## Úloha IV.S ... kvantová

6 bodů; průměr 4,36; řešilo 25 studentů

a) *Podívejte se do textu, jak působí operátor polohy $\hat{X}$ a hybnosti $\hat{P}$ na složky stavového vektoru v $x$-reprezentaci (vlnovou funkci) a spočítejte jejich komutátor, tj.*

$$(\hat{X})_x \left((\hat{P})_x \psi(x)\right) - (\hat{P})_x \left((\hat{X})_x \psi(x)\right) .$$

Tip *Zjistěte si, co se stane při derivaci součinu dvou funkcí.*

b) *Problém energetických hladin pro volnou kvantovou částici, tj. pro $V(x) = 0$, vypadá následovně:*

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi(x)}{\partial x^2} = E\psi(x).$$

1. *Zkuste jako řešení dosadit $\psi(x) = \mathrm{e}^{\alpha x}$ a zjistěte, pro jaká $\alpha$ (obecně komplexní) je $E$ kladná (nadále používejte pouze taková $\alpha$).*
2. *Je toto řešení periodické? Pokud ano, tak s jakou prostorovou periodou (vlnovou délkou)?*
3. *Je získaná vlnová funkce vlastním vektorem operátoru hybnosti (v $x$-reprezentaci)? Pokud ano, najděte souvislost mezi vlnovou délkou a hybností (tj. odpovídajícím vlastním číslem operátoru hybnosti) daného stavu.*
4. *Zkuste formálně spočítat hustotu pravděpodobnosti výskytu částice v prostoru naší vlnové funkci podle vzorce uvedeného v textu. Pravděpodobnost, že se částice vyskytuje v celém prostoru by měla být pro fyzikální hustotu pravděpodobnosti 1, tj. $\int_{\mathbb{R}} \rho(x)\,\mathrm{d}x = 1$. Ukažte, že nelze naší vlnovou funkci* nanormovat *(tj. přenásobit nějakou konstantou) tak, aby její formální hustota pravděpodobnosti podle vzorce z textu byla opravdovou, fyzikální hustotou pravděpodobnosti.*
5. Bonus *Jaká si myslíte, že je limitně neurčitost polohy částice, jejíž vlnová funkce je hodně blízká té naší? (Tj. blíží se ve všech vlastnostech, ale má vždy normovanou hustotu pravděpodobnosti a je to tudíž fyzikální stav.) Lze odhadnout pomocí Heisenbergových relací neurčitosti jaká přitom bude nejméně neurčitost hybnosti?*

Tip *Dávejte pozor na komplexní čísla, například kvadrát komplexního čísla je něco jiného než kvadrát velikosti komplexního čísla.*

c) *V druhém díle jsme si odvodili energetické hladiny elektronu ve vodíku pomocí redukované akce. Zvláštní shodou by řešení spektra hamiltoniánu v coulombickém potenciálu protonu vedlo na úplně samé energie, tj.*

$$E_n = -\mathrm{Ry}\frac{1}{n^2} ,$$

kde $\mathrm{Ry} = 13{,}6\,\mathrm{eV}$ *je energetická konstanta známá jako* Rydberg. *Elektron, který spadne z libovolné hladiny na $n = 2$, vyzáří energii ve formě jediného fotonu úměrnou rozdílu energie daných hladin. Ze kterých hladin musí elektron na druhou hladinu spadnout, aby bylo vyzářené světlo viditelné? Jakou budou mít odpovídající spektrální čáry barvu?*

Tip *Vzpomeňte si na fotoelektrický jev a na vztah mezi frekvencí světla a jeho vlnovou délkou.*

a) Z textu čtvrtého dílu seriálu víme, že $\left(\hat{X}\right)_x \varphi(x) = x\varphi(x)$ a že

$$\left(\hat{P}\right)_x \varphi(x) = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\varphi(x) .$$

Zároveň pro derivaci součinu platí $(fg)' = f'g + fg'$. Pro výraz v zadání tedy dostáváme

$$x\left(-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\varphi}{\partial x}\right) + -\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial x}\left(x\varphi(x)\right) = \mathrm{i}\hbar\varphi(x)\,,$$

což je přesně vztah postulovaný v textu seriálu.

b) Podle zadání zkusíme do rovnice dosadit $\mathrm{e}^{\alpha x}$. Musíme pouze vědět, že $(\mathrm{e}^{\alpha x})' = \alpha\mathrm{e}^{\alpha x}$. Dosazením a zderivováním tedy získáváme

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\alpha^2 = E\,.$$

Protože $E$ je nejen reálná, ale i kladná veličina, musí být $\alpha$ čistě imaginární

$$\alpha = \pm\mathrm{i}\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}\,.$$

Platí, že $\mathrm{e}^{\pm\mathrm{i}\varphi} = \cos\varphi \pm \mathrm{i}\sin\varphi$. Vidíme tudíž, že vlnová délka tohoto řešení je (identifikujeme $\varphi = \sqrt{2mE}/\hbar$)

$$\lambda = \frac{2\pi}{\varphi} = \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2mE}} = \frac{h}{\sqrt{2mE}}\,,$$

kde si vzpomeneme, že $\hbar = h/(2\pi)$. Jednoduchým výpočtem zjistíme, že naše řešení je opravdu vlastním vektorem operátoru hybnosti a že

$$\left(\hat{P}\right)_x \mathrm{e}^{\alpha x} = -\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial x}\mathrm{e}^{\alpha x} = -\mathrm{i}\hbar\alpha\mathrm{e}^{\alpha x}\,,$$

a tudíž $p = -\mathrm{i}\hbar\alpha$. Vlnová délka pak je

$$\lambda = \frac{h}{|p|}\,.$$

Přesně podle De Broglieho vztahu ze seriálu. Kvantová mechanika tedy přesně předpovídá charakter „hmotné vlny“ částic!

Přímým dosazením našeho řešení do vzorce pro hustotu pravděpodobnosti z textu seriálu dostáváme

$$\rho(x) = |\psi(x)|^2 = \psi^*(x)\psi(x) = \mathrm{e}^{\alpha^* x}\mathrm{e}^{\alpha x}\,,$$

kde $^*$ značí komplexní sdružení. Víme, že $\alpha$ je čistě imaginární a tedy $\alpha^* = -\alpha$, takže

$$\rho(x) = \mathrm{e}^{-\alpha x}\mathrm{e}^{\alpha x} = 1\,.$$

Není těžké ukázat, že tuto formální hustotu pravděpodobnosti nelze nanormovat, protože integrál z jakéhokoliv konstantního čísla přes celou reálnou přímku je nekonečný a nemůže být tudíž roven jedné. Tato vlnová funkce nebo vektor tedy neodpovídá nějakému opravdovému stavu částice, ale je spíš matematickou abstrakcí.

*Bonus* Tato vlnová funkce má přesnou hybnost $p$, a tudíž můžeme intuitivně pomocí Heisenbergových relací říct, že neurčitost její polohy tedy musí být nekonečná. To vskutku platí – hustota pravděpodobnosti je všude stejná, tudíž u blízkého stavu opravdové částice by byla všude skoro stejná, nebo přinejmenším hodně rozprostřená, a tudíž bychom fakticky nedokázali vůbec říct, kde by se mohla nacházet.

c) Přímou aplikací vzorce ze zadání a použitím faktu, že pro foton je[1] $E = hf = hc/\lambda$, dostáváme

$$\lambda_m = \frac{hc}{\mathrm{Ry}}\left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{m^2}\right)^{-1} ,$$

kde $m$ je hladina, na kterou z $n = 2$ elektron přeskakuje. Dosazením několika prvních přeskoků dostáváme:

$$\lambda_3 = 656\,\mathrm{nm}\,,$$
$$\lambda_4 = 486\,\mathrm{nm}\,,$$
$$\lambda_5 = 434\,\mathrm{nm}\,,$$
$$\lambda_6 = 410\,\mathrm{nm}\,,$$
$$\lambda_7 = 397\,\mathrm{nm}\,.$$

Všechny další přeskoky už mají kratší vlnové délky. Porovnáním s tabulkami zjistíme, že barvy prvních čtyřech čar jsou červená, tyrkysová, modrá a fialová. Pátý přeskok už je pak ultrafialový a oku neviditelný stejně jako všechny další.

***Vojtěch Witzany***
witzanyv@fykos.cz

***Miroslav Rapčák***
miro@fykos.cz



[1] Vztah mezi frekvencí a vlnovou délkou světla je základní vztah vlnové optiky.