

# F5030 Základy kvantové mechaniky

## Sbírka příkladů

### Předmluva

Tato sbírka vznikla jako doplňkový studijní materiál ke kurzu F5030 *Základy kvantové mechaniky* na Přírodovědecké fakultě Masarykovy univerzity. Obsahuje široké spektrum příkladů pokrývajících témata probíraná na přednáškách a je určena k procvičování a rozšíření látky probírané jak v přednáškách, tak v seminářích.

Sbírka je uspořádána podle struktury kurzu a rozdělena do třinácti kapitol, z nichž každá odpovídá jednomu většímu tematickému celku. Poslední kapitola je věnována systémům více částic. Jedná se o pokročilejší látku, která nebude probírána na seminářích, ale pouze na přednáškách. Příslušné příklady není nutné počítat – jsou určeny pouze pro zájemce, kteří si chtějí rozšířit znalosti a dále procvičit látku. U zkoušky bude vyžadována pouze základní orientace v této problematice v rozsahu „Kvantověmechanického minima.“

V jednotlivých kapitolách se nachází:

- příklady plánované na cvičení • (může se měnit v závislosti na vývoji cvičení)
- příklady **doporučené** jako domácí úkol ○
- zbývající doplňkové příklady; příklady vyšší náročnosti pro ambicióznější studenty jsou navíc označeny symbolem ☆

U jednotlivých příkladů budou postupně doplňovány výsledky řešení, zvýrazněná červenou barvou. Vzhledem k tomu, že se jedná o rozpracovanou verzi sbírky, mohou v textu zatím chybět některá řešení; ta budou průběžně doplňována a sbírka může být v budoucnu dále aktualizována. Pokud naleznete chybu v zadání či řešení, prosím, zašlete upozornění na emailovou adresu [mkrejci@physics.muni.cz](mailto:mkrejci@physics.muni.cz).

Verze: Září 2025

# 1 Bohrův model

## 1.1 Bohrův model atomu vodíku •

V Bohrově modelu vodíkového atomu uvažujeme o elektronu (hmotnost  $m$ , náboj  $-e$ ) obíhající po kruhové trajektorii kolem jádra (hmotnost  $M \gg m$ , náboj  $+e$ ). Jako dostředivá síla, která má v případě kruhové trajektorie velikost  $mv^2/r$ , slouží coulombovská přitažlivá síla o velikosti  $e^2/4\pi\epsilon_0 r^2$ . Niels Bohr zavedl kvantovací podmínku  $\oint \mathbf{p} \cdot d\mathbf{r} = 2\pi n\hbar$ , ze které vyplývá, že velikost momentu hybnosti elektronu může nabývat pouze násobků Planckovy konstanty  $\hbar$ . Platí tedy  $L = mvr = n\hbar$ , kde  $n$  je přirozené číslo. Odvoďte vzorec pro možné hodnoty poloměru trajektorie elektronu. Jádro přitom považujte za statické ( $M \rightarrow \infty$ ). Dále odvoďte vzorec pro možné hodnoty energie. Jak se změni výsledky, zahrneme-li do úvah i pohyb jádra? Vyjádřete kvantitativně s použitím  $M$ .

**Řešení:**

$$r_n = \left(1 + \frac{m}{M}\right) a_0 n^2, \quad E_n = -\frac{1}{\left(1 + \frac{m}{M}\right)} \frac{\mathcal{R}}{n^2}, \quad a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{e^2 m}, \quad \mathcal{R} = \frac{m}{2\hbar^2} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\right)^2$$

kde  $n = 1, 2, 3, \dots$

Pro statické jádro  $M \rightarrow \infty$ :  $r_n = a_0 n^2$ ,  $E_n = -\frac{\mathcal{R}}{n^2}$

## 1.2 Deuterium o

Ionizační energie atomu vodíku je  $E_H = 13.5983 \text{ eV}$ . S pomocí Bohrova modelu vypočtete ionizační energii atomu deuteria, ve kterém je elektron vázán k deuteronu (proton+neutron) se stejným nábojem jako má proton. Hmotnosti elektronu, protonu a deuteronu vyjádřené v atomových jednotkách jsou  $m_e = 5.4858 \times 10^{-4} m_u$ ,  $m_p = 1.00728 m_u$  a  $m_d = 2.01355 m_u$ .

**Řešení:**

$$E_D = 13.602 \text{ eV}$$

## 1.3 Pozitronium o

Elektron a pozitron mohou vytvořit komplex s krátkou dobou života, který se označuje jako pozitronium. Předpokládejme, že by bylo možno pro pozitronium užít Bohrovu teorii atomu vodíku, a vypočtete:

- (a) jeho ionizační energii
- (b) energii přechodu ze základního do prvního excitovaného stavu
- (c) jeho poloměr v základním stavu

**Řešení:**

$$\text{a) } E_{Ps} = 6.8028 \text{ eV}, \quad \text{b) } \Delta E = 5.1021 \text{ eV}, \quad \text{c) } r_1 = 2a_0 = 0.106 \text{ nm}$$

## 1.4 Přesné spektroskopické měření spektra izotopů vodíku o

Přesným měřením bylo zjištěno, že frekvence určitého přechodu z hladiny s  $n = 2$  vodíku na jinou hladinu je rovna  $f_1 = 799191727409 \text{ kHz}$ . Zanedbejme relativistické efekty a další drobné korekce a předpokládejme, že se vodík řídí Bohrovým modelem.

- (a) Jaká je hodnota  $n$  cílové hladiny při přechodu?
- (b) V deuteriu má tatáž absorpční čára frekvenci  $f_2 = 799409184973 \text{ kHz}$ . Určete, jaký je poměr

hmotnosti jádra deuteria a protonu, je-li poměr hmotnosti elektronu a protonu roven  $m_e/m_p = 5.4461702177 \times 10^{-4}$ .

**Řešení:**

$$\text{a) } n = 12, \quad \text{b) } \frac{m_D}{m_p} = \frac{\frac{m_e}{m_p} f_2}{f_1 \left( 1 + \frac{m_e}{m_p} \right) - f_2} \approx 1.99899$$

## 1.5 Mionové atomy ○

Mionový atom se skládá z protonu a  $\mu^-$  mionu. Vzniká radiačním záchytem: proton (předpokládejme, že je v klidu) zachytí mion (taktéž v klidu) a tato formace se dostane do základního stavu vyzářením jednoho nebo více fotonů (radiační kaskáda). Popište mionový atom Bohrovým modelem.

- (a) Vypočtete hmotnost  $\mu^-$  mionu, víte-li, že maximální energie vyzářených fotonů je 2.5 keV.
- (b) Stanovte poloměr mionového atomu v jeho základním stavu.
- (c) Určete frekvenční rozlišení  $\delta\nu/\nu$  potřebné k odlišení případu, kdy je  $\mu^-$  mion zachycen protonem a kdy deuteronem (proton+neutron).

**Řešení:**

$$\text{a) } m_\mu = 204.2 m_e, \quad \text{b) } r_1 = 2.9 \times 10^{-3} \text{ Å}, \quad \text{c) } \delta\nu/\nu = 0.0489$$

## 2 de Broglieovy vlny a difrakce

### 2.1 Odhady de Broglieovy vlnové délky ●

- (a) Odhadněte de Broglieovu vlnovou délku pro prachovou částici o poloměru  $r = 2\mu\text{m}$ , hmotnosti  $m = 10^{-15} \text{ kg}$  a rychlosti  $v = 1 \text{ mm/s}$ .
- (b) Odhadněte de Broglieovu vlnovou délku tanku T72 o hmotnosti 42 t jedoucího po bojišti rychlostí 50 km/h.
- (c) Zjistěte, pro jaké hodnoty energie neutronu je de Broglieova vlnová délka porovnatelná s meziatomovými vzdálenostmi a pro jaké s rozměry atomového jádra.

**Řešení:**

$$\begin{aligned} \text{a) } \lambda &= 6.6 \times 10^{-16} \text{ m} = 0.66 \text{ fm}, \quad \text{b) } \lambda = 1.14 \times 10^{-39} \text{ m}, \\ \text{c) } \text{meziatomové vzdálenosti} &\approx 3 \text{ Å}, \quad E = 9 \text{ meV}; \quad \text{rozměry jádra} \approx 1 \text{ fm}, \quad E = 0.82 \text{ GeV}. \end{aligned}$$

### 2.2 Srovnání de Broglieovy vlnové délky elektronu a fotonu ○

- (a) Najděte vztah mezi de Broglieovou vlnovou délkou elektronu vyjádřenou v nanometrech a jeho energií v elektronvoltech.
- (b) Vypočtete vlnovou délku a hybnost elektronu s kinetickou energií 1 eV.
- (c) Vypočtete vlnovou délku a hybnost fotonu se stejnou energií.
- (d) Ukažte, že konstruktivní interference při odrazu rovinné monochromatické vlny s vlnovou délkou  $\lambda$  na dvojici rovin vzdálených  $d$  nastává při splnění podmínky  $n\lambda = 2d \cos \vartheta$ , kde  $\vartheta$  je úhel dopadu měřený od normály a  $n$  je celé číslo. Jaké typické energie elektronů nebo fotonů byste očekávali při provádění rozptylových experimentů na krystalu niklu, který má mřížkový parametr  $a = 0.352 \text{ nm}$ .

**Řešení:**

- a)  $\lambda = \frac{A}{\sqrt{E}}$ ,  $A = 1.226 \sqrt{\text{eV nm}}$ , b)  $\lambda = 1.226 \text{ nm}$ ,  $p = 5.4 \times 10^{-25} \text{ kg.m.s}^{-1}$ ,  
 c)  $\lambda = 1.24 \text{ } \mu\text{m}$ ,  $p = 5.34 \times 10^{-28} \text{ kg.m.s}^{-1}$ , d)  $E_e \sim \text{eV}$ ,  $E_\gamma \sim \text{keV}$

## 2.3 Grupová rychlost de Broglieových vln

Grupová rychlost vlny je dána vztahem  $v_g = d\omega/dk$ . Ukažte, že grupová rychlost de Broglieovy vlny příslušející volné částici je rovna přímo rychlosti  $v$ , jakou se tato částice pohybuje. Náповěda: Vycházejte ze známého vztahu pro kinetickou energii nerelativistické částice a použijte vztahy, které propojují korpuskulární a vlnové vlastnosti částic.

**Řešení:**

$$v_g = \hbar k / m$$

## 2.4 Difrakce neutronů

Svazek neutronů o konstantní rychlosti, hmotnosti  $M_n$  ( $M_n \approx 1.67 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$ ) a energii  $E$  dopadá kolmo na lineární řetízek (mřížku) atomových jader (může jít např. o jádra dlouhé lineární molekuly). Vzdálenost mezi sousedními jádry označme symbolem  $l$  a poloměr jader symbolem  $r$ ,  $r \ll l$ . Detektor neutronů je umístěn na opačné straně řetízku, než ze které dopadá svazek neutronů, ve velké vzdálenosti od řetízku a ve směru, který svírá úhel  $\vartheta$  se směrem dopadajícího svazku.

- (a) Popište závislost počtu detekovaných neutronů na energii  $E$ .  
 (b) Počet detekovaných neutronů za jednotku času nabývá maxima pro  $E = E_1$ . Vyjádřete  $l$  za předpokladu, že pro žádnou energii menší než  $E_1$  maximum nenastává. Určete  $l$  pro  $\vartheta = 30^\circ$  a  $E_1 = 1.3 \cdot 10^{-20} \text{ J}$ .  
 (c) Pro jaké energie neutronů bude výsledek významně záviset na rozměru jader?

## 2.5 Ultrachladné neutrony

Ultrachladné neutrony jsou volné neutrony s de Broglieovou vlnovou délkou ve stovkách .

- (a) Vypočtete rychlost a energii neutronů s vlnovou délkou  $\lambda = 900$  a jejich „teplotu“ (zavedenou jako  $T \equiv E/k_B$ ).  
 (b) Jedním ze způsobů, jak získat ultrachladné neutrony je vertikální injektáž chladných neutronů do vysoké věže. Jaká musí být počáteční vlnová délka  $\lambda_i$  chladných neutronů ve spodní části věže o výšce  $D = 35 \text{ m}$ , aby na vrcholku dosáhly  $\lambda = 900$  ?  
 (c) Neabsorbující materiál se neutronům jeví jako oblast s odpudivým potenciálem řádově  $V_0 \approx 10^{-7} \text{ eV}$ , např. pro hliník  $V_0 = 0.55 \times 10^{-7} \text{ eV}$ . Určete index lomu hliníku, tj. poměr vlnové délky ve vakuu a v materiálu, pro neutrony s  $\lambda = 900$ .  
 (d) Uvedené neutrony dopadají na rovinný povrch hliníku ve vakuu. Stanovte interval úhlů dopadu, pro které nastává totální odraz.

## 2.6 Bose-Einsteinova kondenzace

Bose-Einsteinova kondenzace nastává v systémech neinteragujících bosonů při teplotách nižších, než je prahová teplota  $T_{\text{BE}}$ . Teplota  $T_{\text{BE}}$  je přibližně rovna teplotě, při které je de Broglieova vlnová délka odpovídající energii termálního pohybu rovna střední hodnotě vzdálenosti mezi bosony. Odhadněte teplotu  $T_{\text{BE}}$  pro plyn sodíkových atomů o hustotě  $n = 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ .

### 3 Volná částice a Schrödingerova rovnice

#### 3.1 Volná částice

Najděte řešení 1D Schrödingerovy rovnice, které odpovídá pohybu volné částice s energií  $E$ . Nápověda: Řešením Schrödingerovy rovnice pro volnou částici jsou rovinné vlny s určitou hybností a energií. Tyto funkce však nelze znormalizovat, a proto nejsou fyzikálně přijatelné. Skutečné řešení vzniká jako superpozice rovinných vln, což vede na vlnový balík, který již splňuje Heisenbergovy relace neurčitosti.

**Řešení:**

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} A(k) e^{i(kx - \omega t)} dk, \quad \text{kde } A(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x, 0) e^{-ikx} dx$$

#### 3.2 Vlnové klubko s gaussovským rozdělením •

Najděte vlnovou funkci vlnového klubka v čase  $t = 0$  vzniklého skládáním řešení 1D Schrödingerovy rovnice pro volnou částici. Uvažujte gaussovské rozložení vlnového čísla  $k$ :

$$A(k) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{1}{4}} \sqrt{\sigma}} \exp \left[ -\frac{(k - k_0)^2}{4\sigma^2} \right].$$

- (a) Zjistěte, jestli je vzniklá vlnová funkce správně normovaná.
- (b) Spočítejte střední hodnotu polohy, kvadrátu polohy.
- (c) Spočítejte střední hodnotu hybnosti, kvadrátu hybnosti.
- (d) Vyjádřete součin kvadratických odchylek polohy a hybnosti  $\Delta x \Delta p$ .

**Řešení:**

$$\psi(x, 0) = \left( \frac{2\sigma^2}{\pi} \right)^{\frac{1}{4}} e^{ik_0 x} e^{-x^2 \sigma^2}, \quad \text{a) Ano,} \quad \text{b) } \langle x \rangle = 0, \quad \langle x^2 \rangle = \frac{1}{4\sigma^2},$$

$$\text{c) } \langle p \rangle = \hbar k_0, \quad \langle p^2 \rangle = \hbar^2 k_0^2 + \hbar^2 \sigma^2, \quad \text{d) } \Delta x \Delta p = \frac{\hbar}{2}.$$

#### 3.3 Vlnové klubko s obdélníkovým rozdělením ○

Najděte vlnovou funkci vlnového klubka v čase  $t = 0$  vzniklého skládáním řešení 1D Schrödingerovy rovnice pro volnou částici. Uvažujte obdélníkové rozložení vlnového čísla  $k$ :

$$A(k) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{k_2 - k_1}}, & k_2 \geq k \geq k_1 \\ 0, & \text{jinak} \end{cases}$$

#### 3.4 Vlnové klubko s trojúhelníkovým rozdělením ○

Najděte vlnovou funkci vlnového klubka v čase  $t = 0$  vzniklého skládáním řešení 1D Schrödingerovy rovnice pro volnou částici. Uvažujte trojúhelníkové rozložení vlnového čísla  $k$ :

$$A(k) = \begin{cases} \sqrt{\frac{3}{(2a)^3}} (a - |k|), & |k| \leq a, \\ 0, & |k| > a. \end{cases}$$

### 3.5 Neznámý potenciál 1

Částice o hmotnosti  $m$  se pohybuje v jednorozměrném potenciálu  $V(x)$ . Víme, že vlnová funkce jejího základního stavu je

$$\psi(x) = \frac{A}{\cosh \lambda x},$$

kde  $\lambda$  je konstanta a  $A$  je normovací konstanta. S předpokladem, že potenciál  $V(x)$  se v nekonečnu blíží nule, nalezněte energii základního stavu a potenciál  $V(x)$ .

### 3.6 Neznámý potenciál 2

Částice o hmotnosti  $m$  se pohybuje v jednorozměrném potenciálu  $V(x)$ . Vlnové funkce jejího základního stavu a prvního excitovaného stavu jsou

$$\psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \exp\left(-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}\right) \quad \text{a} \quad \psi_1(x) = \sqrt{2\pi} \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{3}{4}} x \exp\left(-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}\right).$$

Najděte potenciál  $V(x)$  a rozdíl energií uvedených dvou stavů.

## 4 Vázané stavy

### 4.1 Nekonečně hluboká jáma •

Najděte vlnové funkce stacionárních stavů částice o hmotnosti  $m$  pohybující se v nekonečně hluboké potenciálové jámě o šířce  $a$ . Uvažujme dvě možná zavedení potenciálu jámy:

- (a)  $V(x) = 0$  pro  $0 < x < a$  a  $V(x) \rightarrow \infty$  jinak.
- (b)  $V(x) = 0$  pro  $-\frac{a}{2} < x < \frac{a}{2}$  a  $V(x) \rightarrow \infty$  jinak.

Část řešení SSR uvnitř jámy lze hledat např. ve tvaru  $\psi(x) = A \sin(kx) + B \cos(kx)$  nebo např.  $\psi(x) = A \exp(-ikx) + B \exp(ikx)$ . Vyzkoušejte postupně oba výše uvedené tvary řešení pro obě varianty zadaného potenciálu.

### 4.2 Odhad energie základního stavu částice v kvantové jámě ○

S pomocí Heisenbergovy relace neurčitosti odhadněte energii základního stavu částice v jednorozměrné nekonečně hluboké potenciálové jámě o šířce  $L$  a srovnajte ji s přesnou hodnotou získanou v úloze 4.1.

### 4.3 Rozmazání částice v jámě ○

Pro částici pohybující se v nekonečně hluboké jednorozměrné potenciálové jámě vymezené  $x = 0$  a  $x = a$  ukažte, že střední hodnota její souřadnice  $x$  je  $\langle x \rangle = a/2$  a střední čtverec odchylky od této hodnoty je  $\langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle = (a^2/12)(1 - 6/\pi^2 n^2)$ . Ukažte, že v případě, kdy  $n$  nabývá velmi velkých hodnot, tato hodnota souhlasí s hodnotou klasickou.

### 4.4 Ověření relace neurčitosti pro částici v jámě ○

Uvažujte částici pohybující se v nekonečně hluboké jednorozměrné potenciálové jámě vymezené  $x = 0$  a  $x = a$ . Částice se nachází ve stavu popsaném vlnovou funkcí

$$\psi(x) = \begin{cases} A(x^3 - \frac{3}{2}ax^2 + \frac{a^2}{2}x), & x \in (0, a) \\ 0, & \text{jinak.} \end{cases}$$

(a) Vysvětlete, zda-li je tato vlnová funkce fyzikálně přijatelná. (b) Najděte konstantu  $A$  tak, aby vlnová funkce byla normovaná. (c) Ověřte platnost relace neurčitosti  $\Delta x \Delta p \geq \hbar/2$ .

## 4.5 Počítání hladin

Pro elektron, který je uzavřen v jednorozměrné krabici o šířce 10 nm, vypočtěte počet energiových hladin ležících mezi 9 a 10 eV.

## 4.6 Tlak elektronu

Elektron je uvězněn v jednorozměrném chlívku o šířce  $a = 10^{-10}$  m. Určete:

- (a) Energii elektronu v základním a prvním excitovaném stavu.
- (b) Tlak elektronu na stěny chlívku v těchto stavech.

## 4.7 Jáma s konečnou hloubkou o

Vypočtěte možné hodnoty energie částice pohybující se v potenciálu  $V(x)$ , kde  $V(x) = -V_0$  pro  $-a \leq x \leq +a$  a  $V(x) = 0$  vně tohoto intervalu. Vyjádřete se k existenci vázaného stavu v dané jámě.

## 4.8 Polovodičová kvantová jáma o

V polovodičových heterostrukturách lze poměrně snadno realizovat jednorozměrné kvantové jámy. Jako příklad nám poslouží tenká vrstva InAs obklopená mocnými vrstvami GaAs. Vrstva InAs má tloušťku  $L = 10$  nm a chová se jako jáma o hloubce  $V_0 = 0.5$  eV. Je nutno přihlédnout k tomu, že elektrony v polovodičích se pohybují jako efektivní částice s hmotností  $m^* \ll m_e$ , kde  $m_e$  je hmotnost elektronu. Efektivní hmotnost  $m^*$  v InAs a GaAs se mírně liší, vezmeme pro jednoduchost hodnotu  $m^* = 0.07m_e$ . Vypočtěte energie vázaných stacionárních stavů a srovnajte je s odpovídajícími energiemi v nekonečně hluboké jámě.

## 4.9 Symetrická a asymetrická jáma ☆

Mějme dvě jednorozměrné jámy s potenciály

$$V_A(x) = \begin{cases} +\infty & x < 0 \\ -V_1 & 0 \leq x \leq a \\ 0 & a < x \end{cases} \quad \text{a} \quad V_B(x) = \begin{cases} 0 & x < -a \\ -V_2 & -a \leq x \leq a \\ 0 & a < x \end{cases}$$

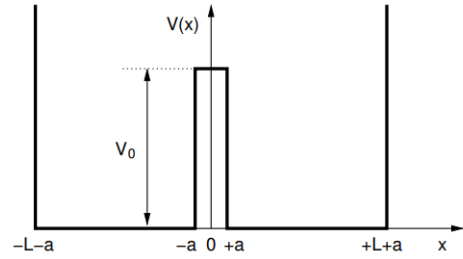
- (a) Zformulujte rovnice pro vlastní energie částice o hmotnosti  $m$ , která se pohybuje v potenciálu  $V_A$  resp.  $V_B$ .
- (b) Jaký je vztah mezi vlastními stavy jam, když platí  $V_1 = V_2$ ?
- (c) Kolik existuje nezávislých stavů pro danou energii  $E > 0$  a jaký je jejich charakter?
- (d) U vázaných stavů porovnejte pravděpodobnost výskytu částice uvnitř a vně jámy. Může být v nějakém případě pravděpodobnější nalézt částici vně jámy?

## 4.10 Sousedící jámy ☆

Uvažujme o systému dvou jam oddělených přepážkou. Systém je popsán potenciálem.

Najděte rovnice pro energie vázaných stavů. Využijte přitom zrcadlovou symetrii problému, která rozděluje vázané stavy do dvou tříd. Je-li přepážka dostatečně nepřekonatelná, lze si představovat vázané stavy v systému jako symetrické/antisymetrické kombinace vázaných stavů izolovaných

$$V(x) = \begin{cases} \infty & x < -L - a \\ 0 & -L - a < x < -a \\ V_0 & -a < x < +a \\ 0 & +a < x < a + L \\ \infty & a + L < x \end{cases}$$



jam. Tyto kombinace mají velmi blízké energie  $E_1, E_2$ , jejichž rozdíl  $\Delta E = E_2 - E_1$  bude záviset na amplitudě tunelování z jedné jámy do druhé. V přiblížení  $\Delta E \ll E_{1,2} \ll V_0$  ukažte, že skutečně platí úměrnost  $\Delta E/E \propto e^{-2\kappa a}$ , kde  $\kappa = \sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar$ .

#### 4.11 $\delta$ -past o

Najděte vlnovou funkci a energii vázaného stavu jednorozměrné částice o hmotnosti  $m$  pohybující se v krátkodosahovém potenciálu  $V(x) = -\lambda\delta(x)$ , kde  $\lambda > 0$ .

#### 4.12 Dvojice $\delta$ -pastí ☆

Najděte vlnové funkce a rovnice pro energie vázaných stavů jednorozměrné částice o hmotnosti  $m$  pohybující se v potenciálu

$$V(x) = -\lambda[\delta(x-a) + \delta(x+a)] \quad (\lambda > 0).$$

Ukažte, že vždy existuje nejméně jeden a nejvýše dva vázané stavy.

#### 4.13 $\delta$ -past v jámě ☆

Částice o hmotnosti  $m$  je uvězněna v jednorozměrné nekonečně hluboké jámě vymezené  $-a < x < +a$ . Ve středu jámy navíc působí přitažlivý potenciál  $-aC\delta(x)$ .

- Jaké jsou energie stacionárních stavů, které jsou popsány vlnovými funkcemi s lichou paritou?
- Stanovte hodnotu  $C = C_0$ , pro kterou má základní stav energii  $E = 0$ .
- Najděte vlnovou funkci základního stavu s  $E < 0$ . Hodnota  $C$  musí být větší než hodnota  $C_0$  stanovená v bodě (b).

#### 4.14 Jednorozměrný coulombovský potenciál ☆

Elektron se pohybuje v jednorozměrném poloprostoru  $x > 0$  a podléhá působení potenciálu

$$V(x) = -\frac{e^2}{16\pi\epsilon_0 x}.$$

Tato situace odpovídá elektronu pohybujícímu se nad povrchem dokonalého kovu.

- Najděte energii základního stavu.
- Najděte střední vzdálenost  $\langle x \rangle$  elektronu od povrchu kovu.

## 5 Rozptylové stavy a časový vývoj

### 5.1 Náraz do bariéry •

Částice o hmotnosti  $m$  se pohybuje v potenciálu  $V(x)$ , který je nulový pro  $x < 0$  a roven  $V_0 > 0$  pro  $x > 0$ . Najděte stacionární řešení Schrödingerovy rovnice, které odpovídá částici narážející zleva

na potenciálovou bariéru. Určete koeficient průchodu a odrazu, které jsou definovány jako poměry toku hustoty pravděpodobnosti procházející a odražené vlny ku toku hustoty pravděpodobnosti vlny dopadající. Zvlášť diskutujte případy  $E > V_0$  a  $E < V_0$ .

## 5.2 Seskok ze schodu •

Vyřešte úlohu 5.1 pro  $V_0 < 0$  (urychlující potenciál). Smysl má přirozeně jen případ  $E > 0$ .

## 5.3 Tunelový jev ○

Částice o hmotnosti  $m$  a energii  $E$  dopadá na bariéru danou potenciálem  $V(x) = V_0 > E$  pro  $0 < x < a$ ,  $V(x) = 0$  jinak. Najděte pravděpodobnost průchodu částice bariérou a její přibližné vyjádření pro dostatečně neproniknutelnou bariéru.

## 5.4 $\alpha$ -rozpad polonia 212 ○

Vypočtete pravděpodobnost průchodu částice bariérou o výšce  $V_0 = 26.4 \text{ MeV}$  a šířce  $a = 17.9 \text{ fm}$ . Energie částice je  $E = 8.78 \text{ MeV}$ , hmotnost určete z údaje  $mc^2 = 3727 \text{ MeV}$ . Uvedené hodnoty se týkají  $\alpha$ -rozpadu jádra polonia 212, kdy se  $\alpha$ -částice snaží uniknout z prostoru jádra a naráží přitom na coulombovskou bariéru. S přihlédnutím k frekvenci narážení  $\alpha$ -částice do stěny bariéry,  $f = 1.1 \times 10^{21} \text{ s}^{-1}$ , odhadněte poločas rozpadu polonia 212. Výsledná hodnota se o mnoho řádů liší od skutečné. Je to způsobeno zejména aproximací potenciálu pravoúhlou bariérou. Výrazně přesnější odhad je proveden v příkladu 5.8.

## 5.5 Rezonance při průchodu nad jámou ○

Výchozí situace je stejná jako v příkladu 5.3, ale zajímáme se o případ, kdy je bariéra nahrazena jámou o hloubce  $V_0$ . Vypočtete závislost pravděpodobnosti průchodu nad jámou na energii  $E$  a sestrojte křivku této závislosti pro případ  $V_0 a^2 = \pi^2 \hbar^2 / m$  a  $V_0 a^2 = 4\pi^2 \hbar^2 / m$ .

## 5.6 Asymetrický tunelový jev ☆

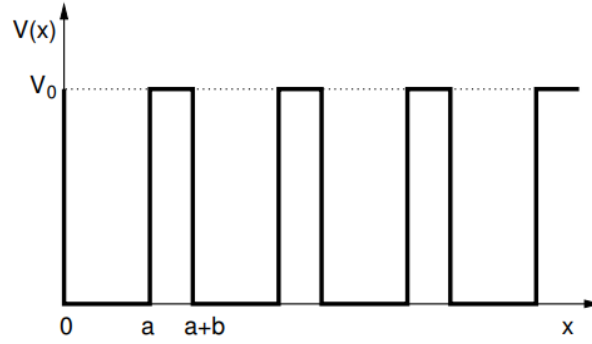
Částice o hmotnosti  $m$  a energii  $E$  dopadá na bariéru danou potenciálem

$$V(x) = \begin{cases} 0 & x < 0 \\ V_0 & 0 < x < a \\ \Delta & x > a \end{cases}.$$

Zde  $V_0$  je kladná konstanta a  $\Delta$  může být kladná i záporná konstanta. Ve srovnání s tunelovým jevem z příkladu 5.3 zde dochází navíc ke zpomalení/urychlení částice po průchodu bariérou. Najděte pravděpodobnost průchodu částice bariérou a prozkoumejte vliv  $\Delta$ .

## 5.7 Kronigův-Penneyův model ☆

Vyřešte jednorozměrnou stacionární Schrödingerovu rovnici pro periodický potenciál z následujícího obrázku. Pomůže vám přitom Blochův teorém, který praví, že řešení Schrödingerovy rovnice je tvaru  $e^{ikx} u_{nk}(x)$ , kde  $u$  jsou periodické funkce s periodou  $a + b$ .



Ukažte, že hodnoty energie závislé na parametru  $k$  jsou implicitně dány rovnicí

$$\cos k(a+b) = \cos \kappa_1 a \cos \kappa_2 b - \frac{1}{2} \left( \frac{\kappa_2}{\kappa_1} + \frac{\kappa_1}{\kappa_2} \right) \sin \kappa_1 a \sin \kappa_2 b ,$$

kde  $\kappa_1 = \sqrt{2mE_k}/\hbar$  a  $\kappa_2 = \sqrt{2m(E_k - V_0)}/\hbar$ . Jak je patrné z uvedené rovnice, předpokládáme  $E_k > V_0$ , i když obdobná rovnice se dá zformulovat i pro případ  $0 < E < V_0$ . Numerické řešení rovnice a nalezení  $E_k$  můžete provést, ale není to nutné.

## 5.8 Gamowova formule ☆

Pravděpodobnost průchodu částice obecnou potenciálovou bariérou může být velmi zjednodušeně odhadnuta rozložením bariéry na mnoho navazujících pravoúhlých bariér. Hledaná pravděpodobnost se pak získá jako součin pravděpodobností průchodu jednotlivými elementárními bariérami. Odvoďte na základě této představy Gamowovu formuli

$$P = \exp \left\{ -\frac{2}{\hbar} \int \sqrt{2m[V(x) - E]} dx \right\} .$$

S použitím této formule výrazně vylepšíme odhad provedený v úloze 5.4. Potenciál bariéry je coulombovský potenciál popisující odpuzování  $\alpha$ -částice (náboj  $2e$ ) a zbytku jádra (náboj  $(Z-2)e$ ,  $Z = 84$  pro polonium)

$$V(r) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{2(Z-2)e^2}{r} .$$

Rozsah bariéry je omezen na  $R_1 < r < R_2$ , kde  $R_1 = 9.0 \text{ fm}$  je poloměr jádra a  $R_2 = 26.9 \text{ fm}$  klasický bod obratu, pro který platí  $E = V(R_2)$ . Energii a hmotnost  $\alpha$ -částice a frekvenci narážení do stěny jádra (počítanou jako  $f = v/2R_1$ ) převezměte z příkladu 5.4 a vypočítejte pravděpodobnost úniku  $\alpha$ -částice z jádra  $^{212}\text{Po}$  a odpovídající poločas rozpadu. Porovnejte se skutečnou hodnotou  $T_{1/2} = 0.3 \mu\text{s}$ .

## 5.9 Hustota toku pravděpodobnosti ○

S pomocí jednorozměrné Schrödingerovy rovnice popište časový vývoj hustoty pravděpodobnosti  $|\psi(x,t)|^2$  a ukažte, že lze zformulovat příslušnou rovnici kontinuity, v níž jako hustota toku pravděpodobnosti figuruje veličina

$$j(x,t) = \frac{\hbar}{2mi} \left( \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial x} \right) .$$

Určete hustotu toku pravděpodobnosti pro volnou částici s vlnovou funkcí  $\psi(x,t) = Ae^{i(kx - Et/\hbar)}$ , kde  $E = \hbar^2 k^2 / 2m$ .

## 5.10 Gaussovský balík ◦

Volná částice o hmotnosti  $m$  pohybující se v jednorozměrném prostoru je popsána vlnovou funkcí

$$\psi(x, t = 0) = A \exp(-x^2/a^2)$$

- (a) Určete normovací konstantu  $A$ .
- (b) Najděte amplitudu pravděpodobnosti částice v hybnostním prostoru.
- (c) Zformulujte relaci neurčitosti pro gaussovský balík.
- (d) Vypočtěte  $\psi(x, t)$ .

## 5.11 Přelévání částice v jámě 1 •

Částice o hmotnosti  $m$  je uvězněna v nekonečně hluboké potenciálové jámě  $0 \leq x \leq L$ . V čase  $t = 0$  je její normovaná vlnová funkce dána výrazem

$$\psi(x, t = 0) = \sqrt{8/5L} \left[ 1 + \cos\left(\frac{\pi x}{L}\right) \right] \sin\left(\frac{\pi x}{L}\right).$$

- (a) Vypočtěte vlnovou funkci v čase  $t = t_0$ .
- (b) Jaká je pravděpodobnost nalezení částice v levé polovině jámy (tj. v oblasti  $L/2 \leq x \leq L$ ) v okamžiku  $t = t_0$ ?
- (c) Vypočtěte časově závislou hustotu toku pravděpodobnosti  $j(x, t)$ .
- (d) Kolik pravděpodobnosti „proteče“ bodem  $x = L/2$  za čas  $t = \pi\hbar/(E_2 - E_1)$ ?
- (e) Spočtěte časově závislou střední hodnotu polohy a hybnosti.

## 5.12 Přelévání částice v jámě 2 ◦

Částice o hmotnosti  $m$  je uvězněna v nekonečně hluboké potenciálové jámě  $0 \leq x \leq L$ . V čase  $t = 0$  je její vlnová funkce dána vztahem

$$\psi(x, 0) = \frac{2}{\sqrt{7L}} \sin\left(\frac{\pi x}{L}\right) + \sqrt{\frac{6}{7L}} \sin\left(\frac{2\pi x}{L}\right) + \frac{2}{\sqrt{7L}} \sin\left(\frac{3\pi x}{L}\right).$$

- (a) Ověřte, zda je vlnová funkce správně normovaná (Trik: využijte ortonormalitu vlnových funkcí).
- (b) Vypočtěte vlnovou funkci v obecném čase  $\psi(x, t)$ .
- (c) Vypočtěte časově závislou střední hodnotu polohy  $\langle x \rangle$  a hybnosti  $\langle p \rangle$ .
- (d) Spočtěte střední hodnotu energie ve stavu  $\psi(x, t)$ .

## 5.13 Přelévání částice v jámě 3 ◦ ☆

Částice o hmotnosti  $m$  se nachází v nekonečně hluboké potenciálové jámě vymezené intervalem  $0 < x < L$ . V čase  $t = 0$  je částice rovnoměrně rozprostřena v levé polovině jámy. Její vlnová funkce tedy jest

$$\psi(x, 0) = \begin{cases} \sqrt{2/L}, & 0 < x < L/2 \\ 0, & L/2 < x < L \end{cases}$$

- (a) Určete vlnovou funkci  $\psi(x, t)$  v libovolném čase.
- (b) Jaká je pravděpodobnost nalezení částice v  $n$ -tém vlastním stavu.
- (c) Zapište výraz pro střední energii částice. Co o něm soudíte?

## 5.14 Přelévání částice v jámě 4 ○ ☆

Částice o hmotnosti  $m$  je uvězněna v nekonečně hluboké potenciálové jámě  $0 \leq x \leq L$ . V čase  $t = 0$  je její vlnová funkce dána vztahem

$$\psi(x, 0) = \begin{cases} Ax(L - x), & 0 \leq x \leq L \\ 0, & \text{jinak} \end{cases}$$

- (a) Určete normalizační konstantu  $A$ .
- (b) Spočítejte střední hodnotu polohy, hybnosti a energie ve stavu  $\psi(x, 0)$ .
- (c) Spočítejte vlnovou funkci v obecném čase  $\psi(x, t)$ . Nápověda: Vlnovou funkci je nejdříve potřeba rozložit do báze vlastních stavů

$$\psi(x, 0) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \phi_n(x),$$

kde  $\phi_n$  jsou vlastní stavy pro nekonečně hlubokou potenciálovou jámu. Koeficienty  $c_n$  pak najdete využitím ortogonality vlastních stavů.

## 6 Formalismus kvantové mechaniky

### 6.1 Normování a skalární součin •

Mějme systém s ortonormální bází  $\{|n\rangle\}_{n=1}^{\infty}$  a v ní zavedené následující stavy:

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= N_1(|1\rangle + |2\rangle) \\ |\varphi\rangle &= N_2(|1\rangle - |2\rangle) \\ |\xi\rangle &= N_3(2|1\rangle + |2\rangle - i|3\rangle) \\ |\eta\rangle &= N_4 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{2^n} |n\rangle \end{aligned}$$

- (a) Najděte normovací faktory  $N_1, N_2, N_3, N_4$ .
- (b) Vyčíslete všechny skalární součiny mezi výše uvedenými stavy.

### 6.2 Střední hodnota operátoru 1 ○

Uvažme systém popsáný stavovým vektorem

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|1\rangle + \frac{1}{\sqrt{5}}|2\rangle + \frac{1}{\sqrt{10}}|3\rangle,$$

kde ortonormální vektory  $|n\rangle$ ,  $n = 1, 2, 3$ ,  $\langle n|m\rangle = \delta_{nm}$  jsou vlastními vektory operátoru  $\hat{A}$ , tj.  $\hat{A}|n\rangle = n^2|n\rangle$ . Spočítejte střední hodnotu operátoru  $\hat{A}$  ve stavu  $|\psi\rangle$ .

### 6.3 Střední hodnota operátoru 2 ○

Uvažme systém popsáný stavovým vektorem

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{15}}|1\rangle + \frac{1}{\sqrt{3}}|2\rangle + \frac{1}{\sqrt{5}}|3\rangle,$$

kde ortonormální vektory  $|n\rangle$ ,  $n = 1, 2, 3$ ,  $\langle n|m\rangle = \delta_{nm}$  jsou vlastními vektory operátoru  $\hat{A}$ , tj.  $\hat{A}|n\rangle = (3n^2 - 1)|n\rangle$ .

- (a) Ověřte, zda je stav  $|\psi\rangle$  správně normalizován. Pokud není, normalizujte ho.
- (b) Vypočítejte střední hodnotu operátoru  $\hat{A}$  ve stavu  $|\psi\rangle$ .
- (c) Vypočítejte střední hodnotu operátoru  $\hat{A}^2$  ve stavu  $|\psi\rangle$ .

## 6.4 Vlastnosti hermiteovského sdružení a hermiteovských operátorů

- (a) Necht'  $A$  a  $B$  jsou lineární operátory na Hilbertově prostoru. Ukažte, že  $(AB)^+ = B^+ A^+$ .
- (b) Ukažte, že vlastní hodnoty hermiteovského operátoru jsou reálné.
- (c) Necht'  $|\varphi\rangle$  a  $|\psi\rangle$  jsou vlastní vektory hermiteovského operátoru patřící k různým vlastním hodnotám. Ukažte, že  $\langle\varphi|\psi\rangle = 0$ .

## 6.5 Vyšetření hermitičnosti vybraných operátorů 1 ○

Uvažujte operátory  $\hat{X}$ ,  $d/dx$ ,  $id/dx$ .

- (a) Prozkoumejte hermitičnost uvedených operátorů.
- (b) Určete, čemu se rovná komplexní sdružení těchto operátorů. Je výsledek stejný jako hermitovské sdružení?
- (c) Využijte předchozí výsledky a prozkoumejte hermitičnost operátorů  $e^{\hat{X}}$ ,  $e^{d/dx}$ ,  $e^{id/dx}$ .
- (d) Určete hermitovské sdružení operátoru  $\hat{X}d/dx$ .

## 6.6 Vyšetření hermitičnosti vybraných operátorů 2 ○

Využijte výsledků z úlohy 6.5 a ověřte hermitičnost operátorů

$$\hat{L}_x = -i\hbar \left( \hat{Y} \frac{\partial}{\partial z} - \hat{Z} \frac{\partial}{\partial y} \right), \hat{L}_y = -i\hbar \left( \hat{Z} \frac{\partial}{\partial x} - \hat{X} \frac{\partial}{\partial z} \right), \hat{L}_z = -i\hbar \left( \hat{X} \frac{\partial}{\partial y} - \hat{Y} \frac{\partial}{\partial x} \right).$$

## 6.7 Maticové elementy pro nekonečně hlubokou potenciálovou jámu ●

V předchozí sekci jsme odvodili, že stacionární stavy nekonečně hluboké potenciálové jámy od 0 po  $L$  jsou v souřadnicové reprezentaci vyjádřeny  $\langle x|n\rangle = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{n\pi x}{L}$ . V bazi tvořené těmito stavy spočtete maticové elementy  $(x^2)_{11}$ ,  $(p)_{12}$  a  $(p)_{21}$  operátorů  $\hat{x}^2$  a  $\hat{p}$ .

## 6.8 Projekční operátor

Operátor  $\hat{P}$  nazýváme projekční operátor, pokud je hermitovský  $\hat{P}^\dagger = \hat{P}$  a zároveň splňuje podmínku  $\hat{P}^2 = \hat{P}$ .

Ověřte následující vlastnosti:

- (a) Součin dvou projekčních operátorů je opět projekční operátor.
- (b) Součet dvou projekčních operátorů obecně není projekční operátor.
- (c) Ukažte, že  $|\psi\rangle\langle\psi|$  je projekční operátor právě tehdy, když je stav  $|\psi\rangle$  normalizován.

## 6.9 Dvoustavový systém 1 ○

Uvažujme o dvourozměrném Hilbertově prostoru. Operátor  $A$  je v ortonormální bázi  $\{|1\rangle, |2\rangle\}$  reprezentován maticí

$$\begin{pmatrix} 2 & i\sqrt{2} \\ -i\sqrt{2} & 3 \end{pmatrix}.$$

- (a) Je operátor  $A$  hermiteovský?
- (b) Stanovte vlastní hodnoty a vlastní vektory (tyto vyjádřete v bázi  $\{|1\rangle, |2\rangle\}$ ).
- (c) Stanovte matice reprezentující projektory do vlastních vektorů.
- (d) Ověřte, že je splněna relace úplnosti.

## 6.10 Spektrální rozklad matice ○

Uvažujte matici

$$\hat{A} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

- (a) Najděte vlastní hodnoty a normalizované vlastní vektory matice  $\hat{A}$ .
- (b) Ověřte, že báze vytvořená vlastními vektory matice  $\hat{A}$  je úplná a ortonormální.
- (c) Pomocí vlastních vektorů matice  $\hat{A}$  zkonstruuje matici  $\hat{U}$  tak, aby platilo

$$\hat{U}^\dagger \hat{A} \hat{U} = \begin{pmatrix} a_1 & 0 & 0 \\ 0 & a_2 & 0 \\ 0 & 0 & a_3 \end{pmatrix}.$$

- (d) Ukažte, že platí  $e^{x\hat{A}} = \hat{I} \cosh x + \hat{A} \sinh x$ , kde  $\hat{I}$  je jednotková matice. Náповěda: využijte Taylorův rozvoj operátoru

$$e^{x\hat{A}} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{x^n}{n!} \hat{A}^n$$

## 6.11 Operátor v Diracově zápisu ○

Uvažujte operátor  $\hat{A}$ , který je v Diracově zápisu dán jako

$$\hat{A} = |1\rangle\langle 1| + |2\rangle\langle 2| + |3\rangle\langle 3| - i|1\rangle\langle 2| - |1\rangle\langle 3| + i|2\rangle\langle 1| - |3\rangle\langle 1|,$$

- kde  $|1\rangle, |2\rangle, |3\rangle$  tvoří úplnou a ortonormální bázi. (a) Je operátor  $\hat{A}$  hermitovský? Spočítejte také  $\hat{A}^2$  a zjistěte, zda je  $\hat{A}$  projekční operátor.
- (b) Najděte maticovou reprezentaci operátoru  $\hat{A}$ .
  - (c) Najděte vlastní vektory a vlastní hodnoty matice  $\hat{A}$ .

## 6.12 Měření energie v potenciálové jámě ○

Uvažujte částici v nekonečně hluboké potenciálové jámě vymezené stěnami v  $x = 0, x = a$ . Stav částice v daném čase je popsán vlnovou funkcí

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{5a}} \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) + \frac{2}{\sqrt{5a}} \sin\left(\frac{3\pi x}{a}\right).$$

- (a) Najděte možné výsledky měření energie a odpovídající pravděpodobnosti.
- (b) Najděte tvar vlnové funkce ihned po měření.
- (c) Když ihned po měření znovu změříme energii systému, jaký výsledek dostaneme a s jakou pravděpodobností?

## 6.13 Měření energie ○

Uvažujte fyzikální systém, jehož Hamiltonián a počáteční stav jsou dány

$$\hat{H} = \varepsilon_0 \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 \\ -1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad |\psi_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 2 \end{pmatrix}$$

- (a) Jaké hodnoty dostaneme, pokud budeme měřit energii systému, a jaké budou pravděpodobnosti jednotlivých měření?
- (b) Spočítejte střední hodnotu energie ve stavu  $|\psi_0\rangle$ .

## 6.14 Postupná měření •

Uvažujte systém, jehož hamiltonián  $\hat{H}$  a operátor  $\hat{A}$  jsou dány maticemi:

$$\hat{H} = \varepsilon_0 \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & 2i \\ 0 & -2i & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{A} = a_0 \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

- (a) Jaké výsledky dostaneme měřením energie?
- (b) Předpokládejme, že měřením energie dostaneme výsledek  $\sqrt{5}\varepsilon_0$ . Ihned poté změříme  $\hat{A}$ . Jaké hodnoty dostaneme a s jakými pravděpodobnostmi?

## 6.15 Vlastnosti komutátorů ◦

S využitím definice komutátoru dokažte následující vztahy:

- (a)  $[\hat{A}, \hat{B} + \hat{C}] = [\hat{A}, \hat{B}] + [\hat{A}, \hat{C}]$
- (b)  $[\hat{A}, \beta \hat{B}] = \beta [\hat{A}, \hat{B}]$
- (c)  $[\hat{A}, \beta \hat{A}^n] = 0$

## 6.16 Komutátory matic

Uvažujte následující matice

$$\hat{A} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{B} = \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{C} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Vypočítejte komutátory  $[\hat{A}, \hat{B}]$ ,  $[\hat{B}, \hat{C}]$ , a  $[\hat{C}, \hat{A}]$ .

## 6.17 Vlastnosti operátoru $\hat{A}$ ◦

Uvažujte operátor  $\hat{A} = \hat{X} \left( \frac{d}{dx} + 2 \right)$ .

- (a) Najděte vlastní funkci operátoru  $\hat{A}$  příslušející nulové vlastní hodnotě. Je tato funkce normalizovatelná?
- (b) Je operátor  $\hat{A}$  hermitovský?
- (c) Spočítejte komutátory  $[\hat{A}, \hat{X}]$ ,  $[\hat{A}, \frac{d}{dx}]$ ,  $[\hat{A}, \frac{d^2}{dx^2}]$ ,  $[\hat{X}, [\hat{A}, \hat{X}]]$  a  $[\frac{d}{dx}, [\hat{A}, \frac{d}{dx}]]$ .

## 6.18 Komutátory 1 ◦

Využitím komutátoru  $[\hat{X}, \hat{P}] = i\hbar$  spočítejte následující komutátory:

- (a)  $[\hat{X}^2, \hat{P}]$ ,
- (b)  $[\hat{X}, \hat{P}^2]$ ,
- (c)  $[\hat{X}^2, \hat{P}^2]$ ,
- (d)  $[\hat{X}^2, \hat{P}^3]$ .

## 6.19 Komutátory 2 ◦

Vypočítejte následující komutátory:

- (a)  $[\hat{X}^2, d/dx]$ . Náповěda: působte komutátorem na vlnovou funkci  $\psi(x)$ .
- (b)  $[\hat{X}, \hat{P}^n]$ ,
- (c)  $[e^{i\hat{X}}, \hat{P}]$ ,

- (d)  $[e^{i\hat{X}^2}, \hat{P}]$ ,  
 (e)  $[e^{i\hat{X}}, \hat{P}^2]$ .

## 6.20 Komutující Hermitovské operátory ○

Uvažujte fyzikální systém, jehož Hamiltonián  $\hat{H}$  a operátor  $\hat{A}$  jsou dány v trojrozměrném prostoru maticemi

$$\hat{H} = \hbar\omega \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad \hat{A} = a \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

- (a) Jsou matice  $\hat{H}$  a  $\hat{A}$  hermitovské?  
 (b) Ukažte, že  $\hat{H}$  a  $\hat{A}$  komutují a najděte společný systém vlastních vektorů matic  $\hat{H}$  a  $\hat{A}$ .

## 6.21 Obecné relace neurčitosti

Obecný vztah pro relace neurčitosti dvou operátorů je dán vztahem

$$\Delta A \Delta B \geq \frac{1}{2} |[\hat{A}, \hat{B}]|.$$

- (a) Vyjádřete relace neurčitosti pro polohu a hybnost:  $\Delta x \Delta p_x$ ,  $\Delta y \Delta p_y$ ,  $\Delta z \Delta p_z$ .  
 (b) Vyjádřete relace neurčitosti pro polohu a hybnost:  $\Delta x \Delta p_y$ ,  $\Delta y \Delta p_z$ ,  $\Delta z \Delta p_x$ .

## 6.22 Operátor časového vývoje ●

Pokud Hamiltonián systému nezávisí explicitně na čase, platí

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle, \quad \text{kde} \quad \hat{U}(t, t_0) = e^{-i(t-t_0)\hat{H}/\hbar}.$$

Operátor  $\hat{U}(t, t_0)$  je tzv. operátor časového vývoje. Pokud známe počáteční stav systému  $|\psi(t_0)\rangle$  v čase  $t_0$ , pak pomocí operátoru časového vývoje získáme stav v libovolném čase  $t$ .

- (a) Ověřte, že operátor časového vývoje je unitární, tj. ověřte, že platí  $\hat{U}^\dagger = \hat{U}^{-1}$ .  
 (b) Uvažujte systém popsany Hamiltoniánem

$$\hat{H} = \varepsilon \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix},$$

najděte vlastní hodnoty a vlastní vektory Hamiltoniánu  $\hat{H}$ .

- (c) Předpokládejte, že stav systému se nachází v čase  $t_0 = 0$  ve stavu

$$|\psi(0)\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

S jakou pravděpodobností změříme energii systému?

- (d) Spočítejte maticovou reprezentaci operátoru časového vývoje  $\hat{U}(t, t_0)$ .  
 (e) Pomocí operátoru časového vývoje najděte stav systému  $|\psi(t)\rangle$ .

## 6.23 Časový vývoj stavu ○

Uvažujte systém, který je v čase  $t_0 = 0$  ve stavu

$$|\psi(0)\rangle = \frac{A}{\sqrt{12}} |1\rangle + \frac{1}{\sqrt{6}} |2\rangle + \frac{2}{\sqrt{12}} |3\rangle + \frac{1}{2} |4\rangle,$$

kde  $|1\rangle, |2\rangle, |3\rangle, |4\rangle$  tvoří úplnou a ortonormální bázi.

(a) Najděte konstantu  $A$ , aby byl stav  $|\psi(0)\rangle$  normován.

(b) Uvažujte, že energie odpovídající stavům  $|1\rangle, |2\rangle, |3\rangle, |4\rangle$  jsou  $E_1, E_2, E_3, E_4$ . Najděte stav  $|\psi(t)\rangle$  v pozdějším čase  $t$ .

(c) Určete pravděpodobnost, že v čase  $t$  se systém nachází ve stavu  $|2\rangle$ .

## 6.24 Bakerovo-Hausdorffovo lemma ☆

Heisenbergův obraz časového vývoje používá časově nezávislých stavů  $|\psi\rangle = |\psi(0)\rangle$  a časově závislých operátorů  $\hat{A}(t) = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\hat{A}e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}$ . Při jejich výpočtu lze často využít Bakerovo-Hausdorffovo lemma:

$$e^{\hat{B}}\hat{A}e^{-\hat{B}} = \hat{A} + [\hat{B}, \hat{A}] + \frac{1}{2!}[\hat{B}, [\hat{B}, \hat{A}]] + \frac{1}{3!}[\hat{B}, [\hat{B}, [\hat{B}, \hat{A}]]] + \dots$$

Dokažte jeho platnost.

Nápověda: Použijte Taylorův rozvoj operátoru  $\hat{\phi}(t) = e^{t\hat{B}}\hat{A}e^{-t\hat{B}}$  vzhledem k proměnné  $t$ .

## 6.25 Molekula $\text{NH}_3$ ●

Uvažujme zjednodušený popis molekuly  $\text{NH}_3$  jako dvojhladinový systém s ortonormální bází  $|1\rangle$  a  $|2\rangle$ . V této bázi jsou vyjádřeny následující fyzikální operátory:

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} E_0 & -T \\ -T & E_0 \end{pmatrix} \quad \text{a} \quad \hat{x} = \begin{pmatrix} a & 0 \\ 0 & -a \end{pmatrix},$$

kde  $E_0, T$  a  $a$  jsou reálné kladné konstanty.

(a) Najděte vlastní stavy a vlastní hodnoty operátoru  $\hat{x}$ .

(b) Najděte vlastní stavy a vlastní hodnoty operátoru  $\hat{H}$ .

(c) Najděte matici přechodu mezi bází  $|1\rangle, |2\rangle$  a bází vlastních stavů operátoru  $\hat{H}$ .

(d) Vyjádřete operátor  $\hat{x}$  v bázi vlastních stavů operátoru  $\hat{H}$ .

(e) Vyjádřete operátor časového vývoje  $\hat{U}$  v bázi vlastních stavů operátoru  $\hat{H}$ .

(f) Vyjádřete operátor časového vývoje  $\hat{U}$  v bázi vlastních stavů operátoru  $\hat{x}$ .

(g) V čase  $t = 0$  máme stav  $|\psi(t=0)\rangle = |1\rangle$ . S pomocí operátoru časového vývoje zapište stav  $|\psi(t)\rangle$  pro libovolný budoucí čas v bázi vlastních stavů operátoru  $\hat{H}$  i  $\hat{x}$ .

## 6.26 Dvoustavový systém 2 ○

Uvažujme o kvantovém systému se dvěma možnými stavy. Je popsán hamiltoniánem (pro jednoduchost položíme  $\hbar = 1$ )

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

(a) Najděte vlastní stavy a vlastní hodnoty  $\hat{H}$ .

(b) Explicitně vyjádřete operátor časového vývoje  $e^{-iHt}$ .

(c) Necht' jsou

$$|\psi(0)\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{a} \quad \hat{O} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix}$$

stavový vektor v čase  $t = 0$  a operátor příslušný pozorovatelné  $O$ . Najděte pravděpodobnost, že v čase  $t > 0$  naměříme hodnotu  $O = 2$ .

## 6.27 Dvoustavový systém 3 o

Kvantový systém se dvěma ortogonálními stavy  $|1\rangle$  a  $|2\rangle$  je popsán hamiltoniánem

$$\hat{H} = i|2\rangle\langle 1| - i|1\rangle\langle 2|.$$

V čase  $t = 0$  byla změřena hodnota  $-1$  pozorovatelné  $O$  příslušné operátoru

$$\hat{O} = 3|1\rangle\langle 1| - |2\rangle\langle 2|.$$

Najděte nejmenší čas  $t > 0$ , ve kterém nastane  $|\psi(t)\rangle = |1\rangle$ .

## 6.28 Měření částice v nekonečně hluboké jámě 1 o

Uvažujme o částici o hmotnosti  $m$  v nekonečně hluboké potenciálové jámě o šířce  $a$ . Vlastní vektory hamiltoniánu označme  $|1\rangle, |2\rangle, \dots$ . V čase  $t = 0$  je stav částice popsán stavovým vektorem  $|\psi(0)\rangle = a_1|1\rangle + a_2|2\rangle + a_3|3\rangle + a_4|4\rangle$ .

(a) Jaká je pravděpodobnost, že ve stavu  $|\psi(0)\rangle$  naměříme vyšší hodnotu energie než  $3\pi^2\hbar^2/ma^2$ ?  
(b) Jaká je střední hodnota energie a střední kvadratická odchylka od této střední hodnoty ve stavu  $|\psi(0)\rangle$ ?

(c) Určete stavový vektor  $|\psi(t)\rangle$  v čase  $t$ . Budou výsledky bodů (a) a (b) platit pro libovolný čas  $t$ ?

(d) Při měření energie byla získána hodnota  $8\pi^2\hbar^2/ma^2$ . V jakém stavu se po měření částice nachází? Jak by dopadlo opětovné měření energie?

## 6.29 Měření částice v nekonečně hluboké jámě 2 o ☆

Částice o hmotnosti  $m$  se pohybuje v jednorozměrné nekonečně hluboké potenciálové jámě vymezené intervalem  $x \in (0, a)$ . V čase  $t = 0$  se částice nachází ve stavu  $|\psi(0)\rangle$ , o kterém jsou známy následující skutečnosti:

(a) Výsledek jakéhokoli měření energie je menší  $3\pi^2\hbar^2/ma^2$ .

(b) Střední energie je rovna  $7\pi^2\hbar^2/8ma^2$ .

(c) Střední hodnota operátoru hybnosti  $\hat{p}$  je rovna  $4\hbar/3a$ .

Pokuste se co možná nejpresněji určit stav  $|\psi(0)\rangle$  a najděte střední hodnotu  $\hat{p}^4$  v čase  $t \geq 0$ .

## 6.30 Trojrozměrná vlnová funkce ☆

Uvažujme o částici popsané stavovým vektorem  $|\psi\rangle$ , kterému v souřadnicové reprezentaci odpovídá funkce  $\psi(x, y, z) = \psi(\mathbf{r})$ .

(a) Vyjádřete pravděpodobnost, že při měření veličiny  $x$  získáme hodnotu v intervalu  $(x_1, x_2)$ .

(b) Vyjádřete pravděpodobnost, že při měření veličiny  $p_x$  získáme hodnotu v intervalu  $(p_1, p_2)$ .

(c) Vyjádřete pravděpodobnost, že při současném měření veličin  $x$  a  $p_y$  získáme hodnotu  $x$  v intervalu  $(x_1, x_2)$  a hodnotu  $p_y$  v intervalu  $(p_1, p_2)$ .

Pomůcka: v části (a) a (b) použijte variantu postulátu IV odpovídající spojitému a degenerovanému spektru. Za úplný systém vlastních vektorů operátoru  $\hat{x}$  lze vzít  $\{|xyz\rangle\}$ ,  $x \in (-\infty, \infty)$ ,  $y \in (-\infty, \infty)$ ,  $z \in (-\infty, \infty)$ . Za úplný systém vlastních vektorů operátoru  $\hat{p}_x$   $\{|p_x y z\rangle\}$ ,  $p_x \in (-\infty, \infty)$ ,  $y \in (-\infty, \infty)$ ,  $z \in (-\infty, \infty)$ . K části (c): vzhledem k tomu, že operátory  $\hat{x}$  a  $\hat{p}_y$  komutují, lze uvažovat o jedné kombinované veličině, o jednom měřicím přístroji, a lze použít přirozené rozšíření postulátu IV, kde vystupuje soubor vlastních vektorů  $\{|xp_y z\rangle\}$  kombinované veličiny.

## 6.31 Operátor souřadnice

Uvažujme o Hilbertově prostoru odpovídajícím částici v jednorozměrném prostoru. Vyjádřete operátor souřadnice  $\hat{x}$  v hybnostní reprezentaci, určete jeho vlastní hodnoty a vlastní funkce.

### 6.32 Operátor hybnosti ○

Ukažte, že operátor  $\hat{p}_x$  je hermiteovský.

- (a) S využitím hybnostní reprezentace.
- (b) S využitím souřadnicové reprezentace.

### 6.33 Gaussovský balík v pohybu ○

Volná částice o hmotnosti  $m$  pohybující se v jednorozměrném prostoru je v hybnostní reprezentaci popsána vlnovou funkcí

$$\varphi(p, t=0) = A \exp \left[ -\frac{(p-p_0)^2}{4\sigma_p^2} \right]$$

- (a) Určete normovací konstantu  $A$ .
- (b) Vypočtete vlnovou funkci  $\psi(x, t)$  v prostorové reprezentaci a přesvědčte se, že pohyb středu balíku odpovídá pohybu klasické částice s hybností  $p_0$ . Vyšetřete prostorové rozšiřování balíku s časem a interpretnujte nalezenou závislost na  $\sigma_p$ .

### 6.34 Hybnostní spektrum stavů v jámě ○

Pomocí převodního vztahu

$$\varphi(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x) e^{-\frac{i}{\hbar}px} dx$$

najděte hybnostní spektrum  $\varphi(p)$   $n$ -tého stacionárního stavu částice o hmotnosti  $m$  nacházející se v nekonečně hluboké jámě vymezené  $x = -L/2$  a  $x = +L/2$ .

### 6.35 Neurčitost hybnosti v jámě ☆

Částice o hmotnosti  $m$  se nachází v základním stavu v nekonečně hluboké jámě vymezené  $x = -a$  a  $x = +a$ . Najděte její hybnostní spektrum  $\varphi(p)$  a vypočtete s jeho pomocí střední hodnotu kvadrátu hybnosti  $\langle p^2 \rangle = \int p^2 |\varphi(p)|^2 dp$ . Kontrolu proveďte srovnáním s energií základního stavu, která je rovna  $E = \langle p^2 \rangle / 2m$ .

### 6.36 Částice v homogenním poli ☆

Částice s hmotností  $m$  se pohybuje v jednorozměrném potenciálu  $U(x) = -\alpha x$  ( $\alpha > 0$ ).

- (a) Určete časový vývoj veličiny  $\Delta p = \sqrt{\langle \hat{p}^2 \rangle - \langle \hat{p} \rangle^2}$ , kde  $\hat{p}$  je operátor hybnosti.
- (b) Najděte časově závislou vlnovou funkci  $\psi(x, t)$ , víte-li, že  $\psi(x, 0) = e^{ip_0x/\hbar - i\phi_0}$ , kde  $p_0$  a  $\phi_0$  jsou konstanty.

## 7 Harmonický oscilátor

### 7.1 Vlnové funkce harmonického oscilátoru

Vyřešte stacionární Schrödingerovu rovnici pro harmonický oscilátor s potenciálem  $V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2x^2$ . Nejprve zaveďte bezrozměrné proměnné  $X = x\sqrt{m\omega/\hbar}$  a  $\varepsilon = 2E/\hbar\omega$ . Řešení získané diferenciální rovnice pro  $\Psi(X)$  jsou tvaru: (polynom v  $X$ )  $\times e^{-aX^2}$ . Určete konstantu  $a$  a polynomy, které odpovídají základnímu stavu a několika nejnižším excitovaným stavům. Najděte rovněž spektrum vlastních energií. Výsledky porovnejte s výsledky algebraického postupu.

## 7.2 Komutátory pro harmonický oscilátor •

Mějme Hamiltonián harmonického oscilátoru  $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2$ . S využitím vlastností komutátoru odvozených v příkladu 6.15 spočítejte komutátory  $[\hat{x}, \hat{H}]$  a  $[\hat{p}, \hat{H}]$

- (a) s pomocí elementárního komutátoru  $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$ .
- (b) v x-representaci.
- (c) v p-representaci.

## 7.3 Odhad energie základního stavu harmonického oscilátoru •

S pomocí relace neurčitosti odhadněte energii základního stavu harmonického oscilátoru, který se řídí stacionární Schrödingerovou rovnicí

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \psi = E\psi.$$

## 7.4 Maticové elementy HO •

Uvažujte o jednorozměrném harmonickém oscilátoru s frekvencí  $\omega$  a hmotností  $m$ . Reprezentujte operátor polohy  $\hat{x}$  pomocí kreačních a anihilačních operátorů a vypočítejte maticové elementy  $(\hat{x}^2)_{0,0}$ ,  $(\hat{x}^2)_{1,1}$ ,  $(\hat{x}^2)_{2,2}$ ,  $(\hat{x}^2)_{0,2}$ ,  $(\hat{x}^2)_{10,5}$ . Maticový element  $(\hat{x}^2)_{m,n} = \langle m|\hat{x}^2|n\rangle$  je vyjádřen v bázi vlastních stavů oscilátoru, energie stavu  $|n\rangle$  je  $E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega$ .

## 7.5 Časový vývoj harmonického oscilátoru ○

Harmonický oscilátor má frekvenci  $\omega$  a je řízen hamiltoniánem

$$\hat{H} = \left(\hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2}\hat{1}\right) \hbar\omega = \left(\hat{n} + \frac{1}{2}\hat{1}\right) \hbar\omega.$$

Označme jako  $|n\rangle$  vlastní stav příslušný energii  $E = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega$ . V čase  $t = 0$  se oscilátor nachází ve stavu

$$|\psi(0)\rangle = \frac{|2\rangle + |3\rangle}{\sqrt{2}}.$$

Najděte střední hodnoty energie, polohy a hybnosti v čase  $t > 0$ .

## 7.6 Měření energie částice v harmonickém potenciálu ○

Stav částice pohybující se v jednorozměrném harmonickém potenciálu je dán stavovým vektorem

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{17}}|0\rangle + \frac{3}{\sqrt{17}}|1\rangle - \frac{2}{\sqrt{17}}|2\rangle - \sqrt{\frac{3}{17}}|3\rangle,$$

kde  $|n\rangle$  jsou normalizované  $n$ -té vlastní stavy harmonického oscilátoru.

- (a) Jaké jsou možné výsledky měření energie? Jaké jsou odpovídající pravděpodobnosti měření?
- (b) Spočítejte střední hodnotu operátoru  $\hat{N}$  a také střední hodnotu Hamiltoniánu  $\hat{H}$ .

## 7.7 Relace neurčitosti pro harmonický oscilátor ○

Částice s hmotností  $m$  se pohybuje v jednorozměrném harmonickém potenciálu. Spočítejte produkt neurčitosti polohy a hybnosti částice obecně v  $n$ -tém stavu, tj.  $(\Delta x \Delta p)_n$ . Nápoděda: Pro výpočet středních hodnot operátorů polohy a hybnosti použijte jejich vyjádření pomocí kreačních a anihilačních operátorů. Splňuje výsledek relace neurčitosti?

## 7.8 Harmonický oscilátor s vnějším polem ☆

Uvažujte částici s hmotností  $m$  a nábojem  $q$ , která se pohybuje v jednorozměrném harmonickém potenciálu. Navíc na částici působí vnější konstantní elektrické pole ve směru kladné osy  $x$  s velikostí  $E$ . Hamiltonián částice je dán vztahem

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\hat{P}^2 + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{X}^2 - qE\hat{X}.$$

Najděte vlastní energie a vlastní funkce systému. Nápoděda: Použijte substituci  $\hat{y} = \hat{X} - \frac{qE}{m\omega^2}$ . Nový Hamiltonián má pak stejnou strukturu jako Hamiltonián částice bez vnějšího pole a energie a vlnové funkce se pak dají odvodit triviálně.

## 7.9 Dvourozměrný harmonický oscilátor

Částice o hmotnosti  $m$  se pohybuje v dvourozměrném harmonickém potenciálu

$$V(x, y) = \frac{m\omega^2}{2}(x^2 + y^2).$$

Najděte vlnové funkce a energie základního stavu a pěti nejnižších excitovaných stavů. Vyjádřete nalezené vlnové funkce v kartézských i polárních souřadnicích.

## 7.10 Trojrozměrný harmonický oscilátor o

Uvažujme o částici v trojrozměrném prostoru v potenciálovém poli  $\frac{1}{2}m\omega^2\mathbf{r}^2$ . Hamiltonián má tvar

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2 + \frac{\hat{p}_y^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{y}^2 + \frac{\hat{p}_z^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{z}^2 = \hat{H}_x + \hat{H}_y + \hat{H}_z,$$

kde

$$\hat{H}_{x/y/z} = \frac{\hat{p}_{x/y/z}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2/\hat{y}^2/\hat{z}^2.$$

S využitím metody separace proměnných (můžete provést na abstraktní úrovni nebo na úrovni souřadnicové reprezentace) naleznete vlastní hodnoty a vlastní vektory  $\hat{H}$ .

## 7.11 Ehrenfestův teorém o

Uvažujte nabitou částici s nábojem  $q$  v harmonickém potenciálu pod vlivem oscilujícího elektrického pole  $E = E_0 \cos(\omega t)$ . Hamiltonián systému je

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\hat{P}^2 + \frac{k}{2}\hat{X}^2 + qE_0\hat{X} \cos \omega t.$$

Využitím Ehrenfestova teorému spočítejte:

(a)  $\frac{d\langle\hat{X}\rangle}{dt}, \frac{d\langle\hat{P}\rangle}{dt}, \frac{d\langle\hat{H}\rangle}{dt}.$

(b) Vyřešte rovnici pro  $\frac{d\langle\hat{X}\rangle}{dt}$  a spočítejte  $\langle\hat{X}\rangle(t)$  s počáteční podmínkou  $\langle\hat{X}\rangle(0) = x_0$ .

## 7.12 Gaussovský balík v harmonickém potenciálu

Částice o hmotnosti  $m$  se pohybuje v harmonickém potenciálu  $V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$ . V čase  $t = 0$  je vlnová funkce částice dána vztahem

$$\psi(x, 0) = \frac{1}{(\pi\sigma^2)^{1/4}} \exp\left(-\frac{x^2}{2\sigma^2}\right).$$

Parametr  $\sigma$  nijak nesouvisí s parametry oscilátoru. Jaká je pravděpodobnost, že v čase  $t = 0$  naměříme energii  $E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$ ?

## 7.13 Polámané pero

Kvantová částice se nachází v základním stavu harmonického oscilátoru řízeného hamiltoniánem

$$\hat{H}_1 = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega_0^2 \hat{x}^2.$$

V jistém okamžiku se oscilátoru poláme pero takovým způsobem, že nová frekvence oscilátoru je  $\eta\omega_0$ . Stanovte pravděpodobnost, že částici spatříme v základním stavu nového hamiltoniánu

$$\hat{H}_2 = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m(\eta\omega_0)^2 \hat{x}^2.$$

## 7.14 Spřažené oscilátory ☆

Dva identické jednorozměrné harmonické oscilátory (hmotnost každého je  $m$ , frekvence  $\omega$ ) jsou spřaženy vazbou  $Cx_1x_2$ , kde  $x_1$  a  $x_2$  jsou souřadnice jednotlivých oscilátorů. Najděte vlastní energie systému. Určete střední hodnotu  $\langle(\Delta x_1)^2\rangle = \langle(\Delta x_2)^2\rangle$  v základním stavu.

## 7.15 Koherentní stavy ☆

Uvažujme o jednorozměrném harmonickém oscilátoru s frekvencí  $\omega$ . Nechť  $\hat{a}$  a  $\hat{a}^\dagger$  jsou anihilační a kreační operátory a  $|n\rangle$  je vlastní stav operátoru  $\hat{a}^\dagger\hat{a}$  příslušný vlastní hodnotě  $n$ . Na rozvičení nejprve vypočítejte komutátor  $[\hat{a}, (\hat{a}^\dagger)^n]$ . Koherentní stav je definován vztahem  $|\alpha\rangle \propto e^{\alpha\hat{a}^\dagger}|0\rangle$ , kde  $\alpha$  je komplexní parametr.

- (a) Zapište stav  $|\alpha\rangle$  jako superpozici stavů  $|n\rangle$ ,  $n = 0, 1, 2, \dots$  a určete normovací konstantu.
- (b) Ukažte, že  $|\alpha\rangle$  je vlastní stav anihilačního operátoru  $\hat{a}$  a najděte příslušnou vlastní hodnotu.
- (c) Stanovte střední hodnotu operátoru polohy  $\hat{x}$ .
- (d) Předpokládejme, že oscilátor se v čase  $t = 0$  nachází v koherentním stavu  $|\alpha\rangle$ , kde  $\alpha$  je nyní reálné. Stanovte střední hodnotu operátoru polohy  $\hat{x}$  v čase  $t \geq 0$ .

# 8 Moment hybnosti a úlohy s centrálním potenciálem

## 8.1 Komutační relace operátoru momentu hybnosti ●

Stanovte komutační relace mezi složkami  $\hat{L}_x$ ,  $\hat{L}_y$  a  $\hat{L}_z$  operátoru momentu hybnosti  $\hat{\mathbf{L}} = \hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}}$  vyjádřeného v kartézských souřadnicích. Postupujte jednak s využitím explicitního vyjádření  $\hat{p}_\alpha = -i\hbar\partial/\partial x_\alpha$ , jednak s využitím elementárních komutátorů  $[\hat{x}_\alpha, \hat{p}_\beta] = i\hbar\delta_{\alpha\beta}$ . Dále najděte komutační relace  $\hat{L}^2$  a jednotlivých složek momentu hybnosti.

## 8.2 Souřadnicová reprezentace momentu hybnosti ○

Orbitální moment hybnosti můžeme vyjádřit ve sférických souřadnicích jako

$$\hat{L} = \hat{r} \times \hat{p} = i\hbar \left( \hat{\phi} \frac{\partial}{\partial \theta} - \frac{\hat{\theta}}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \right)$$

kde  $\hat{\phi}, \hat{\theta}$  jsou jednotkové vektory sférické báze.

- (a) Najděte komponenty operátoru momentu hybnosti  $\hat{L}_x$ ,  $\hat{L}_y$  a  $\hat{L}_z$  ve sférických souřadnicích.
- (b) Také najděte výrazy pro žebříčkové operátory  $\hat{L}_{\pm} = \hat{L}_x \pm i\hat{L}_y$ .
- (c) Najděte výraz pro operátor  $\hat{L}^2$ .

## 8.3 Sférické harmonické funkce 1 ○

- (a) S využitím definice sférických harmonických funkcí (k nalezení v bestiáři vlnových funkcí) najděte tvar sférické harmonické funkce  $Y_{20}(\theta, \varphi)$ .
- (b) S využitím výsledku předchozího bodu a vyjádření operátoru  $\hat{L}_+$  ve sférických souřadnicích nalezněte tvar sférické harmonické funkce  $Y_{21}(\theta, \varphi)$ .
- (c) Ověřte ortogonalitu sférických harmonických funkcí  $Y_{10}(\theta, \varphi)$ ,  $Y_{20}(\theta, \varphi)$  a  $Y_{00}(\theta, \varphi)$ .

## 8.4 Sférické harmonické funkce 2 ●

Uvažujte vlnovou funkci

$$\psi(\theta, \varphi) = 3 \sin \theta \cos \theta e^{i\varphi} - 2(1 - \cos^2 \theta) e^{2i\varphi}$$

- (a) Vyjádřete vlnovou funkci  $\psi(\theta, \varphi)$  pomocí sférických harmonických funkcí.
- (b) Je  $\psi(\theta, \varphi)$  vlastní funkcí operátoru  $\hat{L}^2$  nebo  $\hat{L}_z$ ?
- (c) Najděte pravděpodobnost měření hodnoty  $2\hbar$  pro  $z$ -ovou komponentu momentu hybnosti.

## 8.5 Sférické harmonické funkce 3 ○

Najděte výraz pro sférické harmonické funkce  $Y_{30}$  a  $Y_{3,\pm 1}$  v kartézských souřadnicích.

## 8.6 Sférické harmonické funkce 4 ●

Uvažujte systém, který je popsán vlnovou funkcí

$$\psi(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{3}{8}} Y_{11}(\theta, \varphi) + \sqrt{\frac{1}{8}} Y_{10}(\theta, \varphi) + A Y_{1,-1}(\theta, \varphi),$$

- (a) Najděte konstantu  $A$  tak, aby vlnová funkce byla normovaná.
- (b) Spočítejte  $\hat{L}_+ \psi(\theta, \varphi)$ .
- (c) Spočítejte střední hodnotu operátorů  $\hat{L}_x$  a  $\hat{L}^2$  ve stavu  $\psi(\theta, \varphi)$ .
- (d) Najděte pravděpodobnost, že při měření složky momentu hybnosti naměříte nulovou hodnotu.
- (e) Spočítejte  $\langle \Phi | \hat{L}_z | \psi \rangle$  a  $\langle \Phi | \hat{L}_- | \psi \rangle$ , kde

$$|\Phi\rangle = \sqrt{\frac{8}{15}} Y_{11}(\theta, \varphi) + \sqrt{\frac{4}{15}} Y_{10}(\theta, \varphi) + \sqrt{\frac{3}{15}} Y_{2,-1}(\theta, \varphi).$$

## 8.7 Sférické harmonické funkce 5 ○

Uvažujte částici, která je popsána vlnovou funkcí

$$\psi(x, y, z) = A \frac{(x+z)y + z^2}{r^2} - \frac{A}{3}.$$

- (a) Najděte konstantu  $A$  tak, aby vlnová funkce byla normovaná.
- (b) Je  $\psi$  vlastní funkcí operátoru  $\hat{L}^2$ ? Pokud ano, jaká je odpovídající vlastní hodnota? Je tato vlnová funkce také vlastní funkcí operátoru  $\hat{L}_z$ ?
- (c) Spočítejte střední hodnotu operátorů  $\hat{L}_z$  a  $\hat{L}^2$ .
- (d) Spočítejte  $\hat{L}_\pm |\psi\rangle$  a také  $\langle\psi|\hat{L}_\pm|\psi\rangle$ .
- (e) Najděte všechny možné výsledky měření operátorů  $\hat{L}^2$  a  $\hat{L}_z$  a také pravděpodobnosti těchto výsledků. .

## 8.8 Maticová reprezentace momentu hybnosti ○

Uvažujte systém s celkovým momentem hybnosti  $j = 1$ .

- (a) Najděte matice reprezentující operátory  $\hat{J}_x$ ,  $\hat{J}_y$ ,  $\hat{J}_z$ .
- (b) Jaké jsou možné hodnoty měření  $x$ -ové složky momentu hybnosti?
- (c) Spočítejte střední hodnoty operátorů  $\hat{J}_z$ ,  $\hat{J}_z^2$  a také neurčitost  $\Delta J_z$ , pokud se systém nachází ve stavu s vlastní hodnotou  $x$ -ové složky momentu hybnosti  $-\hbar$ .
- (d) Opakujte úlohu (c) pro  $\hat{J}_y$ ,  $\hat{J}_y^2$  a  $\Delta J_y$ .
- (e) Pokud je počáteční stav systému dán stavovým vektorem

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{14}} \begin{pmatrix} -\sqrt{3} \\ 2\sqrt{2} \\ \sqrt{3} \end{pmatrix},$$

jaké hodnoty měření dostaneme, pokud měříme  $x$ -ovou složku momentu hybnosti, a s jakými pravděpodobnostmi?

## 8.9 Měření momentu hybnosti 1 ○

Systém se nachází ve stavu, který je popsán vlnovou funkcí

$$|\psi\rangle = \frac{1}{2}|0,0\rangle + \frac{1}{\sqrt{3}}|1,1\rangle + \frac{1}{2}|1,-1\rangle + \frac{1}{\sqrt{6}}|2,2\rangle.$$

- (a) Je vlnová funkce normalizovaná?
- (b) Je  $|\psi\rangle$  vlastní stav operátoru  $\hat{L}^2$  nebo  $\hat{L}_z$ ?
- (c) Spočítejte  $\hat{L}_\pm |\psi\rangle$  a  $\langle\psi|\hat{L}_\pm|\psi\rangle$ .
- (d) Pokud vykonáme měření  $z$ -ové složky momentu hybnosti, jaké jsou možné výsledky měření a s jakými pravděpodobnostmi?
- (e) Předpokládejme, že při měření  $z$ -ové složky momentu hybnosti jsme dostali hodnotu  $\hbar$ . Ihned poté měříme  $x$ -ovou složku momentu hybnosti. Jaké jsou možné výsledky měření a s jakými pravděpodobnostmi?

## 8.10 Měření momentu hybnosti 2 ○

Částice se nachází ve stavu popsáném vlnovou funkcí

- (a)  $\psi_1(r, \vartheta, \varphi) = (z+a)f(r)$
- (b)  $\psi_2(r, \vartheta, \varphi) = (x^2 + y^2)f(r)$

(c)  $\psi_3(r, \vartheta, \varphi) = (x^2 - y^2)f(r)$

Pro každou z těchto vlnových funkcí najděte možné výsledky měření  $L^2$  a  $L_z$ . V případě funkce  $\psi_2$  najděte i pravděpodobnosti změření jednotlivých možných hodnot  $L^2$ .

Pozn.: Povzneste se nad jistou umělost zadaných vlnových funkcí. V reálném případě (např. v problému s centrálním potenciálem) se přinejmenším kvantové číslo  $l$  projeví v efektivním potenciálu pro radiální část vlnové funkce a příspěvky do vlnové funkce vyznačující se různým kvantovým číslem  $l$  by tak nesdílely radiální část, jako je tomu v zadání.

### 8.11 Měření momentu hybnosti 3 ○

Částice se nachází ve stavu, který je současně vlastním stavem  $\hat{L}^2$  s příslušným kvantovým číslem  $l$  a vlastním stavem  $\hat{L}_z$  s příslušným kvantovým číslem  $m$ .

(a) Vypočtete střední hodnotu  $\hat{L}_x^2$ .

(b) Ověřte předcházející výsledek výpočtem pravděpodobností jednotlivých vlastních stavů  $\hat{L}_x$  pro případ  $l = 1, m = 1$ .

### 8.12 Měření momentu hybnosti 4 ○

V čase  $t = 0$  je kvantový stav  $|\psi(0)\rangle$  jisté částice vlastním stavem  $\hat{L}^2$  a  $\hat{L}_z$  s vlastními hodnotami  $2\hbar^2$  a  $0$ . Najděte časový vývoj stavu  $|\psi(0)\rangle$ , je-li řízen hamiltoniánem  $\hat{H} = A\hat{L}_x$ . Měření  $L_x$  poskytlo hodnotu  $-\hbar$ . Určete, v jakých časových okamžicích  $t > 0$  byl tento výsledek měření nejpravděpodobnější.

### 8.13 Relace neurčitosti pro složky momentu hybnosti

Uvažujte systém v obecném stavu  $j, m$ .

(a) Spočtete střední hodnoty operátorů  $\hat{J}_x, \hat{J}_y, \hat{J}_x^2, \hat{J}_y^2$ .

(b) Spočtete relace neurčitosti  $\Delta J_x \Delta J_y$  a ukažte, že platí

$$\Delta J_x \Delta J_y \geq \frac{\hbar}{2} |\langle \hat{J}_z \rangle|.$$

### 8.14 Moment hybnosti jako integrál pohybu

Uvažujme o částici v trojrozměrném prostoru v centrálním poli. Hamiltonián má tvar

$$H = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + V(|\hat{\mathbf{r}}|).$$

Ukažte, že časová derivace střední hodnoty každé ze složek momentu hybnosti je rovna nule, tj. moment hybnosti je integrálem pohybu.

### 8.15 Tuhý rotátor ○

Uvažujte volnou částici s hmotností  $m$ , která se může pohybovat pouze po sférické ploše s poloměrem  $R$ . Najděte možné vlastní stavy energie a odpovídající vlastní funkce. Náповěda: Částice je volná, tj. potenciální energie je nulová,  $V = 0$ . Hamiltonián částice bude tedy dán pouze kinetickou energií, kterou vyjádřete pomocí operátoru momentu hybnosti.

### 8.16 Nekonečně hluboká sférická jáma ○

Najděte vlnové funkce vlastních stavů a vlastní energie částice o hmotnosti  $m$  nacházející se v nekonečně hluboké potenciálové jámě vymezené koulí o poloměru  $R$ . Pro jednoduchost se omezte na stavy s nulovým momentem hybnosti.

## 8.17 Konečně hluboká sférická jáma ☆

Najděte vlnové funkce vázaných stavů a vlastní energie částice o hmotnosti  $m$ , která se pohybuje v potenciálu konečně hluboké jámy dané

$$V(r) = \begin{cases} -V_0 & r < R, \\ 0 & r > R. \end{cases}$$

Omezte se pouze na stavy s  $l = 0$  a  $l = 1$ . Jaká je podmínka existence vázaného stavu v jámě?

## 8.18 Sféricky symetrický potenciál ○

Najděte řešení Schrödingerovy rovnice pro sféricky symetrický potenciál, tj.  $V(\vec{r}) = V(r)$ , kde  $r$  značí velikost polohového vektoru  $\vec{r}$ . Takový potenciál nezávisí na směru, ale pouze na vzdálenosti částice od referenčního bodu. Potenciály s touto vlastností se nazývají centrální potenciály, např. elektrostatická interakce mezi dvěma nabitými částicemi.

(a) Napište časově nezávislou Schrödingerovu rovnici pro částici s hmotností  $m$ , která se nachází ve sféricky symetrickém potenciálu  $V(r)$ . Kvůli sférické symetrii je vhodné vyjádřit Laplaceův operátor ve sférických souřadnicích a pomocí operátoru momentu hybnosti. Jaký fyzikální význam mají jednotlivé členy Hamiltoniánu?

(b) Spočítejte komutátory  $[\hat{H}, \hat{L}^2]$  a  $[\hat{H}, \hat{L}_z]$ . Co lze z výsledku usoudit?

(c) Využitím výsledku (b) a struktury  $\hat{H}$  můžeme vhodné vlnové funkce hledat ve tvaru

$$\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi),$$

kde  $R_{nl}(r)$  značí radiální část vlnové funkce. Najděte Schrödingerovu rovnici pro radiální část vlnové funkce.

## 8.19 Volná částice ve sférických souřadnicích ☆

Uvažujte volnou částici s hmotností  $m$ , jejíž Hamiltonián je

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2.$$

Energie můžeme psát ve tvaru

$$E_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m},$$

kde  $k$  je velikost vlnového vektoru,  $k = |\vec{k}|$ .

(a) Ukažte, že tento Hamiltonián komutuje s  $\hat{L}^2$  a  $\hat{L}_z$ .

(b) Hamiltonián volné částice je rotačně invariantní. Můžeme jej chápat jako speciální případ sféricky symetrického potenciálu s  $V(r) = 0$ . V úloze 8.18 jsme ukázali, že vlnové funkce můžeme napsat jako produkt radiální a sférické části

$$\psi_{klm}(r, \theta, \varphi) = R_{kl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi).$$

Napište Schrödingerovu rovnici pro radiální část vlnové funkce a najděte její řešení.

(c) Ukažte, jak výsledné řešení souvisí s řešením v kartézských souřadnicích.

## 8.20 Atom vodíku ○

Atom vodíku se skládá z jednoho elektronu a protonu, které na sebe působí elektrostaticky. Pro jednoduchost budeme prozatím ignorovat jejich spin. Vlnová funkce systému více částic obecně závisí na souřadnicích elektronu  $\vec{r}_e$  a protonu  $\vec{r}_p$ , tj.  $\Psi(\vec{r}_e, \vec{r}_p, t)$ .

(a) Zapište časově závislou Schrödingerovu rovnici pro tento systém.

(b) Protože potenciál nezávisí explicitně na čase, můžeme předpokládat řešení ve tvaru

$$\Psi(\vec{r}_e, \vec{r}_p, t) = \chi(\vec{r}_e, \vec{r}_p) e^{-iEt/\hbar},$$

kde  $E$  představuje celkovou energii systému elektron–proton. Najděte časově nezávislou Schrödingerovu rovnici.

(c) Protože potenciál závisí pouze na vzdálenosti mezi elektronem a protonem  $r$ , je vhodné přejít od souřadnic  $\vec{r}_e, \vec{r}_p$  k relativním souřadnicím  $\vec{r}$  a souřadnicím těžiště systému  $\vec{R}$ , kde

$$\vec{r} = \vec{r}_e - \vec{r}_p, \quad \vec{R} = \frac{m_e \vec{r}_e + m_p \vec{r}_p}{m_e + m_p}.$$

Transformujte časově nezávislou Schrödingerovu rovnici do nových souřadnic.

(d) Pomocí výsledku z úlohy (c) můžeme hledat řešení rovnice ve tvaru

$$\Psi(\vec{r}, \vec{R}) = \psi(\vec{r}) \phi(\vec{R}).$$

Dosaďte toto řešení do Schrödingerovy rovnice z úlohy (c) a ukažte, že se rozpadne na dvě nezávislé rovnice – jednu pro proměnnou  $\vec{R}$  a druhou pro  $\vec{r}$ . Jaká je fyzikální interpretace těchto rovnic?

## 8.21 Vlastní stavy atomu vodíku ○

Řešením Schrödingerovy rovnice pro atom vodíku z úlohy 8.20 jsme zjistili, že řešení se rozpadá na dvě rovnice: Schrödingerovu rovnici pro pohyb těžiště, které se pohybuje jako volná částice popsaná vlnovou funkcí  $\phi(\vec{R})$ , a Schrödingerovu rovnici pro fiktivní částici s hmotností  $\mu$  (redukováná hmotnost, se kterou jsme se již setkali v Bohrově modelu) v potenciálu  $\sim 1/r$ , popsanou vlnovou funkcí  $\psi(\vec{r})$ . Když hovoříme o vlnových funkcích atomu vodíku, vždy se implicitně myslí  $\psi(\vec{r})$ , nikoli celková vlnová funkce  $\psi(\vec{r})\phi(\vec{R})$ . Řešením rovnice pro fiktivní částici s hmotností  $\mu$  jsou vlnové funkce

$$\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi).$$

V Diracově zápisu se jedná o stavy  $|nlm\rangle$ , přičemž souřadnicová reprezentace vlastních stavů je

$$\langle \vec{r} | nlm \rangle = \psi_{nlm}(r, \theta, \varphi).$$

Pomocí definice najděte vlnové funkce  $\psi_{100}$ ,  $\psi_{110}$ ,  $\psi_{11,\pm 1}$  a  $\psi_{21,\pm 1}$ .

## 8.22 Reálné atomové orbitaly ○

Řešením Schrödingerovy rovnice pro atom vodíku jsme se dopracovali k vlastním stavům  $\psi_{nlm}$ . Tyto vlnové funkce jsou obecně komplexní funkce reálných proměnných  $r, \theta, \varphi$ . Místo komplexních atomových orbitalů  $\psi_{nlm}$  se v kvantové chemii nebo ve fyzice pevných látek používají reálné atomové orbitaly. Reálné atomové orbitaly se konstruují z komplexních vhodnou superpozicí. Reálné atomové orbitaly mohou být dány vztahem

$$\psi_{nlm}^{\text{real}}(r, \theta, \phi) = \begin{cases} \sqrt{2}(-1)^m \text{Im}(\psi_{nl,|m|}), & m < 0, \\ \psi_{nl,|m|}, & m = 0, \\ \sqrt{2}(-1)^m \text{Re}(\psi_{nl,|m|}), & m > 0. \end{cases}$$

Najděte výrazy pro reálné atomové orbitály  $\psi_{100}^{\text{real}}, \psi_{210}^{\text{real}}, \psi_{21,\pm 1}^{\text{real}}, \psi_{300}^{\text{real}}, \psi_{310}^{\text{real}}, \psi_{31,\pm 1}^{\text{real}}, \psi_{320}^{\text{real}}, \psi_{32,\pm 1}^{\text{real}}, \psi_{32,\pm 2}^{\text{real}}$ . Poznámka: Odsud pochází značení vlnových funkcí  $1s, 2s, 2p_x$  apod. Například  $\psi_{100}^{\text{real}} = 1s$ ,  $\psi_{21,+1}^{\text{real}} = 2p_x$  atd. Důvod značení by měl být zřejmý z výsledku úlohy.

## 8.23 Charakteristiky vlastních stavů atomu vodíku •

(a) Vypočtěte nejpravděpodobnější vzdálenost od jádra  $r_0$ , střední vzdálenost od jádra  $\langle r \rangle$  a střední kvadratickou vzdálenost od jádra  $\sqrt{\langle r^2 \rangle}$  pro následující stavy atomu vodíku

$$\psi_{1s} = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} e^{-r/a}, \quad \psi_{2s} = \frac{1}{\sqrt{8\pi a^3}} \left(1 - \frac{r}{2a}\right) e^{-r/2a}, \quad \psi_{2p_z} = \frac{1}{\sqrt{8\pi a^3}} \frac{r}{2a} e^{-r/2a} \cos \vartheta.$$

Zde  $a$  značí Bohrovův poloměr.

(b) Dále najděte úhel  $\Theta$  takový, že elektron v  $2p_z$  stavu se nachází s pravděpodobností  $1/2$  v oblasti vymezené  $\min(\vartheta, \pi - \vartheta) \leq \Theta$ .

## 8.24 Odhad energie základního stavu atomu vodíku

S využitím relací neurčitosti odhadněte poloměr atomu vodíku a energii základního stavu. Odhad proveďte minimalizací střední hodnoty energie. Použijte aproximaci  $\langle 1/r \rangle \approx 1/\sqrt{\langle r^2 \rangle}$ .

## 8.25 Atom vodíku v hybnostní reprezentaci ☆

Vypočtěte vlnovou funkci stavů  $1s$  a  $2s$  atomu vodíku v hybnostní reprezentaci. Vlnové funkce těchto stavů v obvyklé souřadnicové reprezentaci jsou

$$\psi_{1s} = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} e^{-r/a}, \quad \psi_{2s} = \frac{1}{\sqrt{8\pi a^3}} \left(1 - \frac{r}{2a}\right) e^{-r/2a},$$

kde  $a$  je Bohrovův poloměr.

## 8.26 Elektron ve stavu $2p$ atomu vodíku ○

Elektron v atomu vodíku se nachází ve vlastním stavu daném vlnovou funkcí

$$\psi_{2,1,-1}(r, \theta, \varphi) = N r e^{-r/(2a_0)} Y_{1,-1}(\theta, \varphi).$$

(a) Najděte normalizační konstantu  $N$ .

(b) Jaká je pravděpodobnost na jednotkový objem, že se elektron nachází v  $r = a_0$ ,  $\theta = 45^\circ$ ,  $\varphi = 60^\circ$ ?

(c) Jaká je pravděpodobnost nalezení elektronu na jednotkové radální délce  $dr$  při  $r = 2a_0$ ? Nápověda: je potřeba integrovat přes  $\theta$  a  $\varphi$  při  $r = 2a_0$ .

(d) Jaké jsou možné výsledky měření kvadrátu momentu hybnosti a  $z$ -ové složky momentu hybnosti elektronu?

## 8.27 Elektron v superpozici stavů atomu vodíku •

Uvažujte elektron v atomu vodíku, jehož stav v čase  $t = 0$  je dán vlnovou funkcí

$$\psi(\vec{r}, 0) = \frac{A}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2} e^{-r/a_0} + \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left(\frac{z - \sqrt{2}x}{r}\right) R_{21}(r).$$

(a) Napište vlnovou funkci  $\psi(\vec{r}, 0)$  jako superpozici vlastních stavů  $\psi_{nlm}$ .

(b) Najděte konstantu  $A$ , tak aby vlnová funkce byla normalizovaná.

- (c) Jaké jsou možné výsledky měření energie a s jakými pravděpodobnostmi?  
 (d) Jaká je pravděpodobnost, že při měření  $z$ -ové složky momentu hybnosti dostaneme hodnotu  $+\hbar$ ?  
 (e) Najděte vlnovou funkci v pozdějším čase  $\psi(\vec{r}, t)$ .

## 8.28 Dipólový moment spojený s přechody v atomu vodíku •

Určete dipólový moment spojený s přechody mezi dvojicemi stavů  $1s-2s$  a  $1s-2p_z$  atomu vodíku, to jest maticové elementy  $\langle 1s|\hat{r}|2s\rangle$  a  $\langle 1s|\hat{r}|2p_z\rangle$ . Příslušné vlnové funkce vyjádřené ve sférických souřadnicích jsou uvedeny v zadání úlohy 8.23.

## 8.29 Dvouatomová molekula ☆

Molekula je tvořena dvěma atomy s hmotnostmi  $m$  a  $M$  spojených vazbou délky  $a$  a tuhosti  $k$ . Při vyšetřování rotačně-vibračního pohybu molekuly lze předpokládat, že elektronový oblak obklopující jádra molekuly se vždy nachází v základním stavu a jeho příspěvek do celkové energie je zahrnut v tuhosti vazby. Molekulu tedy budeme považovat za systém dvou jader řízený hamiltoniánem

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}_1^2}{2m} + \frac{\hat{\mathbf{p}}_2^2}{2M} + \frac{1}{2}k(|\hat{\mathbf{r}}_1 - \hat{\mathbf{r}}_2| - a)^2.$$

Najděte energiové hladiny tohoto systému. Oddělte přitom pohyb těžiště systému a relativní pohyb jader a předpokládejte, že molekula má zanedbatelnou celkovou hybnost. Při vyšetřování vibrací zanedbejte vliv rotačního pohybu molekuly. Při vyšetřování rotací zase považujte vzdálenost jader za pevnou a rovnou  $a$ .

## 8.30 Rotační pohyb molekuly metylchloridu ☆

Na molekulu metylchloridu  $\text{CH}_3\text{Cl}$  se lze dívat jako na symetrický vlček, který má vzhledem k ose vazby C–Cl moment setrvačnosti  $I_a$  a vzhledem ke dvěma na vazbu kolmým osám moment setrvačnosti  $I_b$ . Určete rotační hladiny energie této molekuly. Co byste usoudili z tohoto výsledku o rotačních stavech lineárních molekul typu  $\text{CO}_2$ ?

# 9 Částice v elektromagnetických polích a spin

## 9.1 Zeemanův jev •

Atom s orbitálním momentem hybnosti charakterizovaným kvantovým číslem  $l = 1$  se nachází v magnetickém poli  $\mathbf{B} = B(\sin\vartheta \cos\varphi, \sin\vartheta \sin\varphi, \cos\vartheta)$ . Působení magnetického pole je popsáno Hamiltoniánem  $\hat{H} = \frac{1}{\hbar}\mu \hat{\mathbf{L}} \cdot \mathbf{B}$ , kde  $-\mu \hat{\mathbf{L}}$  je operátor magnetického momentu atomu. Popište výsledné energiové spektrum. Řešte úlohu nejprve pro  $\mathbf{B} \parallel \mathbf{z}$ , poté v obecném případě. Nepomáhejte si přitom otočením souřadného systému.

## 9.2 Operátory spinu •

Uvažujme prostor spinových stavů částice se spinem  $s = 1/2$ . Stavový vektor s hodnotou průmětu spinu na osu  $z$  rovnající se  $\hbar/2$  ( $-\hbar/2$ ) značíme  $|1/2, 1/2\rangle = |\uparrow\rangle$ ,  $|1/2, -1/2\rangle = |\downarrow\rangle$ .

Složky  $\hat{S}_x$ ,  $\hat{S}_y$  a  $\hat{S}_z$  operátoru spinu  $\hat{\mathbf{S}}$  jsou v bázi  $\{|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle\}$  reprezentovány následujícími maticemi:

$$\hat{S}_x = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{S}_y = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{S}_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

- (a) Jaké jsou možné výsledky měření veličin  $s_x$ ,  $s_y$  a  $s_z$ ?
- (b) Najděte vlastní vektory operátorů  $\hat{S}_x$ ,  $\hat{S}_y$  a  $\hat{S}_z$ .
- (c) Částice se nachází ve stavu  $|\uparrow\rangle$ . Určete možné výsledky měření veličin  $s_x$ ,  $s_y$  a  $s_z$  a jejich pravděpodobnosti.
- (d) Určete střední hodnoty těchto veličin ve stavu  $|\uparrow\rangle$ .
- (e) Najděte matice pro operátory  $\hat{S}_\pm$

### 9.3 Pauliho matice o

Uvažujme operátor spinu  $\hat{S} = \frac{\hbar}{2}\hat{\sigma}$ , kde  $\hat{\sigma} = (\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y, \hat{\sigma}_z)$  a složky vektoru  $\hat{\sigma}$  jsou Pauliho matice:

$$\hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Pro Pauliho matice platí následující komutační a antikomutační vztahy:

$$\{\hat{\sigma}_i, \hat{\sigma}_j\} = 2\delta_{ij}, \quad [\hat{\sigma}_i, \hat{\sigma}_j] = 2i\epsilon_{ijk}\hat{\sigma}_k, \quad i, j, k = x, y, z,$$

kde  $\epsilon_{ijk}$  značí Levi-Civitův antisymetrický tenzor. Uvedené vztahy můžeme zjednotit do jediného:

$$\hat{\sigma}_i\hat{\sigma}_j = \delta_{ij} + i\sum_k \epsilon_{ijk}\hat{\sigma}_k.$$

- (a) Spočítejte  $e^{i\alpha\hat{\sigma}_i}$ , kde  $\alpha$  je libovolná reálná veličina.
- (b) Spočítejte  $(\hat{\sigma} \cdot \vec{A})(\hat{\sigma} \cdot \vec{B})$ , kde  $\vec{A}$ ,  $\vec{B}$  jsou libovolné vektory komutující s  $\hat{\sigma}$ .

### 9.4 Částice se spinem 3/2 o

Uvažujte částici se spinem 3/2, jejíž Hamiltonián je dán

$$\hat{H} = \frac{\varepsilon_0}{\hbar^2}(\hat{S}_x^2 - \hat{S}_y^2 - \hat{S}_z^2),$$

kde  $\varepsilon_0$  je konstanta s rozměrem energie.

- (a) Najděte matici Hamiltoniánu.
- (b) Najděte vlastní energie a vlastní stavy Hamiltoniánu a ověřte, že vlastní stavy jsou dvojnásobně degenerované.

### 9.5 Částice se spinem 5/2 o

Najděte energie částice se spinem 5/2, jejíž Hamiltonián je dán

$$\hat{H} = \frac{\varepsilon_0}{\hbar^2}(\hat{S}_x^2 + \hat{S}_y^2) + \frac{\varepsilon_0}{\hbar}\hat{S}_z.$$

Jsou energie degenerované?

### 9.6 Spin měřený podél libovolného směru o

Uvažujme částici se spinem 1/2. Pokud měříme spin ve směru  $x, y, z$ , je toto měření reprezentováno operátory  $\hat{S}_x$ ,  $\hat{S}_y$  a  $\hat{S}_z$ . Předpokládejme, že chceme změřit spin částice podél libovolného směru daného jednotkovým vektorem  $\vec{n}$ .

- (a) Jaké jsou vlastní hodnoty a vlastní stavy měření spinu podél libovolného směru? Napověda: Vyjádřete libovolný jednotkový vektor  $\vec{n}$  ve sférických souřadnicích. Operátor reprezentující měření spinu podél libovolného směru je pak  $\vec{n} \cdot \hat{S}$ .
- (b) Předpokládejme, že systém je v čase  $t = 0$  ve stavu odpovídajícím vlastní hodnotě  $+\hbar/2$  operátoru  $\vec{n} \cdot \hat{S}$  a měříme spin podél osy  $z$ . Jaké jsou možné výsledky měření a jaké jsou jejich pravděpodobnosti?

## 9.7 Pauliho rovnice pro volnou částici o ☆

Schrödingerova rovnice je základní rovnice kvantové mechaniky, ale je neúplná, protože nezachycuje spinové stupně volnosti částic. Tento problém se stal zřetelným po experimentech Sterna–Gerlacha (1922), kde bylo patrné, že částice s nenulovým spinem reagují na magnetické pole způsobem, který nelze popsat pouze Schrödingerovou rovnicí. Pauli se pokusil tento problém vyřešit a manuálně přidal spin do Schrödingerovy rovnice pomocí Pauliho matic. Takto vznikla tzv. Schrödingerova–Pauliho rovnice, která umožňuje popsat spin-1/2 částice v nerelativistickém režimu a zahrnuje interakci spinu s magnetickým polem. Později Dirac formuloval relativistickou kvantovou teorii spin-1/2 částic. V Diracově rovnici spin vychází automaticky z relativistické struktury rovnice, spolu s předpovědí existence antičástic. Pro malé rychlosti částic ( $v \ll c$ ) se Diracova rovnice redukuje na Pauliho rovnici, takže Pauliho rovnice může být chápána jako nerelativistická limitní verze Diracovy rovnice. Výsledkem je, že Pauliho rovnice poskytuje užitečný nástroj pro studium spin-1/2 částic v nerelativistickém prostředí, zatímco Diracova rovnice je úplná relativistická teorie. V této úloze si odvodíte Pauliho rovnici.

V úloze 9.3 jsme si představili Pauliho matice  $\hat{\sigma}_x$ ,  $\hat{\sigma}_y$  a  $\hat{\sigma}_z$  a v bodě (b) jsme měli dokázat identitu

$$(\hat{\sigma} \cdot \vec{A})(\hat{\sigma} \cdot \vec{B}) = (\vec{A} \cdot \vec{B})\hat{I} + i\hat{\sigma} \cdot (\vec{A} \times \vec{B}).$$

(a) Do výše uvedené identity dosadíme  $\vec{A} = \hat{\vec{p}}$ ,  $\vec{B} = \hat{\vec{p}}$ , kde  $\hat{\vec{p}}$  je operátor hybnosti částice. Dokážte, že platí

$$(\hat{\sigma} \cdot \hat{\vec{p}})(\hat{\sigma} \cdot \hat{\vec{p}}) = \hat{p}^2 \hat{I},$$

kde  $\hat{I}$  je  $2 \times 2$  jednotková matice.

(b) Pro volnou částici má časově nezávislá Schrödingerova rovnice tvar

$$\hat{H}|\psi\rangle = \frac{\hat{p}^2}{2m}|\psi\rangle.$$

S využitím výsledku v úloze (a) přepište Schrödingerovu rovnici na dvoukomponentní verzi. Rovnici napište v maticovém tvaru. Protože Pauliho matice jsou  $2 \times 2$  matice, bude mít výsledná Pauliho rovnice dvě komponenty:

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} |\psi\rangle_{\uparrow} \\ |\psi\rangle_{\downarrow} \end{pmatrix}.$$

## 9.8 Pauliho rovnice pro částici v elektromagnetickém poli o ☆

Uvažujme nyní částici s nábojem  $q$ , která interaguje s vnějším elektromagnetickým polem, jež je popsáno skalárním potenciálem  $\phi$  a vektorovým potenciálem  $\vec{A}$ . Z klasické mechaniky víme, že Hamiltonián částice v elektromagnetickém poli se oproti volné částici změní tak, že přibude člen  $q\phi$ , který reprezentuje elektrostatickou interakční energii částice s vnějším polem, a dále se provede záměna

$$\hat{\vec{p}}_0 \rightarrow \hat{\vec{p}} = \hat{\vec{p}}_0 - q\vec{A},$$

kde  $\hat{\vec{p}}_0$  je hybnost volné částice.

(a) Použijte Pauliho rovnici pro volnou částici

$$\hat{H}|\psi\rangle = \frac{(\hat{\sigma} \cdot \hat{\vec{p}})^2}{2m}|\psi\rangle,$$

a запиšte Pauliho rovnici pro částici v elektromagnetickém poli.

(b) Pauliho rovnici z úlohy (a) je možné upravit do výhodnějšího tvaru. Proveďte úpravu a запиšte výslednou Pauliho rovnici. Jaká je fyzikální interpretace jednotlivých členů?

## 9.9 Rotující spin •

Částice se spinem  $1/2$  interaguje s magnetickým polem  $\mathbf{B} = B_0 \mathbf{e}_z$ . Interakce je popsána hamiltoniánem  $\hat{H} = \mu \hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{B}$ , kde  $\mu$  je magnetický moment a  $\hat{\boldsymbol{\sigma}}$  je vektor Pauliho matic. V čase  $t = 0$  byla změřena hodnota  $S_x = \hbar/2$ . Určete časovou závislost pravděpodobnosti naměření hodnoty  $S_y = -\hbar/2$  pro  $t > 0$ .

## 9.10 Nukleární magnetická rezonance ☆

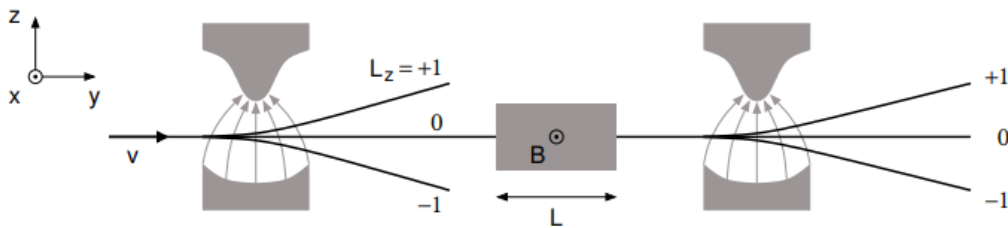
Jádro se spinem  $1/2$  je umístěno v silném magnetickém poli  $B_0$  orientovaném ve směru osy  $z$ . Ke statickému poli je přidána složka  $\mathbf{B}_1$  rotující v rovině  $xy$  s frekvencí  $\omega$  v radiovému oboru. Výsledné magnetické pole pak jest  $\mathbf{B} = (B_1 \cos \omega t, B_1 \sin \omega t, B_0)$ . Interakce spinu jádra s magnetickým polem je popsána hamiltoniánem  $\hat{H} = \mu_N \mathbf{B} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}$ . Použijte značení  $\hbar\Omega_{\parallel} = \mu_N B_0$ ,  $\hbar\Omega_{\perp} = \mu_N B_1$ .

(a) Jestliže spin jádra v okamžiku  $t = 0$  míří ve směru kladné osy  $z$ , jaká je pravděpodobnost, že bude mířit ve směru záporné osy  $z$  v pozdějších okamžicích?

(b) Rozvažte, proč se často v NMR experimentech volí hodnota  $B_0$  tak, aby  $\Omega_{\parallel} \approx \omega/2$ .

## 9.11 Rozšířený Sternův-Gerlachův experiment ☆

Sternův-Gerlachův experiment spočívá v prostorovém oddělení částic s různými hodnotami projekce magnetického momentu do určité osy pomocí nehomogenního magnetického pole. Kombinací několika Sternových-Gerlachových separátorů a dalších magnetických polí lze realizovat mnoho zajímavých experimentů s kvantovým stavem částic. V této úloze předpovíte výsledky dvou takových experimentů. Uvažujme o uspořádání z následujícího obrázku. Atomy, jejichž magnetický moment je dán momentem hybnosti  $L$  s  $l = 1$ , vlétají rychlostí o velikosti  $v$  rovnoběžnou s osou  $y$  do prvního separátoru, kde se rozdělí na tři paprsky s  $L_z = +1, 0, -1$ . Prostřední paprsek s definovaným stavem momentu hybnosti je dále zpracováván.



(a) Mezi separátory je oblast homogenního magnetického pole o velikosti  $B$  orientovaného ve směru osy  $x$ . Atomy prolétávají tímto polem po dráze délky  $L$ . Interakce atomů s magnetickým polem je vystižena hamiltoniánem

$$\hat{H} = \frac{1}{\hbar} \mu_B B \hat{L}_x,$$

ve kterém  $\mu_B = e\hbar/2m_e$  je Bohrov magneton. Vypočtete relativní intenzity paprsků za druhým separátorem za předpokladu, že jsou úměrné pravděpodobnosti nalezení atomu ve stavech s  $L_z = +1, 0, -1$  při vstupu do druhého separátoru.

(b) Magnetické pole z bodu (a) je vypnuto, ale druhým separátorem otáčíme kolem osy  $y$ . Vypočtete závislost relativních intenzit paprsků na úhlu otočení  $\varphi$ . Nejsnadnější cesta je využití explicitního vyjádření sférických harmonických funkcí

$$Y_{1,+1} = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \frac{x + iy}{r}, \quad Y_{1,0} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \frac{z}{r}, \quad Y_{1,-1} = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \frac{x - iy}{r}.$$

## 10 Přibližné metody: Variační metoda

### 10.1 Anharmonický oscilátor 1 ○

Uvažujme o harmonickém oscilátoru popsaném hamiltoniánem

$$\mathcal{H}_1 = \frac{1}{2m} \hat{p}^2 + \frac{\hbar^2}{2mx_0^4} \hat{x}^2 ,$$

kde  $x_0 = \sqrt{\hbar/m\omega}$ , a o anharmonickém oscilátoru popsaném hamiltoniánem

$$\mathcal{H}_2 = \frac{1}{2m} \hat{p}^2 + \frac{\hbar^2}{6mx_0^6} \hat{x}^4 .$$

Variační metodou se zkušební funkcí  $\psi(x) = A e^{-b(x/x_0)^2}$  odhadněte energii základního stavu uvedených oscilátorů.

### 10.2 Anharmonický oscilátor 2 ☆

Uvažujme o anharmonickém oscilátoru z příkladu 10.1. Proved'te odhad energie jeho základního stavu a prvního excitovaného stavu pomocí variační metody, tentokrát s vylepšenými zkušebními funkcemi

$$\psi_0(x) = (A + Bx^2) e^{-Cx^2} \quad \text{a} \quad \psi_1(x) = (Ax + Bx^3) e^{-Cx^2} .$$

Porovnejte odhad energie základního stavu s odhadem z příkladu 10.1 a přesvědčte se, že vylepšený odhad energie má nižší hodnotu.

### 10.3 Roztátný harmonický oscilátor ☆

Částice o hmotnosti  $m$  se pohybuje v jednorozměrném potenciálu

$$V(x) = \begin{cases} \infty & x < 0 \\ \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 & x > 0 . \end{cases}$$

(a) Použijte zkušební funkci  $\psi(x) \propto x \exp(-\lambda x)$  a odhadněte energii a vlnovou funkci základního stavu.

(b) Jaká je skutečná vlnová funkce a energie základního stavu? Porovnejte s výsledky získanými variační metodou.

### 10.4 Atom vodíku řešený variační metodou ☆

Uvažujme o atomu vodíku s centrálním potenciálem  $V(r) = -e^2/4\pi\epsilon_0 r$ . Jako zkušební vlnovou funkci zvolte  $\psi(\mathbf{r}) = N e^{-r^2/a^2}$  a stanovte:

(a) Normovací konstantu  $N$ .

(b) Střední hodnotu energie a  $r^2$  ve stavu popsaném  $\psi(\mathbf{r})$ .

(c) Optimální hodnotu  $a$  ve smyslu variační metody. Příslušnou střední hodnotu energie a  $r^2$  porovnejte s exaktními výsledky pro vodíkový atom.

### 10.5 Variační odhad energie základního stavu atomu vodíku

Variační metodou odhadněte energii základního stavu atomu vodíku. Použijte přitom sféricky symetrickou zkušební funkci

$$\psi(\mathbf{r}, \alpha) = \begin{cases} C \left(1 - \frac{r}{\alpha}\right) & r \leq \alpha , \\ 0 & r > \alpha , \end{cases}$$

kde  $C$  je normovací konstanta a  $\alpha$  je variační parametr. Porovnejte optimální hodnotu  $\alpha$  s Bohrovým poloměrem a příslušný odhad energie se skutečnou energií základního stavu atomu vodíku.

## 10.6 Polarizovatelnost atomu vodíku ☆

Elektron v základním stavu atomu vodíku má vlnovou funkci  $\psi_0(\mathbf{r}) \sim \exp(-r/a_0)$ . Atom vodíku vložíme do homogenního elektrického pole ve směru osy  $z$ . Hledejte novou vlnovou funkci elektronu ve tvaru  $\psi = \psi_0(1 + \gamma z) = \psi_0 + \delta\psi$  a určete  $\gamma$  z minima energie. Ze známé hodnoty  $\gamma$  určete dipólový moment atomu vodíku pomocí vztahu

$$p = \int d^3\mathbf{r} (-e)z(\psi_0\delta\psi^* + \psi_0^*\delta\psi)$$

a ukažte, že polarizovatelnost atomu vodíku je rovna  $\alpha = 4a_0^3$  (v CGS jednotkách).

## 10.7 Deuteron ☆

Interakci mezi dvěma nukleony – protonem a neutronem – v jádře deuteria lze přibližně vystihnout Yukawovým potenciálem

$$V(r) = -V_0 \frac{r}{a} \exp\left(-\frac{r}{a}\right).$$

Najděte vazebnou energii jádra pomocí variační metody v nejjednodušším případě s  $l = 0$ . Relativní pohyb nukleonů přitom popište zkušební vlnovou funkcí

$$\psi(\mathbf{r}) = C \exp\left(-\lambda \frac{r}{a}\right),$$

kde  $\lambda$  je variační parametr. Zformulujte podmínku existence vázaného stavu. Dále zaveďte vhodnou veličinu, která by vyjadřovala rozprostřenost jádra v prostoru a stanovte její hodnotu. Počítejte nejprve obecně, poté pro konkrétní hodnoty:  $a = 1.4 \times 10^{-13}$  cm,  $V_0 = 50$  MeV.

## 10.8 Vibrace dvouatomových molekul ☆

Vibrace dvouatomových molekul jsou výtečně popsány Morseovým potenciálem

$$V(r) = D(e^{-2\alpha x} - 2e^{-\alpha x}), \quad x = \frac{r - r_0}{r_0}.$$

Následující tabulka udává hodnoty parametrů potenciálu pro vybrané molekuly.

| molekula       | $\hbar^2/2Mr_0^2$ [cm <sup>-1</sup> ] | $D$ [cm <sup>-1</sup> ] | $\alpha$ |
|----------------|---------------------------------------|-------------------------|----------|
| H <sub>2</sub> | 60.8296                               | 38292                   | 1.440    |
| HCl            | 10.5930                               | 37244                   | 2.380    |
| I <sub>2</sub> | 0.0374                                | 12550                   | 4.954    |

Zde  $M$  je redukovaná hmotnost a  $E(\text{eV}) = E(\text{cm}^{-1}) \times 1.2398 \times 10^{-4}$ . V prvním přiblížení lze potenciál nahradit harmonickým potenciálem  $V_{\text{harm}}(r)$  získaným Taylorovým rozvojem  $V(r)$  kolem  $r = r_0$ . Vlnové funkce a energie pak snadno získáme z řešení úlohy o harmonickém oscilátoru. Poruchovým přístupem určete korekce energie základního a prvního excitovaného stavu

(a) způsobené rozdílem  $V(r) - V_{\text{harm}}(r)$ ,

(b) způsobené rotačním pohybem molekuly, který charakterizujeme kvantovým číslem  $l$ .

## 11 Přibližné metody: Stacionární poruchová metoda

### 11.1 Částice v nekonečně hluboké jámě s poruchou o

Spočítejte energie  $n$ -tého excitovaného stavu k prvnímu řádu poruchové teorie pro částici v jednorozměrné nekonečně hluboké jámě délky  $2L$ , pro  $x = -L$  a  $x = L$ , která je modifikována na dně potenciálem s  $V_0 \ll 1$ :

$$\begin{aligned} \text{(a)} \quad V_p(x) &= \begin{cases} -V_0, & \text{pro } -L \leq x \leq L, \\ 0, & \text{jinak} \end{cases} \\ \text{(b)} \quad V_p(x) &= \begin{cases} -V_0, & \text{pro } -L/2 \leq x \leq L/2, \\ 0, & \text{jinak} \end{cases} \\ \text{(c)} \quad V_p(x) &= \begin{cases} -V_0, & \text{pro } -L/2 \leq x \leq 0, \\ V_0, & \text{pro } 0 \leq x \leq L/2, \\ 0, & \text{jinak} \end{cases} \\ \text{(d)} \quad V_p(x) &= \begin{cases} -V_0 \left(1 - \frac{x^2}{L^2}\right), & \text{pro } |x| \leq L, \\ 0, & \text{jinak} \end{cases} \end{aligned}$$

### 11.2 Perturbace čtyřrozměrného systému o

Uvažujte systém, jehož Hamiltonián je dán maticí

$$\hat{H} = E_0 \begin{pmatrix} 3 & 2\lambda & 0 & 0 \\ 2\lambda & -3 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -7 & \sqrt{2}\lambda \\ 0 & 0 & \sqrt{2}\lambda & 7 \end{pmatrix},$$

kde  $\lambda \ll 1$ .

(a) Spočítejte přesně vlastní energie matice  $\hat{H}$  a rozviňte všechny energie do druhého řádu podle parametru  $\lambda$ .

(b) Rozdělte Hamiltonián jako součet dvou Hamiltoniánů:  $\hat{H} = \hat{H}_0 + \lambda \hat{V}_p$ . Hamiltonián  $\hat{H}_0$  je diagonální, takže můžeme ihned napsat vlastní energie i vlastní vektory systému. Použijte to a spočítejte energie celkového Hamiltoniánu  $\hat{H}$  do druhého řádu v poruchové teorii a porovnejte s výsledky z úlohy (a).

### 11.3 Poruchová teorie a harmonický oscilátor o

Uvažujte částici, která se řídí Hamiltoniánem

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \lambda \hbar \omega (\hat{a}^2 + \hat{a}^{\dagger 2}),$$

kde  $\hat{H}_0$  je Hamiltonián jednoduchého harmonického oscilátoru.

(a) Spočítejte energii základního stavu do druhého řádu v  $\lambda$ .

(b) Najděte energii  $n$ -tého excitovaného stavu do druhého řádu v  $\lambda$  a také odpovídající vlastní stavy do prvního řádu v  $\lambda$ .

## 11.4 Poruchy pro $l = 1$ ○

Uvažujte bezspinovou částici s orbitálním momentem  $l = 1$  a Hamiltoniánem

$$\hat{H}_0 = \frac{E}{\hbar^2} (\hat{L}_x^2 - \hat{L}_y^2),$$

kde  $E$  je konstanta.

(a) Spočítejte vlastní hodnoty a vlastní stavy.

(b) Přidejte poruchu  $\hat{V}_p = \alpha \hat{L}_z / \hbar$ ,  $\alpha \ll E$ , a spočítejte energie do druhého řádu.

## 11.5 Částice se spinem v magnetickém poli ○

Částice se spinem  $1/2$  a hmotností  $m$  se nachází v nekonečně hluboké potenciálové jámě délky  $2L$  a je vystavena vnějšímu magnetickému poli

$$V(x) = \begin{cases} 0, & -L \leq x \leq L, \\ \infty, & \text{jinak} \end{cases}, \quad \vec{B} = \begin{cases} -B\hat{z}, & -L \leq x \leq 0, \\ -B\hat{x}, & 0 \leq x \leq L \end{cases},$$

kde  $\hat{x}, \hat{z}$  jsou jednotkové vektory podél os  $x$  a  $z$ .

Použijte poruchovou teorii do prvního řádu a spočítejte energie  $n$ -tého excitovaného stavu.

## 11.6 Izotopový posuv hrany K thalia ○

Orbital K elektronu v těžkém atomu má střední kvadratický poloměr jen asi stokrát větší než je poloměr jádra. Zahrnutí vlivu konečné velikosti jádra přináší měřitelný posuv příslušné energie. S užitím poruchové teorie vyčíslete tento posuv. Předpokládejte přitom, že náboj jádra je rovnoměrně rozložen v kouli o poloměru  $R$  a zanedbejte stínění K elektronu. Pomocí získané formule určete posuv K-hrany dvou izotopů thalia ( $Z = 81$ ),  $^{203}\text{Tl}$  a  $^{205}\text{Tl}$ . Poloměr jádra je daný vztahem  $R = r_0 A^{1/3}$ , kde  $r_0 = 1.2 \times 10^{-13}$  cm.

## 11.7 Harmonický oscilátor v elektrickém poli ☆

Částice o hmotnosti  $m$  nesoucí náboj  $-e$  se pohybuje v harmonickém potenciálu  $V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$ .

(a) Správnou volbou konstant  $N$  a  $\alpha$  najděte základní stav popsaného harmonického oscilátoru, jehož vlnová funkce může být zapsána jako  $\Psi_0(x) = Ne^{-\alpha^2 x^2/2}$ . Určete příslušnou energii,

(b) V čase  $t = 0$  je zapnuto elektrické pole o velikosti  $E$ , které představuje potenciál  $V'(x) = eEx$ . Jaká je nová vlnová funkce a energie základního stavu?

(c) Předpokládejme, že čas potřebný k zapnutí pole byl mnohem kratší než  $1/\omega$ . Jaká je pravděpodobnost, že částice zůstane v základním stavu?

## 11.8 Harmonicky porušený harmonický oscilátor ☆

Hamiltonián harmonického oscilátoru s frekvencí  $\omega$  nechť naruší harmonická porucha

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \Delta\hat{V}, \quad \hat{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 \hat{x}^2, \quad \Delta\hat{V} = \frac{1}{2}k\hat{x}^2.$$

(a) Vypočítejte korekce  $\Delta E_n^{(1)}$  energiových hladin  $E_n^{(0)}$  v prvním řádu poruchové teorie.

(b) Vypočítejte korekce  $\Delta E_n^{(2)}$  energiových hladin  $E_n^{(0)}$  v druhém řádu poruchové teorie.

(c) Srovnajte své výsledky s exaktními hodnotami a přesvědčte se, že exaktní energie lze napsat ve tvaru mocninné řady v poruchovém parametru, jejíž první koeficienty se shodují s výsledky získanými v bodech (a) a (b). Vyjádřete se k rychlosti konvergence poruchového rozvoje pro různé hodnoty  $k/m\omega^2$ .

## 11.9 Starkův jev ☆

Atom vodíku je vystaven působení elektrického pole  $E$  ve směru osy  $z$ , které pro elektron s nábojem  $-e$  odpovídá dodatečnému potenciálu

$$\Delta V(r) = eEz .$$

Vyšetřete rozštěpení a posuv energiových hladin s  $n = 1$  a  $n = 2$  s využitím poruchové teorie prvního řádu.

## 11.10 Částice na kouli ☆

Částice s hmotností  $m$  se pohybuje na kouli o poloměru  $R$ . Vhodným způsobem zapište odpovídající hamiltonián a najděte spektrum vlastních stavů, energiové hladiny a jejich degeneraci. Za poruchu nyní považujeme tíhové pole s tíhovým zrychlením o velikosti  $g$ . Najděte operátor, který komutuje s  $\hat{H}_0$  i s poruchou, ten poslouží ke klasifikaci skupin porušených stavů podle příslušných vlastních hodnot. Ukažte, že poruchová teorie prvního řádu dává nulovou opravu energií. K posuvu a rozštěpení degenerovaných hladin vede až poruchová teorie druhého řádu, pomocí níž přibližně vypočítejte nové energiové spektrum.

Pomůcka:

$$\cos \vartheta Y_{lm}(\vartheta, \varphi) = \sqrt{\frac{(l+1)^2 - m^2}{(2l+1)(2l+3)}} Y_{l+1,m}(\vartheta, \varphi) + \sqrt{\frac{l^2 - m^2}{(2l+1)(2l-1)}} Y_{l-1,m}(\vartheta, \varphi)$$

## 12 Přibližné metody: Nestacionární poruchová metoda

### 12.1 Atom vodíku v kondenzátoru ○

Kondenzátor o kapacitě  $C$  je v čase  $t = 0$  zkratován rezistorem o odporu  $R$ . Intenzita elektrického pole v kondenzátoru se od tohoto okamžiku zmenšuje podle vztahu  $E = E_0 e^{-t/\tau}$ , kde  $E_0$  je počáteční intenzita a  $\tau = RC$  je charakteristický čas vybíjení. Předpokládejme, že v kondenzátoru se nachází atom vodíku, který je v čase  $t = 0$  v základním stavu. S pomocí nestacionární poruchové teorie stanovte pravděpodobnosti, že během vybíjení kondenzátoru přejde atom vodíku do stavu (a)  $2s$ , (b)  $2p$ . Odhadněte hodnoty těchto pravděpodobností pro  $E_0 = 1 \text{ kV mm}^{-1}$  a  $\tau = 1 \text{ s}$ .

### 12.2 Harmonický oscilátor ve střídavém poli ☆

Jednorozměrný harmonický oscilátor s hmotností  $m$ , frekvencí  $\omega_0$  a nábojem  $q$  je pro  $t > 0$  vystaven působení střídavého elektrického pole  $E(t) = E_0 \cos \omega t$ . Vypočtěte v prvním řádu poruchové teorie časovou závislost střední hodnoty elektrického dipólového momentu  $\langle d \rangle = \langle \psi | q\hat{z} | \psi \rangle$ . Předpokládejte přitom, že v okamžiku  $t = 0$  se oscilátor nacházel ve vlastním stavu  $|n\rangle$ .

### 12.3 Elektrický pulz ☆

Jednorozměrný harmonický oscilátor popsaný Hamiltoniánem

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 \hat{x}^2$$

je v čase  $t = -\infty$  v základním stavu. Na náboj  $q$  oscilátoru působí časově závislé elektrické pole

$$E(t) = E_{\max} e^{-\alpha t^2} .$$

Nestacionární poruchovou teorií prvního řádu stanovte pravděpodobnost, s jakou se bude oscilátor nacházet v základním stavu poté, co se pulz přezene.

## 13 Systémy více částic ☆

### 13.1 Skládání spinů ☆

Uvažujme o dvou částicích, první má spin  $1/2$ , operátor spinu označme  $\hat{\mathbf{S}}_1 = (\hat{S}_{x1}, \hat{S}_{y1}, \hat{S}_{z1})$ , druhá má spin  $1$ , operátor spinu označme  $\hat{\mathbf{S}}_2 = (\hat{S}_{x2}, \hat{S}_{y2}, \hat{S}_{z2})$ , operátor celkového spinu označme symbolem  $\hat{\mathbf{S}} = (\hat{S}_x, \hat{S}_y, \hat{S}_z)$ ,  $\hat{\mathbf{S}} = \hat{\mathbf{S}}_1 + \hat{\mathbf{S}}_2$ . Nalezněte společný systém vlastních vektorů operátorů  $\hat{\mathbf{S}}^2$  a  $\hat{S}_z$  (vlastní vektory vyjádřete pomocí společných vlastních vektorů  $\hat{\mathbf{S}}_1^2, \hat{S}_{z1}$  a společných vlastních vektorů  $\hat{\mathbf{S}}_2^2, \hat{S}_{z2}$ ).

K terminologii: Hilbertův prostor patřící ke spinovým stupňům volnosti první (druhé) částice označme symbolem  $H_{S1}$  ( $H_{S2}$ ). Je-li  $|\psi_1\rangle \in H_{S1}$  a  $|\varphi_2\rangle \in H_{S2}$ , pak do Hilbertova prostoru složeného systému  $H_{S1\&S2}$  patří vektor, který značíme symbolem  $|\psi_1\rangle \otimes |\varphi_2\rangle$ , nebo zkráceně  $|\psi_1\rangle|\varphi_2\rangle$ , tzv. tenzorový součin  $|\psi_1\rangle$  a  $|\varphi_2\rangle$ . Jde o vektor odpovídající takovému stavu složeného systému, kdy stav první částice je popsán vektorem  $|\psi_1\rangle$  a stav druhé částice vektorem  $|\varphi_2\rangle$ . Je-li  $\{|u_{i1}\rangle\}$  báze na  $H_{S1}$ ,  $\{|v_{j2}\rangle\}$  báze na  $H_{S2}$ , pak  $\{|u_{i1}\rangle \otimes |v_{j2}\rangle\}$  je báze na  $H_{S1\&S2}$ . O prostoru  $H_{S1\&S2}$  mluvíme jako o tenzorovém součinu prostorů  $H_{S1}$  a  $H_{S2}$ , píšeme  $H_{S1\&S2} = H_{S1} \otimes H_{S2}$ .

Uvědomte si, že ne každý vektor z tenzorového součinu Hilbertových prostorů lze zapsat jako tenzorový součin dvou vektorů.

### 13.2 Dipolární interakce ☆

Dvě částice se spinem  $1/2$  mají relativní polohu danou vektorem  $\mathbf{a} = ae_z$  a interakce jejich magnetických dipólových momentů  $\hat{\boldsymbol{\mu}}_j = \mu_0 \hat{\mathbf{s}}_j$  ( $\hat{\mathbf{s}}_j$  je bezrozměrný spin  $\hat{\mathbf{s}}_j = \hat{\mathbf{S}}_j/\hbar$ ) je popsána hamiltoniánem

$$\hat{H} = \frac{\hat{\boldsymbol{\mu}}_1 \cdot \hat{\boldsymbol{\mu}}_2}{a^3} - 3 \frac{(\hat{\boldsymbol{\mu}}_1 \cdot \mathbf{a})(\hat{\boldsymbol{\mu}}_2 \cdot \mathbf{a})}{a^5}.$$

Zapište hamiltonián pomocí spinových operátorů celkového spinu  $\hat{\mathbf{s}} = \hat{\mathbf{s}}_1 + \hat{\mathbf{s}}_2$ , konkrétně pomocí  $\hat{s}^2, \hat{s}_z$ . Najděte vlastní energie systému.

### 13.3 Dvě částice v jámě ☆

Uvažujte o soustavě dvou neinteragujících odlišitelných částic o stejné hmotnosti ( $m$ ) v jednorozměrné nekonečně hluboké potenciálové jámě o šířce  $L$ .

(a) Zapište hamiltonián, nalezněte, s využitím metody separace proměnných, vlastní hodnoty energie a úplný soubor vlastních funkcí.

(b) Dále uvažujte o stavu, kde se první částice nachází v základním jednočásticovém stavu a druhá částice v prvním excitovaném jednočásticovém stavu. Vyjádřete hustotu pravděpodobnosti současného pozorování částice v místě o souřadnici  $a$  a částice v místě o souřadnici  $b$ , na pořadí nezávisí.

(c) Navazuje na předchozí. Jaký výsledek bychom dostali pro totožné bosony? Jaký výsledek bychom dostali pro identické fermiony? Na spinové stupně volnosti neberte ohled (lze si představit, že všechny částice mají nastavenou stejnou orientaci spinu, a projeví se jen souřadnice). Diskutujte o souvislosti s úvahami o srážce totožných částic.

### 13.4 Částice ve vyhráté jámě ☆

Uvažujte o soustavě  $N$  neinteragujících částic o hmotnosti  $m$  v jednorozměrné nekonečně hluboké potenciálové jámě o šířce  $L$  při teplotě  $T$ . Stanovte poměr mezi pravděpodobnostmi nalezení soustavy v základním stavu (o energii  $NE_1$ , kde  $E_1$  je energie základního jednočásticového stavu) a pravděpodobností nalezení soustavy ve stavu o energii  $(N-1)E_1 + E_2$  ( $E_2$  je energie prvního

excitovaného jednočásticového stavu)

(a) pro případ, že jde o odlišitelné částice a

(b) pro případ, že jde o totožné bosony.

Neberte ohled na spinové stupně volnosti. Pravděpodobnost nalezení soustavy ve stavu popsaném daným vlastním vektorem o energii  $E$  je úměrná  $e^{-E/k_B T}$ .

### 13.5 Pauliho tlak ☆

Uvažujte o soustavě  $N$  neinteragujících fermionů o hmotnosti  $m$  v jednorozměrné nekonečně hluboké potenciálové jámě o šířce  $L$ . Vyjádřete sílu, kterou působí na stěnu jámy. Neberte ohled na spinové stupně volnosti.

### 13.6 Trojrozměrná nekonečně hluboká jáma ☆

Vypočtete energiové hladiny a vlnové funkce vlastních stavů částice o hmotnosti  $m$  uvězněné v trojrozměrné krabici tvaru kvádra s rozměry  $a$ ,  $b$ ,  $c$ , jejíž stěny představují nekonečně vysoké potenciálové bariéry. Tato představa je nejjednodušším přiblížením k problému elektronu nacházejícího se v kvantové tečce nebo kovové nanočástici s rozměry několika nanometrů. V takových případech se již výrazně projevuje diskrétní povaha energiových hladin. Poté předpokládejte, že  $a = b = c = L$ , a stanovte energie základního stavu souboru  $N$  elektronů v krabici pro všechna  $N \leq 12$ . Spin elektronů přitom (a) ignorujte (b) do úvah náležitě zakomponujte.

### 13.7 Atom hélia ☆

Variační metodou odhadněte energii elektronového oblaku v atomu hélia. Považujeme-li jádro za nehybné, je hamiltonián dvouelektronového systému elektronů oblaku dán vztahem

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}[\nabla_1^2 + \nabla_2^2] - \frac{2e^2}{4\pi\epsilon_0}\left(\frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2}\right) + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}.$$

Jako zkušební stav závislý na parametru  $\alpha$  použijte stav, jehož prostorová část je daná vlnovou funkcí

$$\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{\alpha^3}{\pi a_0^3} e^{-\alpha(r_1+r_2)/a_0}$$

a spinová část je singlet  $(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle)/\sqrt{2}$ . Veličina  $a_0$  je Bohrov poloměr.