

## Domácí úkol 28. 2. 2023

V tomto úkolu si procvičíme integrály, lineární algebru a výpočet maticových elementů a středních hodnot.

Mějme funkce

$$\begin{aligned} f_0(x) &= \frac{1}{\sqrt[4]{\pi}} e^{-\frac{x^2}{2}} \\ f_1(x) &= \sqrt{\frac{2}{\sqrt{\pi}}} x e^{-\frac{x^2}{2}} \\ f_B(x) &= N x^2 e^{-\frac{x^2}{2}}. \end{aligned}$$

Definiční obor je  $x \in (-\infty, \infty)$ . Těmto funkcím obvykle říkáme gaussovské, gausiány, gaussovky nebo obdobně. Funkce si nakreslete (pokud někdo předělává řešení do TeXu, tak není nutné mi obrázky posílat).

### Část 1 – Normalizace

**1.1** První dvě funkce máme normalizované, jejich normalizaci ověřte pomocí integrálu. Integrály jsou na konci zadání.

**1.2** Vypočtěte normalizační konstantu  $N$ . Měla by vyjít rovna  $\frac{2}{\sqrt{3\sqrt{\pi}}}$ .

### Část 2 – Ortogonalizace báze

**2.1** Ověřte, že funkce  $f_0$  a  $f_1$  jsou na sebe kolmé.

**2.2** Funkce  $f_0$  a  $f_B$  na sebe kolmé nejsou. Ověřte, že jejich skalární součin je roven  $\langle f_B | f_0 \rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}$ .

Funkci  $f_B$  můžeme ortogonalizovat na funkci  $f_0$  pomocí vzorce  $f_{\perp} = f_B - \langle f_B | f_0 \rangle f_0$ .

**2.3** Vypočtěte  $f_{\perp}(x)$ .

Funkce  $f_{\perp}$  není normalizovaná, musíme ji tedy normalizovat. Jednou z možností je explicitní výpočet integrálu  $\int_{-\infty}^{\infty} f_{\perp}^*(x) f_{\perp}(x) dx$ . Jednodušší možností je použít bra-ketů. Funkci  $f_{\perp}(x)$  si napíšeme jako ket  $|f_{\perp}(x)\rangle = |f_B(x)\rangle - \langle f_B | f_0 \rangle |f_0\rangle$ . Dále vypočteme normu funkce  $f_{\perp}$  pomocí skalárního součinu  $\langle f_{\perp} | f_{\perp} \rangle$ .

**2.4** Vypočtěte normu funkce  $f_{\perp}$  a funkci normalizujte.

Výslednou funkci označíme jako  $f_2$  a měla by být rovna  $f_2(x) = \frac{1}{\sqrt{2\sqrt{\pi}}}(2x^2 - 1)e^{-x^2/2}$ .

### Část 3 – Maticové elementy

Budou nás zajímat maticové elementy operátoru  $\hat{x}$ . Pro to je důležité vědět, že integrál gaussovky a liché funkce od  $-\infty$  po  $\infty$  je roven nule (sudá krát lichá).

**3.1** Vypočtěte maticové elementy operátoru  $\hat{x}$  pro funkce  $f_0$ ,  $f_1$  a  $f_2$ , tedy 9 hodnot pro matici  $3 \times 3$ . Nenulové by měly být jen čtyři hodnoty a matice by měla být symetrická.

Matici  $\mathbf{X}$  napište.

**3.2** Vypočtěte matici  $\mathbf{X}^2$ .

**3.3** Vypočtěte střední hodnotu operátoru  $\hat{x}^2$  pro funkci  $f_0$ , tedy  $\langle f_0 | \hat{x}^2 | f_0 \rangle$  a ověřte shodu s odpovídajícím členem matice  $\mathbf{X}^2$ .

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-Bx^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{B}}$$
$$\int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-Bx^2} dx = \frac{1}{2B} \sqrt{\frac{\pi}{B}}$$
$$\int_{-\infty}^{\infty} x^4 e^{-Bx^2} dx = \frac{3}{4B^2} \sqrt{\frac{\pi}{B}}$$
$$\int_{-\infty}^{\infty} x^6 e^{-Bx^2} dx = \frac{15}{8B^3} \sqrt{\frac{\pi}{B}}$$
$$\int_{-\infty}^{\infty} x^8 e^{-Bx^2} dx = \frac{105}{16B^4} \sqrt{\frac{\pi}{B}}$$