Domácí úkol 17. 3. 2021

Použijeme opět gaussovku jako v předešlých úkolech, konkrétně funkci tvaru

$$f_0(x) = \frac{1}{\sqrt{\alpha}\sqrt[4]{\pi}} e^{-\frac{x^2}{2\alpha^2}}$$

a podíváme se na to, jak na tuto funkci působí operátory kinetické a potenciální energie. Budeme uvažovat lineární harmonický oscilátor, který má Hamiltonián tvaru

$$H = T + V = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2\,,$$

kde ω je parametr potenciálu udávající frekvenci oscilace. Čím vyšší je ω, tím je potenciál užší a frekvence oscilací vyšší. Vlastním stavem Hamiltoniánu je právě gausovka $f_0(x)$, pokud $\alpha = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$. Co se stane, pokud to neplatí, se podíváme v úkolu. V následujícím tedy za α nedosazujte, pokud to nebude zadáno.

▷ Vypočtěte akci operátoru T na funkci $f_0(x)$. Je $f_0(x)$ vlastním stavem?

▷ Vypočtěte střední hodnotu kinetické energie. Nakreslete (ručně/v programu) funkci $f_0^2(x)$ (hustota pravděpodobnosti), funkci $f_0(x)Tf_0(x)$ a funkci $f_0(x)Tf_0(x)/f_0^2(x)$. Tu poslední funkci bychom mohli nazvat hustota kinetické energie ϵ_T, neboť platí $\langle T\rangle = \int \epsilon_T(x)\rho(x)\mathrm{d}x$, kde $\rho(x)$ je hustota pravděpodobnosti výskytu částice. V každém případě vidíme, že ϵ_T je místy záporné, což je v pořádku. Zápornost ϵ_T nastává v místech, kdy je energie částice nižší, než je potenciální energie. Do takových míst může vlnová funkce tunelovat, ale přitom také exponencielně upadá, jako je tomu u té gausovky.

▷ Vypočtěte akci operátoru V na funkci $f_0(x)$. Je $f_0(x)$ vlastním stavem? Opět nakreslete $f_0^2(x)$, funkci $f_0(x)Vf_0(x)$ a funkci $f_0(x)Vf_0(x)/f_0^2(x)$. V tomto případě vidíme, že energetická hustota je přímo dána velikostí potenciálu.

▷ Má-li být funkce vlastním stavem Hamiltoniánu, musí být energetická hustota $f_0(x)Hf_0(x)/f_0^2(x)$ konstantní. Proč? Čemu je rovna?

▷ Vykreslete $f_0(x)Tf_0(x)$, $f_0(x)Vf_0(x)$ a $f_0(x)Hf_0(x)$ pro gausovku s $\alpha_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$, a také pro gausovku s $\alpha' = 2\alpha_0$ a $\alpha' = \alpha_0/2$. (Pro jednoduchost lze pracovat v atomových jednotkách $\hbar = m = 1$ a zvolit $\omega = 1$, nebo jinak vhodně.) Porovnejte také střední energie jednotlivých operátorů. Proč zvýšení α zvýší nebo zvýší střední hodnoty operátorů T a V? Z variačního principu kvantové mechaniky plyne, že střední hodnota H (tedy energie) by měla být nejnižší, pokud použijeme hodnotu α_0 (tedy pracujeme s vlastním stavem H). Ověřte, že $\langle H\rangle$ je minimální pro α_0 a pro zbylé dvě hodnoty α je energie vyšší.