Teoretická fyzika – Základy kvantové mechaniky – Příklady

Michal Lenc – jaro 2014

1. Operátory, relace neurčitosti

Operátor $\hat{O}$ je hermiteovský, když pro skalární součin platí

$$\langle \psi | \hat{O} | \varphi \rangle = \left(\langle \varphi | \hat{O} | \psi \rangle \right)^* \quad . \tag{1}$$

Střední hodnotu operátoru v normovaném stavu $|\psi\rangle$ označíme $\langle \hat{O} \rangle = \langle \psi | \hat{O} | \psi \rangle$. Neurčitost definujeme jako $\Delta \hat{O} = \sqrt{\left\langle \left(\hat{O} - \langle \hat{O} \rangle \right)^2 \right\rangle}$. Potom pro hermiteovské operátory $\hat{A}$ a $\hat{B}$ platí zobecněné relace neurčitosti

$$\Delta \hat{A} \Delta \hat{B} \geq \frac{1}{2} \left| \langle \psi | \left[\hat{A}, \hat{B} \right] | \psi \rangle \right| \quad . \tag{2}$$

Příklad 1. Ukažte, že operátory radiální hybnosti a radiální souřadnice (souřadnicová representace se sférickými souřadnicemi)

$$\hat{p}_r = \frac{\hbar}{i} \left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \right) \quad , \quad \hat{r} = r$$

jsou hermiteovské (skalární součin je $\langle f | g \rangle = \int_0^\infty f^*(r)\, g(r)\, r^2 \, \mathrm{d}r$).

Příklad 2. Ukažte, že pro základní stav vodíku

$$R_{10}(r) = \frac{2}{a_B^{3/2}} \exp\left(-\frac{r}{a_B} \right)$$

jsou pro operátory $\hat{r}$ a $\hat{p}_r$ splněny relace neurčitosti (2).

Příklad 3. Ukažte, že operátory kartézské souřadnice a sdružené složky hybnosti

$$\hat{x} = x \quad , \quad \hat{p}_x = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$$

jsou hermiteovské (skalární součin je $\langle f | g \rangle = \int_{-\infty}^\infty f^*(x)\, g(x)\, \mathrm{d}x$).

Příklad 4. Ukažte, že pro základní stav lineárního harmonického oscilátoru

$$h_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi \hbar} \right)^{1/4} \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2 \right)$$

jsou pro operátory $\hat{x}$ a $\hat{p}_x$ splněny relace neurčitosti (2).

2. Schrödingerova rovnice

Příklad 5. Odvoďte ze Schrödingerovy rovnice pro částici v potenciálovém poli

$$i\hbar \frac{\partial \psi\left(\vec{r},t\right)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi\left(\vec{r},t\right) + U\left(\vec{r}\right)\psi\left(\vec{r},t\right) \qquad (3)$$

rovnici kontinuity a výraz pro tok $\vec{j}\left(\vec{r},t\right)$, který v ní vystupuje

$$\frac{\partial \rho\left(\vec{r},t\right)}{\partial t} + \operatorname{div}\vec{j}\left(\vec{r},t\right) = 0 \quad , \quad \rho\left(\vec{r},t\right) = \left|\psi\left(\vec{r},t\right)\right|^2 \quad .$$

Příklad 6. Schrödingerova rovnice pro volnou částici (pro jednoduchost jednorozměrný případ) je

$$i\hbar \frac{\partial \psi\left(x,t\right)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \psi\left(x,t\right)}{\partial x^2} \quad . \qquad (4)$$

Přejdeme Galileiho transformací do jiné inerciální soustavy

$$x' = x - vt \quad , \quad t' = t \quad .$$

Schrödingerova rovnice v této soustavě musí mít stejný tvar

$$i\hbar \frac{\partial \psi'\left(x',t'\right)}{\partial t'} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \psi'\left(x',t'\right)}{\partial x'^2} \quad ,$$

přitom vlnové funkce se mohou lišit pouze fází, aby se měřitelná veličina – hustota pravděpodobnosti – nezměnila

$$\psi\left(x,t\right) = \exp\left[i\, f\left(x',t'\right)\right]\psi'\left(x',t'\right) \quad .$$

Najděte fázovou funkci f a dokažte tím, že nerelativistická Schrödingerova je invariantní vzhledem ke Galileiho transformaci.

3. Různé úlohy

Příklad 7. Vazebná konstanta („tuhost pružiny“) molekuly HCl je $K = 470\,\mathrm{Nm}^{-1}$, moment setrvačnosti je $I = 2{,}3.10^{-47}\ \mathrm{kgm}^2$. 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 8. Budeme-li předpokládat, že obvod stacionární kruhové trajektorie elektronu ve vodíkovém atomu je celistvým násobkem de Broglieho vlnové délky, dostaneme správné hodnoty energiových hladin. Dokažte.

Příklad 9. Stacionární Schrödingerovu rovnici pro jednorozměrný případ přepíšeme pro bezrozměrné proměnné $\xi = x/a$, $\mathcal{E} = E/\varepsilon$

$$\frac{d^2\psi}{d\,x^2} + \frac{2m}{\hbar^2}\left(E - V(x)\right)\psi = 0 \quad , \quad \frac{d^2\psi}{d\,\xi^2} + \left(\mathcal{E} - \frac{V(a\,\xi)}{\varepsilon}\right)\psi = 0 \quad , \quad \varepsilon = \frac{\hbar^2}{2\,m\,a^2} \quad . \tag{5}$$

Spočtěte vztah mezi charakteristickou energií ε a délkou a pro harmonický oscilátor, „coulombovský“ potenciál a homogenní pole, tedy

$$V(x) = \frac{1}{2} m\,\omega^2\,x^2 \quad , \quad V(x) = -\frac{e^2}{4\pi\,\varepsilon_0\,|x|} \quad , \quad V(x) = -e\,F\,x \quad .$$

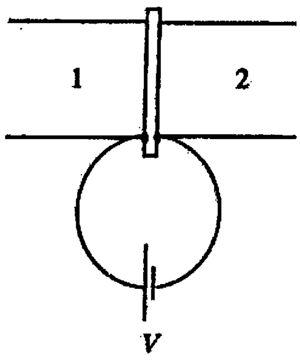
Příklad 10. Najděte stacionární řešení jednorozměrné úlohy se symetrickou dvojitou potenciálovou jámou, kde potenciální energie je

$$U(x) = \begin{cases} \infty & x \le -b/2 \quad , \quad x > b/2 \\ 0 & -b/2 < x \le -a/2 \quad , \quad a/2 < x \le b/2 \\ U & -a/2 < x \le a/2 \end{cases} \tag{6}$$

Stačí hledat řešení pro zajímavější případ, kdy celková energie je $E < U$.

4. Josephsonův jev

Příklad 11. Supravodiče 1 a 2 jsou odděleny tenkou vrstvou isolátoru, kterou mohou supravodivé elektronové páry překonávat tunelováním. Pro jednoduchost předpokládejme u



obou supravodičů stejnou hustotu párů. Pro vlnové funkce máme

$$i\hbar\frac{\partial\psi_1}{\partial t} = E_1\,\psi_1 + T\,\psi_2 \quad , \quad i\hbar\frac{\partial\psi_2}{\partial t} = T\,\psi_1 + E_2\,\psi_2 \quad . \tag{7}$$

Budeme vlnové funkce psát ve tvaru

$$\psi_1 = \rho_1^{1/2}\exp(i\theta_1) \quad , \quad \psi_2 = \rho_2^{1/2}\exp(i\theta_2) \quad , \tag{8}$$

pŚitom E_1, E_2, T jsou reálné konstanty a $\rho_1, \rho_2, \theta_1, \theta_2$ jsou reálné funkce ļasu. Ukaġte, ġe pŚi pŚiloġeném konstantním napĜí V (platí pak $E_2 - E_1 = 2eV$) dochází k oscilacím proudu s Josephsonovou frekvencí.

5. Teorie poruch

PŚíklad 12. PŚi zanedbání spinovĜ závislých interakcí je vodíkový stav s $n = 2$ ļtyŚikrát degenerovaný. Ukaġte pŚi výpoļtu prvního Śádu teorie poruch ļásteļné sejmutí degenerace v homogenním elektrickém poli intenzity $\mathcal{E}$.

PŚíklad 13. Urļete opravy prvního Śádu ve vlastních hodnotách a nultého Śádu ve vlastních funkcích pro dvojnásobnĜ degenerovanou hladinu ï hermiteovská matice poruchového potenciálu je

$$\begin{pmatrix} V_{11} & V_{12} \\ V_{21} & V_{22} \end{pmatrix} .$$