# Cvičení 16. 5. 2023

Téma: Věty

**Příklad 1** Hellmanova-Feynmanova věta

Při výpočtech týkajících se reálných systémů nás často nezajímá jen energie systému pro nějaký stav, ale také hodnota derivace energie podle nějakého parametru, tedy $\frac{\mathrm{d}E_\lambda}{\mathrm{d}\lambda}$. Například pro molekuly nás zajímá, jak se změní energie při změně pozice nějakého atomu, z čehož můžeme vypočíst sílu a najít strukturu s nejnižší energií. V takovém případě je $\lambda = r_{i\alpha}$, tedy komponenta $\alpha$ polohy atomu $i$. Hellmanova-Feynmanova věta nám říká, že pro vlastní stav Hamiltoniánu $\psi$, můžeme kýženou derivaci vypočítat jako střední hodnotu derivace Hamiltoniánu podle daného parametru, tedy

$$\frac{\mathrm{d}E_\lambda}{\mathrm{d}\lambda} = \langle\psi|\frac{\mathrm{d}H_\lambda}{\mathrm{d}\lambda}|\psi\rangle\,. \tag{1}$$

Toto je zjednodušení, neboť jak uvidíme, pokud $\psi$ není vlastní stav $H$, bylo by třeba uvažovat i derivaci $\psi$ podle parametru $\lambda$.

Nejprve si větu odvodíme.

**1.1** Dosaďte $E_\lambda = \langle\psi|H|\psi\rangle$ na levou stranu rovnice 1. Rozepište derivaci pomocí pravidla pro součin funkcí a použijte $H|\psi\rangle = E|\psi\rangle$. Úpravou dostanete HF větu.

Nyní použijeme základní stav LHO pro ověření platnosti HF věty. Nejprve pro $\lambda = \omega$.

**1.2** Vypočtěte $\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}\omega}$ a $\frac{\mathrm{d}H}{\mathrm{d}\omega}$.

**1.3** Vyjádřete $\frac{\mathrm{d}H}{\mathrm{d}\omega}$ pomocí anihilačních a kreačních operátorů a ověřte HF větu pro stavy $|0\rangle$, $\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle)$ a $\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |2\rangle)$.

**R1.4** Uvažujme základní stav LHO centrovaný na $x_0$ a zopakujeme předchozí kroky pro $\lambda = x_0$ a stavy $|0\rangle$ a $\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle)$.

**Příklad 2** Viriálová věta

Viriálová věta udává vztah mezi střední hodnotou kinetické energie a potenciálem:

$$2\langle T\rangle = \left\langle x\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}x}\right\rangle\,. \tag{2}$$

Opět platí přesně pouze pro vlastní stavy a je možné odvodit i vícerozměrnou verzi. Pro odvození použijeme rovnici 3 a operátor $A = xp$. Odvození neprovedeme obecně, ale pro harmonický oscilátor s $V = \frac{1}{2}m\omega^2x^2$.

**2.1** Zamysleme se, proč jsou pro operátor $xp$ obě časové závislosti v rovnici 3 rovny nule pro vlastní stav Hamiltoniánu.

**2.2** Vypočtěte komutátory $[p^2, xp]$ a $[x^2, xp]$.

**2.3** S využitím předešlého výsledku zapište komutátor $[H, xp]$ pro harmonický oscilátor. Ověřte, že dostaneme násobek výrazu $2T - x\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}x}$.

**2.4** Ověřte že viriálový teorém platí pro základní stav LHO a neplatí pro stav $\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |2\rangle)$.

**Příklad 3 Časový vývoj střední hodnoty**

Pro časový vývoj střední hodnoty operátoru $A$ lze odvodit rovnici

$$\frac{\mathrm{d}\langle A\rangle}{\mathrm{d}t} = \frac{i}{\hbar}\langle[H, A]\rangle + \left\langle\frac{\partial A}{\partial t}\right\rangle\,. \tag{3}$$

Ověříme si jej explicitně pro částici pohybující se v poli LHO, která je ve stavu $|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}(|0\rangle + |1\rangle + |3\rangle)$ a operátor hybnosti $p$.

**3.1** Vypočtěte komutátor $[H, p]$.
**3.2** Pomocí anihilačních a kreačních operátorů vypočtěte levou a pravou stranu rovnice.
**Příklad 4** Časový vývoj funkce
Částice je ve stavu daném vlnovou funkcí

$$\psi = \frac{2}{\sqrt{3\alpha\sqrt{\pi}}}\frac{x^2}{\alpha^2}e^{-\frac{x^2}{2\alpha^2}}$$

a pohybuje se v potenciálu lineárního harmonického oscilátoru $V = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$.
**4.1** Napište časovou závislost vlnové funkce.
**Vzorečky**

$$\begin{aligned}
a &= \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(x + \frac{i}{m\omega}p\right) = \frac{1}{\sqrt{2}\alpha}(x + \alpha^2\frac{d}{dx}) \\
a|n\rangle &= \sqrt{n}|n-1\rangle \\
a^+ &= \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(x - \frac{i}{m\omega}p\right) = \frac{1}{\sqrt{2}\alpha}(x - \alpha^2\frac{d}{dx}) \\
a^+|n\rangle &= \sqrt{n+1}|n+1\rangle \\
x &= \frac{\alpha}{\sqrt{2}}(a + a^\dagger) \\
p &= \frac{\sqrt{\hbar m\omega}}{i\sqrt{2}}(a - a^\dagger) \\
[x, p] &= i\hbar
\end{aligned}$$