

Príklady na domácu úlohu z kvantovej teórie 2

Sada č.2

riešenia, prosím, odovzdajte do začiatku prednášky 24.03.2026

1. Zeemanov jav: dopočítanie H' pre elektrón v základnom stave atómu vodíka

Na prednáške o jemnej štruktúre sme sa venovali (aj) základnému stavu elektrónu v atóme vodíka, ale diskusiu tejto hladiny sme preskočili pri počítaní príspevkov od vonkajšieho magnetického poľa. Dopočítajte tieto príspevky v rovnakej báze, v akej sme počítali jemnú štruktúru a rozhodnite, či hladina zostáva dvakrát degenerovaná alebo nie. Ak nie, aké sú rozostupy rozštiepených hladín?

Načrtnite, ako sú tieto hladiny posunuté voči hodnote $\varepsilon_1 = -13.6 \text{ eV}$? **[2 body]**

2. Zeemanov jav: dopočítanie H' pre prvú excitovanú hladinu

Na prednáške sme pre hladinu s $n = 2$ detailne počítali 8×8 maticu H' , do ktorej prispievala jemná štruktúra (len na diagonále) a vonkajšie magnetické pole (aj s členmi mimo diagonály). Vynechali sme výpočet príspevkov magnetického poľa do elementov H'_{66} , H'_{67} , H'_{76} a H'_{77} .

(a) Predveďte výpočet týchto vynechaných elementov a napíšte kompletnú H' maticu v prvom ráde poruchovej teórie.

(b) Vysvetlite, akú bázu treba použiť pre teoretickú predpoveď Zeemanovho javu poruchovou metódou. Je to báza $\{|j j_z \ell s\rangle\}$? Alebo báza $\{|\ell m s s_z\rangle\}$? **[2 body]**

3. Zeemanov jav - jednoduché otázky

(a) Uvažujme jemnú štruktúru hladiny s $n = 2$ spolu s vplyvom magnetického poľa 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) Graficky odpovedzte na otázku, ako sa teda štiepi hladina s $n = 2$? Načrtnite rozostupy rozštiepených hladín a ich degeneráciu pre $\beta = \frac{1}{2}$ v porovnaní s rozstupmi pre $\beta = 1$. Ide tu len o toto porovnanie, netreba počítať čomu sú presne rovné jednotlivé hladiny. K rozštiepeným hladinám dopíšte, ak sa to dá, kvantové čísla j , j_z a ℓ .

(c) Je možné, aby - podľa výsledkov prvého rádu poruchovej teórie - bola niektorá z rozštiepených hladín dvakrát degenerovaná? Určte najmenšie magnetické pole (stačí 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 to ešte nevieme, akú dodatočnú informáciu k tomu potrebujeme? Pomôcka: ide o podobnú dodatočnú informáciu, akú sme potrebovali pre štiepenie hladiny s $n = 2$. **[4 body]**

4. Zeemanov jav: povolené prechody

Na prednáške sme preskočili takú dôležitú vec, akou sú povolené prechody medzi rozštiepenými hladinami. Výberové pravidlá v prvom ráde poruchovej teórie sú:

(i) prechody nastanú iba medzi hladinami s rozdielom $\Delta\ell = \pm 1$,

(ii) aj spomedzi týchto prechodov sú povolené iba tie, pre ktoré $\Delta j_z = 0$ alebo ± 1 .

Odvodiť sa to dá v rámci kvantovej teórie poľa, podľa ktorej prechody v prvom ráde poruchovej teórie odpovedajú jednofotónovej výmene, pričom rozhodujú vlastnosti fotónu voči diskretným symetriám (parita a nábojová konjugácia), ktoré sa zachovávajú pri elektromagnetických interakciách.

Znamená to, že prechod medzi dvomi hladinami je zakázaný v prvom ráde poruchovej teórie, ak majú tieto hladiny rovnaké kvantové číslo ℓ . Takisto je zakázaný, ak majú hladiny rozdiel $|\Delta j_z|$ väčší ako 1.

Vychádzajúc z Vašej odpovede v príklade 3.(b) určte všetky povolené prechody medzi rozštiepenými hladinami s $n = 2$ vo vonkajšom magnetickom poli. Máte všetkých desať?

Ktorý povolený prechod má najmenšiu a ktorý najväčšiu vlnovú dĺžku pre $\beta < 1$?

[2 body]

5. Zeemanov jav pre veľmi silné vonkajšie magnetické pole

Uvažujme elektrón v atóme vodíka v prvom excitovanom stave. V priestore je zapnuté silné vonkajšie homogénne statické magnetické pole $\vec{B}_{ext}$, ktoré definuje smer osi z . Slovom "silné" tu chceme povedať, že jeho príspevky do poruchového hamiltoniánu sú oveľa (rádovo) väčšie ako príspevky jemnej štruktúry, takže jemnú štruktúru možno zanedbať.

(a) Na prednáške plus v príklade 2. sme kompletne odvodili 8×8 maticu $H' = H'_j + H'_{mag}$, čo je podblok poruchového hamiltoniánu pre hladinu $n = 2$ v prvom ráde poruchovej teórie. H'_j je za jemnú štruktúru a H'_{mag} od magnetického poľa. Pripomeňme, že magnetické pole prispelo členmi lineárnymi v parametri $\beta = \frac{\mu_B B_{ext}}{|\varepsilon_2| \alpha^2 / 16}$. 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 z hladiny ε_2 v silnom magnetickom poli pri zanedbaní jemnej štruktúry.

(b) Ak je vonkajšie magnetické pole tak silné, že možno zanedbať jemnú štruktúru, možno celú poruchu H'_j položiť rovnú nule. Jedinou poruchou je $H'_{mag} = \mu_B B_{ext} \left(\frac{\hat{L}_z}{\hbar} + 2 \frac{\hat{S}_z}{\hbar} \right)$.

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'_{mag} v báze $\{ |\ell m s s_z\rangle \}$. Urobte tu tento výpočet a porovnajte výsledok s tým, čo ste dostali v časti (a). Dostávate zhodu?

[4 body]

6. variačná metóda

Variačnou metódou možno preskúmať, ktorá z funkcií (a) - (d) (pozri nižšie) najlep-

šie minimalizuje energiu elektrónu v atóme vodíka. V triede sme predviedli riešenie v časti (a). Dostali sme základný stav: známu vlnovú funkciu i energiu, a to pre $\beta_{min} = 1$. Vy preskúmajte variačnou metódou jednu z možností (b)-(d) a porovnajte výsledok pre E_{min} s energiou 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 $N = 0, 1, 2, \dots$,

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

[2 body za jedno z riešení (b), (c) alebo (d)]

[+ 2 body ako bonus za každé ďalšie riešenie]

7. 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) Porovnajte 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 je 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 porovnajte 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]**

8. 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]**

9. 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 $(\frac{d\sigma}{d\Omega})$ veličina $(\frac{d\sigma}{dz d\theta})$ pre valec v troch rozmeroch, resp. iba $(\frac{d\tilde{\sigma}}{d\theta})$ pre rozptyl v rovine na pol či štvrtkružnici. 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 $(\frac{d\tilde{\sigma}}{d\theta})$ tu potom dá celkovú dĺžku priemetu terča do smeru y .

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

Z toho určte, 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]**

10. 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 počítat, aj keď iniciatíve sa medze nekladú.
[2 body]

11. bonus príklad: klasický rozptyl v troch rozmeroch

Vychádzajúc z prednášky odvoďte 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]