Pokročilé úlohy z teoretické fyziky – kvantová mechanika

Příklad 1.

a) Odvoďte obecné relace neurčitosti (včetně důkazu Schwartzovy nerovnosti) $\Delta\hat{O}_1\,\Delta\hat{O}_2 \geq \frac{1}{2}\left|\langle\psi|\left[\hat{O}_1,\hat{O}_2\right]|\psi\rangle\right|$, kde $\left(\Delta\hat{O}\right)^2 = \langle\psi|\hat{O}^2|\psi\rangle - \left(\langle\psi|\hat{O}|\psi\rangle\right)^2$.

b) V čase $t=0$ se soustava se nachází ve stavu $\left|a(0)\right\rangle$. Hamiltonián $\hat{H}$ je na čase nezávislý. Pravděpodobnost přežití je definována jako $S(t)=\left|\left\langle a(0)\middle|a(t)\right\rangle\right|^2$. Vyjádřete závislost $\Delta\hat{H} = \left[\left\langle a(t)\right|\hat{H}^2\left|a(t)\right\rangle - \left(\left\langle a(t)\right|\hat{H}\left|a(t)\right\rangle\right)^2\right]^{1/2}$ na funkci $S(t)$ a její derivaci.

Příklad 2.

a) Odvoďte podmínku platnosti WKB aproximace při řešení Schrödingerovy rovnice pro jednorozměrný časově nezávislý případ.

b) Pokud je pohyb klasicky omezen dvěma body obratu na úsečku, odvoďte WKB podmínku kvantování.

Příklad 3.

Vazebná konstanta („tuhost pružiny“) molekuly HCl je 470 Nm^{-1} , moment setrvačnosti $2{,}3.10^{-47}$ kgm^2 . Uvažujeme teplotu 300 K.

a) Jaká je pravděpodobnost, že se molekula nachází v prvním excitovaném vibračním stavu?

b) Jaký je poměr molekul v prvním excitovaném a základním rotačním stavu pro určitý vibrační stav?

Příklad 4.

Hledáme vlastní hodnoty hamiltoniánu $\hat{H}$ variační metodou pomocí zkušebních funkcí $\psi=\sum_{k=1}^{n} a_k\,\phi_k$, kde $\{\phi_k\}$ je množina lineárně nezávislých funkcí (pro jednoduchost předpokládejme $\left\langle\phi_i\middle|\phi_j\right\rangle=\delta_{ij}$) a a_k jsou variační parametry. Získáme tak n přibližných vlastních funkcí ψ_α s energiemi $\varepsilon_\alpha=\left\langle\psi_\alpha\right|\hat{H}\left|\psi_\alpha\right\rangle/\left\langle\psi_\alpha\middle|\psi_\alpha\right\rangle$. Energie seřadíme $\varepsilon_1\leq\varepsilon_2\leq\ldots$ .Jsou-li exaktní vlastní hodnoty $E_1\leq E_2\leq\ldots$, dokažte, že platí $\varepsilon_2\geq E_2$.

Příklad 5.

Soustava částic se spinem J=1 je tvořena nekoherentní superpozicí následujících tří čistých spinových stavů

$$\psi^{(1)} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad , \quad \psi^{(2)} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right] \quad , \quad \psi^{(3)} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad .$$

a) Spočtěte polarizační vektor každého ze tří stavů.

b) Spočtěte polarizační vektor na jednu částici pro soustavu (smíšený stav).

c) Spočtěte matici hustoty $\hat{\rho}$ soustavy a přesvědčte se, že $\mathrm{Tr}\,\hat{\rho} = 1$.

d) Pomocí matice hustoty spočtěte polarizační vektor soustavy a přesvědčte se, že výsledek souhlasí s výsledkem b).