Príklady na cvičenie z kvantovej teórie

0. *voľná častica, ľahké veci: na pripomenutie a utvrdenie, či doplnenie*
(a) Uvažujme voľnú časticu v jednom rozmere s hybnosťou p. Napíšte (*skúste spamäti*) vlnovú funkciu tejto voľnej častice normovanú na delta funkciu ako funkciu x a t.
Je častica v stacionárnom stave? Ktorým smerom sa hýbe, ak je $p > 0$, resp. $p < 0$? Z čoho to vidno, ako sa to dá dokázať? Čo je tu tá "častica" - ako je lokalizovaná? Ako môže byť v *stacionárnom* stave a mať hybnosť p (a teda sa *hýbať*)?
Ukážte, že $\Psi_p(x,t)$ je periodická funkcia v priestore aj čase. Ukážte, že perióda v priestore je rovná de Broglieho vlnovej dĺžke (*a tou je čo?*).

(b) Dokážte vzťah z prednášky: $\lim_{K\to\infty} \frac{1}{\pi}\frac{\sin Kx}{x} = \lim_{K\to\infty} \frac{1}{2\pi}\int_{-K}^{+K} e^{ikx} dk$. Čo majú tieto výrazy spoločné s delta funkciou?

(c) Ukážte, že pri normovaní vlnovej funkcie voľnej častice na konečný interval s periodickými okrajovými podmienkami $\Psi_p(x) = \Psi_p(x+L)$ sú povolené len hybnosti $p_n = (2\pi\hbar/L)n$, kde $n \in Z$.

1. Určte, čomu sú rovné integrály s delta funkciou v podintegrálnej funkcii.

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^x\,\delta(x-1)\,dx, \quad \int_{-2}^{+2} e^x\,\delta(x-1)\,dx, \quad \int_{10}^{100} e^x\,\delta(x-1)\,dx,$$

$$\int_{-1}^{0} dx \int_{-1}^{1} dy\, y\,\delta(x-y)\,, \quad \int_{-2}^{0} dx \int_{-1}^{1} dy\, y\,\delta(x-y)\,, \quad \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(3x)\,dx\,,$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} E\,\delta(E-\tilde{E}), dp,\ \tilde{E} > 0,\ E = p^2/2m\ \ldots\ mne\ vyslo\ \tilde{p}$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-mv^2/2k_BT}\,\delta(v)\,d^3v, \quad (T = const.,\ \delta(v) \equiv \delta(|\vec{v}|)\,),$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-mv^2/2k_BT}\,\delta(v^3)\,d^3v, \quad (v^3 = |\vec{v}|^3).$$

2.= A10. Zbierka, str.17, tu uvádzame skrátený text.
Aproximujte π elektróny v molekule hexatriénu šiestimi neinteragujúcimi elektrónmi viazanými na úsečku dĺžky L a určte rozdiel medzi energiou základného a prvého excitovaného stavu takejto sústavy. *($L = N \times \Delta\ell$, kde $N = 6$ je počet elektrónov a $\Delta\ell = 0.289/2 = 0.1445\,nm$ je stredná vzdialenosť medzi atómami uhlíka. Zarátané tu je vyčnievanie elektrónového oblaku z uhlíkového reťazca o dĺžku $\Delta\ell/2$ na každú stranu.)*

V akej časti el-mag spektra sú fotóny z takýchto prechodov? *Porovnajte s experimentálnym údajom uvedeným v texte v Zbierke.*
Je hexatrién vhodný ako farbivo? (T.j. odpovedá prechod pohlcovaniu či emitovaniu elmag žiarenia z viditeľného spektra?)

Aká podobná lineárna molekula: dlhšia (viac atómov C) či kratšia (menej atómov C), by mohla byť vhodná ako farbivo vďaka študovanému prechodu?

3. Uvažujme $N = 7$ identických neinteragujúcich častíc viazaných na *štvorec* o strane L.
Aká je degenerácia tohto základného stavu, ak sú častice fermióny? Môže byť pri nejakom počte fermiónov táto degenerácia rovná trom? Ak áno, pre aké N?
"Degenerácia" je počet rôznych stavov s rovnakou energiou.

V prípade dostatku času si to isté premyslite aj pre $N = 7$ častíc viazaných v kocke o hrane L.

4. Voľná častica s vlnovou funkciou normovanou na konečný (obrovský) interval dĺžky L a periodickými okr.podmienkami je vo všeobecnosti v čase $t = 0$ popísaná vlnovým balíkom $\sum_n c_n \Psi_{p_n}$, kde stav s ostrou hodnotou hybnosti $\Psi_{p_n} = e^{ip_n x/\hbar}/\sqrt{L}$. Hybnosť je diskrétna (nie spojitá), aby spĺňala periodické okrajové podmienky: $p_n = \frac{2\pi\hbar}{L} n, \; n \in Z$. V tomto príklade uvažujme, že tento balík sa redukuje na

$$\Psi(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} \left(\frac{2}{2+i} \, e^{i\,qx/\hbar} + c \, e^{-i\,qx/\hbar} \right),$$

kde hybnosť $q > 0$ je nejakým veľkým celočíselným násobkom $\frac{2\pi\hbar}{L}$ *(ide tu opäť len o splnenie periodických okr. podmienok, zároveň to zaručuje ortogonálnosť rovinných vĺn, z ktorých sa skladá naša superpozícia).*

(a) Určte všetky možné hodnoty c pre správne normovanú $\Psi(x)$.
(b) Aká je pravdepodobnosť, že pri meraní hybnosti v stave Ψ nameriame hybnosť q, hybnosť $-q$, hybnosť $2q$, hybnosť s absolútnou hodnotou rovnou q?
(c) Aká je stredná hodnota hybnosti častice v stave Ψ?
(d) Aká je neurčitosť hybnosti Δp častice v stave Ψ?
(e) Čo by ste odpovedali na otázku, aká je hybnosť častice v stave Ψ?
(f) Aké energie možno namerať v stave Ψ a s akou pravdepodobnosťou? Čo by ste odpovedali na otázku, aká je energia častice v stave Ψ?
(g) Častici v stave Ψ sme namerali hybnosť q.
Na tejto istej častici budeme potom merať hybnosť aj druhýkrát.
S akou pravdepodobnosťou akú hybnosť nameriame?
(h) Nech $\Psi(x) = \Psi(x, t = 0)$. Napíšte $\Psi(x, t)$ pre $t > 0$.
Zmenia sa v neskoršom čase odpovede na niektoré z otázok **(b)**-**(g)**? Na ktoré?