

# Superponované stavy

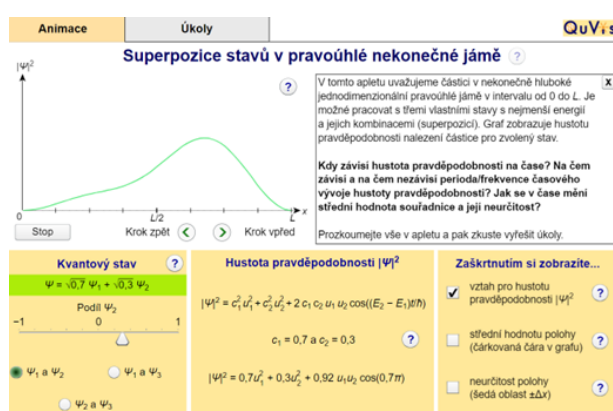
## Zadání úloh

V následujícím pracovním listu se budete zabývat superponovanými stavy částice nacházející se v nekonečné 1D pravoúhlé potenciálové jámě nebo v 1D lineárním harmonickém oscilátoru. Připomeňte si, jak vypadají stacionární stavy částice nacházející se v harmonickém oscilátoru a v nekonečné pravoúhlé jámě. Rovněž si připomeňte, jaký význam mají koeficienty lineární kombinace popisující superponovaný stav.

Využijte odkaz, který vás zavede na QuVis aplet zobrazující superponované stavy částice nacházející se v nekonečné pravoúhlé potenciálové jámě:

<https://fyzweb.cz/materialy/kvantovka/SuperpositionStates/SuperpositionStates.html>

Na obrázku níže je aplet, se kterým budete pracovat:



Obrázek 1: Správně nastavený QuVis aplet.

Vlevo v okně apletu je vidět graf hustoty pravděpodobnosti. Vlevo pod grafem si můžete nastavit různé superponované stavy. Uprostřed okna pak můžete vidět vyjádření hustoty pravděpodobnosti vzorcem, pokud vpravo zakliknete příslušnou volbu.

1. Nastavujte různé lineární kombinace stacionárních stavů  $\psi_1$  a  $\psi_2$ . Pozorujte časový vývoj hustoty pravděpodobnosti  $\rho$ . Jaký je časový vývoj  $\rho$  ve speciálních případech, kdy je koeficient u vlnové funkce  $\psi_2$  nulový nebo roven hodnotám 1 a -1?
2. Nastavte superponovaný stav  $\psi(x,t) = \sqrt{\frac{3}{10}}\psi_1 + \sqrt{\frac{7}{10}}\psi_3$ .

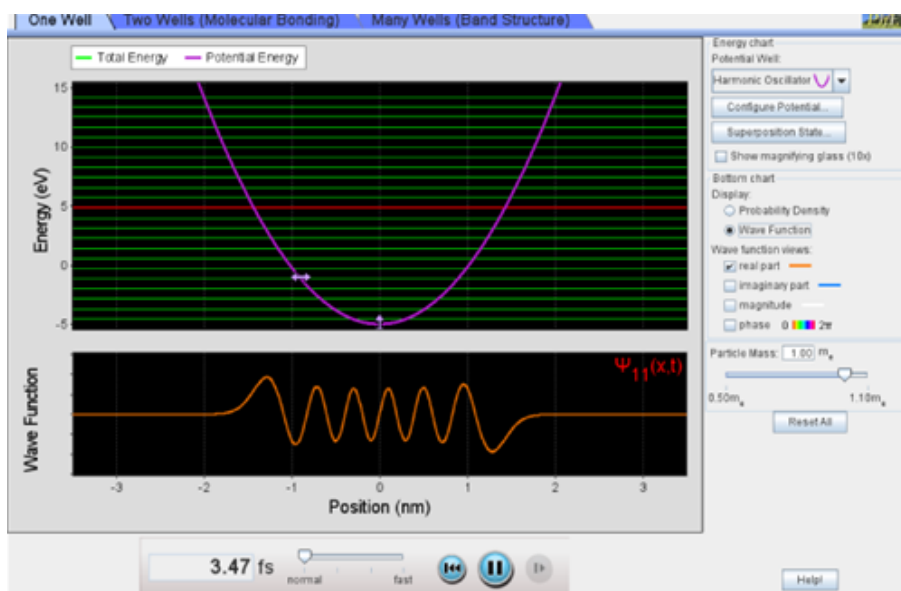
- Určete pravděpodobnost, že částici naměříme celkovou energii rovnou energii základního stavu.
- Pozorujte frekvenci, se kterou se mění graf hustoty pravděpodobnosti. Měňte vzájemnou velikost koeficientů v lineární kombinaci. Mění se frekvence změny hustoty pravděpodobnosti? Pokud ano, jak? Zdůvodněte, proč tomu tak je. Pokud si nevíte rady, rozklikněte v apletu otazník u grafu  $\rho$ , zobrazí se vám nápověda.

3. Vpravo si můžete zakliknout, aby se vám v grafu zobrazila rovněž střední hodnota polohy částice v jámě. Nastavujte různé kombinace stacionárních stavů. Pro které superponované stavy platí, že je střední hodnota polohy částice nezávislá na čase?

Rozklikněte následující odkaz, který vás zavede na stránku s apletem z kolekce PhET:

<https://phet.colorado.edu/sims/cheerpi/bound-states/latest/bound-states.html?simulation=bound-states>.

Nastavte vpravo nahoře, že chcete pracovat s lineárním harmonickým oscilátorem. Na obrázku 2 (viz níže) je příklad správného nastavení apletu.



Obrázek 2: Správně nastavený PhET aplet.

Superponovaný stav nastavíte kliknutím na tlačítko „Superposition State“. Nastavte libovolné hodnoty jednotlivých koeficientů. Když kliknete na „Normalize“, tak se velikost koeficientů upraví tak, aby výsledný stav byl normovaný. Klikněte na „Apply“ a pozorujte graf nastaveného superponovaného stavu. Pokud tedy například chcete zobrazit superpozici dvou stacionárních stavů, kde oba koeficienty v lineární kombinaci jsou stejně velké, nastavte požadované koeficienty oba na stejnou, libovolně velkou hodnotu a klikněte na „Normalize“. Kliknutím na „Clear“ se všechny koeficienty vynulují. Všimněte si, že aplet umožňuje nastavovat jen reálné koeficienty, pro naše potřeby jsou však reálné koeficienty dostačující.

4. Pozorujte postupně časový vývoj grafů hustot pravděpodobnosti, které odpovídají následujícím vlnovým funkcím:

- $\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_1 + \psi_5)$ ,
- $\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_1 + \psi_3)$ ,
- $\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_2 + \psi_6)$ .

Co mají grafy hustot pravděpodobnosti všech uvedených stavů společného? K nalezení odpovědi by vám mohly pomoci následující stavy, které danou vlastnost nemají:

- $\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2}}\psi_4 + \frac{1}{\sqrt{2}}\psi_3$ ,
- $\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2}}\psi_7 + \frac{1}{\sqrt{2}}\psi_2$ .

Nalezněte obecné pravidlo pro superpozici dvou stacionárních stavů, které mají tuto vlastnost. Zobrazte alespoň jeden další stav, jehož graf hustoty pravděpodobnosti má tuto vlastnost.

5. V pravé části obrazovky rozklikněte „Configure Potential“. Nastavte minimum potenciální energie (označeno jako „Offset“) na hodnotu  $-5\text{ eV}$  a konstantu  $\omega$  na hodnotu  $1\text{ fs}^{-1}$ . Uvažujme čtyři superponované stavy, jejichž vlnové funkce mají předpis:

- $\psi_a(x,t) = 0,71(\psi_3 + \psi_4)$ ,
- $\psi_b(x,t) = 0,24\psi_3 + 0,97\psi_4$ ,
- $\psi_c(x,t) = 0,71(\psi_0 + \psi_4)$ ,
- $\psi_d(x,t) = 0,24\psi_0 + 0,97\psi_4$ .

Kterému z těchto stavů odpovídá největší střední hodnota energie?

Určete pro každý stav čas, za který se graf hustoty pravděpodobnosti vrátí do stejné podoby, kterou měl v čase  $t = 0\text{ fs}$ . Rychlost vývoje grafu nastavte na normální.

## Řešení úloh z pracovního listu „Superponované stavy“

1. Když nastavíme koeficient u  $\psi_2$  nulový, zjistíme, že hustota pravděpodobnosti je časově nezávislá, neboť se nejedná o superponovaný, nýbrž o stacionární stav popsany vlnovou funkcí  $\psi_1$ . Jak víme z teorie, platí, že hustota pravděpodobnosti stacionárního stavu je časově nezávislá.

Když bude tento koeficient nenulový a koeficient u  $\psi_1$  nebude roven 1 nebo -1, bude hustota pravděpodobnosti již závislá na čase. Když ale nastavíme hodnotu koeficientu  $c_2$  na hodnotu 1 nebo -1, získáme opět stacionární stav, tentokrát popsany vlnovou funkcí  $\psi_2$  a hustota pravděpodobnosti bude časově nezávislá.

2.
  - Pravděpodobnost naměření energie základního stavu zjistíme tak, že umocníme velikost koeficientu, kterým násobíme stacionární vlnovou funkci základního stavu. Tento postup je použitelný v případě, když je superponovaný stav normovaný, tj. pokud je součet druhých mocnin velikostí koeficientů v lineární kombinaci roven jedné. Superponovaný stav v zadání úlohy má tuto vlastnost, takže můžeme umocnit koeficient, kterým je násobena funkce  $\psi_1$ . Bude tedy  $P(E_1) = \left(\sqrt{\frac{3}{10}}\right)^2 = \frac{3}{10}$ .
  - Hustota pravděpodobnosti zadaného superponovaného stavu má tvar:

$$\rho(x,t) = \left| \sqrt{\frac{3}{10}} \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{\pi x}{L}\right) e^{\frac{E_1 t}{i\hbar}} + \sqrt{\frac{7}{10}} \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{3\pi x}{L}\right) e^{\frac{E_3 t}{i\hbar}} \right|^2.$$

Odvoďme, že časový vývoj hustoty pravděpodobnosti uvažovaného stavu je periodický. Uvažujme superpozici libovolných dvou stacionárních stavů částice v jámě:

$$\psi(x,t) = c_k \sin\left(\frac{n_k \pi x}{L}\right) e^{\frac{-iE_k t}{\hbar}} + c_l \sin\left(\frac{n_l \pi x}{L}\right) e^{\frac{-iE_l t}{\hbar}}.$$

Označme  $u_k = \sin\left(\frac{n_k \pi x}{L}\right)$ ,  $u_l = \sin\left(\frac{n_l \pi x}{L}\right)$ . Hustota pravděpodobnosti je druhá mocnina velikosti vlnové funkce:  $\rho(x,t) = |\psi(x,t)|^2$ .

$$\begin{aligned} \rho(x,t) &= \left| c_k u_k e^{\frac{-iE_k t}{\hbar}} + c_l u_l e^{\frac{-iE_l t}{\hbar}} \right|^2, \\ \rho(x,t) &= \left[ c_k^* u_k e^{\frac{iE_k t}{\hbar}} + c_l^* u_l e^{\frac{iE_l t}{\hbar}} \right] \cdot \left[ c_k u_k e^{\frac{-iE_k t}{\hbar}} + c_l u_l e^{\frac{-iE_l t}{\hbar}} \right], \\ \rho(x,t) &= |c_k|^2 u_k^2 + |c_l|^2 u_l^2 + c_k^* c_l u_k u_l e^{\frac{it(E_k - E_l)}{\hbar}} + c_l^* c_k u_k u_l e^{\frac{it(E_l - E_k)}{\hbar}}, \\ \rho(x,t) &= |c_k|^2 u_k^2 + |c_l|^2 u_l^2 + c_k^* c_l u_k u_l \left[ \cos\left(\frac{(E_k - E_l)t}{\hbar}\right) + i \sin\left(\frac{(E_k - E_l)t}{\hbar}\right) \right] \\ &\quad + c_l^* c_k u_k u_l \left[ \cos\left(\frac{(E_l - E_k)t}{\hbar}\right) + i \sin\left(\frac{(E_l - E_k)t}{\hbar}\right) \right], \\ \rho(x,t) &= |c_k|^2 u_k^2 + |c_l|^2 u_l^2 + [c_k^* c_l u_k u_l + c_l^* c_k u_k u_l] \cos\left(\frac{(E_k - E_l)t}{\hbar}\right) \\ &\quad + i [c_k^* c_l u_k u_l + c_l^* c_k u_k u_l] \sin\left(\frac{(E_k - E_l)t}{\hbar}\right). \end{aligned}$$

Z tvaru hustoty pravděpodobnosti plyne, že vývoj  $\rho$  v čase je periodický, neboť funkce sinus a kosinus jsou periodické. Frekvence časového vývoje  $\rho$  je úměrná rozdílu energií příslušejících stacionárním stavům v lineární kombinaci. Na velikosti koeficientů lineární kombinace přitom frekvence časového vývoje nezávisí.

Podobné odvození lze také nalézt na stránce s apletem po rozkliknutí nápovědy v pravé části okna.

3. Stav, pro který je střední hodnota polohy částice časově nezávislá, jsou superpozicí základního a druhého excitovaného stavu. Pro tyto stavy platí, že je graf odpovídající hustoty pravděpodobnosti osově souměrný podle přímky rovnoběžné s osou  $y$  a procházející středem jámy. Graf je rozdělen na dvě poloviny tak, že obsahy ploch pod levou částí a pravou částí grafu se neustále rovnají. U ostatních superponovaných stavů je střední hodnota polohy částice časově závislá.
4. Hustoty pravděpodobnosti odpovídající prvním třem vlnovým funkcím jsou sudé funkce. Tuto vlastnost mají stavy, které jsou superpozicí jen sudých nebo jen lichých stavů. Stavů v superpozici přitom může být více než dva. Na velikosti koeficientů nezáleží. Když se vlnová funkce skládá pouze z lichých nebo pouze ze sudých členů, je druhá mocnina její velikosti, což je hustota pravděpodobnosti, sudá funkce. Uvedme tedy další stav, jehož hustota pravděpodobnosti je sudá funkce:

$$\psi(x,t) = \sqrt{\frac{1}{3}}\psi_1 + \sqrt{\frac{1}{3}}\psi_5 + \sqrt{\frac{1}{3}}\psi_7.$$

5. Střední hodnotu energie lze spočítat jako vážený průměr energií, kde váhami jsou pravděpodobnosti naměření jednotlivých energií:

$$\langle E \rangle = \frac{|c_1|^2 E_1 + |c_2|^2 E_2}{|c_1|^2 + |c_2|^2}.$$

Pokud je stav normovaný, je jmenovatel zlomku roven jedné. Lehce můžeme ověřit, že všechny zadané stavy jsou normované. Ve všech uvedených stavech můžeme naměřit energii  $E_4$  a nějakou menší energii. Největší střední hodnotu energie naměříme částici ve stavu, kde tato menší energie je co největší a navíc není moc pravděpodobné její naměření. Střední hodnota energie bude tedy největší u stavu  $\psi_b$ , neboť koeficient u  $\psi_4$  je větší, než jak je tomu u stavu  $\psi_a$ . Střední hodnota energie druhého superponovaného stavu je:

$$\langle E \rangle \doteq 0,24^2 E_3 + 0,97^2 E_4 \doteq 0,06 \cdot \frac{7}{2} \hbar\omega + 0,94 \cdot \frac{9}{2} \hbar\omega \doteq 4,44 \hbar\omega.$$

Časy, za které se graf hustoty pravděpodobnosti vrátí do stejné podoby, jakou měl v počátečním čase (časy jsou zaokrouhleny):

$$t_a \doteq 6,4 \text{ fs},$$

$$t_b \doteq 6,4 \text{ fs},$$

$$t_c \doteq 1,6 \text{ fs},$$

$$t_d \doteq 1,6 \text{ fs}.$$

Ze změřených časů je vidět, že graf hustoty pravděpodobnosti se u prvních dvou stavů měnil stejně dlouho a o poznání déle, než graf  $\rho$  příslušející  $\psi_c$  a  $\psi_d$ . Rozdíl energetických hladin, které přísluší vlnovým funkcím, je u prvních dvou stavů nejmenší možný, neboť máme dva sousední stacionární stavy. V obou případech vyšel stejný čas, i když koeficienty měly jinou hodnotu. U druhých dvou superponovaných stavů je energetický rozdíl mezi odpovídajícími energetickými hladinami větší. I zde jsme pozorovali,

že rychlost časového vývoje hustoty pravděpodobnosti nezávisí na velikosti koeficientů v lineární kombinaci.

Doporučuji vyzkoušet například stav popsany touto vlnovou funkcí:

$$\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2}}\psi_3 + \frac{1}{\sqrt{2}}\psi_{26}.$$

Energetický rozdíl mezi oběma hladinami reprezentovanými funkcemi v uvedené lineární kombinaci je ještě výraznější než v případě stavů  $\psi_c$  a  $\psi_d$ . Tomu odpovídá i časový vývoj grafu  $\rho$ .