1 Kvantová mechanika - příklady

1.1 Tříhladinový stav

Zadání Částice se spinem 1 a magnetickým momentem μ se v čase $0 \leq t \leq T$ nachází v homogenním magnetickém poli indukce B, orientovaném podél osy z. Její hamiltonián je tedy

$$\hat{H} = -\mu B \hat{S}_z \tag{1}$$

$\hat{S}_z$ je operátor projekce spinu do osy z. Vlastní vektory tohoto operátoru označíme jako

$$\hat{S}_z |\phi_1\rangle = 1 |\phi_1\rangle \qquad \hat{S}_z |\phi_0\rangle = 0 |\phi_0\rangle \qquad \hat{S}_z |\phi_{-1}\rangle = -1 |\phi_{-1}\rangle \tag{2}$$

Vlastní vektory operátoru projekce spinu do osy x $\hat{S}_x$ označíme jako

$$\hat{S}_x |\chi_1\rangle = 1 |\chi_1\rangle \qquad \hat{S}_x |\chi_0\rangle = 0 |\chi_0\rangle \qquad \hat{S}_x |\chi_{-1}\rangle = -1 |\chi_{-1}\rangle \tag{3}$$

Platí

$$|\chi_1\rangle = \frac{1}{2}\left(|\phi_1\rangle + \sqrt{2}\,|\phi_0\rangle + |\phi_{-1}\rangle\right) \qquad |\chi_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\phi_1\rangle - |\phi_{-1}\rangle\right) \qquad |\chi_{-1}\rangle = \frac{1}{2}\left(|\phi_1\rangle - \sqrt{2}\,|\phi_0\rangle + |\phi_{-1}\rangle\right) \tag{4}$$

Počáteční stav je

$$|\psi(t = 0)\rangle = |\chi_1\rangle \tag{5}$$

Spočtěte koncový stav $|\psi(t = T)\rangle$ a z něj pravděpodobnosti nalezení částice v čase $t = T$ ve stavech s projekcí spinu do osy x rovnou 1, 0 a -1 (tj. ve stavech $|\chi_1\rangle$, $|\chi_0\rangle$, $|\chi_{-1}\rangle$)

Moje řešení Hledáme vlastní hodnoty energie hamiltoniánu

$$\hat{H} |\phi_k\rangle = E_k |\phi_k\rangle \qquad k = 1, 0, -1 \tag{6}$$

do této rovnice dosadíme hamiltonián z rovnice 1

$$-\mu B \hat{S}_z |\phi_k\rangle = E_k |\phi_k\rangle \qquad k = 1, 0, -1 \tag{7}$$

a do této rovnice dosadíme vlastní hodnoty operátoru $\hat{S}_z$

$$-\mu B k |\phi_k\rangle = E_k |\phi_k\rangle \qquad k = 1, 0, -1 \tag{8}$$

odtud

$$-\mu B k = E_k \qquad k = 1, 0, -1 \tag{9}$$

tj.

$$E_1 = -\mu B \qquad E_0 = 0 \qquad E_{-1} = \mu B \tag{10}$$

Časový vývoj vlastních stavů operátoru $\hat{S}_z$ je

$$e^{-\frac{i}{\hbar}E_k t} |\phi_k\rangle \qquad k = 1, 0, -1 \tag{11}$$

Pro stav $|\psi\rangle$ platí

$$|\psi(0)\rangle = |\chi_1\rangle = \frac{1}{2}|\phi_1\rangle + \frac{\sqrt{2}}{2}|\phi_0\rangle + \frac{1}{2}|\phi_{-1}\rangle \tag{12}$$

$$|\psi(t)\rangle = \frac{1}{2}e^{-\frac{i}{\hbar}E_1 t}|\phi_1\rangle + \frac{\sqrt{2}}{2}e^{-\frac{i}{\hbar}E_0 t}|\phi_0\rangle + \frac{1}{2}e^{-\frac{i}{\hbar}E_{-1} t}|\phi_{-1}\rangle \tag{13}$$

Pravděpodobnosti, že se částice nachází ve stavech $|\chi_1\rangle$, $|\chi_0\rangle$, $|\chi_{-1}\rangle$ jsou

$$|\langle\chi_1|\psi(t)\rangle|^2 \qquad |\langle\chi_0|\psi(t)\rangle|^2 \qquad |\langle\chi_{-1}|\psi(t)\rangle|^2 \tag{14}$$

$$\langle\chi_1|\psi(t)\rangle = \frac{1}{2}\left(\langle\phi_1| + \sqrt{2}\langle\phi_0| + \langle\phi_{-1}|\right)\left(\frac{1}{2}e^{-\frac{i}{\hbar}E_1 t}|\phi_1\rangle + \frac{\sqrt{2}}{2}e^{-\frac{i}{\hbar}E_0 t}|\phi_0\rangle + \frac{1}{2}e^{-\frac{i}{\hbar}E_{-1} t}|\phi_{-1}\rangle\right) \quad (15)$$

$$\langle\chi_1|\psi(t)\rangle = \frac{1}{2}\left(\frac{1}{2}e^{-\frac{i}{\hbar}E_1 t} + e^{-\frac{i}{\hbar}E_0 t} + \frac{1}{2}e^{-\frac{i}{\hbar}E_{-1} t}\right) \quad (16)$$

$$|\langle\chi_1|\psi(t)\rangle|^2 = \frac{1}{4}\left(\frac{1}{2}e^{-\frac{i}{\hbar}E_1 t} + e^{-\frac{i}{\hbar}E_0 t} + \frac{1}{2}e^{-\frac{i}{\hbar}E_{-1} t}\right)\left(\frac{1}{2}e^{\frac{i}{\hbar}E_1 t} + e^{\frac{i}{\hbar}E_0 t} + \frac{1}{2}e^{\frac{i}{\hbar}E_{-1} t}\right) \quad (17)$$

$$|\langle\chi_1|\psi(t)\rangle|^2 = \frac{1}{4}\left[\frac{3}{2} + \cos\frac{E_0 - E_1}{\hbar}t + \cos\frac{E_0 - E_{-1}}{\hbar}t + \frac{1}{2}\cos\frac{E_1 - E_{-1}}{\hbar}t\right] \quad (18)$$

$$|\langle\chi_1|\psi(t)\rangle|^2 = -\frac{1}{4}\left[\left(1 - \cos\frac{E_0 - E_1}{\hbar}t\right) + \left(1 - \cos\frac{E_0 - E_{-1}}{\hbar}t\right) + \frac{1}{2}\left(1 - \cos\frac{E_1 - E_{-1}}{\hbar}t\right) - 4\right] \quad (19)$$

Zde použijeme vztah

$$1 - \cos 2x = 1 - \cos^2 x + \sin^2 x = 2\sin^2 x \quad (20)$$

$$|\langle\chi_1|\psi(t)\rangle|^2 = \frac{1}{4}\left[4 - 2\sin^2\frac{E_0 - E_1}{2\hbar}t - 2\sin^2\frac{E_0 - E_{-1}}{2\hbar}t - \sin^2\frac{E_1 - E_{-1}}{2\hbar}t\right] \quad (21)$$

Po upravení dostaneme

$$|\langle\chi_1|\psi(t)\rangle|^2 = 1 - \frac{1}{2}\sin^2\frac{E_0 - E_1}{2\hbar}t - \frac{1}{2}\sin^2\frac{E_0 - E_{-1}}{2\hbar}t - \frac{1}{4}\sin^2\frac{E_1 - E_{-1}}{2\hbar}t \quad (22)$$

Podobně spočítáme i zbylé dvě pravděpodobnosti

$$|\langle\chi_0|\psi(t)\rangle|^2 = \frac{1}{2}\sin^2\frac{E_1 - E_{-1}}{2\hbar}t \quad (23)$$

$$|\langle\chi_{-1}|\psi(t)\rangle|^2 = \frac{1}{2}\sin^2\frac{E_0 - E_1}{2\hbar}t + \frac{1}{2}\sin^2\frac{E_0 - E_{-1}}{2\hbar}t - \frac{1}{4}\sin^2\frac{E_1 - E_{-1}}{2\hbar}t \quad (24)$$

Je vidět, že součet těchto tří pravděpodobností je roven 1. Do vztahů 22, 23 a 24 dosadíme vlastní hodnoty energie ze vztahů 10

$$|\langle\chi_1|\psi(t)\rangle|^2 = 1 - \sin^2\frac{\mu B}{2\hbar}t - \frac{1}{4}\sin^2\frac{\mu B}{\hbar}t \quad (25)$$

$$|\langle\chi_0|\psi(t)\rangle|^2 = \frac{1}{2}\sin^2\frac{\mu B}{\hbar}t \quad (26)$$

$$|\langle\chi_{-1}|\psi(t)\rangle|^2 = \sin^2\frac{\mu B}{2\hbar}t - \frac{1}{4}\sin^2\frac{\mu B}{\hbar}t \quad (27)$$

1.2 Příklady ze sbírky doc. Mgr. Tomáše Tyce, Ph.D.

1.2.1 Příklad 14

Zadání Dokažte, že operátor parity definovaný vztahem $\hat{P}\psi(x) = \psi(-x)$ je hermitovský. Dále ukažte, že vlastní vektory odpovídající vlastním hodnotám 1 a -1 jsou ortogonální.

Moje řešení Pro libovolný operátor A platí

$$\left(\hat{A}|\psi(x)\rangle\right)^\dagger = \langle\psi(x)|\hat{A}^\dagger \quad (28)$$

Tedy pro operátor $\hat{P}^\dagger$ platí

$$\left(\hat{P}^\dagger|\psi(x)\rangle\right)^\dagger = \langle\psi(x)|\hat{P} \quad (29)$$

Z definice operátoru parity

$$\langle\psi(x)|\hat{P} = \langle\psi(-x)| = (|\psi(-x)\rangle)^\dagger \quad (30)$$

Porovnáním těchto dvou rovnic získáme

$$\hat{P}^\dagger |\psi(x)\rangle = |\psi(-x)\rangle = \hat{P}|\psi(x)\rangle \tag{31}$$

Odtud

$$\hat{P}^\dagger = \hat{P} \tag{32}$$

tj. operátor $\hat{P}$ je hermitovský. Pro vlastní hodnoty λ operátoru $\hat{P}$ platí

$$\lambda\psi(x) = \hat{P}\psi(x) = \psi(-x) \tag{33}$$

$$\lambda\psi(-x) = \hat{P}\psi(-x) = \psi(x) \tag{34}$$

Z těchto dvou rovnic získáme $\lambda^2 = 1$, tedy $\lambda = \pm 1$. Po dosazení těchto hodnot do rovnice 33 získáme rovnice pro vlastní stavy ψ_1 a ψ_{-1}

$$\psi_1(x) = \hat{P}\psi_1(x) = \psi_1(-x) \tag{35}$$

$$-\psi_{-1}(x) = \hat{P}\psi_{-1}(x) = \psi_{-1}(-x) \tag{36}$$

tj. funkce ψ_1 je sudá a ψ_{-1} je lichá, tedy jejich skalární součin je roven nule a tyto funkce jsou ortogonální.

1.2.2 Příklad 24

Zadání Najděte vlnovou funkci $\psi_0(x)$ základního stavu harmonického oscilátoru z toho, že víte, že $\hat{a}\psi_0(x) = 0$. Anihilační operátor $\hat{a}$ vyjádřete v souřadnicové reprezentaci a řešte vzniklou diferenciální rovnici např. metodou separace proměnných.

Moje řešení Vyjádříme anihilační operátor pomocí operátorů hybnosti a souřadnice

$$\hat{a} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{x} + i\frac{1}{\sqrt{2m\omega\hbar}}\hat{p} \tag{37}$$

Nyní oba operátory vyjádříme v souřadnicové reprezentaci

$$\hat{a} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x + \hbar\frac{1}{\sqrt{2m\omega\hbar}}\frac{\partial}{\partial x} \tag{38}$$

Operátor $\hat{a}$ působí na vlnovou funkci základního stavu harmonického oscilátoru

$$\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x\psi_0(x) + \hbar\frac{1}{\sqrt{2m\omega\hbar}}\frac{\partial\psi_0(x)}{\partial x} = 0 \tag{39}$$

Tuto rovnici upravíme na tvar

$$-\frac{m\omega}{\hbar}x\psi_0(x) = \frac{\partial\psi_0(x)}{\partial x} \tag{40}$$

odtud získáme

$$-\frac{m\omega}{\hbar}\frac{x^2}{2} = \ln\psi_0(x) - \ln c \tag{41}$$

kde $-\ln c$ je integrační konstanta. Odtud získáme řešení ve tvaru

$$\psi_0(x) = ce^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} \tag{42}$$

Konstantu c určíme z normovací podmínky

$$1 = \int_{-\infty}^{\infty}\psi_0^*(x)\psi_0(x)\mathrm{d}x = \int_{-\infty}^{\infty}c^2e^{-\frac{m\omega}{\hbar}x^2}\mathrm{d}x = c^2\sqrt{\frac{\pi\hbar}{m\omega}} \tag{43}$$

Odtud

$$\psi_0(x) = \sqrt[4]{\frac{m\omega}{\pi\hbar}}e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} \tag{44}$$

1.3 Další příklady

1.3.1 Komutátor $\left[\hat{a}^2, \hat{a}^{\dagger 2}\right]$

Zadání Spočítejte komutátor $\left[\hat{a}^2, \hat{a}^{\dagger 2}\right]$ tak, aby se ve výsledku vyskytovaly pouze součiny nejvýše dvou operátorů $\hat{a}$, $\hat{a}^\dagger$. Využijte přitom komutační relaci $[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1$.

Moje řešení

$$\begin{aligned}
\left[\hat{a}^2, \hat{a}^{\dagger 2}\right] &= \hat{a}^2\hat{a}^{\dagger 2} - \hat{a}^{\dagger 2}\hat{a}^2 \\
&= \hat{a}\hat{a}\hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger - \hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger\hat{a}\hat{a} \\
&= \hat{a}\hat{a}\hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger - \hat{a}^\dagger\hat{a}\hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a}\hat{a}\hat{a}^\dagger - \hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger\hat{a}\hat{a} \\
&= (\hat{a}\hat{a}\hat{a}^\dagger - \hat{a}^\dagger\hat{a}\hat{a})\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger(\hat{a}\hat{a}\hat{a}^\dagger - \hat{a}^\dagger\hat{a}\hat{a}) \\
&= [\hat{a}\hat{a}\hat{a}^\dagger - \hat{a}\hat{a}^\dagger\hat{a} + \hat{a}\hat{a}^\dagger\hat{a} - \hat{a}^\dagger\hat{a}\hat{a}]\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger[\hat{a}\hat{a}\hat{a}^\dagger - \hat{a}\hat{a}^\dagger\hat{a} + \hat{a}\hat{a}^\dagger\hat{a} - \hat{a}^\dagger\hat{a}\hat{a}] \\
&= [\hat{a}(\hat{a}\hat{a}^\dagger - \hat{a}^\dagger\hat{a}) + (\hat{a}\hat{a}^\dagger - \hat{a}^\dagger\hat{a})\hat{a}]\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger[\hat{a}(\hat{a}\hat{a}^\dagger - \hat{a}^\dagger\hat{a}) + (\hat{a}\hat{a}^\dagger - \hat{a}^\dagger\hat{a})\hat{a}]
\end{aligned}$$

Zde využijeme komutační relace

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = \hat{a}\hat{a}^\dagger - \hat{a}^\dagger\hat{a} = 1 \tag{45}$$

$$\begin{aligned}
\left[\hat{a}^2, \hat{a}^{\dagger 2}\right] &= (\hat{a} + \hat{a})\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger(\hat{a} + \hat{a}) \\
&= 2(\hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a})
\end{aligned}$$

1.3.2 Spin elektronu

Zadání Elektron se nachází ve stavu $|\psi\rangle = \alpha\,|z+\rangle + \beta\,|z-\rangle$ takovém, že střední hodnota průmětu spinu do osy z je rovna nule. (a) Najděte všechny dvojice čísel α, β, pro které má stav $|\psi\rangle$ uvedenou vlastnost. (b) S jakou pravděpodobností při měření průmětu spinu do osy x v tomto stavu $|\psi\rangle$ nalezneme hodnotu $+\frac{\hbar}{2}$? (c) Jaká může být v tomto stavu střední hodnota průmětu spinu do osy x? Užitečná informace: Operátory průmětů spinu v bázi $\{|z+\rangle\,, |z-\rangle\}$ jsou

$$\hat{S}_x = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \qquad \hat{S}_y = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \qquad \hat{S}_z = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{46}$$

a vlastní stavy $\hat{S}_x$ jsou $|x\pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\,(|z+\rangle \pm |z-\rangle)$.

Moje řešení V bázi $\{|z+\rangle\,, |z-\rangle\}$ platí

$$|z+\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \qquad |z-\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \tag{47}$$

Z definice operátorů dle vztahu 46 získáme

$$\hat{S}_z|z+\rangle = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}|z+\rangle \tag{48}$$

$$\hat{S}_z|z-\rangle = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = -\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = -\frac{\hbar}{2}|z-\rangle \tag{49}$$

$$\hat{S}_x|z+\rangle = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}|z-\rangle \tag{50}$$

$$\hat{S}_x|z-\rangle = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}|z+\rangle \tag{51}$$

(a) Z toho, že známe střední hodnotu operátoru $\hat{S}_z$, získáme

$$\begin{aligned} 0 &= \left\langle \hat{S}_z \right\rangle \\ &= \langle\psi|\hat{S}_z|\psi\rangle \\ &= \left(\alpha\,\langle z+| + \beta\,\langle z-|\right)\hat{S}_z\left(\alpha\,|z+\rangle + \beta\,|z-\rangle\right) \\ &= \alpha^*\alpha\langle z+|\hat{S}_z|z+\rangle + \beta^*\beta\langle z-|\hat{S}_z|z-\rangle + \alpha^*\beta\langle z+|\hat{S}_z|z-\rangle + \beta^*\alpha\langle z-|\hat{S}_z|z+\rangle \end{aligned}$$

Zde použijeme rovnice 48 a 49

$$0 = |\alpha|^2\frac{\hbar}{2}\langle z+|z+\rangle - |\beta|^2\frac{\hbar}{2}\langle z-|z-\rangle - \alpha^*\beta\frac{\hbar}{2}\langle z+|z-\rangle + \beta^*\alpha\frac{\hbar}{2}\langle z-|z+\rangle$$

Zde využijeme ortogonality bázových vektorů

$$\langle z+|z+\rangle = \langle z-|z-\rangle = 1 \qquad \langle z+|z-\rangle = \langle z-|z+\rangle = 0 \tag{52}$$

$$\begin{aligned} 0 &= \frac{\hbar}{2}\left(|\alpha|^2 - |\beta|^2\right) \\ 0 &= |\alpha|^2 - |\beta|^2 \\ |\alpha|^2 &= |\beta|^2 \end{aligned}$$

Absolutní hodnoty koeficientů α, β se rovnají, tedy komplexní čísla α a β se liší jen fází ϕ, tj.

$$\alpha = \beta e^{i\phi} \tag{53}$$

Z normovací podmínky navíc získáme

$$1 = \langle\psi|\psi\rangle = \left(\alpha\,\langle z+| + \beta\,\langle z-|\right)\left(\alpha\,|z+\rangle + \beta\,|z-\rangle\right) = |\alpha|^2 + |\beta|^2 \tag{54}$$

Odtud tedy

$$|\alpha|^2 = |\beta|^2 = \frac{1}{2} \tag{55}$$

(b) Hledáme pravděpodobnost, s jakou se částice ve stavu $|\psi\rangle$ nachází ve stavu $|x+\rangle$, tj. $|\langle x+|\psi\rangle|^2$.

$$|\langle x+|\psi\rangle|^2 = \left|\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\langle z+| + \langle z-|\right)\left(\alpha|z+\rangle + \beta|z-\rangle\right)\right|^2$$

Po roznásobení a využití rovnic 52 získáme

$$\begin{aligned} |\langle x+|\psi\rangle|^2 &= \left|\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\alpha+\beta\right)\right|^2 \\ &= \left|\frac{1}{\sqrt{2}}\beta\left(1+e^{i\phi}\right)\right|^2 \\ &= \frac{1}{2}|\beta|^2\left(1+e^{i\phi}\right)\left(1+e^{-i\phi}\right) \\ &= \frac{1}{4}\left(2+e^{i\phi}+e^{-i\phi}\right) \\ &= \frac{1}{4}\left(2+2\cos\phi\right) \\ &= \frac{1}{2}\left(1+\cos\phi\right) \\ &= \cos^2\frac{\phi}{2} \end{aligned}$$

(c) Podobně jako v bodě (a) upravíme střední hodnotu operátoru $\hat{S}_x$ za využití vztahů 50 a 51

$$\begin{aligned}
\left\langle \hat{S}_x \right\rangle &= \langle\psi|\hat{S}_x|\psi\rangle \\
&= \left(\alpha\left\langle z+\right| + \beta\left\langle z-\right|\right)\hat{S}_x\left(\alpha\left|z+\right\rangle + \beta\left|z-\right\rangle\right) \\
&= \alpha^*\alpha\langle z+|\hat{S}_x|z+\rangle + \beta^*\beta\langle z-|\hat{S}_x|z-\rangle + \alpha^*\beta\langle z+|\hat{S}_x|z-\rangle + \beta^*\alpha\langle z-|\hat{S}_x|z+\rangle \\
&= |\alpha|^2\frac{\hbar}{2}\langle z+|z-\rangle + |\beta|^2\frac{\hbar}{2}\langle z-|z+\rangle + \alpha^*\beta\frac{\hbar}{2}\langle z+|z+\rangle + \beta^*\alpha\frac{\hbar}{2}\langle z-|z-\rangle \\
&= \frac{\hbar}{2}\left(\alpha^*\beta + \beta^*\alpha\right) \\
&= \frac{\hbar}{2}|\beta|^2\left(e^{-i\phi} + e^{i\phi}\right) \\
&= \frac{\hbar}{2}\frac{1}{2}\left(e^{-i\phi} + e^{i\phi}\right) \\
&= \frac{\hbar}{2}\cos\phi \qquad \in \left[-\frac{\hbar}{2}, \frac{\hbar}{2}\right]
\end{aligned}$$

1.3.3 Částice v nekonečně hluboké potenciálové jámě

Zadání Uvažujme částici vázanou na interval $[0, L]$ osy x, tedy částici v nekonečně hluboké potenciálové jámě. V čase $t = 0$ se částice nachází ve stavu

$$\psi(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{L}}\left(\sin\frac{\pi x}{L} + \sin\frac{2\pi x}{L}\right) \tag{56}$$

(jde tedy o superpozici stacionárních stavů s hodnotami energie $E_1 = \frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}$ a $E_2 = 4E_1$). Určete pravděpodobnost, že souřadnice této částice leží v intervalu $\left[0, \frac{L}{2}\right]$, a to (a) v čase $t = 0$, (b) v čase $t = \frac{\pi\hbar}{E_1}$.

Moje řešení Platí

$$\psi_1(x, 0) = \sin\frac{\pi x}{L} \qquad \psi_2(x, 0) = \sin\frac{2\pi x}{L} \qquad \psi(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{L}}\left(\psi_1(x, 0) + \psi_2(x, 0)\right) \tag{57}$$

Pro časový vývoj stavů ψ_1 a ψ_2 platí

$$\psi_1(x, t) = e^{-\frac{i}{\hbar}E_1 t}\sin\frac{\pi x}{L} \qquad \psi_2(x, t) = e^{-\frac{i}{\hbar}E_2 t}\sin\frac{2\pi x}{L} \tag{58}$$

Odtud získáme časový vývoj stavu ψ

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{L}}\left(\psi_1(x, t) + \psi_2(x, t)\right) = \frac{1}{\sqrt{L}}\left(e^{-\frac{i}{\hbar}E_1 t}\sin\frac{\pi x}{L} + e^{-\frac{i}{\hbar}E_2 t}\sin\frac{2\pi x}{L}\right) \tag{59}$$

Všechny výše uvedené vlnové funkce ψ_1, ψ_2 a ψ jsou nulové na oblasti $(-\infty, 0) \cup (L, \infty)$ a jsou normované.
Pravděpodobnost, že se částice nachází na intervalu $\left[0, \frac{L}{2}\right]$ v čase t, je

$$\int_0^{\frac{L}{2}} \psi^*(x, t)\psi(x, t)\mathrm{d}x \tag{60}$$

Pomocný výpočet Budeme potřebovat následující tři integrály

$$\begin{aligned}
I_1 &= \frac{1}{L}\int_0^{\frac{L}{2}} \sin^2\frac{\pi x}{L}\mathrm{d}x \\
\text{substituce:} &\qquad s = \frac{\pi x}{L} \quad \mathrm{d}s = \frac{\pi}{L}\mathrm{d}x
\end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
I_1 &= \frac{1}{L}\frac{L}{\pi}\int_0^{\frac{\pi}{2}} \sin^2 s\mathrm{d}s \\
&= \frac{1}{\pi}\int_0^{\frac{\pi}{2}} \frac{1}{2}\left(1-\cos 2s\right)\mathrm{d}s \\
&= \frac{1}{2\pi}\left[s\right]_0^{\frac{\pi}{2}} - \frac{1}{\pi}\left[\frac{\sin 2s}{2}\right]_0^{\frac{\pi}{2}} \\
&= \frac{1}{4}
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
I_2 &= \frac{1}{L}\int_0^{\frac{L}{2}} \sin^2\frac{2\pi x}{L}\mathrm{d}x \\
\text{substituce:}\qquad & s = \frac{2\pi x}{L} \qquad \mathrm{d}s = \frac{2\pi}{L}\mathrm{d}x \\
I_2 &= \frac{1}{L}\frac{L}{2\pi}\int_0^{\pi} \sin^2 s\mathrm{d}s \\
&= \frac{1}{2\pi}\int_0^{\pi} \frac{1}{2}\left(1-\cos 2s\right)\mathrm{d}s \\
&= \frac{1}{4\pi}\left[s\right]_0^{\pi} - \frac{1}{\pi}\left[\frac{\sin 2s}{2}\right]_0^{\pi} \\
&= \frac{1}{4}
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
I_3 &= \frac{1}{L}\int_0^{\frac{L}{2}} 2\sin\frac{\pi x}{L}\sin\frac{2\pi x}{L}\mathrm{d}x \\
&= \frac{4}{L}\int_0^{\frac{L}{2}} \sin^2\frac{\pi x}{L}\cos\frac{\pi x}{L}\mathrm{d}x \\
\text{substituce:}\qquad & s = \sin\frac{\pi x}{L} \qquad \mathrm{d}s = \frac{\pi}{L}\cos\frac{\pi x}{L}\mathrm{d}x \\
I_3 &= \frac{4}{L}\frac{L}{\pi}\int s^2\mathrm{d}s \\
&= \frac{4}{\pi}\left[\frac{s^3}{3}\right] \\
&= \frac{4}{\pi}\left[\frac{\sin^3\frac{\pi x}{L}}{3}\right]_0^{\frac{L}{2}} \\
&= \frac{4}{3\pi}
\end{aligned}
$$

(a) Počítáme integrál 60 v čase $t=0$

$$
\begin{aligned}
\int_0^{\frac{L}{2}} \psi^*(x,0)\psi(x,0)\mathrm{d}x &= \frac{1}{L}\int_0^{\frac{L}{2}}\left(\sin\frac{\pi x}{L}+\sin\frac{2\pi x}{L}\right)^2\mathrm{d}x \\
&= \frac{1}{L}\int_0^{\frac{L}{2}}\left(\sin^2\frac{\pi x}{L}+2\sin\frac{\pi x}{L}\sin\frac{2\pi x}{L}+\sin^2\frac{2\pi x}{L}\right)\mathrm{d}x \\
&= I_1+I_2+I_3 \\
&= \frac{1}{2}+\frac{4}{3\pi}
\end{aligned}
$$

(b) Počítáme integrál 60 v čase $t = \frac{\pi\hbar}{E_1}$

$$
\begin{aligned}
\int_0^{\frac{L}{2}} \psi^*(x,t)\psi(x,t)\mathrm{d}x &= \frac{1}{L}\int_0^{\frac{L}{2}} \left(e^{-\frac{i}{\hbar}E_1 t}\sin\frac{\pi x}{L} + e^{-\frac{i}{\hbar}E_2 t}\sin\frac{2\pi x}{L}\right)\left(e^{\frac{i}{\hbar}E_1 t}\sin\frac{\pi x}{L} + e^{\frac{i}{\hbar}E_2 t}\sin\frac{2\pi x}{L}\right)\mathrm{d}x \\
&= \frac{1}{L}\int_0^{\frac{L}{2}} \left[\sin^2\frac{\pi x}{L} + \sin\frac{\pi x}{L}\sin\frac{2\pi x}{L}\left(e^{-\frac{i}{\hbar}(E_1-E_2)t} + e^{-\frac{i}{\hbar}(E_2-E_1)t}\right) + \sin^2\frac{2\pi x}{L}\right]\mathrm{d}x \\
&= \frac{1}{L}\int_0^{\frac{L}{2}} \left(\sin^2\frac{\pi x}{L} + 2\sin\frac{\pi x}{L}\sin\frac{2\pi x}{L}\cos\frac{E_1-E_2}{\hbar}t + \sin^2\frac{2\pi x}{L}\right)\mathrm{d}x \\
&= I_1 + I_2 + I_3\cos\frac{E_1-E_2}{\hbar}t \\
&= \frac{1}{2} + \frac{4}{3\pi}\cos\frac{E_1-E_2}{\hbar}t \\
&= \frac{1}{2} + \frac{4}{3\pi}\cos\frac{3E_1}{\hbar}\frac{\pi\hbar}{E_1} \\
&= \frac{1}{2} + \frac{4}{3\pi}\cos 3\pi \\
&= \frac{1}{2} - \frac{4}{3\pi}
\end{aligned}
$$