Domácí úkol 21. 3. 2023

V úkolu použijeme vlnovou funkci ve tvaru gaussovky, která je vlastní funkcí kvantového harmonického oscilátoru. Konkrétně se jedná o funkci

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

α je parametr udávající tvar funkce. V příladech se podíváme na to, jak na tuto funkci působí operátory kinetické a potenciální energie.

Hamiltonián kvantového oscilátoru má tvar

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

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

1.1 Vypočtěte, jak působí operátor T na funkci $f(x)$. Je $f(x)$ vlastním stavem T?

1.2 Vypočtěte střední hodnotu kinetické energie pro $f(x)$. Nakreslete (ručně/v programu) funkci $f^2(x)$ (hustota pravděpodobnosti), funkci $f(x)Tf(x)$ a funkci $f(x)Tf(x)/f^2(x)$. Tu poslední funkci bychom mohli nazvat hustota kinetické energie $\epsilon_T(x)$, 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 $\epsilon_T(x)$ je místy záporné, což je v pořádku. Zápornost $\epsilon_T(x)$ 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.

2.1 Vypočtěte výsledek aplikace operátoru V na funkci $f(x)$. Je $f(x)$ vlastním stavem V? Opět nakreslete $f^2(x)$, funkci $f(x)Vf(x)$ a funkci $f(x)Vf(x)/f^2(x)$ (ano, zde se $f(x)^2$ pokrátí). V tomto případě vidíme, že energetická hustota je přímo dána velikostí potenciálu.

3.1 Má-li být funkce vlastním stavem Hamiltoniánu, musí být energetická hustota $f(x)Hf(x)/f^2(x)$ konstantní funkcí x. Proč? Čemu je rovna?

4.1 Vykreslete $f(x)Tf(x)$, $f(x)Vf(x)$ a $f(x)Hf(x)$ 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. Pozn.: energie základního stavu kvantového oscilátoru je $\hbar\omega/2$. Proč zvýšení α zvýší nebo sníží střední hodnoty operátorů T a V?

4.2 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.

4.3 Uvažujte výraz $(T + V)f(x)$ získaný v **1.1** a **2.1**. Je obecná $f(x)$ závisející na α vlastní funkcí operátoru $T + V$, tedy celkového Hamiltoniánu? Vypočtěte hodnotu α, při které se $f(x)$ stane vlastní funkcí $T + V$.