

Príklady na domácu úlohu z kvantovej teórie

Sada č.5

riešenia, prosím, odovzdajte do začiatku prednášky 7.11.2025

1. vlastnosti hermitovských operátorov

Na prednáške sme vymenovali päť dôležitých vlastností hermitovských operátorov, prvé štyri sme aj dokázali. Pripomeňte si, ktoré vlastnosti to konkrétne boli. Na viaceré z nich sme už v minulosti upozorňovali, napr. v prípade funkcií $\Psi_n(x)$ pre časticu na úsečke alebo aj funkcií $\Psi_p(x)$ pre voľnú časticu. Tu overíme tieto vlastnosti na príklade operátora parity $\hat{P}\Psi(x) = \Psi(-x)$, o ktorom ste dokázali v minulej sade dú, že je hermitovský. V kvantovej fyzike má veľké použitie, na rozdiel od klasickej fyziky.

(a) Nájdite všetky možné vlastné hodnoty operátora parity. *Pomôcka: Pôsobte s $\hat{P}$ na vlastnú funkciu dvakrát. Sú vlastné hodnoty naozaj reálne? Sú degenerované? Ak áno, koľkokrát? Aké sú im odpovedajúce vlastné funkcie?*

(b) Ukážte, že ľubovoľné dve vlastné funkcie operátora $\hat{P}$ sú na seba ortogonálne, ak odpovedajú jeho rôznym vlastným hodnotám.

(c) Ukážte úplnosť vlastných funkcií operátora $\hat{P}$, t.j. dajte predpis, ako rozložiť ľubovoľnú vlnovú funkciu na superpozíciu jeho vlastných funkcií. **[2 body]**

2. vlnová funkcia elektrónu v atóme vodíka v základnom stave

V minulosti sme bez vysvetlenia predviedli vlnovú funkciu elektrónu v základnom stave atómu H v tvare $\Psi(\vec{r}) = Ae^{-r/a_B}$, kde A je normovacia konštanta a $a_B = \hbar/(m_e\alpha)$ je Bohrov polomer. Dokážte, že táto funkcia naozaj spĺňa bezčasovú SchR a je vlastnou funkciou $\hat{H}$. Pre akú energiu? *Pomôcka: Použite laplasián vo sférických premenných.* **[2 body]**

3. operátor hybnosti a atóm vodíka

(a) Vysvetlite, či pre e^- v atóme H komutujú operátory (zložiek) hybnosti a energie.

(b) Očakávate na základe predchádzajúcej odpovede, že $\Psi(\vec{r}) = Ae^{-r/a_B}$ bude aj vlastnou funkciou operátorov $\hat{p}_x$, $\hat{p}_y$ a $\hat{p}_z$? Odpoveď vysvetlite na základe Vašej odpovede v časti (a).

(c) Vypočítajte strednú hodnotu hybnosti elektrónu v základnom stave atómu vodíka, teda určte $\overline{p}_x$, $\overline{p}_y$ a $\overline{p}_z$.

(d) 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, môžete ich odtiaľ sem prepísať. V opačnom prípade ich odporúčam spočítať tu, aj so správnym normovaním vlnovej funkcie.

Pre výpočet stredných hodnôt $\overline{p_x^2}$, $\overline{p_y^2}$ a $\overline{p_z^2}$ možno využiť sférickú symetriu, podobne ako pri výpočte $\overline{x^2}$, $\overline{y^2}$ a $\overline{z^2}$. Za laplasián dosadíte jeho vyjadrenie vo sférických premenných. Zvážte, či je možno použiť časť výpočtu z príkladu 2. **[2 body]**

4. $\hat{L}_z$ vo sférických súradniciach

Dokážte, že vo sférických súradniciach platí $\hat{L}_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi}$.

Návod: keďže vieme vyjadrenie pre $\hat{L}_z$ v kartézskych súradniciach, teda vieme, čo má výjsť na ľavej strane, môžeme začať pravou stranou pôsobiacou na funkciu $\Psi(x, y, z)$, kde kartézske súradnice x, y, z chápeme ako funkcie troch nezávislých sférických premenných. **[2 body]**

5. príklad na komutujúce operátory

Uvažujte elektrón v atóme vodíka. Napíšte $\hat{H}$ a $\hat{L}_z$ vo sférických súradniciach a overte, že komutujú. (Mimochodom, je to jednoduchšie vo sférických alebo v kartézskych súradniciach?)

Čo vyplýva pre ich vlastné funkcie z rovnosti $\hat{H}\hat{L}_z = \hat{L}_z\hat{H}$?

Čo z toho vyplýva pre neurčitost ΔL_z pri meraní L_z elektrónu v základnom stave?

Zmení meranie L_z vlnovú funkciu, a teda stav elektrónu (ktorý je pred meraním L_z v základnom stave)?

Overte na vlnovej funkcii základného stavu, že je zároveň vlastnou funkciou $\hat{L}_z$. Akú hodnotu orbitálneho momentu hybnosti L_z meriame elektrónu v tomto stave?

Poznámka: Keby sme to chceli zovšeobecniť aj na excitované stavy, museli by sme byť opatrnejší. Pre excitované stavy máme degeneráciu hladín, a na základe prednášky tam treba pre degenerovanú energetickú hladinu E_n vyberať správne lineárne kombinácie odpovedajúcich vlastných funkcií $\hat{H}$, aby boli aj vlastnými funkciami $\hat{L}_z$ a aby tak mali $\hat{H}$ a $\hat{L}_z$ spoločné vlastné funkcie. Pre základný stav to netreba robiť, lebo základná hladina pre elektrón v atóme vodíka nie je degenerovaná - ignorujúc spin elektrónu.

[2 body]

6. Schwarzova nerovnosť pre vlnové funkcie

Ukážte, že pre ľubovoľné dve komplexné kvadraticky integrovateľné funkcie $f(x)$ a $g(x)$, $x \in \mathcal{R}$ platí nerovnosť $(\int |f(x)|^2) \cdot (\int |g(x)|^2) \geq |\int f(x)^* g(x)|^2$.

Pomôcka: vyjdite z nerovnosti $\int |f + \lambda g|^2 \geq 0$, ktorá zjavne platí pre každé $\lambda \in \mathbb{C}$. Zistite, či tvrdenie platí pre $g(x) = 0$, teda pre nulovú funkciu na celej reálnej osi. Potom zvolte $\lambda = (\int g^* f) / (\int |g|^2)$. **[2 body]**

7. komutátory $[\hat{L}_i, \hat{L}_j]$

Vypočítajte komutátor $[\hat{L}_x, \hat{L}_y]$ a výsledok vyjadrite pomocou $\hat{L}_z$. Analogicky, teraz už bez počítania využitím cyklickej zámieny určte, čomu sú rovné $[\hat{L}_y, \hat{L}_z]$ a $[\hat{L}_z, \hat{L}_x]$. **[2 body]**

8. komutátory $[\hat{L}_i, \hat{L}^2]$

Na cvičení sa prejde / prešlo cez výpočet pomocného komutátora $[\hat{A}, \hat{B}\hat{C}]$. Využite tento malý trik na výpočet $[\hat{L}_x, \hat{L}^2]$, kde $\hat{L}^2$ je súčet kvadrátov zložiek $\hat{\vec{L}}$.

Analogicky, teraz už bez počítania využitím cyklickej zámeny určte, čomu sú rovné $[\hat{L}_y, \hat{L}^2]$ a $[\hat{L}_z, \hat{L}^2]$. **[2 body]**

9. (bonus príklad) vzťah neurčitosti pre hybnosť a paritu

Na cviku ste ukázali, že v stave popísanom vlnovou funkciou $\Psi(x) = Ae^{-x^2/x_Q^2}$, kde A a x_Q sú konštanty, platí triviálny vzťah neurčitosti $\Delta p \Delta P \geq 0$, lebo stredná hodnota na pravej strane dala nulu v stave Ψ . Odvodte tu teraz vzťah neurčitosti $\Delta p \Delta P$, ktorý bude netriviálny, pre časticu v jednom rozmere v inom stave $\tilde{\Psi}$ s vlnovou funkciou $\tilde{\Psi}(x) = \tilde{A}(\frac{1}{\sqrt{2}} + \frac{x}{x_Q})e^{-x^2/2x_Q^2}$.

Overte, že $\tilde{\Psi}(x)$ je správne normovaná pre $\tilde{A} = 1/\sqrt{\sqrt{\pi}x_Q}$. x_Q je kladná konštanta, typická dĺžka pre danú sústavu, ktorej hodnota nie je dôležitá pre tento náš príklad. Mne vyšla pravá strana vzťahu neurčitosti $\frac{1}{\sqrt{2}}\frac{\hbar}{x_Q}$ a neurčitosť hybnosti $\Delta p = \frac{\hbar}{x_Q}$. Samostatne overte tieto výsledky a vypočítajte neurčitosť parity ΔP v uvedenom stave. Je tu splnený vzťah neurčitosti pre $\Delta p \Delta P$? **[2 body]**