

Príklady na domácu úlohu z kvantovej teórie 2

Sada č.2

riešenia, prosím, odovzdajte do začiatku prednášky 21.03.2025

1. Zeemanov jav pre veľmi silné vonkajšie magnetické pole

Celý tento príklad je o elektróne v atóme vodíka, ktorý je na hladine s $n = 2$ a v priestore je zapnuté silné vonkajšie homogénne statické magnetické pole. Toto pole tu uvažujeme silné, čím chceme povedať, že jeho príspevky do poruchového hamiltoniánu sú podstatne väčšie ako príspevky zodpovedné za jemnú štruktúru.

(a) Na prednáške sme kompletne odvodili 8×8 maticu $H' = H'_1 + H'_2$, čo je podblok poruchového hamiltoniánu pre hladinu $n = 2$. V limite, ktorú tu predpokladáme, je zjavne $\beta \gg 1$. Diagonalizáciou tejto 8×8 matice určte, aké štiepenie, aké hladiny a s akou degeneráciou dostávame v silnom magnetickom poli.

(b) Ak je vonkajšie magnetické pole tak silné, že možno zanedbať jemnú štruktúru, možno celú poruchu H'_1 položiť rovnú nule. Jedinou poruchou je $H'_2 = \mu_B B \left(\frac{\hat{L}_z}{\hbar} + 2 \frac{\hat{S}_z}{\hbar} \right)$. Táto porucha je zjavne diagonálna v báze $\{ |\ell m s s_z\rangle \}$. Pripomeňme, že 8×8 matica H' spomínaná ako východzí bod v časti (a) bola vypočítaná na prednáške v báze $\{ |j j_z \ell s\rangle \}$. Bolo to preto, lebo táto báza diagonalizovala príspevok jemnej štruktúry. Teraz však jemnú štruktúru neuvažujeme, a preto priamo môžeme vypočítať maticu H'_2 v báze $\{ |\ell m s s_z\rangle \}$. Urobte tu tento výpočet a porovnajte výsledok s tým, čo ste dostali v časti (a). **[2 body]**

2. Zeemanov jav - jednoduché otázky

(a) Uvažujme jemnú štruktúru hladiny s $n = 2$ spolu so Zeemanovým javom (teda s mag.poľom takej veľkosti, že pôsobí porovnateľne s príspevkami od jemnej štruktúry). Predpokladajme báзовé stavy pre 8×8 maticu H' ako na prednáške. Vysvetlite, prečo je element H'_{16} rovný nule.

(b) Ako sa teda štiepi hladina s $n = 2$? Načrtnite rozstupy rozštiepených hladín pre $\beta = \frac{1}{2}$ a $\beta = 1$.

(c) Je možné, aby bola niektorá z rozštiepených hladín dvakrát degenerovaná? Určte najmenšie magnetické pole, prípadne najmenšie β , pre ktoré sa

to udeje.

(d) Vieme z našich doterajších prednášok, ak by sme sa "hecli", určiť štiepenie hladiny s $n = 3$? Ak nie, akú dodatočnú informáciu k tomu potrebujeme?

[2 body]

3. variačná metóda

Variačnou metódou možno preskúmať, ktorá z nasledujúcich funkcií najlepšie minimalizuje energiu elektrónu v atóme vodíka. V triede sme stručne okomentovali riešenie v časti (a). Nakoniec tam dostávame základný stav: známu vlnovú funkciu i energiu, a to pre $\beta_{min} = 1$. Na d.ú. to overte výpočtom. Ďalej preskúmajte jednu z možností (b)-(d) porovnávajúc výsledky s výsledkami z časti (a). Zhruba o koľko percent sa s nesprávnymi odhadmi (b)-(d) trafíme mimo hodnoty -13.6 eV ?

(a) $\Psi(r) = A(\beta) e^{-\beta r/a}$,

(b) $\Psi(r) = A(\beta) r e^{-\beta r/a}$, aká predstava atómu H motivuje tento odhad?

(c) $\Psi(r) = A(\beta) e^{-\beta r^2/a^2}$, aká predstava atómu H motivuje tento odhad?

(d) $\Psi(r) = A(\beta) r \sin \theta e^{-\beta r/a}$. Tu je motiváciou Bohrov model: výskyt elektrónu v rovine xy v oblasti pripomínajúcej kružnicu (záchranné koleso) o polomere rádovo a .

$A(\beta)$ je normovacia konštanta a β je variačný parameter.

Pomocné vzorce: $\Delta\Phi(r) = \Phi'' + \frac{2}{r}\Phi'$, $a = \hbar/(mc\alpha)$ je Bohrov polomer,

$$\hbar^2/(ma^2) = \alpha\hbar c/a = mc^2\alpha^2 = 2|E_1| = 2 \times 13.6 \text{ eV}.$$

Pomocné integrály: $\int_0^\infty t^N e^{-t} dt = N!$ pre $N = 0, 1, 2, \dots$,

$$\int_0^\infty t e^{-t^2} dt = \frac{1}{2}, \int_0^\infty e^{-t^2} dt = \frac{\sqrt{\pi}}{2}, \int_0^\infty t^2 e^{-t^2} dt = \frac{1}{2} \frac{\sqrt{\pi}}{2}, \int_0^\infty t^4 e^{-t^2} dt = \frac{3}{2} \frac{1}{2} \frac{\sqrt{\pi}}{2}.$$

[4 body za časť (a) a za jedno z riešení (b), (c) alebo (d)]

[+ 2 body ako bonus za každé ďalšie riešenie]

4. variačná metóda

Jeden z najdôležitejších a najužitočnejších príkladov minulého semestra je príklad s časticou na úsečke v stave popísanom vlnovou funkciou $\Psi(x) = Ax(L-x)$. Za úlohu bolo nájsť pravdepodobnosti namerať v tomto stave energie E_n . (Zbierka, str. 46 v tlačenej verzii, časť (d).) Ukáže sa, že s viac ako 99%-nou pravdepodobnosťou nameriame energiu základného stavu.

Z hľadiska variačnej metódy ide o provokatívny výsledok. Stav $\Psi(x)$ sme

navrhli z pohodlnosti, nakoľko zjavne spĺňa okrajové podmienky a umožňuje ľahké integrovanie. Ako to, že sa s ním trafíme tak blízko k skutočnému základnému stavu? Čo ak sa s trochou snahy jeho vhodnou parametrizáciou dopracujeme variačnou metódou k energii ešte nižšej ako je základná hladina vypočítaná zo SchR? V tomto príklade ukážeme, že pre jednu takúto parametrizáciu, nech sa čo ako snažíme, energiu nižšiu ako základnú nedostaneme.

(a) Vypočítajte strednú hodnotu energie v stave $\Psi(x)$. Vyjadrite ju v tvare $\overline{E}|_{\beta=1} = \frac{\hbar^2}{2mL^2} X$, kde X bude vami vypočítaná reálna hodnota.

Poznámka: Ináč povedané, energiu tu budeme udávať v jednotkách $\hbar^2/(2mL^2)$.

(b) Porovnajete X s vlastnou energiou odpovedajúcou vlastnému stavu hamiltoniánu $\Psi_1(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin(\pi x)$, ktorý sme našli riešením bezčasovej SchR pre časticu na úsečke. Ktorá ja nižšia? O koľko percent sa líšia?

(c) Variačnou metódou nájdite priblíženie pre energiu základného stavu vychádzajúc z parametrizovanej vlnovej funkcie $\Psi(x, \beta) = A(\beta) x^\beta (L - x)^\beta$, kde $\beta \geq \frac{1}{2}$ je variačný parameter a $A(\beta)$ je normovacia konštanta. Výsledok porovnajete s vlastnou energiou stavu $\Psi_1(x)$.

Pomôcky: Namiesto prechodu od x k bezrozmernej integračnej premennej $t = x/L$ zvážte možnosť priamo položiť $L = 1$ pri všetkom počítaní. Kde potom treba vo výsledku dopísať L ?

Použite pomocný integrál $\int_0^1 t^a (1-t)^b dt = \Gamma(a+1)\Gamma(b+1)/\Gamma(a+b+2)$, kde $\Gamma(x+1) = x\Gamma(x)$ je gamma funkcia.

Pre vašu kontrolu: mne vyšlo, že $\overline{E}(\beta)$ je úmerná $(\beta + \frac{3}{8} \frac{1}{\beta-1/2} + C)$, kde C je konštanta nezávislá na β .

Nakoniec minimalizujte $\overline{E}(\beta)$ vzhľadom na variačný parameter a numericky vyčíslite X_{min} vo vzťahu $\overline{E}_{min} = \frac{\hbar^2}{2mL^2} X_{min}$.

Dostali ste výsledok menší ako energia stavu $\Psi_1(x)$?

O koľko percent sa líšia E_1 a $\overline{E}_{min}$?

O koľko percent sme sa zlepšili voči energii stavu $\Psi(x) = Ax(L-x)$ vďaka použitiu variačnej metódy? **[4 body]**

5. viriálový teorém

Aký viriálový teorém platí pre stacionárne stavy elektrónu v atóme vodíka?

Určte z neho strednú hodnotu $\frac{1}{r}$ v každom stacionárnom stave. **[2 body]**

6. klasický rozptyl

Na prednáške sme prediskutovali klasický rozptyl projektilu na tvrdej guli, pričom sme odvodili, že dopadajúce častice (projektily) budú rozptyľované rovnako do všetkých smerov. Uvažujme teraz klasický rozptyl na dlhom valci o polomere R (s osou v smere z), kde častice dopadajú zo smeru kolmého na os valca, nech je to zo smeru x . Úlohu možno zredukovať na rozptyl v rovine xy na tvrdej kružnici. A vlastne stačí na hornej polkružnici, keďže na dolnej bude rovnaký výsledok. A aj z tej polkružnice stačí uvažovať len prednú štvrtkružnicu, na ktorej naozaj dochádza k rozptylu. Diferenciálny účinný prierez bude teraz namiesto $\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)$ veličina $\left(\frac{d\sigma}{dz d\theta}\right)$ pre valec v troch rozmeroch, resp. iba $\left(\frac{d\tilde{\sigma}}{d\theta}\right)$ pre rozptyl v rovine na (pol či štvrt)kružnici. V tomto druhom prípade $d\tilde{\sigma}$ už nie je *plocha* (priemetu silového centra do priečnej roviny), ale *dĺžka* jednorozmerného priemetu silového centra do smeru y , čiže do smeru kolmého na smer šírenia projektilu, ale stále v rovine xy . Konkrétne dĺžka priemetu kúska kružnice, odkiaľ sa častica rozptyľuje do uhla θ . Integrál cez rozptyľový uhol θ z veličiny $\left(\frac{d\tilde{\sigma}}{d\theta}\right)$ tu potom dá celkovú dĺžku priemetu terča do smeru y .

(a) Určte $\left(\frac{d\tilde{\sigma}}{d\theta}\right)$.

Do ktorého smeru sa odráža najviac častíc?

(b) Integráciou výsledku z časti (a) určte celkový účinný prierez $\tilde{\sigma}$. Okomentujte, či výsledok dáva súhlas so zdravým rozumom. **[2 body]**

7. kvantový rozptyl v jednom rozmere

Vychádzajúc z prednášky a na základe zachovania toku hustoty pravdepodobnosti dokážte, že pre koeficienty odrazu a prechodu platí $|r|^2 + |t|^2 = 1$. **[2 body]**

8. bonus príklad: Starkov jav v 1.ráde poruch. teórie pre hladinu s $n=3$

Aká je degenerácia hladiny s $n = 3$?

Na základe riešeného príkladu A.1 kapitoly 12 v Zbierke (autori: Pišút, Černý, Prešnajder) vysvetlite slovne, k akému štiepeniu tejto hladiny dochádza vo vonkajšom elektrickom poli, a odkiaľ to štiepenie pochádza (čiže ktoré elementy poruchy sú tu nenulové). Vo svojej odpovedi nemusíte nič počítať, aj keď iniciatíve sa medze nekladú. **[2 body]**

9. bonus príklad: klasický rozptyl v troch rozmeroch

Vychádzajúc z prednášky odvodte diferenciálny účinný prierez pre klasický rozptyl na elipsoide, pričom častice dopadajú v smere hlavnej osi elipsoidu. Výsledok zintegrujte cez priestorový uhol a okomentujte, či Váš celkový účinný prierez dáva súhlas so zdravým rozumom. **[2 body]**