

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.

(d) Platí aj bezčasová SchR pre všetky vlnové funkcie? Odpoveď vysvetlite.

Ako sa volajú stavy, pre ktoré platí bezčasová SchR?

2. SchR

(a) Uvažujme časticu viazanú na úsečke a jednorozmerný svet rovný celej reálnej osi. Čo je v tomto prípade potenciálom $V(x)$ v SchR?

Pripomeňme, že potenciál v SchR v kvantovej mechanike znamená potenciálnu energiu, a nie potenciál nejakého poľa, napr. elektrického.

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

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

(d) Uvažujme dvojrozmerný svet a časticu viazanú na štvorec o strane L .

Ako vyzerá hamiltonián v tomto prípade? Čo je tu potenciálom $V(x, y)$ v SchR?

3. detaily bezčasovej SchR pre časticu na úsečke

Uvažujme časticu viazanú na úsečke $0 < x < L$ 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. E je určená až rovnicou pre priestorovú časť $\Psi(x)$, t.j. bezčasovou SchR.

V krajných bodoch úsečky je zjavne potenciál nespojitý. Nemení sa však o konečný skok, ale o nekonečne veľkú hodnotu. Je tento nekonečný skok vykompenzovaný v bezčasovej SchR nekonečnom s opačným znamienkom z nejakého iného člena?

Sústredme sa na člen s druhou deriváciou a položíme 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 $x = L+ = L + \varepsilon$.

Dôkaz, že bezčasová SchR platí vo vnútri úsečky, bol na dú.

Súčasťou dôkazu je to, že ona neplatí pre ľubovoľnú konštantu E . 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 tu uvažovanej bezčasovej SchR ľubovoľné číslo, alebo musí byť nastavená na nejakú konkrétnu hodnotu, aby bola bezčasová SchR splnená?

5. hermitovský operátor

Napíšte spamäti definíciu hermitovského operátora.

6. hermitovský operátor

Preverte, či sú hermitovské nasledujúce operátory:

- (a) operátor $\hat{A} = 5$ (násobenie reálnym číslom 5),
- (b) operátor $\hat{B} = i$ (násobenie rýdzom imaginárnym číslom i),
- (c) operátor $\hat{C} = 1 + i$ (násobenie komplexným číslom $1 + i$),
- (d) operátor $\hat{D} = \partial_x$ (operátor derivácie),
- (e) operátor $\hat{K}$ (operátor komplexného združenia),
- (f) operátor $\hat{S}$ (vlnovej funkcii $\Psi(x)$ priradí $|\Psi(x)|^2$).

7. hermitovský operátor

Preverte, či sú hermitovské nasledujúce operátory:

- (a) operátor $\hat{x}$ (operátor násobenia súradnicou x),
- (b) operátor $\hat{x}^2$ (operátor násobenia kvadrátom súradnice x^2),
- (c) operátor hybnosti $\hat{p}_x = \frac{\hbar}{i} \partial_x$ (operátor derivácie násobený s $\hbar/i = -i\hbar$),
- (d) operátor momentu hybnosti $\hat{L}_z$ (jeho z-ová zložka): $\hat{L}_z = \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x$,
- (e) 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)