Ukázky testových úloh

1. (0b) Elektron pohybující se podél osy x v statickém potenciálu $V(x)$ je popsán komplexní vlnovou funkcí $\psi(x,t)$. Zapište výrazy pro:
(a) Pravděpodobnost nalezení elektronu na kladné poloose x v daném čase t.
(b) Střední polohu elektronu v daném čase t.
(c) Střední hodnotu energie elektronu v daném čase t.

a) $$P = \int_0^\infty |\psi(x,t)|^2 \, dx$$

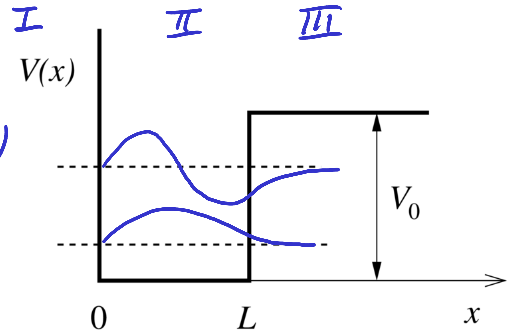
b) $$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x \, |\psi(x,t)|^2 \, dx$$

c) $$\langle E \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x,t) \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right] \psi(x,t) \, dx$$

2. (0b) Částice o hmotnosti m se nachází ve vázaném stavu v jednorozměrné polonekonečné jámě zadané po částech konstantním potenciálem

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

c)



kde V_0 je kladná konstanta.
(a) Napište obecný tvar řešení stacionární Schrödingerovy rovnice pro jednotlivé oblasti v případě vázaného stavu, to jest stavu s energií $E < V_0$.
(b) Jaké podmínky musí splňovat vlnová funkce v bodech $x = 0$ a $x = L$? Jaké rovnice z nich plynou pro koeficienty vystupující ve výrazech z části (a)?
(c) V obrázku jsou vyznačeny skutečné energiové hladiny základního stavu a prvního excitovaného stavu pro nějaké konkrétní hodnoty m, L a V_0. Načrtněte do obrázku odhadovaný průběh vlnových funkcí těchto vlastních stavů. Použijte obvyklý způsob znázornění, kdy energiová hladina vyznačená v obrázku slouží jako „základna“ (horizontální osa) pro graf příslušné vlnové funkce.

a) $\psi_{I} = 0$

$\psi_{II} = A e^{ikx} + B e^{-ikx}$ $\qquad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$

$\psi_{III} = C e^{-\varkappa(x-L)}$

$\varkappa = \frac{\sqrt{2m(V_0-E)}}{\hbar}$

b) $x = 0:\ \psi_{II} = 0 \rightarrow A + B = 0$

$x = L:$

$\psi_{II} = \psi_{III} \rightarrow A e^{ikL} + B e^{-ikL} = C$

$\psi_{II}' = \psi_{III}' \rightarrow ik\left(A e^{ikL} - B e^{-ikL}\right) = -\varkappa C$

3. (0b) Jednoduchý dvouhladinový systém je popsán Hamiltoniánem zapsaným „diracovsky" jako

$$\hat{H} = E_0 \left(|1\rangle\langle 1| + |2\rangle\langle 2| \right) - T \left(|1\rangle\langle 2| + |2\rangle\langle 1| \right),$$

přičemž $|1\rangle$ a $|2\rangle$ jsou ortonormální bázové vektory a E_0, T jsou reálné konstanty.
(a) Určete maticové prvky $\langle m|\hat{H}|n\rangle$ pro $m, n \in 1, 2$ a sestavte tak matici Hamiltoniánu v bázi $|1\rangle$, $|2\rangle$.
(b) Najděte vlastní energie systému.
(c) Vypočtěte střední hodnotu energie ve stavu $|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle + i\,|2\rangle)$.

a) $\langle 1|\hat{H}|1\rangle = \langle 1| \left[E_0 \left(|1\rangle\langle 1| + |2\rangle\langle 2| \right) - T \left(|1\rangle\langle 2| + |2\rangle\langle 1| \right) \right] |1\rangle = E_0$

$\langle 1|\hat{H}|2\rangle = -T \qquad \langle 2|\hat{H}|1\rangle = -T \qquad \langle 2|\hat{H}|2\rangle = E_0 \qquad \hat{H} = \begin{pmatrix} E_0 & -T \\ -T & E_0 \end{pmatrix}$

b) $\det(\hat{H} - E\hat{1}) = \begin{vmatrix} E_0 - E & -T \\ -T & E_0 - E \end{vmatrix} = (E_0 - E)^2 - T^2 \longrightarrow E_{1,2} = E_0 \pm T$

c) $\langle \hat{H} \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (1 \ \ -i) \begin{pmatrix} E_0 & -T \\ -T & E_0 \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix} = \frac{1}{2} (1 \ \ -i) \begin{pmatrix} E_0 - iT \\ -T + iE_0 \end{pmatrix} =$

$= \frac{1}{2} (E_0 - iT + iT + E_0) = E_0$

4. (0b) Ukažte s využitím explicitního zápisu příslušných operátorů v kartézských souřadnicích, že Hamiltonián trojrozměrného izotropního harmonického oscilátoru

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\hat{\boldsymbol{p}}^2 + \frac{1}{2}m\omega^2(\hat{x}^2 + \hat{y}^2 + \hat{z}^2)$$

komutuje s operátorem $\hat{L}_z$. Budou se vám hodit komutátory $[\hat{p}_x^2, \hat{x}] = -2i\hbar\hat{p}_x$, dále $[\hat{x}^2, \hat{p}_x] = 2i\hbar\hat{x}$ a podobně pro y. Podobně snadno by se dalo ukázat, že $\hat{H}$ komutuje i s dalšími složkami momentu hybnosti (což není vzhledem k izotropnosti překvapivé) a tedy i $\hat{L}^2$. Díky tomu lze hledat vlnové funkce oscilátoru ve tvaru vlastních stavů momentu hybnosti $R_{nl}(r)Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$.

$$\hat{L}_z = \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x \qquad \hat{H} = \frac{1}{2m}(\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2) + \frac{1}{2}m\omega^2(\hat{x}^2 + \hat{y}^2 + \hat{z}^2)$$

$$[\hat{L}_z, \hat{H}] = \frac{1}{2m}\left([\hat{x}\hat{p}_y, \hat{p}_x^2] - [\hat{y}\hat{p}_x, \hat{p}_y^2]\right) + \frac{1}{2}m\omega^2\left([\hat{x}\hat{p}_y, \hat{y}^2] - [\hat{y}\hat{p}_x, \hat{x}^2]\right)$$

$$= \frac{1}{2m}\Big(\hat{p}_y \underbrace{[\hat{x}, \hat{p}_x^2]}_{2i\hbar\hat{p}_x} - \hat{p}_x \underbrace{[\hat{y}, \hat{p}_y^2]}_{2i\hbar\hat{p}_y}\Big) + \frac{1}{2}m\omega^2\Big(\hat{x}\underbrace{[\hat{p}_y, \hat{y}^2]}_{-2i\hbar\hat{y}} - \hat{y}\underbrace{[\hat{p}_x, \hat{x}^2]}_{-2i\hbar\hat{x}}\Big)$$

$$= \frac{1}{2m} 2i\hbar(\hat{p}_y\hat{p}_x - \hat{p}_x\hat{p}_y) + \frac{1}{2}m\omega^2(-2i\hbar)(\hat{x}\hat{y} - \hat{y}\hat{x}) = 0$$

5. (0b) Elektron v atomu vodíku se nachází v orbitalu $2p_x$ popsaném vlnovou funkcí

$$\psi_{2p_x} = \frac{1}{\sqrt{8\pi}} \frac{1}{a^{3/2}} \frac{x}{2a} \mathrm{e}^{-r/2a} .$$

(a) Napište výraz pro střední kvadratickou vzdálenost. Použijte přitom sférické souřadnice.
(b) Napište výraz pro pravděpodobnost nalezení elektronu ve vzdálenosti větší než $2a$ od jádra.
(c) Jaké hodnoty je možné s nenulovou pravděpodobností získat při měření L_z elektronu v daném stavu?

a) $\sqrt{\langle r^2 \rangle}$ $\quad \langle r^2 \rangle = \int_0^\infty dr\, r^2 \int_0^\pi d\vartheta \sin\vartheta \int_0^{2\pi} d\varphi \; r^2 \underbrace{\frac{1}{8\pi} \frac{1}{4a^5} r^2 \sin^2\vartheta \cos^2\varphi \, e^{-\frac{r}{a}}}_{|\psi_{2p_x}|^2}$

b) $P = \int_{2a}^\infty dr\, r^2 \int_0^\pi d\vartheta \sin\vartheta \int_0^{2\pi} d\varphi \; |\psi_{2p_x}|^2$

c) úhlová část ψ_{2p_x} $= \sin\vartheta \cos\varphi \quad = \sin\vartheta \, \frac{1}{2}(e^{i\varphi} + e^{-i\varphi})$

$m = +1 \qquad m = -1$

měření $\hat{L}_z$ může poskytnout $+\hbar, -\hbar$