

Príklady na cvičenie z kvantovej teórie

1. základné vlastnosti riešení $\hat{H}\Psi = E\Psi$ pre elektrón v atóme vodíka

(a) V akom separovanom tvare píšeme vlnovú funkciu $\Psi(\vec{r})$ stacionárneho stavu elektrónu v atóme vodíka?

Od akých kvantových čísel závisí uhlová časť tejto vlnovej funkcie? Aké hodnoty môžu nadobúdať tieto kvantové čísla?

Od akých kvantových čísel závisí radiálna časť tejto vlnovej funkcie? Aké hodnoty môžu nadobúdať tieto kvantové čísla?

Od akých kvantových čísel potom závisí $\Psi(\vec{r})$?

(b) Osobitne určte, či môže byť hlavné kvantové číslo N menšie než ℓ . Alebo rovné ℓ . Odpoveď vysvetlite.

(c) Osobitne vysvetlite, či môže byť hlavné kvantové číslo N rovné nule.

2. radiálna funkcia $R_{N\ell}(r)$

(a) $R_{N\ell}$ píšeme vo všeobecnosti v tvare $R_{N\ell}(\rho) = \rho^\ell L(\rho) e^{-\rho/N}$.

Čomu je rovná premenná ρ ?

Odkiaľ sa zobrali jednotlivé výrazy v tomto vzťahu?

(b) Akého stupňa je tu Laguerrov polynóm $L(\rho)$, ak je $\ell = 0$ a N nadobúda ľubovoľnú hodnotu? (T.j. aká je najvyššia mocnina ρ v tomto polynóme?) Odpoveď vysvetlite.

(c) Akého stupňa je tu Laguerrov polynóm $L(\rho)$, ak je $\ell = 1$ a N nadobúda ľubovoľnú povolenú hodnotu? Odpoveď vysvetlite.

3. ortogonalita

(a) Ako by ste sformulovali podmienku ortogonalit vlnových funkcií $\Psi_{N\ell m}(\vec{r})$ a $\Psi_{N'\ell' m'}(\vec{r})$, ktoré obe popisujú stacionárne stavy elektrónu v atóme vodíka?

(b) Pre $\Psi_{N\ell m}(\vec{r}) = R_{N\ell}(r) Y_{\ell m}$ a podobnú separáciu $\Psi_{N'\ell' m'}(\vec{r})$, kedy je ortogonalita týchto vlnových funkcií odvodená od ortogonalit guľových funkcií $Y_{\ell m}$ a $Y_{\ell' m'}$ a kedy od ortogonalit radiálnych funkcií $R_{N\ell}$ a $R_{N'\ell'}$?

(c) Na prednáške sme odvodili, až na konštantu, radiálne funkcie R_{10} , R_{20} a R_{21} . Vzhľadom na Vaše odpovede v časti (b), t.j. zatiaľ bez počítania, určte, ktoré funkcie R tu sú (musia byť) ortogonálne? A ktoré nemusia byť (a ani nie sú) ortogonálne?

(d) Tvrdenia v časti (c) teraz overte výpočtom.

4. normovanie

Čomu je rovná normovacia konštanta vlnovej funkcie základného stavu? Vypočítajte ju.

Čomu je rovná normovacia konštanta vlnovej funkcie $\Psi_{210}(\vec{r})$?

5. fyzikálny význam prvých $\Psi_{N\ell m}(\vec{r})$

(a) Vybodkujte v 3-d priestore hustotu pravdepodobnosti výskytu elektrónu v základnom stave.

(b) Vybodkujte v 3-d priestore hustotu pravdepodobnosti výskytu elektrónu v prvom excitovanom stave s nulovým momentom hybnosti.

(c) Nakoniec vyhodkujte v 3-d priestore hustotu pravdepodobnosti výskytu elektrónu v prvom excitovanom stave s celkovým momentom hybnosti $L^2 = 2\hbar^2$ a závislosťou Ψ na uhloch rovnou

(i) $Y_{10}(\theta, \varphi)$,

(ii) $\frac{1}{\sqrt{2}} (Y_{11}(\theta, \varphi) + Y_{1-1}(\theta, \varphi))$,

(iii) $\frac{1}{\sqrt{2}} (Y_{11}(\theta, \varphi) - Y_{1-1}(\theta, \varphi))$.

6. $R(r)$ z rekurentného vzťahu

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

(b) Vyhodkujte v 3-d priestore hustotu pravdepodobnosti výskytu elektrónu v druhom excitovanom stave s nulovým momentom hybnosti.