operátor komutuje se svým sdružením. Alternativně by se dalo ověřit, že

$$\hat{H}\hat{C}|n\rangle = -t(|n+2\rangle + |n\rangle) = \hat{C}\hat{H}|n\rangle.$$

Vztah (3) ještě sice neodpovídá na poslední otázku, protože operátor $\hat{C}^\dagger$ není reálnou funkcí oprátoru $\hat{C}$, ale vzpomeneme-li si, že jsme dokázali unitaritu $\hat{C}$, můžeme psát

$$\hat{H} = -t(\hat{C} + \hat{C}^{-1}) = f(\hat{C})$$

pro funkci $f(x) = -t(x + 1/x)$.

Poznámky k dalším způsobům řešení:
Většina z Vás se vydala jinými cestami řešení. Řešení výše má tu výhodu, že většinou nemusíme pracovat přímo s operátory, ale jen s bázovými vektory. Pokud chcete lze celé řešení provést přímo s operátory. Například unitaritu, s užitím vztahu $(|a\rangle\langle b|)^\dagger = |b\rangle\langle a|$ ověříme takto

$$\hat{C}\hat{C}^\dagger = \sum_m |m+1\rangle\langle m| \sum_n |n\rangle\langle n+1| = \sum_m \sum_n |m+1\rangle\delta_{m,n}\langle n+1| = \sum_m |m+1\rangle\langle m+1| = \hat{I},$$

kde jsme si uvědomili, že poslední zápis je po substituci $l = m+1$ rozkladem jedničky. Správně bychom měli ověřit i opačnou relaci $\hat{C}^\dagger\hat{C} = \hat{I}$ ale v konečnědimenzionálních prostorech je již splněna automaticky.

K řešení dalších částí bylo potřeba dospět v nějaké formě ke klíčové relaci (2). V operátorové podobě tato relace vypadá takto

$$\hat{C}^n = \sum_m |m+n\rangle\langle m|$$

a dá se odvodit postupným násobením, nebo matematickou indukcí

$$\hat{C}^{n+1} = \hat{C}^n\hat{C} = \sum_m |m+n\rangle\langle m| \sum_k |k+1\rangle\langle k| = \sum_m \sum_k |m+n\rangle\delta_{m,k+1}\langle k| = \sum_k |k+n+1\rangle\langle k|.$$

Opět se dá s užitím unitarity $\hat{C}$ dokázat, že tato relace platí i pro záporná n. Se znalostí těchto relací se dá dále postupovat podobně jako výše.

Další možnost je používat maticovou reprezentaci operátorů

$$\hat{C} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \qquad \hat{H} = -t \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

Někteří z Vás zapomněli na jedničky v rozích ze členů $|7\rangle\langle 6| = |1\rangle\langle 6|$ a $|6\rangle\langle 7| = |6\rangle\langle 1|$. Unitarita $\hat{C}\hat{C}^\dagger = \hat{I}$ se pak dokáže přímo maticovým násobením stejně jako komutátor $[\hat{C}, \hat{H}] = 0$, nebo lze unitaritu nahlédnout z toho, že matice $\hat{C}$ vznikne premutací jednotkové matice a tedy její řádky tvoří triviálně ortonormální bázi. Mocniny matice $\hat{C}$ pak vypadají takto

$$\hat{C}^2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \hat{C}^3 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \dots \quad \hat{C}^6 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

S těmito relacemi již dokončíme úlohu podobně jako předchozím přístupem.

Úloha 3(10 bodů)
Na stavovém prostoru kvantového lineárního harmonického oscilátoru uvažujme následující operátor $\hat{U} = [\hat{I} + \hat{a}^\dagger - \hat{a}]^{-1}[\hat{I} - \hat{a}^\dagger + \hat{a}]$, kde $\hat{a}$ je anihilační operátor. Dokažte, že $\hat{U}$ je unitární (3 body). Nalezněte střední hodnotu hybnosti (3 body) a polohy (4 body) ve stavu daném vektorem $|\psi\rangle = \hat{U}(|0\rangle + |1\rangle)$, kde $|0\rangle$ a $|1\rangle = \hat{a}^\dagger|0\rangle$ je základní a první excitovaný stav.
Nápověda: najděte $(\hat{I} + \hat{a}^\dagger - \hat{a})|0\rangle$.

Řešení:
Nejdříve se pokusíme dokázat unitaritu operátoru $\hat{U}$. Přitom používáme relace $(\hat{A}\hat{B})^\dagger = \hat{B}^\dagger\hat{A}^\dagger$, $(\hat{A} + \hat{B})^\dagger = \hat{A}^\dagger + \hat{B}^\dagger$ a $(\hat{A}^{-1})^\dagger = (\hat{A}^\dagger)^{-1}$, takže

$$\hat{U}^\dagger = [\hat{I} - \hat{a}^\dagger + \hat{a}]^\dagger([\hat{I} + \hat{a}^\dagger - \hat{a}]^{-1})^\dagger = [\hat{I} - \hat{a} + \hat{a}^\dagger][\hat{I} + \hat{a} - \hat{a}^\dagger]^{-1}$$

Nyní si uvědomíme, že oba faktory ve výrazu pro operátory $\hat{U}$ i $\hat{U}^\dagger$ jsou funkcí operátoru $a - a^\dagger$ a tudíž navzájem komutují. Takže pořadí faktorů si přizpůsobíme a tedy

$$\hat{U}^\dagger\hat{U} = [\hat{I} + \hat{a} - \hat{a}^\dagger]^{-1}\underbrace{[\hat{I} + \hat{a}^\dagger - \hat{a}][\hat{I} + \hat{a}^\dagger - \hat{a}]^{-1}}_{\hat{I}}[\hat{I} - \hat{a}^\dagger + \hat{a}] = [\hat{I} + \hat{a} - \hat{a}^\dagger]^{-1}[\hat{I} + \hat{a} - \hat{a}^\dagger] = \hat{I}.$$

Obrácená relace $\hat{U}\hat{U}^\dagger = \hat{I}$ se dokáže stejně. Před výpočtem středních hodnot se zamyslíme nad nápovědou

$$(\hat{I} + \hat{a}^\dagger - \hat{a})|0\rangle = |0\rangle + |1\rangle,$$

kde jsme použili relace $\hat{a}|0\rangle = 0$, $\hat{a}^\dagger|0\rangle = |1\rangle$. Vidíme, že stavový vektor $|\psi\rangle$ můžeme upravit následovně

$$|\psi\rangle = \hat{U}(|0\rangle + |1\rangle) = \underline{[\hat{I} + \hat{a}^\dagger - \hat{a}]^{-1}}[\hat{I} - \hat{a}^\dagger + \hat{a}]\underline{(\hat{I} + \hat{a}^\dagger - \hat{a})}|0\rangle = [\hat{I} - \hat{a}^\dagger + \hat{a}]|0\rangle = |0\rangle - |1\rangle.$$

Podtržením jsme vyznačili členy, které můžeme prokomutovat k sobě, takže se navzájem vyruší. Před výpočtem středních hodnot je třeba ještě vlnovou funkci normovat

$$|\psi\rangle = \tfrac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle).$$

Výpočet střední hodnoty hybnosti může vypadat třeba takto

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

Nyní si uvědomíme, že nenulové maticové elementy jsou jen $\langle 0|\hat{a}|1\rangle = \langle 1|\hat{a}^\dagger|0\rangle = 1$, takže

$$\langle\hat{p}\rangle = \frac{p_0}{2i\sqrt{2}}(\langle 1|\hat{a}^\dagger|0\rangle - \langle 0|\hat{a}|1\rangle) = 0.$$

Mimochodem $\langle\hat{p}\rangle$ se dala vyčíslit bez nápovědy, když si uvědomíme, že operátor $\hat{U}$ je funkcí operátoru $\hat{p}$ a tudíž s ním komutuje, takže $\hat{U}^\dagger\hat{p}\hat{U} = \hat{U}^\dagger\hat{U}\hat{p} = \hat{p}$.

Střední hodnotu polohy vypočteme podobně

$$\langle\hat{x}\rangle = \frac{x_0}{2\sqrt{2}}((\langle 0| - \langle 1|)(\hat{a} + \hat{a}^\dagger)(|0\rangle - |1\rangle) = \frac{x_0}{2\sqrt{2}}(\langle 1|\hat{a}^\dagger|0\rangle + \langle 0|\hat{a}|1\rangle) = \frac{x_0}{\sqrt{2}}.$$

Poznámky: Alternativně šlo celou úlohu řešit v $p-$reprezentaci, přičemž už jsme zmínili, že operátor $\hat{U}$ lze napsat jako funkci p, vlnová funkce $|\psi\rangle$ se dá napsat pomocí Hermiteových polynomů a operátor $\hat{x} = i\hbar\partial_p$.

Úloha 4(10 bodů)
Bezstrukturní částice s hmotností m je zachycena v potenciálové jámě aproximované $\delta-$potenciálem $V(x) = -\lambda\delta(x)$, kde $\lambda > 0$ je konstanta. Hloubka jámy se najednou zvětší na dvojnásobek. Jaká je pravděpodobnost, že částice uteče z jámy pryč?

Řešení:
Počáteční stav najdeme řešením stacionární Schrödingerovy rovnice

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

Potenciál je nulový mimo bod $x = 0$. Obecné řešení pro fixní energii $E < 0$ tedy je

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{-\kappa x} + Be^{\kappa x} & \text{pro } x < 0, \\ Ce^{-\kappa x} + De^{\kappa x} & \text{pro } x > 0, \end{cases}$$

kde $\kappa = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m|E|}$ je funkcí zatím neznámé energie. Řešením pro vázaný stav musí být kvadraticky integrovatelná funkce a tedy $A = D = 0$. V bodě $x = 0$ musí být vlnová funkce spojitá tj. $B = C$. Výsledná vlnová funkce tedy má tvar

$$\psi(x) = C\exp(-\kappa|x|).$$

Jak jsme si říkali na přednášce, $\delta-$člen v potenciálu se dá započítat podmínkou na skok v derivaci

$$\Delta\psi'(0) \equiv \lim_{\epsilon\to 0+}[\psi(0+\epsilon) - \psi(0-\epsilon)] = \frac{2m}{\hbar^2}\lambda\psi(0).$$

Po dosazení tvaru vlnové funkce zjistíme, že tato podmínka je splněna pro jediné

$$\kappa = \frac{\lambda m}{\hbar^2}.$$

Energie jediného vázaného stavu potom je $E = -\hbar^2\kappa^2/2m = -\lambda^2 m/2\hbar^2$. K úplnému určení vlnové funkce zbývá zjistit normalizační konstantu C, kterou dotaneme z podmínky

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

neboli $C = \sqrt{\kappa}$. Tím jsme zcela určili vlnovou funkci vázaného stavu v původní potenciálové jámě. Po prohloubení jámy na dvojnásobek bude vázaný stav v nové jámě popsán vlnovou funkcí $\tilde{\psi}(x)$, která je dána stejnými vzorci, ale s hodnotou $\tilde{\lambda} = 2\lambda$ což se projeví jen záměnou $\kappa \to 2\kappa$ neboli

$$\tilde{\psi}(x) = \sqrt{2\kappa}\exp(-2\kappa|x|).$$

Amplituda pravděpodobnosti, že částice zůstane zachycena v takto změněné potenciálové jámě tedy je

$$a = \langle\psi(x)|\tilde{\psi}(x)\rangle = \int_{-\infty}^{\infty}\psi(x)^*\tilde{\psi}(x)\mathrm{d}x = 2\int_0^{\infty}\sqrt{2}\kappa e^{-3\kappa|x|}\mathrm{d}x = \frac{2\sqrt{2}}{3}.$$

Pravděpobnost odchodu z jámy pak je doplňkem pravděpodobnosti záchytu

$$p = 1 - |a|^2 = 1 - \frac{8}{9} = \frac{1}{9}.$$

Úloha 5(10 bodů)
Bezstrukturní částice nacházející se v trojrozměrné potenciálové jámě je připravena ve stavu popsaném vlnovou funkcí

$$\psi(x,y,z) = (x+y+z)^2 e^{-\lambda r},$$

kde $r = \sqrt{x^2+y^2+z^2}$ a $\lambda > 0$ je konstanta. Jaké hodnoty kvadrátu momentu hybnosti můžeme naměřit a s jakou pravděpodobností (5 bodů)? Předpokládejme, že jsme naměřili nejnižší z těchto hodnot. Jaká bude (po tomto měření) pravděpodobnost, že částice je nejvýše ve vzdálenosti $(2\lambda)^{-1}$ od počátku (5 bodů)?

Mohou se hodit:

$$\int_0^\infty x^n e^{-x}\mathrm{d}x = n!, \qquad \int_0^1 x^n e^{-x}\mathrm{d}x = n! - \frac{a_n}{e},$$

kde $a_0 = 1$, $a_1 = 2$, $a_2 = 5$, $a_3 = 16$, $a_4 = 65$, $a_5 = 326$, $a_6 = 1957$, $a_7 = 13700$.

Řešení I: (rychlé)
Nejrychlejší způsob řešení je uvědomit si, že odpověď na otázku měření kvadrátu momentu hybnosti, ani vzdálenosti od počátku nezávisí na zvoleném souřadném systému, takže si zvolíme souřadný systém, v němž osa z míří ve směru vektoru $(1,1,1)$. V tomto souřadném systému je vlnová funkce jednodušší

$$\psi(x,y,z) = Cz^2 e^{-\lambda r},$$

kde C je v tuto chvíli nepodstatná konstanta. Pohledem na tabulku sférických harmonik zjistíme

$$\left.\begin{aligned} Y_{00} &= \tfrac{1}{\sqrt{4\pi}}\tfrac{r^2}{r^2} \\ Y_{20} &= \tfrac{1}{\sqrt{4\pi}}\tfrac{\sqrt{5}}{2}\tfrac{3z^2-r^2}{r^2} \end{aligned}\right\} \qquad \Rightarrow \qquad 3z^2 = r^2\sqrt{4\pi}\left(\frac{2}{\sqrt{5}}Y_{20} + Y_{00}\right)$$

Poslední výraz v závorce je úhlová část vlnové funkce, která obsahuje plnou informaci o měření momentu hybnosti. Vzhledem k tomu, že kulové funkce tvoří ortonormální bázi na jednotkové sféře je kvadrát normy výrazu v závorce roven $\frac{4}{5}+1 = \frac{9}{5}$. Správně normovaná úhlová část vlnové funkce tedy je

$$\phi(\vartheta,\varphi) = \frac{2}{3}Y_{20} + \frac{\sqrt{5}}{3}Y_{00}$$

a radiální část vlnové funkce ψ je $r^2\exp(-\lambda r)$. Koeficienty u sférických harmonik potom představují amplitudy pravděpodobnosti pro měření momentu hybnosti. Speciálně pro operátor kvadrátu momentu hybnosti můžeme naměřit hodnoty $\hbar^2 l(l+1)$ pro $l=0$ a $l=2$, tj. hodnotu 0 s pravděpodobností 4/9 a hodnotu $6\hbar^2$ s pravděpodobností 5/9. Po nalezení hodnoty $l=0$ dojde k redukci vlnové funkce do stavu

$$\psi(x,y,z) = NY_{00}r^2 e^{-\lambda r}.$$

Normalizační konstantu najdeme integrací (symbolem $\mathrm{d}^2\Omega$ značíme integraci přes jednotkovou sféru)

$$1 = \int |\psi|^2 \mathrm{d}^3\vec{r} = \int |N|^2|Y_{00}|^2 r^4 e^{-2\lambda r} r^2 \mathrm{d}^2\Omega \mathrm{d}r = |N|^2\int_0^\infty r^6 e^{-2\lambda r}\mathrm{d}r = |N|^2\frac{6!}{(2\lambda)^7},$$

neboli $|N|^2 = (2\lambda)^7/6!$ a hledaná pravděpodobnost je (využijeme integrálu z nápovědy)

$$\begin{aligned} p &= \int_{r<(2\lambda)^{-1}} |\psi|^2\mathrm{d}^3\vec{r} = \frac{(2\lambda)^7}{6!}\int |Y_{00}|^2 r^4 e^{-2\lambda r} r^2\mathrm{d}^2\Omega\mathrm{d}r = \frac{(2\lambda)^7}{6!}\int_0^{1/(2\lambda)} r^6 e^{-2\lambda r}\mathrm{d}r \\ &= \frac{(2\lambda)^7}{6!}\frac{1}{(2\lambda)^7}\int_0^1 x^6 e^{-x}\mathrm{d}x = \frac{1}{6!}\left(6! - \frac{a_6}{e}\right) = 1 - \frac{1957}{720e} \doteq 8.3\times 10^{-5} \end{aligned}$$

Řešení II: (v původních souřadnicích)
Pokud chceme řešit úlohu v původních souřadnicích budeme postupovat podobně, ale dostáváme poněkud komplikovanější výrazy. Úhlová část vlnové funkce je úměrná výrazu

$$r^{-2}(x+y+z)^2 = r^{-2}(x^2+y^2+z^2+2xy+2yz+2xz).$$

Nyní dá více práce zkonstruovat jednotlivé členy z tabulky sférických harmonik

$$\begin{aligned}
Y_{00} &= \tfrac{1}{\sqrt{4\pi}} & &\Rightarrow & x^2+y^2+z^2 &= r^2\sqrt{4\pi}Y_{00},\\
Y_{22}-Y_{2-2} &= \sqrt{\tfrac{15}{32\pi}}\tfrac{4ixy}{r^2} & &\Rightarrow & 2xy &= r^2\sqrt{\tfrac{32\pi}{15}}\tfrac{1}{2i}(Y_{22}-Y_{2-2}),\\
Y_{2-1}+Y_{21} &= \sqrt{\tfrac{15}{8\pi}}\tfrac{-2iyz}{r^2} & &\Rightarrow & 2yz &= r^2\sqrt{\tfrac{8\pi}{15}}i(Y_{2-1}+Y_{21}),\\
Y_{2-1}-Y_{21} &= \sqrt{\tfrac{15}{8\pi}}\tfrac{2xz}{r^2} & &\Rightarrow & 2xz &= r^2\sqrt{\tfrac{8\pi}{15}}(Y_{2-1}-Y_{21}).
\end{aligned}$$

Původní vlnovou funkci tedy můžeme rozložit do sférických harmonik následovně

$$\psi = r^2 e^{-\lambda r}\sqrt{4\pi}\left\{Y_{00} + \sqrt{\frac{8}{15}}\frac{1}{2i}(Y_{22}-Y_{2-2}) + \sqrt{\frac{2}{15}}\left[(i+1)Y_{2-1}+(i-1)Y_{21}\right]\right\}.$$

Výraz v závorce je úhlová část vlnové funkce, kterou opět můžeme normovat na jednotkové sféře, přičemž kvadráty koeficientů u jednotlivých harmonik dají převrácený kvadrát normovacího koeficientu

$$N^{-2} = 1 + \frac{8}{15}\frac{1}{4}(1+1) + \frac{2}{15}(2+2) = \frac{15+4+8}{15} = \frac{9}{5}.$$

Správně normovaná úhlová část vlnové funkce tedy nyní je

$$\phi(\vartheta,\varphi) = \frac{\sqrt{5}}{3}Y_{00} + \sqrt{\frac{2}{27}}\left[iY_{2-2}+(i+1)Y_{2-1}+(i-1)Y_{21}-iY_{22}\right].$$

Pravděpodobnost naměřit nulový kvadrát momentu hybnost tedy je 5/9 a pravděpodobnost nalézt hodnotu $6\hbar^2 = l(l+1)\hbar^2$ pro $l=2$ je doplněk do 1 tj.

$$\frac{2}{27}(1+2+2+1) = \frac{4}{9}.$$

Zbytek úlohy se týká jen radiální části a bude probíhat stejně bez ohledu na volbu natočení souřadného systému.
Řešení III: (Integrací, bez přímého rozkladu do sférických harmonik)
Ještě asi dopíšu podrobněji. Stačí si uvědomit, že v rozkladu bud jen $l=0$ a $l=2$ (sudý polynom řádu 2). Pravděpodobnost naměření $l=0$ se najde projekcí na Y_{00}, tj. integrací

$$p_0 = \frac{\left|\frac{1}{\sqrt{4\pi}}\int\psi(x,y,z)\mathrm{d}^3\vec{r}\right|^2}{\int|\psi(x,y,z)|^2\mathrm{d}^3\vec{r}}.$$

Tato integrace se opět nejsnáze provede ve sférických souřadnicích orientovaných s osou z ve směru $(1,1,1)$, ale dá se to provést i v původních souřadnicích. Pravděpodobnost naměřit $l=2$ je pak doplněk do 1.