Cvičení 4. 5. 2022

Téma: Spin, vodík, etc.

Spin

Uvažujme ještě maticovou reprezentaci operátorů spinu 1/2, konkrétně s_x.

$$\mathbf{s_x} = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

▷ Vypočítejte vlastní čísla a stavy matice s_x.

▷ Využijte $O = \sum_i \lambda_i |i\rangle\langle i|$ pro zpětný výpočet maticové reprezentace operátoru.

▷ Jak bude vypadat matice s_x, pokud v předešlém vzorci použijeme bázi vlastních stavů s_x?

▷ Jak bude vypadat matice s_z, v bázi vlastních stavů s_x?

Maticové elementy souřadnic pro atom vodíku

V minulém cvičení jsme zmiňovali, že interakci hmoty s elmag. zářením je v kvantové mechanice možné přibližně popsat pomocí dodatečného členu Hamiltoniánu, který obsahuje nějakou složku souřadnice (x, y, z). Pro zjištění, zda záření může způsobit přechod z jednoho stavu ($|I\rangle$) do jiného ($|F\rangle$), jsou důležité maticové elementy $\langle I|V'|F\rangle$, kde V' je právě dodatečný člen Hamiltoniánu (typicky nazývaný porucha). Pro vodík známe několik spektrálních tzv. sérií, přechodů z jednoho stavu do nižšího (emise záření). V minulém cvičení jsme si naznačili, že nejsou možné všechny přechody, ale je nutná změna l o jedna. Kvantové číslo m může zůstat stejné, nebo se o jedna změní. Změna n může být libovolná, proto také existují série přechodů.

Začneme se základním stavem vodíku Ψ_{100}.

▷ Ověřte normalizaci Ψ_{100}.

Nyní budeme uvažovat souřadnici $x = r\sin\theta\cos\phi$, a pro snadnější výpočet funkci $f = r\sin\theta e^{i\phi}$.

▷ Bude střední hodnota f nenulová pro základní nebo jiný stav vodíku?

Uvažujme maticový element $\langle R_{10}Y_0^0|r\sin\theta e^{i\phi}|R_{21}Y_l^m\rangle$.

▷ Jaké jsou hodnoty l a m pro které bude integrál nenulový?

▷ Maticový element vypočtěte, nejprve např. radiální část, potom úhlovou.

Pro rychlíky: Ověřte $\langle R_{10}|R_{31}\rangle = 0$.

Užitečné vzorečky

$$Y_0^0 = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$$
$$Y_1^0 = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta$$
$$Y_1^{\pm 1} = \mp\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta e^{\pm i\phi}.$$

navíc $Y_2^1 = -\sqrt{\frac{15}{8\pi}}\cos\theta\sin\theta e^{i\phi}$.

$x = r\sin\theta\cos\phi$, $y = r\sin\theta\sin\phi$ a $z = \cos\theta$.

$$\begin{aligned}
R_{10}(r) &= 2\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} e^{-Zr/a_0} \\
R_{20}(r) &= \frac{1}{2\sqrt{2}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2}\left(2-\frac{Zr}{a_0}\right) e^{-Zr/(2a_0)} \\
R_{21}(r) &= \frac{1}{2\sqrt{6}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2}\frac{Zr}{a_0} e^{-Zr/(2a_0)} \\
R_{30}(r) &= \frac{2}{81\sqrt{3}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2}\left[27-18\frac{Zr}{a_0}+2\left(\frac{Zr}{a_0}\right)^2\right] e^{-Zr/(2a_0)} \\
R_{31}(r) &= \frac{4}{81\sqrt{6}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2}\left(6-\frac{Zr}{a_0}\right)\frac{Zr}{a_0} e^{-Zr/(3a_0)} \\
R_{32}(r) &= \frac{4}{81\sqrt{30}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2}\left(\frac{Zr}{a_0}\right)^2 e^{-Zr/(3a_0)}\,.
\end{aligned} \tag{1}$$

Vodík pomocí gausovky

Uvažujme, že elektron v potenciálu vodíkového jádra se nepohybuje ve funkci $\psi_0 =\sim \exp(-r/a_0)$, ale ve funkci $\psi = Nexp(-\alpha r^2)$. Hodnotu α ještě nebudeme definovat, postupně najdeme optimální z hlediska energie.

Pozn. Takovéto gausovky se masově používají jako báze pro elektronové vlnové funkce při kvantových výpočtech. Důvod je ten, že pokud vynásobíme dvě gausovky, dostaneme opět gausovku, což velmi zjednodušuje výpočty maticových elementů.

Nicméně je jasné, že ψ není přesnou funkcí základního stavu.

▷ Jaký vztah bude platit mezi $\langle\psi_0|H|\psi_0\rangle$ a $\langle\psi|H|\psi\rangle$? ($H$ je Hamiltonián vodíku.)

Nyní postupně najdeme $\langle\psi|H|\psi\rangle$ jako parametr α.

▷ Normalizujte ψ.

▷ Zapůsobte operátorem kinetické energie $T = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}r^2\frac{d}{dr}Ne^{-\alpha r^2}$ na $|\psi\rangle$ a výsledek přeintegrujte s $\langle\psi|$.

▷ Vypočtěte $\langle\psi|V|\psi\rangle$ jako funkci α.

Výsledkem je energie jako funkce α, diskutujte závislost $\langle T\rangle$ a $\langle V\rangle$ na α.

▷ Derivací najděte minimum $E(\alpha)$ a hodnotu energie v minimu porovnejte s energií přesného řešení.