Cvičení ÚDKM 10. 3. 2022 (4. cvičení)

Témata:

- opakování, otázky a nejasnosti
- volná částice
- vlnové klubko

Volná částice

Základní rovnicí kvantové mechaniky je tzv. **časová Schrödingerova rovnice**,

$$\hat{H}\Psi(x,t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x,t)\,, \tag{1}$$

kde $\hat{H}$ je hamiltonián našeho systému a $\Psi(x,t)$ je vlnová funkce popisující náš systém. Pro popis časově nezávislých jevů používáme tzv. **bezčasovou Schrödingerovu rovnici**

$$\hat{H}\psi(x) = E\psi(x)\,, \tag{2}$$

kde vlastní funkce $\psi(x)$ je jen prostorová část vlnové funkce $\Psi(x,t)$ a vlastní číslo E je energie systému. Hamiltonián $\hat{H}$ je obecně dán jako součet operátorů kinetické a potenciální energie

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V}\,. \tag{3}$$

Operátor kinetické energie ($\hat{p}_i = -i\hbar\partial/\partial x_i$) je

$$\hat{T} = \frac{\hat{p}^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\,. \tag{4}$$

Pokud bychom měli volnou částici, tj. $V(x) = 0$ v celém prostoru, bezčasová Schrödingerova rovnice má jednoduchý tvar

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\psi(x) = E\psi(x)\,. \tag{5}$$

Jejím řešením $\psi(x)$ jsou rovinné vlny

$$\psi(x) = Ae^{ikx}\,; \tag{6}$$

A je amplituda (konstanta) a k, $|k| = 2\pi/\lambda$, je vlnový vektor s vlnovou délkou λ. Odpovídající energie E je

$$E(k) = -\frac{\hbar^2}{2m}(ik)^2 = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}\,. \tag{7}$$

(Energie nerelativistické částice o hmotnosti m.) Každá taková vlnová funkce $\psi(x)$ popisuje rovinnou vlnu pro částici s energií $E(k)$ a podle de Broglieho vztahu s hybností $p = \hbar k = h/\lambda$. Energetické spektrum volně se pohybující částice je tedy spojité, od nuly do nekonečna, a je dvojnásobně degenerované, jelikož částice se může pohybovat zleva doprava nebo zprava doleva. (Jediným nedegenerovaným stav je případ $k = 0$, kdy dostaneme v prostoru konstantní funkci.) V případě nenulového časově nezávislého potenciálu $\hat{V} = V(x)$ řešíme obecně bezčasovou Schrödingerovu rovnici

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + V(x)\right]\psi(x) = E\psi(x)\,. \tag{8}$$

Vlnové klubko

V experimentech se spíše než s jednotlivými částicemi (elektronem, fotonem,...), tj. objektem přesně lokalizovaným v prostoru nebo času, setkáváme s nejasně ohraničenými objekty (mají nějakou distribuci v prostoru/energii/čase/...). Příkladem jsou třeba laserové pulsy, kterými můžeme excitovat atomy nebo molekuly a měřit absorbci/emisi. Tyto objekty ("pulzy") můžeme popsat různými funkcemi (distribucemi), z nichž nejjednodušší je právě gaussovská funkce. Pro její charakterizaci nám slouží veličiny jako kolem jaké hodnoty je balík centrován (x_0, p_0), jak moc je "rozplizlý" (odchylka Δx, Δp), atd.

Uvažujme částici pohybující se podél osy x, jejíž stav $|\psi\rangle$ je dán, v souřadnicové reprezentaci,

$$\langle x|\psi\rangle = \psi(x) = C\exp\left\{\frac{ip_0 x}{\hbar}\right\}\exp\left\{-\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma^2}\right\}\,. \tag{9}$$

C je normalizační konstanta plynoucí z požadavku $\langle\psi|\psi\rangle = 1$ (I) Dopočtěte tuto konstantu. Mělo by vyjít

$$|C| = \sqrt[4]{\frac{1}{\pi\sigma^2}}\,. \tag{10}$$

Spočteme-li $P(x) = |\psi(x)|^2$, dostaneme pravděpodobnost (přesněji hustotu pravděpodobnosti) výskytu částice v bodě x; snadno dostaneme

$$P(x) = |\psi(x)|^2 = \sqrt[2]{\frac{1}{\pi\sigma^2}}\exp\left\{-\frac{(x-x_0)^2}{\sigma^2}\right\}\,. \tag{11}$$

Připomeňme, že pro souřadnicovou reprezentaci máme

$$\hat{x}\,|x\rangle = x\,|x\rangle\ , \tag{12}$$

$$\langle x'|x\rangle = \delta(x'-x)\quad(\text{ortogonalita})\,,\qquad \int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}x\,|x\rangle\,\langle x| = 1\quad(\text{relace uplnosti})\,, \tag{13}$$

$$\langle x|\,\hat{x}\,|\psi\rangle = x\psi(x)\,,\qquad \langle x|\,\hat{p}\,|\psi\rangle = -i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\psi(x)\,, \tag{14}$$

(poslední vztah lze odvodit z komutátoru $[\hat{x},\hat{p}] = i\hbar$) a pro hybnostní reprezentaci

$$\hat{p}\,|p\rangle = p\,|p\rangle\ , \tag{15}$$

$$\langle p'|p\rangle = \delta(p'-p)\quad(\text{ortogonalita})\,,\qquad \int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}p\,|p\rangle\,\langle p| = 1\quad(\text{relace uplnosti})\,, \tag{16}$$

$$\langle p|\,\hat{p}\,|\psi\rangle = p\psi(p)\,,\qquad \langle p|\,\hat{x}\,|\psi\rangle = i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}p}\psi(p)\,. \tag{17}$$

Naším prvním úkolem bude vyjádřit stav této částice $|\psi\rangle$ v hybností reprezentaci, tj. chceme najít funkci $\tilde{\psi}(p)$. To znamená

$$\tilde{\psi}(p) = \langle p|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty}\langle p|x\rangle\,\langle x|\psi\rangle\,\mathrm{d}x\,, \tag{18}$$

kde jsme vložili rozklad jedničky (v souřadnicové reprezentaci). Jak vypadá $\langle x|\psi\rangle$ víme, viz rovnice (9). Zbývá nám tedy vyjádřit $\langle p|x\rangle$ a poté provést integraci. Vyjdeme z rovnice (15) a vynásobíme obě strany $\langle x|$ zleva

$$\langle x|\,\hat{p}\,|p\rangle = p\,\langle x|p\rangle\ . \tag{19}$$

Použitím druhé rovnice (14) pro $|\psi\rangle = |p\rangle$ dostaneme

$$-i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\,\langle x|p\rangle = p\,\langle x|p\rangle\ . \tag{20}$$

$\langle x|p\rangle$ tedy musí mít tvar

$$\langle x|p\rangle = Ke^{\frac{i}{\hbar}px}\,. \tag{21}$$

Faktor K určíme z požadavku normalizace na delta-funkci $\langle p|p'\rangle = \delta(p-p')$:

$$\langle p|p'\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}x\,\langle p|x\rangle\,\langle x|p'\rangle = |K|^2\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}xe^{\frac{i}{\hbar}(p-p')x} = \delta(p-p')\,. \tag{22}$$

Dále si vzpomeneme, že

$$\delta(x) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}ke^{-ikx}\,. \tag{23}$$

V našem případě tedy

$$|K|^2\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}xe^{\frac{i}{\hbar}(p-p')x} = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}ke^{-ik(p-p')}\,, \tag{24}$$

čili $K = 1/\sqrt{2\pi\hbar}$ a

$$\langle x|p\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{\frac{i}{\hbar}px}\,,\qquad \langle p|x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{-\frac{i}{\hbar}px}\,. \tag{25}$$

Nyní zbývá už jen dosadit a spočítat integrál

$$\begin{aligned}\tilde{\psi}(p) &= \int_{-\infty}^{+\infty}\langle p|x\rangle\,\langle x|\psi\rangle\,\mathrm{d}x = \int_{-\infty}^{+\infty}\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\exp\left\{\frac{i}{\hbar}px\right\}C\exp\left\{\frac{ip_0x}{\hbar}\right\}\exp\left\{-\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma^2}\right\} = \ldots = \\ &= \sqrt[4]{\frac{\sigma^2}{\pi\hbar^2}}\exp\left\{-\frac{1}{2}\frac{(p-p_0)^2}{(\hbar/\sigma)^2}\right\}\exp\left\{-\frac{i}{\hbar}(p-p_0)x_0\right\}\,.\end{aligned} \tag{26}$$

(III) Spočtěte.

(IV) Kolik je a jaký význam má $P(p) = \left|\tilde{\psi}(p)\right|^2$?

Podívejme se ještě na limity, kdy $\sigma \to \infty$ a $\sigma \to 0$. Pro $\sigma \to \infty$ dostaneme

$$\psi(x) \approx C e^{\frac{i p_0 x}{\hbar}} , \tag{27}$$

tedy rovinnou vlnu. Pro $\sigma \to 0$ dostaneme Diracovu distribuci

$$\psi(x) \approx \delta(x - x_0) . \tag{28}$$

Naším druhým úkolem bude výpočet středních hodnot operátorů souřadnice a hybnosti. Konkrétně si spočteme střední hodnoty $\langle \hat{x} \rangle$, $\left\langle \hat{x}^2 \right\rangle$, $\langle \hat{p} \rangle$, $\left\langle \hat{p}^2 \right\rangle$ a střední kvadratické odchylky, tj. neurčitosti v určení polohy a hybnosti, $\Delta x = \sqrt{\langle (\hat{x} - \langle \hat{x} \rangle)^2 \rangle}$, $\Delta p = \sqrt{\langle (\hat{p} - \langle \hat{p} \rangle)^2 \rangle}$. Jak na to si ukážeme na výpočtu střední hodnoty $< \hat{x} >$:

$$\langle \hat{x} \rangle = \langle x | \, \hat{x} \, | x \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \langle \psi | x \rangle \, \langle x | \, \hat{x} \, | \psi \rangle \, \mathrm{d}x = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x) x \psi(x) \mathrm{d}x = \tag{29}$$

$$= |C|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} x \exp\left\{ - \frac{(x - x_0)^2}{\sigma^2} \right\} \mathrm{d}x = |C|^2 x_0 \sqrt{\pi \sigma^2} = x_0 . \tag{30}$$

Podobně dostaneme pro zbylé střední hodnoty a neurčitosti

$$\left\langle \hat{x}^2 \right\rangle = x_0^2 + \frac{1}{2} \sigma^2 , \tag{31}$$

$$\Delta x = \frac{\sigma}{\sqrt{2}} , \tag{32}$$

$$\langle \hat{p} \rangle = p_0 , \tag{33}$$

$$\left\langle \hat{p}^2 \right\rangle = p_0^2 + \frac{\hbar^2}{2\sigma^2} , \tag{34}$$

$$\Delta p = \frac{\hbar}{\sqrt{2}\sigma} . \tag{35}$$

(V) Proveďte výpočty. Poznamenejme, že výpočet střední kvadratické odchylky lze převést na

$$\left\langle (\hat{x} - \langle \hat{x} \rangle)^2 \right\rangle = \left\langle \hat{x}^2 - 2\hat{x} \langle \hat{x} \rangle + \langle \hat{x} \rangle^2 \right\rangle = \left\langle \hat{x}^2 \right\rangle - \langle \hat{x} \rangle^2 . \tag{36}$$

Povinné úlohy na příště

Tentokrát nejsou, užívejte volna!

Bonusová úloha

Tentokrát není.