Príklady na cvičenie z kvantovej teórie

1. *Schrödingerova rovnica (skrátene SchR)*
(a) Samostatne napíšte časovú SchR pre jednorozmerný prípad, podľa možnosti spamäti. *A podľa možnosti s rozpísanou pravou stranou, kde je člen s deriváciou a člen s potenciálnou energiou, ako sme ju napísali na prednáške.*

(b) Platí pre všetky vlnové funkcie?

(c) Napíšte bezčasovú SchR, podľa možnosti spamäti. *Tu sa už typicky píše* $\hat{H}$*, na prednáške sme pri jej odvodení ešte nemali operátor* $\hat{H}$ *zavedený, tak bola na tabuli s rozpísanou ľavou stranou.*

(d) Platí aj bezčasová SchR pre všetky vlnové funkcie? Odpoveď vysvetlite. Ako sa volajú stavy, pre ktoré platí bezčasová SchR?

2. *SchR*
Uvažujme časticu viazanú na úsečke a jednorozmerný svet rovný celej reálnej osi. Čo je v tomto prípade potenciálom $V(x)$ v SchR?
Mimochodom, potenciál v SchR v kvantovej mechanike znamená potenciálnu energiu, a nie potenciál nejakého poľa, napr. elektrického.

Uvažujme elektrón viazaný v atóme vodíka v trojrozmernom priestore. Čo je v tomto prípade potenciálom $V(\vec{r})$ v SchR?

Uvažujme jednoduchý harmonický oscilátor v jednom rozmere. Čo je v tomto prípade potenciálom $V(x)$ v SchR?

3. *detaily bezčasovej SchR pre časticu na úsečke*
Uvažujme časticu viazanú na úsečke $< 0, L >$ v stave popísanom vlnovou funkciou $\Psi_n(x)$ (na úsečke) a jednorozmerný svet rovný celej reálnej osi. Čomu je rovná vlnová funkcia mimo úsečky? Čo by ste povedali na otázku, či bezčasová SchR platí mimo úsečky?
Na prednáške sme povedali, že bezčasovú SchR nesplňa každá vlnová funkcia, ale len taká, ktorá je separovateľná na súčin $\Psi(x)\Theta(t)$*, a ak to je možné a taká funkcia existuje, potom jej časová závislosť* $\Theta(t)$ *musí byť rovná* $e^{-iEt/\hbar}$*, kde* E *je zatiaľ neurčená konštanta, ktorá bude určená až rovnicou pre priestorovú časť* $\Psi(x)$*.*

V krajných bodoch úsečky je zjavne potenciál nespojitý. Nemení sa však o konečný skok, ale o nekonečne veľkú hodnotu. Dalo by sa povedať, že tento nekonečný skok je akoby vykrátený v bezčasovej SchR nekonečnom s opačným znamienkom z nejakého iného člena?
Sústreďme sa na člen s druhou deriváciou a položme si otázky: Je vlnová funkcia v krajných bodoch úsečky spojitá? Je tam aj jej prvá derivácia spojitá? A ak je prvá derivácia nespojitá s konečným skokom, čo možno povedať o

(ne)spojitosti druhej derivácie v týchto bodoch?
Pre (ne)spojitosť napr. v nule uvažujme rozdiel funkčných hodnôt v bode $x = 0- = -\varepsilon$ a v bode $x = 0+ = +\varepsilon$. Podobne na druhom konci úsečky v bodoch $x = L- = L - \varepsilon$ a $x = L+ = L + \varepsilon$.

Po dumaní o svete mimo úsečky a o jej krajných bodoch, dokážte na záver to najdôležitejšie: že bezčasová SchR platí vo vnútri úsečky.
Súčasťou dôkazu je to, že ona vlastne neplatí pre ľubovolnú konštantu E, ale na to, aby platila, musí byť konštanta E nastavená na jednu konkrétnu hodnotu. Akú?

4. *bezčasová Schr v dvoch rozmeroch a častica viazaná vo štvorci o strane L*
Na prednáške bolo požičané z budúcnosti, že vlnová funkcia stacionárneho stavu pre body 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 nastavená na nejakú konkrétnu hodnotu, aby bola bezčasová SchR splnená?

5. *bezčasová Schr a základný stav elektrónu v atóme vodíka*
Spomeňte si na vlnovú funkciu základného stavu elektrónu v atóme vodíka a dokážte, že naozaj vyhovuje bezčasovej SchR.
Svet je tu teraz trojrozmerný a má sférickú symetriu. Takže druhé derivácie v $\hat{H}$ predstavujú laplasián, a ten je tu užitočné vyjadriť vo sférických premenných: $\Delta = \partial_x^2 + \partial_y^2 + \partial_z^2 = \frac{1}{r^2}\partial_r \, r^2 \partial_r + derivcie\, poda\, uhlov.$
Opäť by ste mali dostať, že bezčasová SchR je splnená, ale len za podmienky, že E je rovná jednej konkrétnej hodnote. Akej?

6. *hermitovský operátor*
Napíšte spamäti definíciu hermitovského operátora.

7. *hermitovský operátor*
Spomeňte si najprv na príklady operátorov zo včerajšej prednášky a ako sme

starostlivo rozhodovali, ktoré sú hermitovské. Teraz preverte, či sú hermitovské nasledujúce operátory:
(a) operátor $\hat{p}_x = \frac{\hbar}{i}\partial_x$ (operátor derivácie násobený imaginárnym číslom $\hbar/i = -i\hbar$),
(b) operátor $\partial_x^2 = \frac{d^2}{dx^2}$ (operátor druhej derivácie),
(c) operátor $\partial_x^3 = \frac{d^3}{dx^3}$ (operátor tretej derivácie),
(d) operátor $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2$ (operátor energie voľnej častice),
(e) operátor momentu hybnosti $\hat{L}_z$ (jeho z-ová zložka): $\hat{L}_z = \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x$,
(f) operátor $\hat{P}$ (operátor parity): $\hat{P}\Psi(x) = \Psi(-x)$.

8. *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)

9. *základné vlastnosti hermitovského operátora*
Na základe predchádzajúcich otázok rozhodnite bez testovania pomocou definície, či je isté, že 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): $\hat{L}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2 = (\hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y)^2 + (\hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z)^2 + (\hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x)^2$.