

Príklady na domácu úlohu z kvantovej teórie

Sada č.3

riešenia, prosím, odovzdajte do začiatku cvika 24.10.2025

1. 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 diskretná (nie spojitá), aby spĺňala periodické okrajové podmienky: $p_n = \frac{2\pi\hbar}{L}n$, $n \in \mathbb{Z}$. V tomto príklade uvažujme, že tento balík sa redukuje na superpozíciu dvoch vln

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

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 vln, 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 s absolútnou hodnotou rovnou q ?
- (c) Aká je stredná hodnota hybnosti častice v stave Ψ ?
- (d) Aká je neurčitosť hybnosti Δp častice v stave Ψ ?
- (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 q .
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)? Na ktoré sa zmenia a na ktoré sa nezmenia?
- (i) Závisí niektorá z odpovedí na veľkosti intervalu L ? Prečo nie?
- (j) Vysvetlite, či je na začiatku uvažovaná častica v stacionárnom stave. [4 body]

2. voľná častica: gaussovský vlnový balík

Na prednáške sme vysvetlili, že vhodným balíkom na popis voľnej častice v labáku je gaussovský balík. Hybnosť častice je vtedy centrovaná na k_0 s neurčitosťou Δk a zároveň je častica lokalizovaná v priestore s neurčitosťou Δx .

Uvedené vlastnosti má balík $c_k = A e^{-(k-k_0)^2/[4(\Delta k)^2]}$.

Poznámka: V tomto príklade píšeme **všade** normovacia konštantu ako A , aj keď pri úpravách dôjde k jej zmene. Presný výraz pre A tu nie je pre nás podstatný.

(a) Vypočítajte, až na normovaciu konštantu, vlnovú funkciu balíka v čase $t = 0$, t.j. integrál $\Psi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} c_k \Psi_k(x) dk$.

Podobne ako na prednáške využite pomocný integrál $\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha z^2 + \beta z} dz = B e^{\beta^2/(4\alpha)}$.

Poznámky: Aby integrál konvergoval, požadujeme $\alpha > 0$. Veličina B bude v ďalšom nepodstatná, ale pre poriadok $B = \sqrt{\pi/\alpha}$. Vo výpočte integrálu stačí vykonať substitúciu integračnej premennej za $k - k_0$ a aplikovať vzorec. Všimnite si, že u nás je β rýdzo imaginárna, čo nám tu nevadí.

(b) Napíšte $|\Psi(x)|^2$ a porovnajte túto hustotu pravdepodobnosti výskytu častice s gaussovským rozdelením $g_\sigma(x) = A e^{-x^2/2\sigma^2}$, pre ktoré je $\Delta x = \sigma$. Čomu je rovná stredná kvadratická odchýlka merania polohy našej častice?

Čomu je rovný súčin $\Delta x \Delta p$, kde $\Delta p = \hbar \Delta k$? Je splnený princíp neurčitosti, podľa ktorého - ako ukážeme neskôr - má byť $\Delta x \Delta p \geq \hbar/2$?

(c) Napíšte vzťah (vzorec), podľa ktorého počítame vlnovú funkciu tejto častice v neskoršom čase.

V integráli nahraďte $e^{i(kx - \omega(k)t)}$ faktorom $e^{i[(k-k_0)x - (\omega(k) - \omega_0)t]}$ kvôli substitúcii v ďalšom kroku. Pred integrál potom pridáme $e^{i(k_0x - \omega_0t)}$, čo sa presne kráti s dopísaným výrazom v podintegrálnej funkcii. V ďalšom kroku uvažte, že $\omega(k) = \omega_0 + (k - k_0) \frac{d\omega}{dk} \Big|_{k=k_0} + \frac{1}{2} (k - k_0)^2 \frac{d^2\omega}{dk^2} \Big|_{k=k_0}$, kde $\omega_0 \equiv \omega(k_0)$, prvá derivácia je grupová rýchlosť a druhá derivácia je konštanta $\frac{\hbar}{m}$. Teraz už môžeme vypočítavať integrál $\Psi(x, t)$ obyčajným dosadením do pomocného vzorca z časti (a). Urobte to. *Nebojte sa dlhšieho výrazu vo výsledku. Zjavne pomôže starostlivo si napísať bokom, čomu sa teraz rovná α a čomu β .*

(d) Po krátení štvorkou je menovateľ exponentu rovný $\frac{1}{(\Delta k)^2} + i \frac{2\hbar t}{m}$. Vyšlo vám to tiež?

Predstavme si ho v tvare $a + ib$, kde $a, b \in \mathcal{R}$. (Konkrétne $a = 1/(\Delta k)^2$ a $b = 2\hbar t/m$.) Jeho imaginárna časť je menšou komplikáciou, lebo nás zaujíma výsledok pre $|\Psi(x, t)|^2$. Urobíme preto nasledovnú úpravu exponenta $-(x - v_g t)^2/(a + ib) = -(x - v_g t)^2(a - ib)/(a^2 + b^2)$. Imaginárna časť zjavne prispieva iba do fázy komplexnej funkcie $\Psi(x, t)$ a kvadrát absolútnej hodnoty $|\Psi(x, t)|^2$ od nej nezávisí. Z exponenta ostane podstatná len jeho reálna časť $-(x - v_g t)^2 a/(a^2 + b^2) = -(x - v_g t)^2/(a + b^2/a)$, kde a prešlo do menovateľa menovateľa. Pomocou týchto úprav odvodte výraz pre $|\Psi(x, t)|^2$.

Keďže je to gaussovské rozdelenie a premenná x je iba v exponente, stačí tu napísať $|\Psi(x, t)|^2$ v tvare $A \cdot \exp[\dots]$, kde vašou úlohou je napísať exponent a získať vhľad do toho, čo tu znamená.¹

(e) Fyzika: výsledok pre $|\Psi(x, t)|^2$ nám hovorí o časovom vývoji balíka odvodeného/napísaného v časti (b) pre $t = 0$. Dosadte do výsledku v (d) za čas $t = 0$

¹Normovacia konštanta A je tu menej podstatná, lebo nezávisí od x . Obsahuje však šírku σ a tá sa mení v čase, preto aj A , výška gaussovského hrbu, závisí na čase. Zdravý rozum dá, že pri zachovaní normovania, ak sa zmení šírka hrbu, musí sa zmeniť aj jeho výška. Napr. ak sa hrb rozšíri, musí sa znížiť. Ak by sme urobili celý výpočet v úplnosti aj s normovaním, a správne, malo by nám nakoniec vyjsť správne aj $A(t)$, t.j. v tvare $1/\sqrt{2\pi} \sigma(t)$, kde $\sigma(t)$ bude v zhode so $\sigma(t)^2$ v menovateli exponenta.

a otestujte, či máte zhodu s (b).

Z čitateľa exponentu určte, čomu je rovná stredná hodnota polohy častice v čase $t > 0$.

Z menovateľa exponentu určte, čomu je rovné Δx pre našu časticu v čase $t > 0$.

(f) Podrobnejšou analýzou $\Delta x(t)$ vidíme, že druhý člen je pre malé časy zanedbateľný, a naopak, pre veľmi veľké časy je dominantný. V akom čase, približne, sa tieto dva režimy vystriedajú? Označme ho ako t_R . Je to teda približne, rádovo, čas, kedy sú dva členy v $\Delta x(t)$ rovnaké.

(g) Načrtnite hustotu pravdepodobnosti výskytu častice $|\Psi(x, t)|^2$ v samostatných náčrtkoch pre rôzne časy. Prvý náčrtok nech je v čase $t_1 = 0$. Druhý v čase t_2 , kde $t_2 > t_1$, avšak $t_2 \ll t_R$. Tretí náčrtok v čase $t_3 > t_2$, avšak už $t_3 > t_R$. Nakoniec štvrtý náčrtok pre $t_4 > t_3$. Dajte si záležať na detailoch náčrtku: výške a šírke hustoty pravdepodobnosti: pamätajte, že v každom čase má byť normovaná na jednotkovú pravdepodobnosť výskytu na celej reálnej osi. **[6 bodov]**

3. nadväzuje na predchádzajúci príklad

(a) Určte t_R z príkladu 2. pre elektrón s $\Delta p c \approx 1$ meV (milielektrónvolt). Predpokladajme, že elektrón je v čase $t = 0$ emitovaný do voľného priestoru bez polí (napr. bez elektrického poľa) a jeho stav je popísaný vlnovou funkciou v tvare gaussa ako v príklade 2.

(b) K odhadu jeho rýchlosti predpokladajme, že pri emisii dostane elektrón kinetickú energiu 1 eV. Akú vzdialenosť preletí predtým, než sa začne rozplývať podľa zákonov kvantovej mechaniky? *Mne vyšlo 600 m a použil som $\hbar = 4 \cdot 10^{-15} \text{ eVs}$.* **[2 body]**

4. elektrón v atóme vodíka - v základnom stave

(a) Napíšte vlnovú funkciu elektrónu v atóme vodíka v základnom stave.

(b) Uvažujme pravdepodobnosť $dP(r) = \rho(r)dr$, s akou nájdeme elektrón v medziguľovej vrstvičke s polomerom r a hrúbkou dr . Vychádzajúc z odpovede v časti (a) napíšte, čomu sa rovná $\rho(r)$. Potom overte, že hustota pravdepodobnosti $\rho(r)$ má maximum pre $r = a_B$ (Bohrov polomer) - ako bolo povedané na prednáške.

(c) Ak by ste mali iba jeden pokus nájsť elektrón v experimente, kde (t.j. v ktorej infinitezimálne malej kocke o stranách dx , dy a dz) by bola najväčšia šanca nájsť ho? To isté inými slovami: do ktorého miesta = kocky o rozmeroch $dx \times dy \times dz$ by ste si naňho najskôr "posvietili"? Bolo by to miesto nachádzajúce sa niekde v medziguľovej vrstvičke s polomerom rovným a_B ?

(d) Vypočítajte stredné hodnoty $\bar{r}$ a $\overline{r^2}$ vychádzajúc z $\rho(r)$. *Poznámka: treba tu použiť správne normovanú vlnovú funkciu.*

Čomu vychádza rovné $\Delta r = \sqrt{\overline{r^2} - \bar{r}^2}$? Slovné interpretujte výsledok pre Δr vo vzťahu k experimentu, ak by taký bol, ktorý by dokázal merať prítomnosť elektrónu v individuálnych medziguľových vrstvičkách.

(e) Na základe sférickej symetrie $\Psi_{100}(r)$ z časti (a) rozhodnite, čomu je rovná stredná

hodnota $\bar{x}$ z meraní súradnice x elektrónu na veľa atómov vodíka (s elektrónom v základnom stave). Podobne určte $\bar{y}$ a $\bar{z}$.

Z časti (d) poznáme $\overline{r^2}$, pričom $\overline{r^2} = \overline{x^2 + y^2 + z^2} = \overline{x^2} + \overline{y^2} + \overline{z^2}$. Na základe symetrie okomentujte, či a ako sa líšia $\overline{x^2}$, $\overline{y^2}$ a $\overline{z^2}$. Potom zo spomenutých stredných hodnôt určte $\Delta x = \sqrt{\overline{x^2} - \bar{x}^2}$, a podobne Δy a Δz . Slovné vysvetlite fyzikálny význam výsledku pre uvažované merania. **[4 body]**

5. *nadväzuje na predchádzajúci príklad*

Prosím pozrite influencera vo videu

https://www.youtube.com/watch?v=M--6_0F62pQ

v čase videa 08:46 až 10:00 min. Stručne vysvetlite, prečo je jeho výklad nesprávny. **[2 body]**

6. *overenie vlnových funkcií v minulosti spadnutých z oblakov*

(a) Overte, že vlnové funkcie stacionárnych stavov pre časticu na úsečke vyhovujú bezčasovej SchR. Pre akú energiu?

(b) Overte, že vlnové funkcie stavov voľnej častice s ostrou hybnosťou p vyhovujú bezčasovej SchR. Pre akú energiu? **[4 body]**

7. *bonus príklad*

(a) Na prednáške sme predviedli päť príkladov vlnového balíka pre voľnú časticu. (Z toho dva, konkrétne $c(k) = \delta(k - k_0)$ a $c(k) = \text{konšt.}$ sú triviálne.) Načrtnite teraz priebeh funkcie

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

(b) Ak $c_6(k)$ definuje vlnový balík, tipnite si, ako približne bude vyzerat' $\Psi(x)$ opisujúca stav častice, na základe balíkov prebratých na prednáške. Načrtnite $\text{Re}\Psi(x)$, t.j. jej reálnu časť.

(c) Aký integrál treba spočítať pri presnom určení vlnovej funkcie tohto šiesteho balíka? Integrál stačí napísať. Ak to viete a máte dostatok času, vypočítajte ho za **extra 2 body**. Napr. prechodom do komplexnej roviny v premennej k . V zásade tu však nechceme dávať dôraz na výpočet integrálu.

(d) Pre $\Delta k > 0$ platí

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

Zo znalosti integrálu načrtnite $\text{Re}\Psi(x)$ tejto voľnej častice a porovnajte s (b).

(e) Prečo je $c_6(k)$ menej vhodná na opis voľnej častice ako $c_4(k)$?

Pripomeňme, že $c_4(k)$ opisovala *gaussovský balík*, viď úvod do príkladu 2.

[2 body + 2 body za integrál]