Príklady na domácu úlohu z kvantovej teórie

Sada č.5

riešenia, prosím, odovzdajte do začiatku prednášky 5.11.2024

0. *základné veci z kúpeľňového zrkadla*
(a) Napíšte spamäti časovú Schrödingerovu rovnicu (SchR) v troch rozmeroch s rozpísaným hamiltoniánom.

(b) Napíšte spamäti definíciu hermitovského operátora v troch rozmeroch. **[1 bod]**

1. *bezčasová SchR v 2 rozmeroch a častica viazaná vo štvorci LxL*
Na prednáške bolo požičané z budúcnosti, že vlnová funkcia stacionárneho stavu vo vnútri štvorca $x \in (0, L)$ a $y \in (0, L)$ je rovná $\Psi_{m,n}(x, y) = A \sin \frac{m\pi x}{L} \sin \frac{n\pi y}{L}$, kde A je normovacia konštanta a m, n sú celé kladné čísla. Dokážte teraz, že naozaj takýto súčin sínusov vo štvorci vyhovuje bezčasovej SchR.

Poznamenajme, že zároveň tie sínusy urobia nulu na krajoch štvorca, a preto $\Psi_{m,n}(x, y)$ je naozaj hľadaným riešením s okrajovou podmienkou "nula na kraji".

Je konštanta E v bezčasovej SchR ľubovolné číslo, alebo musí byť rovná nejakej konkrétnej hodnote, aby bola bezčasová SchR splnená? **[2 body]**

2. *voľná častica*
(a) Overte, že $\Psi_p(x)$ napísaná na prednáške vyhovuje bezčasovej SchR v jednom rozmere s $V(x) = 0$. Pre akú hodnotu E?

(b) Overte, že $\Psi_{\vec{p}}(\vec{r})$ napísaná na prednáške vyhovuje bezčasovej SchR v troch rozmeroch s $V(\vec{r}) = 0$. Pre akú hodnotu E?

(c) Overte, že $\Psi_p(x)$ aj $\Psi_{\vec{p}}(\vec{r})$ sú vlastné funkcie operátora hybnosti $\hat{p}_x$. S akými vlastnými hodnotami? **[2 body]**

3. *definícia hermitovosti*
Na prednáške sme zadefinovali hermitovosť operátora $\hat{A}$ pomocou rovnosti $\int \Phi^* \hat{A} \Psi = \int (\hat{A}\Phi)^* \Psi$, platnej pre ľubovolné dve kvadraticky integrovateľné funkcie Φ, Ψ.

Mohlo by sa zdať, že táto definícia je viac všeobecná, ako keby sme definovali hermitovosť $\hat{A}$ pomocou rovnosti $\int \Psi^* \hat{A} \Psi = \int (\hat{A}\Psi)^* \Psi$, v ktorej vystupuje len jedna funkcia Ψ. Toto však nie je pravda. Naša definícia je **ekvivalentná** definícii $\int \Psi^* \hat{A} \Psi = \int (\hat{A}\Psi)^* \Psi$ s jedinou funkciou (kvadraticky integrovateľnou $\Psi(x)$). Dokážte toto tvrdenie.
Treba dokázať, že jedna definícia implikuje druhú a naopak. Pozrite k tomu Zelenú knihu na str.99 - tlačená verzia, resp. 67 v pdf. **[2 body]**

4. *operátor parity*
Operátor parity $\hat{P}$ v jednom rozmere je definovaný vzťahom $\hat{P}\,\Psi(x) = \Psi(-x)$.
(a) Ukážte, že je hermitovský. Začnite dôkazom, že je lineárny.

(b) Určte jeho dve vlastné hodnoty. Ďalšie už nemá.
Pomôcka: Pôsobte s $\hat{P}$ na vlastnú funkciu dvakrát. Zjavne platí, že tak dostaneme tú istú funkciu. Nakoľko ide o hermitovský operátor, jeho vlastné hodnoty by mali byť reálne. Sú?

(c) Aké sú jeho vlastné funkcie?
Sú vlastné hodnoty degenerované? Ak áno, koľkokrát?
Nakoľko ide o hermitovský operátor, jeho vlastné funkcie prislúchajúce rôznym vlastným hodnotám by mali byť ortogonálne. Sú? Vysvetlite.

(d) Nakoľko ide o hermitovský operátor, jeho vlastné funkcie by mali tvoriť úplný systém. Tvoria? Naozaj je možné každú kvadraticky integrovateľnú funkciu vyjadriť ako superpozíciu vlastných funkcií operátora $\hat{P}$? **[2 body]**

5. *základné vlastnosti hermitovského operátora*
Nech $\hat{A}$ a $\hat{B}$ sú hermitovské operátory.
Rozhodnite, či sú hermitovské aj nasledujúce operátory:
(a) operátor $\hat{C} = \hat{A} + \hat{B}$ (súčet operátorov)
(b) operátor $\hat{C} = \hat{A}\,\hat{B}$ (súčin operátorov)
(c) operátor $\hat{C} = \hat{A}\,\hat{B} + \hat{B}\,\hat{A}$ (antikomutátor herm. operátorov)
(d) operátor $\hat{C} = \hat{A}\,\hat{B} - \hat{B}\,\hat{A}$ (komutátor herm. operátorov)
(e) operátor $\hat{C} = \hat{A}^2$ (druhá mocnina hermitovského operátora)
(f) operátor $\hat{C} = \hat{A}^n$ (n-tá mocnina hermitovského operátora) **[2 body]**

6. *základné vlastnosti hermitovského operátora*
Na základe otázok príkladu **5.** rozhodnite, či sú hermitovské nasledujúce

operátory:
(a) operátor $\partial_x^4 = (\partial_x^2)^2$ (operátor štvrtej derivácie ako druhá mocnina už prevereného operátora druhej derivácie),
(b) operátor $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2 + V(x)$ (operátor celkovej energie pre časticu s potenciálnou energiou V(x)),
(c) operátor $\hat{x}\hat{p}_x$ (súčin hermitovských operátorov súradnice a hybnosti)
(d) operátor $\hat{x}\hat{p}_x - \hat{p}_x\hat{x}$ (komutátor operátorov súradnice a hybnosti),
(e) operátor celkového momentu hybnosti $\hat{L}^2$ (jeho druhá mocnina): $\hat{L}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2 = (\hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y)^2 + (\hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z)^2 + (\hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x)^2$. **[2 body]**

7.*výpočet strednej hodnoty zo vzťahu* $\overline{A} = \int \Psi^* \hat{A} \Psi$
Uvažujte časticu na úsečke v stave popísanom vlnovou funkciou $\Psi(x) = \sqrt{\frac{30}{L^5}}x(L-x)$. V minulosti sme našli pravdepodobnosti $P(E_n)$ namerať v tomto stave energiu E_n. Sú aj v Zbierke, str.46 tlačená verzia a 34 v pdf. Ukážte, že predpoveď pre strednú hodnotu merania energie v tomto stave $\overline{E} = \sum_{n=1}^{\infty} E_n\, P(E_n)$ dostaneme rovnako (a oveľa pohodlnejšie), ak ju počítame zo vzťahu $\overline{E} = \int_0^L \Psi(x)^*\, \hat{H}\Psi(x)\, dx$. Teda vypočítajte $\overline{E}$ oboma spôsobmi a okomentujte zhodu.
Nekonečný rad možno spočítať pomocou známej zeta funkcie $\zeta(4) = \frac{\pi^4}{90}$.
[2 body]

8. *operátor hybnosti*
Vypočítajte strednú hodnotu hybnosti elektrónu v základnom stave atómu vodíka. Teraz sme v troch rozmeroch a treba teda počítať $\overline{p}_x$, $\overline{p}_y$ a $\overline{p}_z$. Vlnová funkcia elektrónu je konšt$\cdot e^{-r/a}$.

(b) Overte, že pre tento elektrón je splnený vzťah neurčitosti.
V skutočnosti sú to tri vzťahy neurčitosti $\Delta x\, \Delta p_x > \hbar/2$ *a podobne pre y a z. Neurčitosti polohy ste už počítali v minulosti. Ak ste ich tam vypočítali, môžte ich odtiaľ sem prepísať. V opačnom prípade ich odporúčame spočítať tu, aj so správnym normovaním vlnovej funkcie.*
Pre výpočet stredných hodnôt $\overline{p_x^2}$, $\overline{p_y^2}$ *a* $\overline{p_z^2}$ *odporúčame využiť sférickú symetriu, podobne ako pri výpočte* $\overline{x^2}$, $\overline{y^2}$ *a* $\overline{z^2}$. *Za laplasián dosaďte jeho vyjadrenie vo sférických premenných.* **[2 body]**

9. (bonus príklad) *výpočet strednej hodnoty E častice na úsečke* $<0, L>$
Podobný príklad ako príklad **7.**, tento raz pre vlnovú funkciu v čase $t = 0$

rovnú $\Psi(x) = Ax^2(L - x)$. Načrtnite jej priebeh na úsečke $< 0, L >$, ako aj priebeh hustoty pravdepodobnosti výskytu častice. Vypočítajte normovaciu konštantu A, amplitúdy pravdepodobnosti c_n pre každé $n = 1, 2, 3, \ldots$ a dokážte, že výpočet $\overline{E}$ dáva oboma spôsobmi rovnaký výsledok.

Navyše vyčíslite $P(E_1)$, $P(E_2)$ a $P(E_3)$. Z výsledku určte najmenší nenulový čas $t > 0$ (s presnosťou na 1%), v ktorom bude "hrb"v $|\Psi(x)|^2$ presunutý doľava. **[2 body]**