

Príklady na domácu úlohu z kvantovej teórie

Sada č.10

riešenia, prosím, odovzdajte do začiatku cvičenia v piatok 12.12.2025

1. Laguerrove polynómy

(a) Sú aj Laguerrove polynómy buď iba párne alebo nepárne, podobne ako Legendrove a Hermitove polynómy?

Pre Vašu odpoveď skúste dať hlbší dôvod než iba pozorovanie, čo nám vyšlo z riešenia diferenciálnej rovnice.

(b) Môžeme elektrónu s nenulovým momentom hybnosti namerať jeho polohu v počiatku?

Môžeme tam namerať elektrón s nulovým momentom hybnosti?

(c) V tejto otázke uvažujme pre jednoduchosť iba stavy s $\ell = 0$. Koľko nulových bodov majú radiálne funkcie $R_{10}(r)$ a $R_{20}(r)$, ktoré boli odvodené na prednáške, a $R_{30}(r)$ z cvika (pozri tiež príklad 2. nižšie)? Čo to znamená pre meranie polohy elektrónu?

Odpoveď zovšeobecnite na počet nulových bodov Laguerrovho polynómu v $R_{N0}(r)$.

Dáva to zmysel, že počet nulových bodov rastie s rastúcim N ?

Bude to rovnako aj pre stavy s $\ell > 0$?

Mohlo by to súvisieť s tým, že ide o vlastné funkcie $\hat{H}$ s čoraz vyššou energiou? Ak áno, okomentujte viac, ako to spolu súvisí. **[3 body]**

2. radiálna funkcia $R(r)$ z rekurentného vzťahu

(a) Odvoďte, čomu sú rovné $R_{30}(\rho)$, $R_{31}(\rho)$ a $R_{32}(\rho)$, až na normováciu konštantu.

(b) Vybodkujte v 3-d priestore hustotu pravdepodobnosti výskytu elektrónu v druhom excitovanom stave s nulovým momentom hybnosti. **[2 body]**

3. elektrón v atóme vodíka, prvý excitovaný stav s $L^2 = 0$

Uvažujme elektrón v atóme vodíka v prvom excitovanom stave popísanom vlnovou funkciou $\Psi_{200}(\vec{r})$.

(a) Aká je najmenej pravdepodobná poloha elektrónu?

Pre poriadok: Otázka je na jeden bod $\vec{r}_{min}$, ale máme na pamäti, že minimum hustoty pravdepodobnosti znamená najmenšiu pravdepodobnosť výskytu nie v bode $\vec{r}_{min}$, ale v infinitezimálne malom objeme centrovanom na $\vec{r}_{min}$.

(b) Aká je najpravdepodobnejšia poloha elektrónu?

Dajte pozor, tu je ľahké sa pomýliť v odpovedi.

(c) Aká je najpravdepodobnejšia vzdialenosť elektrónu od jadra?

Pýtame sa, aký polomer má "cibuľová" guľová vrstvička infinitezimálne malej hrúbky dr , v ktorej je najväčšia šanca nájsť elektrón. Teraz sa teda nepýtame na polohu, ako v otázkach (a) a (b).

(d) Aká je v tomto stave stredná vzdialenosť $\bar{r}$ elektrónu od jadra? Výsledok skontrolujte so všeobecným výsledkom - prvý zo vzťahov (17) v ZU kap. 4.11. Prekvapil vás výsledok v porovnaní s hodnotou $\bar{r} = a$ pre základný stav? **[3 body]**

4. mierne nadväzuje na predchádzajúci príklad

Elektrón v atóme H je v prvom excitovanom stave popísanom vlnovou funkciou $\Psi_{200}(\vec{r}) = A(\rho - 2)e^{-\rho/2}$, kde ρ je bezrozmerná radiálna súradnica $\frac{r}{a_B}$.

Priestor je teraz prirodzene rozdelený na vnútornú oblasť s výskytom elektrónu pre $r < 2a_B$ a vonkajšiu oblasť $r > 2a_B$. S akou pravdepodobnosťou sa elektrón nachádza vo vonkajšej oblasti? Pred počítaním si výsledok najskôr tipnite a výsledok počítania okomentujte.

Návod: potrebný integrál $\int_2^\infty d\rho$ počítajte substitúciou integračnej premennej $\rho \rightarrow \rho_{NEW} + 2$, vďaka ktorej bude dolná hranica integrácie nula a z integrálov budú faktoriály.

Výsledok je pravdivý! Budeme ho potrebovať v budúcnosti pri diskusii Starkovho javu. **[2 body]**

5. inertné a prudko reagujúce chemické prvky

Nasledujúce otázky čiastočne nadväzujú na príklad 8. v DÚ9.

(a) Prečo sú hélium alebo neón inertnými, t.j. veľmi slabo reagujúcimi chemickými prvkami? *Pomôcka: Keď sú elektrónmi obsadené presne všetky ich kvantové stavy na jednej či viacerých najnižších hladinách, a na zostávajúcich vyšších hladinách nie je žiaden elektrón, tak sa elektrónom "nechce" viazať sa aj k ďalšiemu inému atómu a atóm s takto obsadenými hladinami potom tvorí inertný chemický prvok.*

(b) Prečo sú lítium a sodík prudko reagujúcimi chemickými prvkami? *Pomôcka: Ak sú elektrónmi obsadené všetky stavy na najnižšej hladine, prípadne hladinách a ešte je tam aj jeden elektrón, ktorý je jediný na vyššej energetickej hladine, tak tento posledný elektrón je vysoko reaktívny a ľahko opúšťa svoj atóm.*

(c) Prečo je fluór prudko reagujúcim chemickým prvkom?

(d) Čo je to oxidácia, resp. horenie z hľadiska elektrónovej štruktúry atómu kyslíka, dalo by sa z toho (tak zhruba) vyvodiť, prečo množstvo látok dobre horí?

(e) Prečo máme H_2O (vodu) a nemáme H_3O ? **[3 body]**

6. meranie energie

(a) Uvažujme elektrón v atóme vodíka v nestacionárnom stave popísanom vlnovou funkciou $\Psi(\vec{r})$. S akou pravdepodobnosťou aké hodnoty energie nameriame častici, pre ktorú

$$\Psi(\vec{r}) = \frac{2+i}{\sqrt{14}} \Psi_{320}(\vec{r}) + \frac{2}{\sqrt{14}} \Psi_{310}(\vec{r}) - \frac{1-i}{\sqrt{14}} \Psi_{520}(\vec{r}) + \frac{\sqrt{2}-i}{\sqrt{14}} \Psi_{510}(\vec{r}) ?$$

(b) Ak by sme namiesto energie merali elektrónu v stave Ψ priemet momentu hybnosti L_z , s akou pravdepodobnosťou aké hodnoty nameriame?

(c) V akom stave (s akou vlnovou funkciou) je elektrón po meraní L_z v časti (b)?

Ak potom meriame energiu, s akou pravdepodobnosťou aké hodnoty nameriame?

(d) Aké hodnoty L^2 a s akými pravdepodobnosťami nameriame elektrónu po meraní energie z časti (c)? [2 body]

7. meranie energie

Aké energie a s akou pravdepodobnosťou nameriame elektrónu v atóme vodíka v stave popísanom vlnovou funkciou (A je normovacia konštanta)

(a) $\Psi(\vec{r}) = A \left(\frac{r}{a_B} \cos \theta + \left(2 - \frac{r}{a_B} \right) \right) e^{-r/2a_B},$

(b) $\Psi(\vec{r}) = A \left(5 \frac{r}{a_B} \cos \theta + \left(2 - \frac{r}{a_B} \right) \right) e^{-r/2a_B},$

(c) $\Psi(\vec{r}) = A \left(5 \frac{r}{a_B} \sin \theta e^{i\varphi} + \left(2 - \frac{r}{a_B} \right) \right) e^{-r/2a_B},$

(d) $\Psi(\vec{r}) = A \left(5 \frac{r}{a_B} \sin \theta \cos \varphi + \frac{r}{a_B} \cos \theta \right) e^{-r/2a_B}.$ [2 body]

8. meranie L^2 a L_z

Uvažujte ešte raz štyri vlnové funkcie elektrónu v atóme vodíka ako sú zadané v predchádzajúcom príklade.

V ktorých prípadoch (ak také sú) vieme s určitosťou predpovedať výsledok jedného merania L^2 ? Aká hodnota L^2 sa vtedy meria a v akom stave je elektrón po tomto meraní?

V ktorých prípadoch (ak také sú) vieme s určitosťou predpovedať výsledok jedného merania L_z ? Aká hodnota L_z sa vtedy meria a v akom stave je elektrón po tomto meraní? [2 body]

9. meranie energie elektrónu v nestacionárnom stave

S akou pravdepodobnosťou nameriame elektrónu energiu základného stavu a s akou energiu prvého excitovaného stavu, ak je tento elektrón v stave popísanom vlnovou funkciou $\Psi(\vec{r}) = A e^{-\beta r/a_B}$, kde β je fixovaný reálny kladný parameter. (Závisí od neho aj normovacia konštanta A .)

Viete vopred, pre ktorú hodnotu β bude mať $P(E_1)$ maximum? Overte toto maximum z Vášho vypočítaného výsledku.

Pre ktoré hodnoty β , ak také sú, je $P(E_2) > P(E_1)$? [2 body]

10. BONUS príklad: meranie energie

Uvažujme elektrón v atóme vodíka v stave popísanom vlnovou funkciou (A je normovacia konštanta)

$\Psi(\vec{r}) = A \left[\left(\frac{r}{a_B} \cos \theta + \left(2 - \frac{r}{a_B} \right) \right) e^{-r/2a_B} + e^{-r/a_B} \right]$. Určte, aké hodnoty energie a s akou pravdepodobnosťou nameriame tomuto elektrónu. [2 body]