Sada příkladů z kvantové fyziky č.3

Termín odevzdání: před cvičením 2.11.

V této sadě příkladů nejprve ospravedlníme důležitost zkoumání vlastností komutátorů z minulého cvičení, když ukážeme, že komutátor je kvantový analog Poissonových závorek z Hamiltonovské mechaniky, v dalším příkladu vyřešíme Schrödingerovu rovnici pro jednoduchý jednodimenzionální systém, a v posledních dvou cvičeních naznačíme univerzální postup při řešení Schrödingerovy rovnice s centrálně symetrickým potenciálem.

Příklad č.1
Kanonické kvantování
Předpokládejme, že klasickým dynamickým proměnným A_i, B_j přiřadíme hermitovské[1] operátory $\hat{A}_i$, $\hat{B}_j$. Diracova kvantovací podmínka požaduje, aby Poissonovým závorkám v klasické fyzice odpovídal komutátor operátorů, tedy

$$\{A_1, A_2\} = A_3 \to [\hat{A}_1, \hat{A}_2] = i\hbar\hat{A}_3. \tag{1}$$

Ukažte, že tato volba kvantování je jediná možná, tedy, že jako jediná odpovídá základním vlastnostem Poissonových závorek (antisymetrie, bilinearita, Poissonova závorka součinu, Jacobiho identita, časová derivace,...).

Pozn.: Při důkazu mužete postupovat například následujícím způsobem: Definujte si kvantově mechanický analog Poissonových závorek $\{\hat{A}, \hat{B}\}_{QM}$ a předpokládejte, že má stejné vlastnosti jako Poissonovy závorky. Spočtěte $\{\hat{A}_1\hat{A}_2, \hat{B}_1\hat{B}_2\}_{QM}$ (nezapomeňte na možnou nekomutativitu operátorů) a ukažte, že z toho lze usoudit, že

$$\{\hat{A}_1, \hat{B}_1\}_{QM}\left(\hat{A}_2\hat{B}_2 - \hat{B}_2\hat{A}_2\right) = \left(\hat{A}_1\hat{B}_1 - \hat{B}_1\hat{A}_1\right)\{\hat{A}_2, \hat{B}_2\}_{QM} \tag{2}$$

a z nezávislosti operátorů můžeme usoudit, že $c\{\hat{A}, \hat{B}\} = [\hat{A}, \hat{B}]$. Ukažte, že $\Re(c) = 0$. Nakonec ukažte, že pokud v klasické mechanice platí, že $\{A_1, A_2\} = A_3$, pak v QM musí platit $[\hat{A}_1, \hat{A}_2] = i|c|\hat{A}_3$.

Příklad č.2
Částice v nekonečně hluboké potenciálové jámě
Nalezněte spektrum a vlastní vektory Hamiltoniánu částice v nekonečně hluboké potenciálové jámě, tedy $V(x) = 0$ pro $|x| \le a$ a $V(x) = \infty$ jinak.
Pozn.: řešte rovnici $\hat{H}\psi_n = E_n\psi_n$ a předpokládejte, že vlnové funkce jsou všude spojité a nulové pro $|x| \ge a$.

[1] hermitovské operátory jsou takové, pro které $\hat{A}^\dagger = \hat{A}$. Důvodem požadavek hermitovosti je fakt, že hermitovské operátory mají reálné spektrum a tudíž i množinu měřitelných hodnot.

Příklad č.3
Operátor momentu hybnosti
Operátor momentu hybnosti je definován v analogii s klasickou mechanikou jako

$$\hat{L_j} = \epsilon_{jkl}\hat{Q_k}\hat{P_l} = -i\hbar\epsilon_{jkl}x_k\frac{\partial}{\partial x_l} \tag{3}$$

. Nalezněte vyjádření L_j ve sférických souřadnicích a ukažte, že operátor

$$\hat{L^2} := \hat{L_1^2} + \hat{L_2^2} + \hat{L_3^2}$$

má ve sférických souřadnicích tvar:

$$L^2 = -\hbar^2\left[\frac{1}{sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2} + \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)\right]. \tag{4}$$

Pozn.: zaveďte transformaci $x = r\sin\theta\cos\phi$, $y = r\sin\theta\sin\phi$, $z = r\cos\theta$, spočítejte (nebo klidně i nalezněte v literatuře, na internetu - pozor na znaménka) výrazy pro $\frac{\partial}{\partial x}$ atd. a poté dosaďte do výrazů pro momenty hybnosti. Správně by operátory momentů hybnosti neměly mít žádnou závislost na r (můžete to pro jednoduchost i předpokládat).

Příklad č.4
Hamiltonián se sféricky symetrickým potenciálem
Mějme hamiltonián s potenciálem závislým pouze na r , tedy

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\sum_{i=1}^{3}\hat{P_i^2} + \hat{V}(\sqrt{x^2+y^2+z^2}). \tag{5}$$

Přechodem do sférických souřadnic ukažte, že má Hamiltonián následující tvar:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\left[\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{\hbar^2 r^2}\hat{L^2}(\theta,\phi)\right)\right] + \hat{V}(r). \tag{6}$$