

Časť 0. - Matematické základy

1. Operácie s maticami:

(a) Pre matice

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 2 \\ -1 & 3 \end{bmatrix}, \quad B = \begin{bmatrix} 2 & -1 \\ 0 & 4 \end{bmatrix}$$

vypočítajte $A + B$, AB a BA . Overte, či $AB = BA$.

(b) Vypočítajte determinant matice

$$A = \begin{bmatrix} -1 & 2 \\ 2 & 2 \end{bmatrix}.$$

Nájdite jej vlastné hodnoty a príslušné vlastné vektory. Vlastné vektory normalizujte a overte ich ortogonalitu.

(c) Nájdite vlastné hodnoty matice

$$B = \begin{bmatrix} -2 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 2 \\ 0 & 2 & 2 \end{bmatrix}.$$

Určte normalizovaný vlastný vektor patriaci ku každej vlastnej hodnote.

2. Goniometrické výrazy

(a) Upravte výrazy pomocou goniometrických identít:

$$\sin^2 x + \cos^2 x, \quad 1 - \cos(2x), \quad \sin(2x).$$

(b) Vyjadrite súčin

$$\sin x \cos x$$

pomocou funkcie s dvojnásobným argumentom.

(c) Vypočítajte

$$\int_0^{2\pi} \sin x \, dx, \quad \int_0^{2\pi} \sin^2 x \, dx, \quad \int_0^{2\pi} \sin x \cos x \, dx.$$

(d) Overte, že pre celé kladné čísla $m \neq n$

$$\int_0^\pi \sin(mx) \sin(nx) dx = 0.$$

3. Vyriešte diferenciálne rovnice druhého rádu s danými okrajovými podmienkami:

(a)

$$\frac{d^2 x(t)}{dt^2} + k^2 x(t) = 0,$$
$$x(0) = L, \quad \left. \frac{dx}{dt} \right|_{t=0} = 0.$$

(b) Nájdite riešenie rovnice

$$\frac{d^2 y(x)}{dx^2} + k^2 y(x) = 0$$

spĺňajúce okrajové podmienky

$$y(0) = 0, \quad y(L) = 0.$$

Určte, pre ktoré hodnoty k existuje netriviálne riešenie.

4. Komplexné čísla

(a) Pre komplexné číslo

$$z = 3 - 4i$$

určte komplexne združené číslo z^* , absolútnu hodnotu $|z|$ a číslo zapíšte v exponenciálnom tvare

$$z = r e^{i\varphi}.$$

(b) Pomocou Eulerovho vzťahu

$$e^{i\varphi} = \cos \varphi + i \sin \varphi$$

vyjadrite $\cos \varphi$ a $\sin \varphi$ pomocou komplexných exponenciálnych funkcií.

(c) Pre komplexné vektory

$$\mathbf{u} = \begin{bmatrix} 1 \\ i \end{bmatrix}, \quad \mathbf{v} = \begin{bmatrix} i \\ 1 \end{bmatrix}$$

vypočítajte skalárne súčiny

$$\mathbf{u}^\dagger \mathbf{u}, \quad \mathbf{v}^\dagger \mathbf{v}, \quad \mathbf{u}^\dagger \mathbf{v}.$$

(d) Pre maticu

$$A = \begin{bmatrix} 2 & i \\ -i & 3 \end{bmatrix}$$

vytvorte komplexne združenú maticu A^* a hermitovsky združenú maticu $A^\dagger$. Rozhodnite, či platí

$$A = A^\dagger.$$

5. Integrovane

(a) Vypočítajte

$$\int_0^\infty e^{-ax} dx, \quad a > 0.$$

(b) Vypočítajte

$$\int_0^\infty x e^{-ax} dx, \quad a > 0.$$

(c) Pomocou známeho Gaussovho integrálu

$$\int_{-\infty}^\infty e^{-x^2} dx = \sqrt{\pi}$$

určte

$$\int_{-\infty}^\infty e^{-ax^2} dx, \quad a > 0.$$

(d) Určte hodnotu integrálu

$$\int_{-\infty}^\infty x e^{-x^2} dx$$

bez priameho integrovania. Využite vlastnosti párnych a nepárnych funkcií.

(e) Vypočítajte

$$\int_0^\pi x \sin x dx$$

pomocou integrácie per partes.

(f) Vypočítajte

$$\int_0^\pi x \sin^2 x dx.$$

6. Derivácie

(a) Vypočítajte prvú a druhú deriváciu funkcií

$$f(x) = e^{-ax}, \quad g(x) = e^{-ax^2}, \quad h(x) = \sin(kx).$$

(b) Pomocou pravidla pre deriváciu súčinu vypočítajte deriváciu

$$f(x) = xe^{-ax}.$$

(c) Nájdite extrémny funkcie

$$f(x) = x^2e^{-x}.$$

Určte, či ide o minimum alebo maximum.

(d) Nájdite minimum funkcie

$$f(x) = ax^2 + \frac{b}{x^2}, \quad a > 0, \quad b > 0, \quad x > 0.$$

7. Pravdepodobnosť a štatistika

(a) Pri meraní veličiny boli získané hodnoty

$$2.1, \quad 1.9, \quad 2.0, \quad 2.2, \quad 1.8.$$

Vypočítajte aritmetický priemer a smerodajnú odchýlku.

(b) Náhodná veličina môže nadobudnúť hodnoty

$$x_1 = -1, \quad x_2 = 0, \quad x_3 = 2$$

s pravdepodobnosťami

$$p_1 = \frac{1}{4}, \quad p_2 = \frac{1}{2}, \quad p_3 = \frac{1}{4}.$$

Vypočítajte

$$\langle x \rangle, \quad \langle x^2 \rangle, \quad \sigma_x.$$

(c) Pravdepodobnostná hustota má tvar

$$p(x) = Ae^{-ax}, \quad x \geq 0, \quad a > 0.$$

Určte konštantu A z podmienky

$$\int_0^\infty p(x) dx = 1.$$

Potom vypočítajte strednú hodnotu $\langle x \rangle$.

Časť 1. - Experimenty

1. Vypočítajte de Broglieho vlnovú dĺžku pre:
 - (a) fotón s kinetickou energiou 1 eV
 - (b) elektrón s kinetickou energiou 1 eV
 - (c) protón s kinetickou energiou 1 eV
 - (d) molekulu UF_6 s hmotnosťou $m = 5.86 \cdot 10^{-10}$ kg a kinetickou energiou 1 eV
 - (e) teleso s hmotnosťou 1 kg a rýchlosťou $v = 100$ km/h
2. Určte, ktorý mikroskop, optický alebo elektrónový s elektrónovým delom o napätí 100 kV, je vhodnejší na skúmanie kapsidy vírusu o veľkosti 50 nm.
3. Elektrón urýchlíme potenciálovým rozdielom 100 V. Aká bude jeho rýchlosť? Na základe porovnania s rýchlosťou svetla, c , určte, či sa správa ako relativistická alebo nerelativistická častica.
4. Experiment ukazuje, že pri sodíku nastáva fotoelektrický jav len vtedy, ak naň dopadá svetlo s vlnovou dĺžkou menšou ako $\lambda_0 = 539$ nm. Vypočítajte výstupnú prácu pre sodík! Akú rýchlosť majú elektróny, ktoré vyletujú zo sodíkovej katódy, ak ju osvetlíme modrým svetlom ortuťovej výbojky? Toto svetlo má vlnovú dĺžku $\lambda = 436$ nm.
5. Určte teplotu na povrchu Slnka, ak jeho vyžarovacia energia je $E = 3.83 \cdot 10^{26}$ W a polomer Slnka je 700 000 km.
6. Energia hladín v atóme vodíka v závislosti od hlavného kvantového čísla n ako $E_n = \frac{13.6}{n^2}$ eV. Určte vlnovú dĺžku fotónu emitovaného pri prechode elektrónu z hladiny $n=3$ na hladinu $n=2$.
7. Atóm železa ^{55}Fe kmitá s frekvenciou 10^{13} Hz okolo svojej rovnovážnej polohy (uzla) v mriežke kryštálu. Pohyb v určitom smere možno v rozumnej aproximácii opísať lineárnym harmonickým oscilátorom. Odhadnite amplitúdu takýchto kmitov a porovnajte ju s typickou vzdialenosťou dvoch uzlov mriežky (asi 0,2 nm).

8. Základnými veličinami lineárneho harmonického oscilátora sú: m – hmotnosť častice, ω – uhlová frekvencia a na jeho opis pomocou kvantovej mechaniky aj $\hbar$ – Planckova konštanta. Nájdite pomocou rozmerovej analýzy typické hodnoty energie, hybnosti i amplitúdy.

Konštanty:

$$b = 2.89 \cdot 10^{-3} \text{ mK}$$

$$\sigma = 5.67 \cdot 10^{-8} \text{ Wm}^2\text{K}^{-4}$$

$$h = 6.62 \cdot 10^{-34} \text{ Js} \quad \hbar = h/2\pi$$

$$m_e = 9.11 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$$

$$c = 2.99 \cdot 10^8 \text{ ms}^{-1}$$

Časť 2. - Vlnová funkcia, operátory, komutátory

1. Ukážte, že operátor hybnosti, $\hat{p}$, je hermitovský!
2. Je daná vlnová funkcia častice viazanej na úsečke ako lineárna kombinácia ortonormálnych stacionárnych stavov φ_n s vlastnými hodnotami energie E_n :

$$\Psi(x) = c_2\varphi_2(x) + c_4\varphi_4(x)$$

$$\Psi(x) = c_2\varphi_2(x) + \frac{2-i}{3}\varphi_4(x)$$

- (a) Určte koeficient c_2 .
 - (b) Určte pravdepodobnosť namerania energií E_1 , E_2 a E_4
 - (c) Zapište časový vývoj tejto vlnovej funkcie.
3. Správanie častice viazanej na úsečke je opísané vlnovou funkciou $\Psi(x) = Ax(L-x)$ pre $x \in <0, L>$, inak 0.
 - (a) Určte normováciu konštantu A .
 - (b) Určte strednú hodnotu pre polohu a hybnosť častice.
 - (c) Určte pravdepodobnosť výskytu častice na intervale $<0, L/2>$
 - (d) Ako určíme pravdepodobnosť namerania energie E_n niektorého stacionárneho stavu, ak táto vlnová funkcia sa dá rozpísať do úplneho systému vlastných funkcií:

$$\Psi(x) = \sum_n c_n \varphi_n(x)$$

4. Nech operátor $\hat{A}$ má spektrum vlastných funkcií φ_n s prisluchajúcimi vlastnými hodnotami A_n . Stav systému je opísaný normalizovanou vlnovou funkciou Ψ :

$$\Psi(x) = \frac{1}{2}\varphi_1 + \left(\frac{3}{8}\right)^{\frac{1}{2}}\varphi_2(x) + \left(\frac{3}{8}i\right)^{\frac{1}{2}}\varphi_3(x)$$

- (a) Aké hodnoty veličiny A bude možné namerať?
 - (b) Aká bude stredná hodnota $\overline{A}$?
5. Ukážte, či dané funkcie sú vlastnými funkciami operátorov a určte ich prisluchajúce vlastné hodnoty:

- (a) Operátor $\hat{A} = \frac{\partial^2}{\partial x^2}$ a funkcia $e^{3x} + e^{-3x}$
- (b) Operátor $\hat{B} = x \frac{\partial}{\partial x}$ a funkcia $5x^4$
6. Ukážte, že komutátor $[\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] = [\hat{A}, \hat{B}]\hat{C} + \hat{B}[\hat{A}\hat{C}]$.
7. Ukážte, že komutátor $[\hat{L}_x, \hat{L}^2] = 0$.
8. Určte komutátor $[\hat{x}, \hat{p}^2]$.
9. Hamiltonian pre voľnú časticu je daný ako $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta$. Určte komutátory medzi $\hat{H}$ a $\hat{p}$ a $\hat{H}$ a $\hat{x}$. Čo to hovorí o tomto systéme a vlastných funkciách operátorov $\hat{H}$, $\hat{p}$ a $\hat{x}$?

Pomôcky:

$$[\hat{A} + \hat{B}, \hat{C} + \hat{D}] = [\hat{A} + \hat{C}] + [\hat{A} + \hat{D}] + [\hat{B} + \hat{C}] + [\hat{B} + \hat{D}]$$

$$[\hat{A}\hat{B}, \hat{C}\hat{D}] = [\hat{A}\hat{C}]\hat{B}\hat{D} + \hat{C}[\hat{A}\hat{D}]\hat{B} + \hat{A}[\hat{B}\hat{C}]\hat{D} + \hat{A}\hat{C}[\hat{B}\hat{D}]$$

Časť 3. - Schrödingerova rovnica a jednoduché kvantové systémy

1. Častica je viazaná na konečný interval $0 \leq x \leq L$. Formálne možno povedať, že sa pohybuje v poli s potenciálnou energiou

$$V(x) = 0 \text{ pre } 0 \leq x \leq L$$
$$V(x) = \infty \text{ všade inde}$$

- (a) Riešte Schrödingerovu rovnicu a nájdite energie E_n stacionárnych stavov a príslušné vlastné funkcie.
- (b) Načrtnite riešenia pre prvé tri stavy s najnižšími energiami ($n=1,2,3$).
2. Elektrón je viazaný v štvorci s hranou L . Formálne môžeme povedať, že sa nachádza v poli:

$$V(x, y) = 0 \text{ pre } 0 \leq x \leq L, 0 \leq y \leq L$$
$$V(x, y) = \infty \text{ všade inde}$$

- (a) Na základe analógie s predchádzajúcim príkladom, určte energie E_{n_1, n_2} a príslušné vlastné funkcie.
- (b) Usporiadajte 7 elektrónov v tomto systéme a určte jeho energiu v jednotkách E_1 .
- (c) Aké hodnoty budú mať rozdiely energií $E(1, 1) - E(1, 0)$ a $E(5, 2) - E(4, 2)$?
3. Častica s kinetickou energiou E dopadá zľava na potenciálovú bariéru

$$V(x) = 0 \text{ pre } x < 0$$
$$V(x) = V_0 \text{ pre } x > 0, V_0 > 0$$

Určte koeficienty odrazu a prechodu, R a T , ak

- (a) $E = \frac{5}{4}V_0$
- (b) $E = \frac{3}{4}V_0$
- (c) $E = -\frac{5}{4}V_0$

4. Určte charakter spektra pre pohyb v poli danom potenciálnou energiou (t.j. určiť typy riešení na základe minimá potenciálnej energie a jej správania v nekonečne):

$$(a) V(x) = \begin{cases} 0, & \text{pre } |x| < a \\ \alpha, & \text{pre } |x| > a \end{cases}, \alpha > 0$$

$$(b) V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2x^2$$

$$(c) V(r) = \frac{\alpha}{r}, \text{ rozlíšte pre } \alpha > 0 \text{ a } \alpha < 0$$

5. Určte energie a vlnové funkcie pre 3 najnižšie stavy jednoduchého harmonického oscilátora (JHO) v 1 rozmere s potenciálom $V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2x^2$ (stavy s kvantovými číslami $N=0, 1, 2$), ak poznáte všeobecné riešenie:

$$\Psi(x) = A \left(\sum_{n=0}^{\infty} a_n \left(\frac{x}{x_0} \right)^n \right) e^{-\frac{x^2}{2x_0^2}}$$

$$a_{n+2} = \frac{2n+1-\lambda}{(n+1)(n+2)} a_n \quad \lambda = \frac{2E}{\hbar\omega} = 2N+1 \quad x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$$

Pre dané stavy určte aj ich stredné hodnoty $\bar{x}$ a $\overline{x^2}$.

- (a) Ako bude vyzerat vzťah pre energiu pre JHO v 3 rozmeroch, ak $\omega_x = \omega_y = \omega_z = \omega$?
- (b) Ako budú degenerované 4 najnižšie stavy pre JHO z bodu a)

6. Vlnová funkcia základného stavu lineárneho harmonického oscilátora je:

$$\Psi(x) = Ae^{-\frac{x^2}{2x_0^2}}$$

kde $x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$. Vlastnú frekvenciu oscilátora sme označili ω a jeho hmotnosť m . S akou pravdepodobnosťou bude v tomto stave výchylka oscilátora z rovnovážnej polohy väčšia ako maximálna výchylka, ktorú by nadobúdala klasický oscilátor kmitajúci s tou istou energiou $E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}$?

Pomocný integrál:

$$\int_1^{\infty} e^{-x^2} dx \approx 0.0787\sqrt{\pi}$$

7. Nájdite vlastné hodnoty a vlastné stavy dvojhladinového hamiltoniánu

$$\begin{bmatrix} E_0 & A \\ A & E_0 \end{bmatrix}$$

kde E_0 a A sú reálne čísla. Riešte bezčasovú Schrödingerovu rovnicu $\hat{H}\Phi = E\Phi$, kde $\phi = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$. Určte ich časový vývoj.

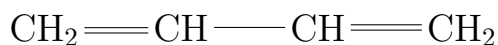
Časť 4. - Približné riešenia Schrödingerovej rovnice

1. Použite poruchovú teóriu na určenie príspevku prvého rádu k energii základného stavu častice na úsečke dĺžky L , ak na ňu pôsobí malá dodatočná porucha $\hat{H}' = \alpha x^2$. Nový hamiltonián má tvar $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}'$, kde $\hat{H}_0$ je neporušený hamiltonián pre časticu na úsečke.
2. Pomocou poruchovej teórie odhadnite korekciu energie prvého a druhého rádu pre časticu v nekonečnej potenciálovej jame šírky $2a$ s nábojom q , ak na ňu pôsobí malá porucha daná homogénnym elektrickým poľom $V(x)=qEx$.
3. Uvažujte dvojhladinovú sústavu s hamiltoniánom $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}'$, kde v báze vlastných funkcií $\hat{H}_0$ platí

$$\hat{H}_0 = \begin{bmatrix} E_0 & 0 \\ 0 & E_0 \end{bmatrix} \quad \hat{H}' = \begin{bmatrix} A & V \\ V^* & B \end{bmatrix}$$

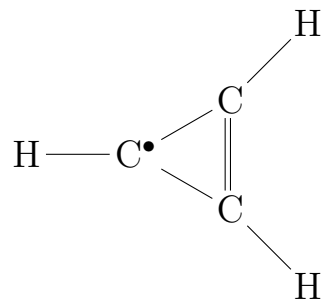
Nájdite presné vlastné hodnoty hamiltonianu $\hat{H}$.

4. Určte pomocou variačnej metódy energiu základného stavu častice s hmotnosťou m a nábojom q v homogénnom elektrickom poli daným potenciálom $V(x)=qE|x|$. Ako skúšobnú vlnovú funkciu zvoľte $\Psi(x) = Ae^{-\alpha|x|}$.
5. Určte pomocou variačnej metódy energiu základného stavu častice s hmotnosťou m pohybujúcej sa v poli daným potenciálom $V(x) = \alpha x^6$. Ako skúšobnú vlnovú funkciu zvoľte $\Psi(x) = Ae^{-bx^2}$.
6. Určte pomocou variačnej metódy energiu základného stavu jednoduchého harmonického oscilátora s potenciálom $V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2x^2$. Ako skúšobnú vlnovú funkciu zvoľte $\Psi(x) = Ae^{-bx^2}$. Porovnajte s presným riešením.
7. Použite variačnú metódu na odhad energie E základného stavu častice v jednorozmernej nekonečnej jame so skúšobnou funkciou $\Psi = Ax(L-x)$. Ukážte, že tento odhad spĺňa podmienku $E > E_0$.
8. Pomocou Hückelovej metódy určte energiu a vlnovú funkciu pre π elektróny základného stavu molekuly 1,3-butadiénu.



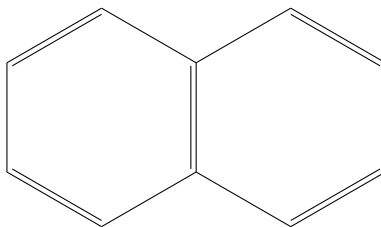
1,3-butadién

9. Pomocou Hückelovej metódy porovnajte energie pre neutrálnu molekulu cyklopropylénu, jej kation a anión na základe ich delokalizačných energií.



Cyclopropylén

10. Použite Hückelovu metódu na molekulu naftalénu a určte energiu základného stavu pre π elektróny. ako aj koeficienty c_i pre vlnovú funkciu základný stavu $\Psi_{ZS} = \sum_1^{10} c_i \xi_i$. Využite symetriu danej molekuly.



Naftalén

Pomocné integrály:

$$\int_0^\infty x^{2n} e^{-px^2} dx = \frac{(2n-1) \dots 5 \cdot 3 \cdot 1}{2(2p)^n} \sqrt{\frac{\pi}{p}}, \quad p > 0, n = 0, 1, 2, \dots$$

$$\int_{-\infty}^\infty e^{-px^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{p}}, \quad p > 0$$

$$\int \xi_i \hat{H} \xi_j = H_{ij} = \begin{cases} \alpha, & \text{pre } i = j \\ \beta & \text{pre } i \neq j \text{ susediace} \\ 0, & \text{pre } i \neq j \text{ nesusediace} \end{cases}$$

Časť 5. - Spin

1. Interakcia magnetického momentu elektrónu s vonkajším homogénnym magnetickým poľom je daná vzťahom $H = -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B}$. Priemet spinu elektrónu do smeru poľa $\mathbf{B}$ môže nadobudnúť dve hodnoty $S_z = \pm \hbar/2$. Nájdite rozdiel energií týchto dvoch stavov pre elektrón vo vonkajšom magnetickom poli s indukciou:

- (a) $\mathbf{B} = 10^{-9} T$ (medzihviezdny priestor)
- (b) $\mathbf{B} = 0.5 \cdot 10^{-4} T$ (zemské magn. pole)
- (c) $\mathbf{B} = 1 T$
- (d) $\mathbf{B} = 10 T$ (supravodivý magnet)

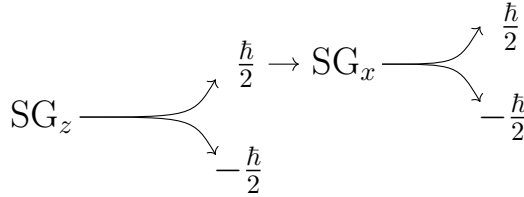
Pre určitosť si pod týmito dvoma stavmi môžeme predstaviť dva stavy 1s elektrónu v ióne He^+ (jadro He má nulový magnetický moment). Nájdite uhlovú frekvenciu, frekvenciu a dĺžku vlny elektromagnetického poľa, v ktorom možno uskutočniť prechod medzi týmito 2 stavmi.

2. Operátory priemetu spinu na osi x, y a z , $\hat{S}_x$, $\hat{S}_y$ a $\hat{S}_z$ majú tvar:

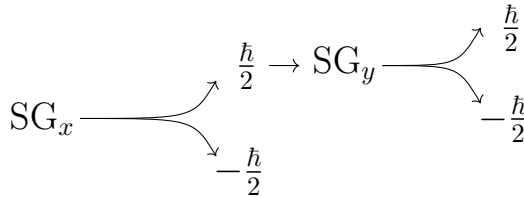
$$\hat{S}_x = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \hat{S}_y = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \hat{S}_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

- (a) Ukážte, že tieto matice sú hermitovské.
 - (b) Určte správne normované vlastné funkcie týchto operátorov v maticovom zápise.
3. Spinová časť vlnovej funkcie má tvar $\phi = A \begin{pmatrix} -3i \\ 4 \end{pmatrix}$
- (a) Určte normovaciú konštantu A .
 - (b) Určte strednú hodnotu pre operátory $\hat{S}_x$, $\hat{S}_y$, $\hat{S}_z$.
 - (c) Určte strednú hodnotu operátorov $\hat{S}_x^2$, $\hat{S}_y^2$, $\hat{S}_z^2$
 - (d) Určte strednú hodnotu operátora $\hat{S}^2$, ktorý je analógom operátora $\hat{L}^2$.
4. Elektróny s náhodne orientovanými spinmi prechádzajú Stern-Gerlachovým prístrojom s nehomogénnym magnetickým poľom v smere osi z (s priemetom

spinu na os z) , SG_z . Tie, ktorých spin je $+\hbar/2$ ďalej pokračujú cez SG prístroj s nehomogénnym magnetickým poľom v smere osi x, SG_x (viď obrázok nižšie). S akou pravdepodobnosťou nameriame spin hore a spin dole elektrónu po prechode prístrojom SG_x ?



5. Elektróny prechádzajú Stern-Gerlachovým prístrojom s nehomogénnym magnetickým poľom v smere osi x, SG_x . Tie, ktorých spin je $+\hbar/2$ ďalej pokračujú cez SG prístroj s priemeteom spinu na os y, SG_y (viď obrázok nižšie). Spinová vlnová funkcia ma tvar $\phi = A \begin{pmatrix} 2 \\ -i \end{pmatrix}$. S akou pravdepodobnosťou nameriame spin hore a spin dole elektrónu po prechode prístrojom SG_y ?



6. Uvažujte spin elektrónu v silnom magnetickom poli $\mathbf{B}_0$ v smere osi z. K tomuto poľu pridáme slabé magnetické pole b v smere osi x. Nájdite vlastné hodnoty energie a príslušné spinové funkcie.

$$\hat{H}_0 = +\frac{eh}{2m} \begin{bmatrix} B_0 & 0 \\ 0 & -B_0 \end{bmatrix} \qquad \hat{H}' = +\frac{eh}{2m} \begin{bmatrix} 0 & b \\ b & 0 \end{bmatrix}$$

Pomôcky:

Časť 6. - Atóm vodíka

1. Riešenie radiálnej Schrödingerovej rovnice pre atóm vodíka má tvar

$$R(r) = A\left(\frac{r}{a_b}\right)^l \left(\sum_{k=0}^{\infty} a_k \left(\frac{r}{a_b}\right)^k\right) e^{-\sqrt{\epsilon} \frac{r}{a_b}}$$

$$a_{k+1} = -\frac{2 - 2\sqrt{\epsilon}(k + l + 1)}{(k + 1)(k + 2l + 2)} a_k$$

kde a_b je Bohrov polomer atómu, $\sqrt{\epsilon} = 1/n$, $\epsilon = E/\frac{1}{2}m_e c^2 \alpha^2$ a n je hlavné kvantové číslo a l je vedľajšie kvantové číslo. Určte vlastné funkcie a ich prislúchajúce hodnoty energie pre 3 najnižšie stavy. Načrtnite grafy týchto vlastných funkcií.

2. Určte stredné hodnoty vzdialenosti r a najpravdepodobnejšiu vzdialenosť r od jadra atómu pre 3 najnižšie stavy z predchádzajúcej úlohy a porovnajte ich.
3. Určte pravdepodobnosť nájdenia elektrónu v intervaloch $< 0, a_0 >$ a $< 0, 2a_0 >$ pre 3 najnižšie stavy z úlohy č.1.
4. Riešenia pre prvé 4 stavy uhlovej časti Schrödingerovej rovnice majú tvar:

$$Y_{00} = \frac{1}{4\pi} \quad Y_{10} = \frac{3}{4\pi} \cos\theta$$

$$Y_{11} = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin\theta e^{i\varphi} \quad Y_{1-1} = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin\theta e^{-i\varphi}$$

Máme vlnovú funkciu $\Psi(\theta, \varphi) = A(\cos\theta - \sin\theta \cos\varphi)$. Určte aké hodnoty momentu hybnosti L a jej z-zložky L_z môžeme namerať a s akými pravdepodobnosťami.

5. Pomocou variačnej metódy odhadnite energiu základného stavu atómu vodíka pre tieto skúšobné funkcie a hamiltonián pozostávajúci z radiálnej časti a Coulombovho potenciálu vyjadreného pomocou konštanty α :

$$\Psi(x) = Ae^{-\beta r}$$

$$\Psi(x) = A r e^{-\beta r}$$

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\Delta_r - \frac{\alpha \hbar c}{r} \right)$$

Porovnejte výsledky so skutočnou hodnotou energie základného stavu.

Pomoc pri výpočtoch:

$$\int_0^\infty x^n e^{-x} dx = n! \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

$$\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar c}$$

$$\Delta_r = \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d}{dr} \right)$$

Časť 7. - Kreačný a anihilačný operátor

1. Ukážte, že $[a, a^\dagger] = 1$, ak

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{\hat{x}}{x_0} + i \frac{\hat{p}}{p_0} \right) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\xi + \partial_\xi)$$

$$\hat{a}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{\hat{x}}{x_0} - i \frac{\hat{p}}{p_0} \right) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\xi - \partial_\xi)$$

kde $x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$ a $p_0 = \sqrt{\hbar m\omega}$.

2. Ukážte, že Hamiltonián pre jednoduchý harmonický oscilátor sa dá napísať pomocou kreačných a anihilačných operátorov.
3. Ukážte, čomu sa rovnajú nasledujúce výrazy, ak $\hat{N} = \hat{a}^\dagger \hat{a}$ a $\hat{N}|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle$.
- (a) $[\hat{N}, \hat{a}]$ a $[\hat{N}, \hat{a}^\dagger]$
 - (b) $\langle m | \hat{a}^\dagger | n \rangle$
 - (c) $\langle m | \hat{a} \hat{a}^\dagger | n \rangle$
 - (d) $\langle m | \hat{a} + \hat{a}^\dagger | n \rangle$
 - (e) $\langle n | (\hat{a} - \hat{a}^\dagger)^2 | n \rangle$
4. Vyjadrite operátory $\hat{x}$ a $\hat{p}$ cez kreačné a anihilačné operátory a vytvorte k nim zodpovedajúce matice $a_{kn} = \int \varphi_k \hat{a} \varphi_n$ a $a_{kn}^\dagger = \int \varphi_k \hat{a}^\dagger \varphi_n$

5. Určte strednú hodnotu $\bar{x}$ a $\overline{x^2}$ pomocou kreačných a anihilačných operátorov (matíc a_{kn} a $a_{kn}^\dagger$) pre nasledujúce vlnové funkcie dané linárnou kombináciou vlastných stavov jednoduchého harmonického oscilátora v maticovom zápise:

$$(a) \quad \phi = \varphi_2 = |2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ \dots \end{pmatrix}$$

$$(b) \quad \phi = \frac{1}{\sqrt{2}}\varphi_0 + \frac{1}{\sqrt{2}}\varphi_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ \dots \end{pmatrix}$$

Porovnajete s riešením pre stredné hodnoty získaným integrovaním týchto vlnových funkcií (pozri časť 3, príklad 5) s operátormi $\hat{x}$ a $\hat{x}^2$.

6. Určte strednú hodnotu $\bar{p}$ a $\overline{p^2}$ pomocou kreačných a anihilačných operátorov (matíc a_{kn} a $a_{kn}^\dagger$) pre nasledujúce vlnové funkcie dané linárnou kombináciou vlastných stavov jednoduchého harmonického oscilátora v maticovom zápise:

$$(a) \quad \phi = \varphi_2 = |2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ \dots \end{pmatrix}$$

$$(b) \quad \phi = \frac{1}{\sqrt{2}}\varphi_0 + \frac{1}{\sqrt{2}}\varphi_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ \dots \end{pmatrix}$$

Pomoc pri výpočtoch:

$$[\hat{A}\hat{B}, \hat{C}] = [\hat{A}, \hat{C}]\hat{B} + \hat{A}[\hat{B}\hat{C}]$$

$$\hat{a}|\alpha\rangle = \sqrt{\alpha}|\alpha - 1\rangle$$

$$\hat{a}^\dagger|\alpha\rangle = \sqrt{\alpha + 1}|\alpha + 1\rangle$$