Základy kvantové mechaniky, p. s. r. 2010/2011
Příklady - 3. týden

Obecné vlastnosti řešení jednorozměrné stacionární Schrödingerovy rovnice
Uvažujeme o řešení rovnice

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+V(x)\right\}\psi=E\psi\,.$$

Teorémy probrané na přednášce:
I. (O energiovém spektru). Označení:
V_+ ... $\lim_{x\to\infty}V$,
V_- ... $\lim_{x\to-\infty}V$,
$V_{\min}$ ... $\inf\{V(x)\}$.
Předpokládáme, že limity existují a že $V_+ \geq V_-$. Dále:
A ... $(-\infty, V_{\min})$,
B ... $(V_{\min}, V_-)$,
C ... (V_-, V_+),
D ... (V_+, ∞).
A ... Neexistuje řešení.
B ... Ř. existuje jen pro diskrétní množinu hodnot energie, mluvíme o diskrétní části energiového spektra. Ke každé energiové hladině z diskrétní části spektra existuje právě jedno řešení (až na konstantu).
C ... Jedno řešení ke každé hodnotě energie z tohoto intervalu.
D ... Dvě řešení ke každé hodnotě energie z tohoto intervalu.
C & D ... tzv. spojitá část energiového spektra.

II. (O reálnosti). Řešení odpovídající hodnotě energie z diskrétní části spektra je reálné (až na konstantu).

III. (O ortogonalitě). Nechť ψ_1, ψ_2 jsou řešení odpovídající hodnotám energie E_1, E_2, $E_1 \neq E_2$ z diskrétní části energiového spektra. Pak $\int_{-\infty}^{\infty}\psi_1(x)\psi_2(x)\,\mathrm{d}x = 0$.

IV. (O uzlech). Nechť E_1, E_2, ... jsou vzestupně uspořádané hodnoty energie z diskrétní části energiového spektra, ψ_1, ψ_2, ... odpovídající vlnové funkce. ψ_n má $n-1$ uzlů.

V. (O sudosti/lichosti). Nechť $V(x)$ je sudá funkce: $V(-x) = V(x)$. Pak řešení odpovídající hodnotě energie z diskrétní části spektra je sudá nebo lichá funkce.

Příklady
1. Ukažte, že ke každé energiové hladině z diskrétní části spektra existuje právě jedno řešení (až na konstantu).

2. Dokažte teorém o ortogonalitě.

3. Dokažte teorém o sudosti/lichosti.

K pravděpodobnostní interpretaci

Hustota pravděpodobnosti nalezení částice v místě s polohovým vektorem $\mathbf{r}$ jest $P(\mathbf{r}) = |\psi(\mathbf{r})|^2$. Platí

$$\int P(\mathbf{r})\,\mathrm{d}\mathbf{r} = \int |\psi(\mathbf{r})|^2\,\mathrm{d}\mathbf{r} = 1\,.$$

Tj. takzvaná normovací podmínka pro funkci ψ.

Hustota pravděpodobnosti nalezení částice ve stavu s hybností $\mathbf{p}$ jest $\Pi(\mathbf{p}) = |\varphi(\mathbf{p})|^2$, kde φ je Fourierova transformace funkce ψ:

$$\varphi(\mathbf{p}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\int \psi(\mathbf{r})\mathrm{e}^{-i\mathbf{pr}/\hbar}\,\mathrm{d}\mathbf{r}\;\;,\;\;\psi(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\int \varphi(\mathbf{p})\mathrm{e}^{i\mathbf{pr}/\hbar}\,\mathrm{d}\mathbf{p}\,.$$

Platí

$$\int \Pi(\mathbf{p})\,\mathrm{d}\mathbf{p} = \int |\varphi(\mathbf{p})|^2\,\mathrm{d}\mathbf{p} = 1\,.$$

Tj. normovací podmínka pro funkci φ.

Příklady

4. Uvažujte o částici, která se nachází v nekonečně hluboké potenciálové jámě o šířce l, ve stavu s vlnovou funkcí $\psi_n(x) = A\sin\left(\frac{n\pi x}{l}\right)$.
(a) Určete hodnotu konstanty A, pro kterou funkce ψ splňuje normovací podmínku.
(b) Stanovte hustotu pravděpodobnosti nalezení částice ve stavu s x-ovou složkou hybnosti p_x.
Použijte jednorozměrné analogie vztahů uvedených v úvodní části.

5. (a) S využitím časově závislé Schrödingerovy rovnice

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\mathbf{r})\right\}\psi = i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}$$

ukažte, že hustota pravděpodobnosti $P(\mathbf{r},t) = |\psi(\mathbf{r},t)|^2$ vyhovuje rovnici kontinuity

$$\frac{\partial P}{\partial t} + \mathrm{div}\mathbf{j} = 0\,,$$

kde $\mathbf{j}(\mathbf{r},t)$ je hustota toku pravděpodobnosti definovaná následovně:

$$\mathbf{j}(\mathbf{r},t) = -\mathrm{Re}\left[\frac{i\hbar}{m}\psi^*\nabla\psi\right] = \frac{i\hbar}{2m}\left[\psi\nabla\psi^* - \psi^*\nabla\psi\right]\,.$$

(b) S využitím integrálního tvaru rovnice kontinuity a předpokladu, že vlnová funkce dostatečně rychle klesá pro $|\mathbf{r}| \to \infty$, ukažte, že pokud normovací podmínka platí v čase $t = 0$, pak platí ustavičně.
(c) Vyjádřete hustotu toku pravděpodobnosti pro de Broglieho vlnu.
Poznámka: podmínkou postačující pro spojitost hustoty toku pravděpodobnosti je spojitost funkce ψ a jejich derivací. Tuto podmínku jsme využili při „sešívání” řešení v úlohách z minulého tydne.

Střední hodnoty funkcí závislých na poloze a na hybnosti, relace neurčitosti

Střední hodnota $\langle F(\mathbf{r})\rangle$ funkce $F(\mathbf{r})$ je dána následovně:

$$\langle F(\mathbf{r})\rangle = \int P(\mathbf{r})F(\mathbf{r})\,\mathrm{d}\mathbf{r}\,.$$

Pro střední hodnotu $\langle G(\mathbf{p})\rangle$ funkce $G(\mathbf{p})$ máme

$$\langle G(\mathbf{p})\rangle = \int \Pi(\mathbf{p})G(\mathbf{p})\,\mathrm{d}\mathbf{p}\,.$$

Pro odvození relací neurčitosti potřebujeme následující teorémy:

I. Fourierovou transformací funkce hybnosti $p_x\varphi(\mathbf{p})$ je funkce $-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\psi$, kde $\psi(\mathbf{r})$ je Fourierova transformace funkce $\varphi(\mathbf{p})$,

$$\psi(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\int \varphi(\mathbf{p})\mathrm{e}^{i\mathbf{pr}/\hbar}\,\mathrm{d}\mathbf{p}\,.$$

II. Nechť $\psi_1(\mathbf{r})$ a $\psi_2(\mathbf{r})$ jsou funkce, jejich Fourierovy transformace označme $\varphi_1(\mathbf{p})$ a $\varphi_2(\mathbf{p})$. Platí

$$\int \psi_1^*(\mathbf{r})\psi_2(\mathbf{r})\,\mathrm{d}\mathbf{r} = \int \varphi_1^*(\mathbf{p})\varphi_2(\mathbf{p})\,\mathrm{d}\mathbf{p}\,.$$

O všech funkcích vystupujících v teorémech I a II se předpokládá, že jsou kvadraticky integrovatelné (tj., že existuje integrál $|f|^2$).

Příklady

6. S využitím teorémů I a II ukažte, že (a)

$$\langle p_x\rangle = \int \varphi(\mathbf{p})p_x\varphi(\mathbf{p})\,\mathrm{d}\mathbf{p} = \int \psi^*(\mathbf{r})\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\psi(\mathbf{r})\,\mathrm{d}\mathbf{r}$$

a (b)

$$\langle p_x^2\rangle = \int \varphi(\mathbf{p})p_x^2\varphi(\mathbf{p})\,\mathrm{d}\mathbf{p} = \int \psi^*(\mathbf{r})\left(-\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right)\psi(\mathbf{r})\,\mathrm{d}\mathbf{r}\,.$$

7. Odvození relací neurčitosti pro x a p_x v jednorozměrném případě. Relace neurčitosti:

$$\Delta x \times \Delta p_x \geq \hbar/2\,,$$

kde $\Delta x = \sqrt{\langle(x-\bar{x})^2\rangle}$ a $\Delta p_x = \sqrt{\langle(p_x-\bar{p}_x)^2\rangle}$, $\bar{x} = \langle x\rangle$, $\bar{p}_x = \langle p_x\rangle$. V dalším se pro jednoduchost omezíme na případ, kdy $\bar{x} = 0$ a $\bar{p}_x = 0$. Uvažujme o výrazu $I(\lambda)$,

$$I(\lambda) = \int_{-\infty}^{\infty}\left|x\psi + \lambda\hbar\frac{\partial\psi}{\partial x}\right|^2\,\mathrm{d}x\,.$$

Výraz je pozitivně definitní. Ukažte nejprve, že

$$I(\lambda) = \langle x^2\rangle - \lambda\hbar + \lambda^2\langle p^2\rangle.$$

Postup: roznásobení, integrace per partes, využití výsledku předchozí úlohy.

S využitím pozitivní definitnosti $I(\lambda)$ dále odvoďte relace neurčitosti.

8. S využitím relací neurčitosti proveďte řádový odhad energie základního stavu elektronu v nekonečně hluboké potenciálové jámě o šířce $l =$ (a) 10^{-8} cm a (b) 10^{-12} cm.

9. S využitím relací neurčitosti odhadněte energii základního stavu harmonického oscilátoru.
Návod.
(i) S pomocí Schrödingerovy rovnice a výsledků př. 6 nejprve ukažte, že pro vlastní funkce platí

$$E = \left\langle \frac{p_x^2}{2m} \right\rangle + \left\langle \frac{1}{2} k x^2 \right\rangle .$$

Pro harmonický oscilátor zřejmě navíc platí $\langle x \rangle = 0$ a $\langle p_x \rangle = 0$, tedy $\Delta x = \sqrt{\langle x^2 \rangle}$ a $\Delta p_x = \sqrt{\langle p_x^2 \rangle}$.
(ii) S využitím relací neurčitosti ukažte, že $E \geq (\hbar\omega)/2$, kde $\omega = \sqrt{k/m}$.

10. S využitím relací neurčitosti odhadněte poloměr atomu vodíku a energii základního stavu.
Návod.
(i) S pomocí Schrödingerovy rovnice a výsledků př. 6 nejprve ukažte, že pro vlastní funkce platí

$$E = \left\langle \frac{p_x^2}{2m} \right\rangle + \left\langle \frac{p_y^2}{2m} \right\rangle + \left\langle \frac{p_z^2}{2m} \right\rangle + \left\langle -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0} \frac{1}{r} \right\rangle ,$$

kde $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$. Pro atom vodíku zřejmě platí $\langle x \rangle = \langle y \rangle = \langle z \rangle = 0$, $\langle p_x \rangle = \langle p_y \rangle = \langle p_z \rangle = 0$, $\langle x^2 \rangle = \langle y^2 \rangle = \langle z^2 \rangle$ a $\langle p_x^2 \rangle = \langle p_y^2 \rangle = \langle p_z^2 \rangle$.
(ii) Výraz $\langle \frac{1}{r} \rangle$ aproximujte výrazem $\frac{1}{\sqrt{\langle r^2 \rangle}}$. Podobně jako v předchozím příkladě dále odhadněte minimální hodnotu E a odpovídající hodnotu $\sqrt{\langle r^2 \rangle}$.
Poznámka: výsledky se liší od přesných výsledků o faktor řádu 1, více variant postupu.