Príklady na domácu úlohu z kvantovej teórie

Sada č.4

riešenia, prosím, odovzdajte do začiatku prednášky 29.10.2024

1. *gaussovský vlnový balík v čase $t = 0$*
(a) V čase $t = 0$ je gaussovský vlnový balík popísaný vlnovou funkciou $\Psi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} c(k)\,\Psi_k(x)\,dk$, kde $c(k) = A\,\exp\left(\frac{-(k-k_0)^2}{4(\Delta k)^2}\right)$ a A je konštanta. k_0 a Δk tu sú zatiaľ iba nejaké konštanty, resp. parametre. Hustota pravdepodobnosti pre meranie hybnosti k je potom $|c(k)|^2$. Je to gaussovo rozdelenie? Ak áno, s akou strednou hodnotou $\overline{k}$ a akou strednou kvadratickou odchýlkou?

(b) Integráciou dostávame $\Psi(x) = B\,e^{ik_0x}\,\exp\left\{-x^2/\left(\frac{1}{\Delta k}\right)^2\right\}$, kde B je konštanta. Hustota pravdepodobnosti pre meranie polohy je potom $|\Psi(x)|^2$. Je to gaussovo rozdelenie? Ak áno, s akou strednou hodnotou $\overline{x}$ a akou strednou kvadratickou odchýlkou?

(c) Pripomíname, že v časti *(a)* pre jednoduchosť používame k namiesto $p = \hbar k$. Z odpovedí v *(a)* a *(b)* určte, čomu je rovný súčin $\Delta x\,\Delta p$, kde Δx a Δp sú stredné kvadratické odchýlky polohy a hybnosti. *Tu sme už prešli od k ku p.* Podľa princípu neurčitosti má byť tento výraz väčší alebo rovný $\hbar/2$, čo dokážeme neskôr. Je princíp neurčitosti splnený?

(d) Vykonajte integráciu spomenutú v časti *(b)* využijúc $\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha x^2+\beta x}dx = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}\,e^{\beta^2/4\alpha}$. **[2 body]**

2. *gaussovský vlnový balík v čase $t > 0$*
(a) Voľne nadväzujúc na predchádzajúci príklad pozrite do Zelenej učebnice (ZU) na vzťah (7′) na str.76 (tlačená verzia), resp. na str.51 (pdf verzia). Nás tu bude zaujímať iba exponenciálna časť tohto výrazu. Po jej umocnení na druhú dostaneme, až na konštantu, hustotu pravdepodobnosti výskytu častice. Vykonajte toto umocnenie a určte, čomu sa rovná $\overline{x}(t)$ a $\Delta x(t)$. Pri úpravách nahraďte κ^2 v ZU našim výrazom $2(\Delta k)^2$. K tomu porovnajte $c(k)$ zo zadania príkladu **1.***(a)* a vzťah (6) v ZU.

(b) Dostávate pre čas $t = 0$ zhodu s odpoveďami v príklade **1.** ?

(c) Čomu sa rovná $\Delta x(t)$ pre $t = t_{char} = \frac{1}{2}\,\frac{m}{\hbar\,(\Delta k)^2}$? t_{char} je zjavne charakteristický čas pre gaussovský balík.

Čomu sa rovná $\Delta x(t)$ pre $0 < t \ll t_{char}$?
Čomu sa rovná $\Delta x(t)$ pre $t \gg t_{char}$? **[2 body]**

3. *šírenie voľnej častice v stave gaussovského vlnového balíka*
(a) Načrtnite hustotu pravdepodobnosti výskytu $|\Psi(x,\,t)|^2$ pre štyri rôzne časy $t_1,\ t_2,\ t_3,\ t_4$, pričom

$$t_4 > t_3 \gg t_{char} = \frac{m}{2\hbar(\Delta k)^2} \gg t_2 > t_1 = 0.$$

Dajte si záležať na **správnej polohe stredu, šírke a výške** balíka v jednotlivých prípadoch.

(b) Stručne vysvetlite, z ktorej časti vzorca $(7')$ vidno, akou rýchlosťou sa balík pohybuje priestorom. Je to nejaká z rýchlostí v_f (fázová) alebo v_g (grupová)?

(c) Stručne vysvetlite, odkiaľ vo vzťahu pre $|\Psi(x,\,t)|^2$ vidno, že sa tento balík neudrží navždy rovnako lokalizovaný v priestore, ale že sa raz začne rozplývať (delokalizovať). **[2 body]**

4. *šírenie voľnej častice v stave gaussovského vlnového balíka*
Odhadnite čas, kedy sa začne rozplývať gaussovský vlnový balík odpovedajúci elektrónu vyžiarenému pri beta rozpade neutrónu.
Treba k tomu odhad $\Delta k = \Delta p/\hbar$ elektrónu. Na čo všetko sa rozpadá neutrón pri beta rozpade? Aká energia v eV, resp. MeV sa vtedy uvoľní? Keďže ide len o rádový odhad, možno uvažovať pre elektrón $pc = 0.1\,MeV$ s rádovo rovnakou neurčitosťou.

Rok má rádovo 10^7 sekúnd. Vek vesmíru je rádovo 10^{10} rokov. Porovnajte s týmito údajmi Váš výsledok. **[2 body]**

5. *šírenie voľnej častice v stave gaussovského vlnového balíka*
Uvažujme balík v čase $t \gg t_{char}$. Ako sa zmenila - ak vôbec - hustota pravdepodobnosti hybnosti častice voči počiatočnému času $t = 0$? Na základe tejto Vašej odpovede vysvetlite, či sa v neskoršom čase $t \gg t_{char}$ mení neurčitosť hybnosti častice a teda či gaussovské rozdelenie hybnosti tejto častice mení svoj tvar pri časovom vývoji. Ak áno, aký tvar nadobúda? Ak nie, prečo nie?

Na záver vysvetlite, či je v čase $t \gg t_{char}$ splnený vzťah neurčitosti pre Δx a Δp. **[2 body]**

6. *výpočet jednoduchých integrálov s delta funkciou*
Určte, čomu sú rovné integrály s delta funkciou v podintegrálnej funkcii:

(a)

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x+1)\,dx, \quad \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(2x+1)\,dx, \quad \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x^2-4)\,dx, \quad \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x^2+4)\,dx,$$

(b)

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^x\,\delta(x+1)\,dx, \quad \int_{-\infty}^{+\infty} e^x\,\delta(2x+1)\,dx, \quad \int_{-\infty}^{+\infty} e^x\,\delta(x^2-4)\,dx, \quad \int_{-\infty}^{+\infty} e^x\,\delta(x^2+4)\,dx,$$

(c)

$$\int_{-4}^{+4} (x+3)\,(x+5)\,\delta(x-1)\,dx, \quad \int_{10}^{100} (x+3)\,(x+5)\,\delta(x-1)\,dx, \quad \int_{-4}^{+4} (x+3)\,(x+5)\,\delta[(x+3)(x+5)]\,dx, \quad \int_{-4}^{+4} (x+4)\,(x+5)\,\delta[(x+3)(x+5)]\,dx,$$

(d)

$$\int_{-\infty}^{+\infty} x\,\delta(x)\,dx, \quad \int_{-\infty}^{+\infty} x\,\delta(x^2)\,dx, \quad \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x^2)\,dx,$$

(e)

$$\int_{-1}^{0} dx \int_{-1}^{1} dy\, y\,\delta(x-y)\,, \quad \int_{-2}^{0} dx \int_{-1}^{1} dy\, y\,\delta(x-y)\,.$$

[2 body]

7.*voľná častica - jednoduchá superpozícia*
Voľná častica s vlnovou funkciou normovanou na konečný (obrovský) interval dĺžky L a periodickými okrajovými podmienkami je vo všeobecnosti v čase $t=0$ popísaná vlnovým balíkom $\sum_n c_n \Psi_{p_n}$, kde stav s ostrou hodnotou hybnosti $\Psi_{p_n} = e^{ip_n x/\hbar}/\sqrt{L}$. Hybnosť je diskrétna (nie spojitá), aby spĺňala periodické okrajové podmienky: $p_n = \frac{2\pi\hbar}{L} n,\ n \in Z$. V tomto príklade uvažujme, že tento balík sa redukuje na

$$\Psi(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} \left(\frac{\sqrt{5}+i}{2-2i}\, e^{i\,2qx/\hbar} + c\, e^{-i\,2qx/\hbar} \right),$$

kde hybnosť $q>0$ je nejakým veľkým celočíselným násobkom $\frac{2\pi\hbar}{L}$ *(ide tu opäť len o splnenie periodických okr. podmienok, zároveň to zaručuje ortogonálnosť rovinných vĺn, z ktorých sa skladá naša superpozícia).*

(a) Určte všetky možné hodnoty c pre správne normovanú $\Psi(x)$.
(b) Aká je pravdepodobnosť, že pri meraní hybnosti v stave Ψ nameriame hybnosť q, hybnosť $-q$, hybnosť $2q$, hybnosť $-2q$, hybnosť $4q$, hybnosť s absolútnou hodnotou rovnou $2q$?
(c) Aká je stredná hodnota hybnosti častice v stave Ψ? Vysvetlite, ako by ste Váš výsledok overili "na prstoch".
(d) Aká je neurčitosť hybnosti Δp častice v stave Ψ? Vysvetlite, ako by ste Váš výsledok overili "na prstoch".

(e) Čo by ste odpovedali na otázku, aká je hybnosť častice v stave Ψ?
(f) Aké energie možno namerať v stave Ψ a s akou pravdepodobnosťou?
Čo by ste odpovedali na otázku, aká je energia častice v stave Ψ?
(g) Častici v stave Ψ sme namerali hybnosť $2q$.
Na tejto istej častici budeme potom merať hybnosť aj druhýkrát.
S akou pravdepodobnosťou akú hybnosť nameriame?
(h) Nech $\Psi(x) = \Psi(x, t = 0)$. Napíšte $\Psi(x, t)$ pre $t > 0$.
Zmenia sa v neskoršom čase odpovede na niektoré z otázok *(b)*-*(g)*?
(i) Závisí niektorá z odpovedí na veľkosti L? Prečo nie? **[2 body]**

8. *voľná častica, vlnový balík*
(a) Na prednáške sme predviedli päť príkladov vlnového balíka. *Z toho prvý,* $c_1(k) = \delta(k - k_0)$ *a posledný,* $c_5(k) = konst.$ *sú triviálne.* Pripomeňte si týchto päť príkladov a pod sebou urobte päť náčrtkov $c_1(k), c_2(k), \ldots$ až $c_5(k)$ definujúcich balíky študované na prednáške. Vedľa týchto náčrtkov potom načrtnite grafy im odpovedajúcich vlnových funkcií (ich reálnych častí).

(b) Načrtnite priebeh funkcie

$$c_6(k) = konst. \frac{1}{1 + \frac{(k-k_0)^2}{(\Delta k)^2}},$$

kde $k_0 > 0$ a $|\Delta k| \ll k_0$. Ak $c_6(k)$ definuje vlnový balík, ako bude približne vyzerať $\Psi(x)$ opisujúca stav častice? Načrtnite v hrubých rysoch jej reálnu časť.

(c) Aký integrál treba spočítať pri presnom určení vlnovej funkcie tohto šiesteho balíka? *Integrál stačí napísať. Ak to viete vypočítajte ho. Napr. prechodom do komplexnej roviny v premennej k. Za správny výpočet budú dva bonusové body.*

(d) Pre $\Delta k > 0$ platí

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{1 + \frac{k^2}{(\Delta k)^2}} e^{ikx} \, dk = \pi \Delta k e^{-\Delta k \, |x|}$$

Na základe znalosti tohto integrálu zopakujte náčrtok z časti *(b)*.

(e) Prečo je $c_6(k)$ menej vhodná na opis častice ako $c_4(k)$?
Pripomeňme, že $c_4(k)$ *opisovala gaussovský balík.* **[2 body + 2 bonus body]**

9. (bonus príklad) *na počet kvantových stavov*
Na prednáške bol odvodený vzťah pre Fermiho energiu E_F v 3-rozmernom prípade, v závislosti na objemovej hustote počtu elektrónov ρ. Predpokladáme pritom nulovú teplotu, a teda každý stav s energiou pod Fermiho hladinou je obsadený práve jedným elektrónom. Preto je počet častíc rovný počtu stavov s $E < E_F$, a podobne to platí pre hustoty: $\rho = n$, hustota počtu častíc ρ je rovná hustote počtu stavov n.

(a) Vyjadrite n ako funkciu (Fermiho) energie.
Zdiferencujte tento vzťah. Po zdiferencovaní z neho dostávame (infinitezimálny) počet stavov dn v jednotke objemu pripadajúcich na interval energie (E,E+dE). Premyslite si, že je to tak. Konečná veličina $dn/dE \equiv g(E)$ je spektrálna hustota počtu stavov. Ide o dôležitú veličinu v teórii tuhých látok. Napíšte, čomu sa rovná $g(E)$. Toto je $g(E)$ zo vzťahu pre Fermiho energiu.

(b) Tento výsledok vieme dostať aj iným spôsobom: z počtu stavov v intervale $d^3\vec{p}$, ktorý bol odvodený na prednáške z normovania voľnej častice na konečný objem (výsledný vzťah je všeobecne platný). Použite teda *(i)* počet kvantových stavov v intervale d^3p odvodený na prednáške a *(ii)* vzťah medzi energiou a hybnosťou voľnej častice na odvodenie $g(E)$. Presvedčte sa, že dostávate ten istý výsledok ako v časti *(a)*.

Poznámky:
Aj pri druhom spôsobe treba extra zarátať dva spinové stavy elektrónov.

V podstate by sme mohli integráciou $g(E)$ odvodenou z počtu stavov v intervale d^3p odvodiť vzťah pre Fermiho energiu v kove... vlastne sme sa nemuseli "trápiť" s počítaním počtu stavov v kladnom oktante (n_x, n_y, n_z) celočíselnej mriežky pre elektrón viazaný v kove.
Ale ...

je pozoruhodné, že výsledky (a) a (b) sú rovnaké. Lebo: *V prvom prístupe pri odvodzovaní Fermiho energie sčitujeme počet stacionárnych stavov voľnej častice na úsečke. Vtedy zarátavame aj "polvlny"!*
V druhom prístupe sčitujeme počet postupných vĺn odpovedajúcich voľnej častici s periodickými okrajovými podmienkami. Vtedy "polvlny" nerátame, lebo nesplňajú period. okr. podmienky!
Matematicky dostávame zhodu preto, že v druhom prípade periodické okrajové podmienky síce nedovoľujú zarátať stavy s "polvlnami" (strácame polovicu stavov voči častici na úsečke), ale na druhej strane postupné vlny s hybnosťami $+p_x$ a $-p_x$ počítame za dva rôzne stavy, kdežto pre časticu na úsečke

zarátavame iba ich superpozíciu: stojatú vlnu.
Zhoda medzi (a) a (b) tak okrem iného dokazuje správnosť výberu periodických okrajových podmienok pre normovanie na konečný objem. **[2 body]**