Príklady na domácu úlohu z kvantovej teórie

Sada č.3

Riešenia, prosím, odovzdajte do začiatku prednášky 29.10.2026. Ak ich odovzdáte už na prednáške 27.10., opravíme ich do písomky.

1. *častica na úsečke*
Klasickú limitu dostávame z kvantového opisu pomocou superpozície susedných stacionárnych stavov s veľkými kvantovými číslami.

(a) Graficky zobrazte (napr. pomocou AI chatbotu) priebeh vlnovej funkcie $\Psi(x) = A \sum_{n=90}^{110} \Psi_n(x)$ pre $x \in \langle 0,\, L\rangle$.
$\Psi_n(x)$ *označuje vlnovú funkciu stacionárneho stavu. Normovanie je tu vedľajšie, pre jednoduchosť nech* $A = \sqrt{\frac{L}{2}}$, *čiže sa budú sčitovať iba sínusy. Hodnotu* L *nastavte čo najvýhodnejšie, napr.* $L = \pi$, *na jednotkách dĺžky tu nezáleží. Takže argumenty sínusov budú iba* nx. *Ak odovzdávate písomné riešenie, voľne okopírujte tvar* $\Psi(x)$ *z displeja / monitoru.*

(b) Podobne zobrazte (načrtnite) $|\Psi(x)|^2$.

(c) Nakoniec zobrazte (načrtnite) $|\Psi(x,\, t)|^2$ pre *(i)* $t = 5$ a *(ii)* $t = 10$ v jednotkách $\hbar/E_1$. Treba teda do každého člena v sume dodať komplexný faktor $e^{-iE_n t/\hbar}$, v uvedených jednotkách to je zjednodušené na faktor $e^{-in^2 t}$.

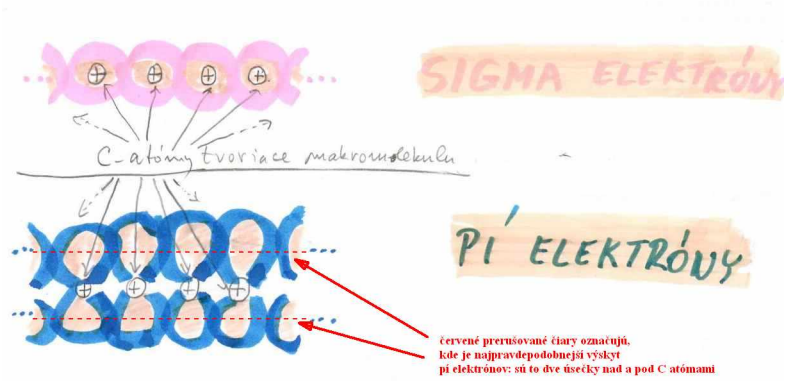
(d) Okomentujte, či pri presune častice medzi časmi $t = 0$, $t = 5$ a $t = 10$ sa táto častica pohybuje rovnomerne alebo skôr harmonicky.
U klasického harmonického pohybu je poloha guličky na pružine $\cos(\omega t)$. *Na krajoch taká guličkа mení polohu pomaly a v strede intervalu ju mení rýchlo. Pre obrázky z častí (b) a (c) by harmonický pohyb odpovedal malej vzdialenosti medzi polohami častice v čase* $t = 0$ *a* $t = 5$ *a potom veľkej vzdialenosti k polohe v čase* $t = 10$. *Pozorujete to vo Vašej odpovedi?*
Otázka je dôležitá preto, že pre klasickú časticu viazanú na úsečke je pohyb (medzi krajmi) rovnomerný. Ak častica nenarazí na kraj, jej poloha sa za čas od $t = 0$ *do* $t = 5$ *zmení rovnako ako od* $t = 5$ *do* $t = 10$. *To je v spore s pohybom strednej hodnoty polohy častice pre superpozíciu* ***dvoch*** *kvantových stacionárnych stavov, ktorý je harmonický. Bolo to na cviku pre* Ψ_1 *a* Ψ_2, *ale rovnaký jav by vyšiel pre každé dva stacionárne stavy. Vyvstáva otázka, či z kvantového opisu naozaj vychádza v klasickej limite (čiže pre superpozíciu veľmi veľa susedných stacionárnych stavov s veľkými kvantovými číslami) pohyb strednej hodnoty v zhode s klasickým pohybom guličky. Pozorujete vo Vašej odpovedi blízkosť ku klasickej limite?* **[3 body]**

2. *nadväzuje na predchádzajúci príklad*
Opäť - pre jednoduchosť - uvažujme úsečku dĺžky $L = \pi$. Načrtnite vlnovú funkciu a určte z náčrtku, kde sa (v termínoch klasickej limity) nachádza častica, ktorej kvantový stav je popísaný vlnovou funkciou $\Psi(x) = A\,[\Psi_{91}(x) - \Psi_{93}(x) + \Psi_{95}(x) - \Psi_{97}(x) + \ldots - \Psi_{109}(x)]$, kde A je normovacia konštanta, na ktorej tu nezáleží.

Odpovedá tu kvantový časový vývoj klasickej limite pre guličku? **[2 body]**

3.= A10. Zbierka, str.17 tlačená verzia a str.15 pdf. *Častica na úsečke.*
Aproximujte π elektróny v molekule hexatriénu šiestimi neinteragujúcimi elektrónmi viazanými na úsečku dĺžky L.

Určte rozdiel medzi energiou základného a prvého excitovaného stavu takejto sústavy. *Poznámky:* $L = N \times \Delta\ell$, *kde* $N = 6$ *je počet elektrónov a* $\Delta\ell = 0.289/2 = 0.1445\,nm$ *je stredná vzdialenosť*



medzi atómami uhlíka. Zarátané tu je vyčnievanie elektrónového oblaku z uhlíkového reťazca o dĺžku $\Delta\ell/2$ na každú stranu. Molekulu hexatriénu si tu možno predstaviť ako šesť osmičiek vedľa seba, kde sa dve susedné osmičky dotýkajú, až mierne prekrývajú. V uzle každej osmičky je uhlík. Hustota pravdepodobnosti výskytu π elektrónov má tvar tých osmičiek. Prekryvy osmičiek umožňujú pohyb π elektrónov naprieč osmičkami mimo uhlíkového reťazca, paralelne s ním. Vyššie prikladám hrubý náčrtok osobitne sigma elektrónov a osobitne pí elektrónov v uhlíkovom reťazci.

V akej časti el-mag spektra sú fotóny z takýchto prechodov? *Porovnajte s experimentálnym údajom uvedeným v texte v Zbierke.*
Je hexatrién vhodný ako farbivo? (T.j. odpovedá prechod pohlcovaniu elmag žiarenia z viditeľného spektra?)
Aká podobná lineárna molekula: dlhšia (viac atómov C) či kratšia (menej atómov C), by mohla byť vhodná ako farbivo vďaka študovanému prechodu? **[2 body]**

4. *Zbierka, príklad **A1.**, str.44 (tlačená verzia) a str.33 (pdf).*
Častica je na úsečke $\langle 0, L\rangle$ v stave s vlnovou funciou $\Psi(x) = Ax(L-x)$.

(a) Načrtnite vlnovú funkciu častice.
Načrtnite hustotu pravdepodobnosti výskytu tejto častice na úsečke.
Bez počítania určte strednú hodnotu merania polohy častice.

(b) Vypočítajte normovaciu konštantu A.
Odporúčame pritom položiť $L = 1$ a využiť beta funkciu $\int_0^1 = t^M(1-t)^N dt = \frac{M!\,N!}{(M+N+1)!}$ pre prirodzené M a N. Do výsledku dodajte správnu mocninu L.

(c) Vypočítajte pravdepodobnosť $P(E_1)$ namerať častici v stave Ψ energiu základného stavu E_1.
Pomôcka: treba k tomu vypočítať koeficient c_1 v rozvoji $\Psi(x) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \Psi_n(x)$. Určíme ho vďaka ortogonalite funkcií $\Psi_n(x)$ dokazovanej v minulej dú.

(d) Čo sa dá bez počítania povedať o $P(E_2)$?

(e) Čo sa dá bez počítania povedať o $P(E_3)$?

(f) Ako súvisí Váš výsledok pre $P(E_1)$ s tvarom funkcie $\Psi(x)$ voči tvaru $\Psi_1(x)$? **[2 body]**

5. *voľná častica*
Voľná častica je v stave popísanom vlnovou funkciou $\Psi(x) = \frac{1}{2}\frac{e^{i4qx/\hbar}}{\sqrt{2\pi}} + \frac{1+i}{2}\frac{e^{i6qx/\hbar}}{\sqrt{2\pi}} + \frac{1}{2}\frac{e^{i8qx/\hbar}}{\sqrt{2\pi}}$, kde $q > 0$ je fixovaný parameter s rozmerom hybnosti .

(a) S akou pravdepodobnosťou aké hybnosti nameriame tejto častici?
A máme to vôbec správne normované?

Aká bude stredná hodnota po mnohých meraniach hybnosti na takýchto identicky pripravených

časticiach? Vedeli by ste to predpovedať prakticky ihneď, bez počítania?

Viete si takisto bez počítania tipnúť vopred strednú kvadratickú odchýlku z týchto meraní? Určte ju aj výpočtom.

(b) Odpovedzte rovnaké otázky pre energiu meranú na tom istom stave Ψ. Aké hodnoty energie s akou prqvdepodobnosťou nameriame, aká bude stredná hodnota týchto meraní a k nej stredná kvadratická odchýlka. **[2 body]**

6. *vlnové riešenia*
(a) Určte smer fázovej rýchlosti vlny $\Psi_k(x,\,t) = Ae^{i(kx-\omega t)}$.
Zdôvodnite / vysvetlite svoju odpoveď.
Aký tvar má vlnoplocha? Kde sa nachádza voči osi x ?

(b) Určte smer fázovej rýchlosti vlny $\Psi_{\vec{k}}(\vec{r},\,t) = Ae^{i(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega t)} = Ae^{i(k_x x+k_y y+k_z z-\omega t)}$.
Zdôvodnite / vysvetlite svoju odpoveď.
Aký tvar má vlnoplocha? Umiestnite ju do priestoru.

(c) Určte smer fázovej rýchlosti vlny $\Phi_k(x,\,t) = Ae^{i(kx+\omega t)}$, pre kladné znamienko v exponente.
Zdôvodnite / vysvetlite svoju odpoveď.
Aký tvar má vlnoplocha? Kde sa nachádza voči osi x ?

(d) Uvažujme vlnu $\Psi_{\vec{k}}(\vec{r},\,t) = Ae^{i(kr-\omega t)}$, ktorá závisí iba od veľkosti $|\vec{k}| = k$, resp. $|\vec{r}| = r$, a nie od uhlov.
Aký tvar má vlnoplocha?
Zdôvodnite / vysvetlite svoju odpoveď a určte, kam vlna smeruje.

(e) Čo podobne vieme prehlásiť o vlne $\Psi_{\vec{k}}(\vec{r},\,t) = Ae^{i(kr+\omega t)}$? Ako sa líšia odpovede od Ψ v časti *(d)* a prečo? **[2 body]**

7. *Diracova delta funkcia*
Vypočítajte integrály
$(i)\ \int_{-2}^{2}(x^2+1)\,\delta(x-1)\,dx,\quad (ii)\ \int_0^{2\pi}\sin\theta\,\delta(\theta-\pi)\,d\theta,\quad (iii)\ \int_0^{\infty}e^{-x^2}\,\delta(x+1)\,dx,$
$(iv)\ \int_{-2}^{2}(x^2+4x+1)\,\delta(3x)\,dx,\quad (v)\ \int_{-1}^{1}(16x^2+3)\,\delta(4x+1)\,dx,\quad (vi)\ \int_1^9 dx\,\int_{-\infty}^{\infty}dy\,(x+y)\,\delta(x-y)\,,$
$(vii)\ \int_1^9 dx\,\int_1^9 dy\,(x+y)\,\delta(x-y)\,,\quad (viii)\ \int_1^2 dx\,\int_1^9 dy\,(x+y)\,\delta(x-y)\,,$
$(ix)\ \int_{-2}^{2}(x+1)\,\delta(x^2-1)\,dx.$ **[2 body]**

8. *voľná častica - šírenie gaussovského vlnového balíka*
Na prednáške sme odvodili vlnovú funkciu stavu voľnej častice s gaussovsky rozdelenými hybnosťami (bol to vlnový balík č.5, so strednou hodnotou hybnosti $\hbar k_0$ a strednou kvadratickou odchýlkou $\hbar\Delta k$). Výpočet $\Psi(x,t)$ sme urobili najprv pre čas $t=0$, potom aj pre $t>0$. Namiesto p bolo k.

(a) Pripomeňte si záver odvodenia výrazu pre $|\Psi(x,t)|^2$ pre $t>0$ a určte, čomu pre $t>0$ vychádza rovná stredná kvadratická odchýlka polohy. *Je možné, že na tabuli sa tu chybne zabudlo v druhom člene násobiť štvorkou.* Overte.

(b) Podrobnejšou analýzou výrazu pre $\Delta x(t)$ 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.

(c) 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 $0<t_2\ll t_R$. Tretí náčrtok v čase t_3, kde už $t_3>t_R$. Nakoniec štvrtý náčrtok pre $t_4>t_3$. Dajte si záležať na detailoch náčrtku: výške a šírke hustoty pravdepodobnosti výskytu častice. Pamätajte, že v každom čase má byť normovaná

na jednotkovú pravdepodobnosť výskytu na celej reálnej osi. **[3 body]**

9. *voľná častica - šírenie gaussovského vlnového balíka*
Uvažujme tú istú časticu popísanú tým istým gaussovským vlnovým balíkom ako v príklade **8.** Určte, ako sa v čase vyvíja (ak vôbec) rozdelenie hybnosti častice. Svoje tvrdenie detailne vysvetlite, neodôvodnené odpovede body nezískajú. **[2 body]**

10. *voľná častica - jednoduchá superpozícia*
Uvažujme voľnú časticu v kvantovom stave popísanom vlnovou funkciou $\Psi(x) = \frac{1}{\sqrt{10}} \frac{e^{iqx/\hbar}}{\sqrt{L}} + \frac{3}{\sqrt{10}} \frac{e^{-iqx/\hbar}}{\sqrt{L}}$, kde $q > 0$ je fixovaný parameter s rozmerom hybnosti vyhovujúci periodickým okrajovým podmienkam.

(a) S akou pravdepodobnosťou aké hybnosti nameriame tejto častici?

(b) S akou pravdepodobnosťou aké energie nameriame tejto častici?

(c) Zadanú vlnovú funkciu možno chápať ako $\Psi(x,\, t = 0)$. Aká je vlnová funkcia častice v stave $t > 0$?
Je alebo nie je častica v stacionárnom stave?

(d) Ako sa v neskoršom čase zmenia odpovede na otázku *(a)*? **[2 body]**

11. *voľná častica*
Navrhnite stav voľnej častice (normovanú vlnovú funkciu), ktorej sa budú merať iba tri rôzne hodnoty hybnosti s pravdepodobnosťami v pomere 1:2:3 a strednou hodnotou rovnou q. **[2 body]**

12. *bonus príklad - voľná častica v stave vlnového balíka*
Pripomeňme, že vlnový balík je popísaný vlnovou funkciou $\Psi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} c_k\, \Psi_k(x,\, t)\, dk$, kde c_k je komplexná funkcia. Taká, že $|c_k|^2$ je hustota pravdepodobnosti pri meraní hybnosti k, takže integrál $\int_{-\infty}^{\infty} |c_k|^2\, dk$ je rovný 1. Naproti tomu $\Psi_k(x,\, t)$ nie je normovaná na 1, ale na delta funkciu: $\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi_k(x,\, t)|^2\, dx$ je rovný nekonečnu pre $\Psi_k(x,t) = e^{i(kx-\omega t)}/\sqrt{2\pi}$.
Ukážte, že napriek "zlému"normovaniu $\Psi_k(x,t)$ balík $\Psi(x)$ je správne normovaný na 1. **[2 body]**

13. *bonus príklad - voľná častica: ešte iný vlnový balík*
Uvažujme vlnový balík popísaný vlnovou funkciou $\Psi(x)$. Ako určíme koeficienty c_k v rozvoji $\Psi(x)$ do vlnových funkcií stacionárnych stavov $\Psi_k(x)$?
Vypočítajte c_k pre balík $\Psi(x) = A\, \frac{1}{x^2+a^2}$, kde A je normovacia konštanta a a je parameter súvisiaci so šírkou balíka. Načrtnite hustoty pravdepodobnosti $|\Psi(x)|^2$ aj $|c_k|^2$. **[2 body]**

14. *bonus príklad - nadväzuje na príklad **6.***
Ako by vyzerala $\Psi(\vec{r},\, t)$, ktorej vlnoplochy by boli (nekonečne dlhé) valce?
A elipsoidy? **[2 body]**