Domácí úkol 11. 5. 2022

Vodík pomocí gausovky

Uvažujme, že elektron v potenciálu vodíkového jádra se nepohybuje ve funkci $\psi_0 = \sim \exp(-r/a_0)$, ale ve funkci $\psi = N\exp(-\alpha r^2)$. Hodnotu α ještě nebudeme definovat, postupně najdeme optimální hodnotu z hlediska energie.

Pozn. Takovéto gausovky se masově používají jako báze pro elektronové vlnové funkce při kvantových výpočtech. Důvod je ten, že pokud vynásobíme dvě gausovky, dostaneme opět gausovku, což velmi zjednodušuje výpočty maticových elementů.

Funkce ψ není přesnou funkcí základního stavu.

▷ Jaký vztah (větší, menší, stejné, není možné říct dopředu) bude platit mezi $\langle\psi_0|H|\psi_0\rangle$ a $\langle\psi|H|\psi\rangle$? ($H$ je Hamiltonián vodíku.)

Nyní postupně najdeme $\langle\psi|H|\psi\rangle$ jako parametr α.

▷ Normalizujte ψ.

Hodnota normalizační konstanty by měla vyjít $N = (\frac{2\alpha}{\pi})^{3/4}$.

▷ Zapůsobte operátorem kinetické energie $T = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}r^2\frac{d}{dr}Ne^{-\alpha r^2}$ na $|\psi\rangle$ a výsledek přeintegrujte s $\langle\psi|$.

Pozor, zdůvodu sférické symetrie ψ stačí uvažovat jen radiální část operátoru kinetické energie. Při integraci pro výpočet střední hodnoty $\langle\psi|T|\psi\rangle$ ale musíme uvažovat také θ a ϕ a dodat r^2 z Jakobiánu. (Na θ a ϕ výsledek nezávisí, stačí tedy vynásobit 4π.) Výsledkem by mělo být $\frac{3\alpha\hbar^2}{2m}$, po aplikaci T na ψ bychom meli dostat $\frac{\hbar^2}{2m}2\alpha N(3-2\alpha r^2)e^{-\alpha r^2}$.

▷ Vypočtěte $\langle\psi|V|\psi\rangle$ jako funkci α.

Zde je opět třeba uvažovat r^2 z Jakobiánu a opět funkce nezávisí na θ a ϕ . Výsledkem by mělo být $\langle V\rangle(\alpha) = -2\sqrt{\frac{2\alpha}{\pi}}\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}$.

Výsledkem je energie jako funkce α, tedy energie se mění v závislosti na tom, jestli je gausián užší nebo širší. Diskutujte závislost $\langle T\rangle$ a $\langle V\rangle$ na α. Jakým hodnotám se budou blížit $\langle T\rangle$ a $\langle V\rangle$ jako funkce α pro hodnoty α jdoucí k nule a k nekonečnu?

V kvantové mechanice platí variační princip: Střední hodnoty energie jsou pro různé testovací funkce vyšší nebo rovny energii základního stavu. Rovnost nastává v případě, že použijeme vlnovou funkci základního stavu jako testovací funkci. Pokud tedy uvažujeme gausiány ψ s všemi možnými parametry α, dostaneme energie vyšší než je energie základního stavu. Nicméně bude existovat hodnota α_0, pro kterou bude $\langle E\rangle(\alpha)$ nejnižší. Asi si dokážeme představit, že pro α_0 bude mít gausián podobný tvar jako ψ, tedy vlnová funkce základního stavu. Jelikož známe funkční závislost střední hodnoty energie na parametru α, můžeme získat α_0 jako minimum $\langle E\rangle(\alpha)$.

▷ Derivací $\langle E\rangle(\alpha)$ najděte hodnotu α_0. Dosazením do $\langle E\rangle(\alpha)$ získáte hodnotu energie v minimu pro gausián. (Výsledkem by měl být jeden člen.) Porovnejte s energií přesného řešení.

Pro porovnání uvažte, že $\frac{m}{\hbar^2}(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0})^2$ je rovno jednomu Hartree (jednotka energie v atomových jednotkách) a energie základního stavu vodíku je jeden Rydberg, který je polovinou Hartree.

Případně si vykreslete ψ a ψ_0, opravdu by měly být podobné.

Komutátor a čas

Časovému vývoji jsme se ve cvičeních moc nevěnovali, nicméně si jej můžeme připomenout tímto příkladem. Podstatné je i) pokud je systém ve vlastním stavu ψ_n Hamiltoniánu s energií E_n, je jeho časový vývoj dán $\psi_n(x,t) = \psi_n(x,0)e^{-i\hbar E_n/t}$. Tedy jen se mění fáze.

ii) pokud je systém ve stavu, který můžeme popsat jako kombinaci vlastních stavů, pak platí $\psi(x,t) = \sum_n c_n \psi_n(x,0) e^{-iE_n t/\hbar}$. Tedy každému vlastnímu stavu přibývá fáze různě, podle jeho energie. Hodnoty c_n jsou rozvojové koeficieny do báze vlastních stavů.

Tedy pokud má systém dva stavy ψ_1 a ψ_2 s energiemi E_1 a E_2 a vlnová funkce je v čase $t = 0$ rovna $\psi = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_1 + \psi_2)$, bude časový vývoj $\psi(t) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_1 e^{-iE_1 t/\hbar} + \psi_2 e^{-iE_2 t/\hbar})$.

Nyní k příkladu.

Pro časový vývoj střední hodnoty veličiny je možné odvodit vztah

$$\frac{d\langle A\rangle}{dt} = \frac{i}{\hbar}\langle [H, A]\rangle + \left\langle \frac{\partial A}{\partial t} \right\rangle , \tag{1}$$

kde $\langle A\rangle = \langle\psi| \cdot |\psi\rangle$, tedy střední hodnota pro nějakou funkci ψ.

Uvažujme, že se částice nachází v poli lineárního harmonického oscilátoru s Hamiltoniánem

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

.

▷ Jakých hodnot nabývají vlastní čísla n a jaké jsou příslušné vlastní energie?

Vlnová funkce částice v čase $t = 0$ je $\psi = \frac{1}{\sqrt{3}}(\psi_0 + \psi_1 + \psi_3)$, kde ψ_n jsou vlastní funkce pro vlastní čísla n.

▷ Napiště časovou závislost ψ (tedy pouze k ψ_n přidáme časové fázové faktory).

Dosaďme v rovnici 1 za obecný operátor A operátor souřadnice x (explicitně na času nezávislý).

▷ Pro Hamiltonián kvantového oscilátoru, částici ve stavu $\psi(t)$ (časová závislost je zásadní) a $A = x$ ověřte, že se obě strany rovnice 1 rovnají.

(Pro výpočet maticových elementů je vhodné použít zvyšovací a snižovací operátory.)