Kvantová chemie
Cvičení 1

Shrnutí základních poznatků kvantové mechaniky

Problém 1 (Hejtman)

Ukažte, že množina všech polynomů maximálně 2. stupně je lineární vektorový prostor (LVP), tj. ověřte axiomy LVP. (Uvažujte jen reálné polynomy.)

Problém 2 (Hlobílková)

Ukažte, že na prostoru všech reálných polynomů maximálně 1. stupně je možno definovat skalární součin, pokud se omezíme s nezávislou proměnnou (např.) na interval $\langle 0,1\rangle$, předpisem $\langle P|Q\rangle = \int_0^1 P(x)Q(x)\mathrm{d}x$, tj. ověřte pro zadaný předpis platnost axiomů skalárního součinu.

Problém 3 (Toběrný)

Určete všechna (komplexní) čísla *c* tak, aby funkce $\varphi(\vec{r}) = ce^{-r^2/2}$ byla normována k jednotce ($\vec{r} \equiv [x,y,z]$ a $r = \|\vec{r}\|$).

Určete střední hodnotu polohy a hybnosti částice na přímce ve stavu $\varphi(x) = \frac{1}{\sqrt[4]{\pi}}e^{-x^2/2}$ (normovaná funkce).

Problém 4

Určete komutátory operátorů $\widehat{\mathrm{X}}_j = x_j$ a $\widehat{\mathrm{P}}_k = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x_k}$ a dosazením do obecných relací neurčitosti odvoďte Heisenbergovy relace neurčitosti pro polohu a hybnost (uvažujte odděleně případy $j = k$ a $j \neq k$).

(Návod: Komutátory při odvozování aplikujte na funkci $f(x_1, x_2, x_3)$ a využijte pravidla pro derivování součinu.)

Problém 5 (Hůla)

Napište stacionární Schrödingerovu rovnici v *X* a *P*-reprezentaci pro 1 částici na přímce pohybující se v poli anharmonického oscilátoru $V(x) = x^2 - 0{,}1x^3 + 0{,}01x^4$. Využijte, že v *P*-reprezentaci platí $\widehat{\mathrm{X}} = i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}p}$ a $\widehat{\mathrm{P}} = p$ a v *X*-reprezentaci $\widehat{\mathrm{P}} = -i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}$ a $\widehat{\mathrm{X}} = x$.