Príklady na cvičenie z kvantovej teórie

0. *JHO - úvodné veci*
Čomu je rovná typická dĺžka x_Q a typická hybnosť p_Q pre kvantový JHO?
Čomu je rovný súčin $x_Q p_Q$?
Čomu je rovná bezrozmerná súradnica ξ?
Čomu je rovná bezrozmerná energia ε?

1. *vlnové funkcie JHO*
Pripomeňte si (napíšte) rekurentný vzťah pre koeficienty a_k, ktoré sme zaviedli na prednáške v mocninnom rade $v(\xi) = \sum a_k \xi^k$.

Rad $v(\xi)$ sme usekli a urobili z neho polynóm, aby sme nedostali $v(\xi)$ asymptoticky pripomínajúce funkciu e^{ξ^2}, a tým pádom by sme stratili pravdepodobnostnú interpretáciu vlnovej funkcie $\Psi(\xi) = v(\xi)\, e^{-\xi^2/2}$, ktorá by prestala byť kvadraticky integrovateľná.

Usekávame výberom $2\varepsilon = 2N + 1$. Následne dostávame $E_N = (N + \frac{1}{2})\hbar\omega$ a k nej odpovedajúcu vlastnú funkciu $\Psi_N(x)$, pre $N = 0,\ 1,\ 2,\ \ldots$.

Na prednáške sme - až na normovaciu konštantu - odvodili $\Psi_0(x)$, $\Psi_1(x)$ a $\Psi_2(x)$.

(a) Použitím pomocných integrálov overte, že tieto funkcie sú na seba navzájom ortogonálne. *Musia byť, lebo odpovedajú rôznym vlastným hodnotám.*

(b) Odvoďte - až na normovaciu konštantu - $\Psi_3(x)$ a $\Psi_4(x)$ a načrtnite tieto vlnové funkcie, spolu s odpovedajúcimi hustotami pravdepodobnosti výskytu JHO. Nezabudnite na to, že *Hermitove* polynómy (Hermitove až na konštantu, resp.funkciu $v(\xi)$) dostávame v premennej $\frac{x}{x_Q}$ a nie v premennej x.

(c) Použitím pomocných integrálov overte, že $\Psi_4(x)$ je ortogonálna na $\Psi_0(x)$ a $\Psi_2(x)$.

(d) Podobne s použitím pomocných integrálov overte, že $\Psi_3(x)$ je ortogonálna na $\Psi_1(x)$.

Pomocné integrály: $\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2}\, dx = \sqrt{\pi}$, $\int_{-\infty}^{\infty} x^2\, e^{-x^2}\, dx = \frac{1}{2}\sqrt{\pi}$, $\int_{-\infty}^{\infty} x^4\, e^{-x^2}\, dx = \frac{3}{2}\,\frac{1}{2}\sqrt{\pi}$, $\int_{-\infty}^{\infty} x^6\, e^{-x^2}\, dx = \frac{5}{2}\,\frac{3}{2}\,\frac{1}{2}\sqrt{\pi}$, atď.

2. *operátory* $\hat{a}$ *a* $\hat{a}^\dagger$
Ako sme definovali operátory $\hat{a}$ a $\hat{a}^\dagger$?
Sú hermitovské? Je hermitovský operátor $\hat{a}^\dagger \hat{a}$?
Aký komutačný vzťah platí medzi nimi? (*dokázaný na prednáške*)

Ukážte, že operátor $(\hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2})\hbar\omega$ je rovný hamiltoniánu.

3. *základný stav*
Na poslednej prednáške, ktorá bola venovaná úvodu do všeobecného (Diracovho) formalizmu, sme sa dostali k základnému stavu JHO ako k stavu $|\Psi_0\rangle$, pre ktorý platí $\hat{a}\,|\Psi_0\rangle = 0$.
Ukážte, že tento vzťah je naozaj splnený v reprezentácii JHO vlnovými funkciami, teda že platí $\hat{a}\,\Psi_0(x) = 0$, kde $\Psi_0(x)$ je gauss odvodený na prednáške a $\hat{a}$ je pripomenutý v predchádzajúcom príklade.

Poznámka: $\hat{a}$ sme zadefinovali ako operátor pôsobiaci na vlnové funkcie. Vo vzťahu $\hat{a}\,|\Psi_0\rangle$ však pôsobí $\hat{a}$ na stav, teda už nie na vlnovú funkciu. Je to teraz operátor pôsobiaci vo všeobecnom vektorovom priestore "zobákových" ket stavov a nie vlnových funkcií. Budeme hovoriť, že jeho prvotná definícia je jeho súradnicovou reprezentáciou, resp. (čo je to isté) že sme ho pôvodne zadali v reprezentácii, v ktorej stavy reprezentujeme vlnovými funkciami.

4. *JHO: konštrukcia prvého excitovaného stavu vo všeobecnom formalizme*
(a) Tento príklad nadväzuje na predchádzajúci a vychádza z teraz už známeho základného stavu $|\Psi_0\rangle$.
Najprv však ukážte, že ak je *nejaký* stav $|\Psi\rangle$ vlastným stavom operátora $(\hat{a}^\dagger\hat{a})$ s vlastnou hodnotou α, tak stav $\hat{a}^\dagger|\Psi\rangle$ je tiež vlastným stavom tohto operátora s vlastnou hodnotou $(\alpha+1)$.
Dokáže sa to podobne ako tvrdenie na prednáške, že stav $\hat{a}|\Psi\rangle$ je tiež vlastným stavom tohto operátora s vlastnou hodnotou $(\alpha-1)$.

(b) Ak teda pôsobíme s operátorom $\hat{a}^\dagger$ na základný stav $|\Psi_0\rangle$, dostávame nový stav $|\Psi_1\rangle$, ktorý je vlastným stavom operátora $(\hat{a}^\dagger\hat{a})$ s vlastnou hodnotou $+1$. To znamená, že je to aj vlastný stav hamiltoniánu. Aká energia mu odpovedá?

(c) Overte, že keď stavy reprezentujeme vlnovými funkciami, naozaj platí $\Psi_1(x) = \hat{a}^\dagger\Psi_0(x)$, kde $\Psi_1(x)$ a $\Psi_0(x)$ sú vlnové funkcie popisujúce prvý excitovaný a základný stav, ktoré sme odvodili ako riešenia bezčasovej SchR z diferenciálnej rovnice. *V tejto úlohe je dôležité aj správne normovanie. Tvrdenie platí pre správne normované vlnové funkcie, preto im najprv vypočítajte normovacie konštanty.*

5. *JHO: konštrukcia ďalších excitovaných stavov vo všeobecnom formalizme*
(a) Chceme, aby bol každý excitovaný stav $|\Psi_n\rangle$ správne normovaný. Čomu

je vtedy rovné komplexné číslo $\langle\Psi_n|\Psi_n\rangle$ a to pre každé n?

(b) Pri pôsobení zvyšovacím operátorom $\hat{a}^\dagger$ na excitovaný stav $|\Psi_n\rangle$ zrejme dostaneme $|\Psi_{n+1}\rangle$, avšak normovanie sa môže pokaziť. Preto píšeme

$$\hat{a}^\dagger|\Psi_n\rangle = C_+|\Psi_{n+1}\rangle, \tag{1}$$

kde C_+ je vo všeobecnosti komplexná konštanta a stav na pravej strane je už normovaný na 1.
Dá sa ukázať (ale nebudeme to robiť), že možno konzistentne vybrať C_+ ako reálne kladné číslo pre každé n. Aj my budeme C_+ vyberať s touto fázovou konvenciou. Vypočítajte teraz C_+.
Poznámka: nech vás nemýli, že sme ho nezaviedli už v predchádzajúcom príklade. Pre $n = 0$ je totiž $C_+ = 1$.
Návod: urobte hermitovské združenie vzťahu (1) využijúc, že $|\Psi\rangle^\dagger = \langle\Psi|$ (ako komplexné združenie) a fakt, že pri hermitovskom združení sa mení poradie členov v súčine: $(\hat{A}\,\hat{B})^\dagger = \hat{B}^\dagger\,\hat{A}^\dagger$. Potom zlúčte osobitne ľavé strany a osobitne pravé strany rovnice (1) a jej hermitovsky združenej rovnice.

(c) Napíšte, čomu sa rovná $\hat{a}^\dagger|\Psi_1\rangle$ aj s vyčíslenou konštantou C_+.

(d) Napíšte, čomu sa vo všeobecnosti rovná $\hat{a}^\dagger|\Psi_n\rangle$ aj s vyčíslenou konštantou C_+.

6. *JHO: maticové vyjadrenie operátorov $\hat{a}^\dagger$ a $\hat{a}$*
Nakoľko stavy $\{|\Psi_n\rangle\}_{n=0}^{\infty}$ tvoria úplný systém, keď nimi poobkladáme operátory $\hat{a}^\dagger$ a $\hat{a}$, dostaneme maticové vyjadrenia týchto operátorov, ktoré nesú úplnú informáciu o pôsobení $\hat{a}^\dagger$ a $\hat{a}$ vo všeobecnom formalizme.
(a) Vypočítajte, čomu sa vo všeobecnosti rovná $a^\dagger_{ij} = \langle\Psi_i|a^\dagger|\Psi_j\rangle$, pre všetky i a j od nuly do nekonečna.
Návod: Výsledkom tu bude veľmi často nula. Nenulový maticový element dostaneme zo vzťahu (1) len ak $i = j + 1$

(b) Ak už rozumiete, čomu vychádzajú rovné maticové elementy $a^\dagger_{ij}$, napíšte celú maticu $a^\dagger$. S bodkami pre riadky a stĺpce s i, $j > 4$.

(c) K matici $a^\dagger$ napíšte hermitovsky združenú maticu a. Toto je maticové vyjadrenie operátora $\hat{a}$.