6 Přibližné metody

6.1 Anharmonický oscilátor 1

Uvažujme o harmonickém oscilátoru popsaném hamiltoniánem

$$\mathcal{H}_1 = \frac{1}{2m}\,\hat{p}^2 + \frac{\hbar^2}{2mx_0^4}\,\hat{x}^2 \ ,$$

kde $x_0 = \sqrt{\hbar/m\omega}$, a o anharmonickém oscilátoru popsaném hamiltoniánem

$$\mathcal{H}_2 = \frac{1}{2m}\,\hat{p}^2 + \frac{\hbar^2}{6mx_0^6}\,\hat{x}^4 \ .$$

Variační metodou se zkušební funkcí $\psi(x) = A\,\mathrm{e}^{-b\,(x/x_0)^2}$ odhadněte energii základního stavu uvedených oscilátorů.

6.2 Anharmonický oscilátor 2 ✡

Uvažujme o anharmonickém oscilátoru z příkladu **??**. Proveďte odhad energie jeho základního stavu a prvního excitovaného stavu pomocí variační metody, tentokrát s vylepšenými zkušebními funkcemi

$$\psi_0(x) = (A + Bx^2)\,\mathrm{e}^{-Cx^2} \qquad \text{a} \qquad \psi_1(x) = (Ax + Bx^3)\,\mathrm{e}^{-Cx^2} \ .$$

Porovnejte odhad energie základního stavu s odhadem z příkladu **??** a přesvědčte se, že vylepšený odhad energie má nižší hodnotu.

6.3 Rozťatý harmonický oscilátor ✡

Částice o hmotnosti m se pohybuje v jednorozměrném potenciálu

$$V(x) = \begin{cases} \infty & x < 0 \\ \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 & x > 0 \ . \end{cases}$$

(a) Použijte zkušební funkci $\psi(x) \propto x\exp(-\lambda x)$ a odhadněte energii a vlnovou funkci základního stavu.
(b) Jaká je skutečná vlnová funkce a energie základního stavu? Porovnejte s výsledky získanými variační metodou.

6.4 Atom vodíku řešený variační metodou ✡

Uvažujme o atomu vodíku s centrálním potenciálem $V(r) = -e^2/4\pi\varepsilon_0 r$. Jako zkušební vlnovou funkci zvolte $\psi(\boldsymbol{r}) = N\mathrm{e}^{-r^2/a^2}$ a stanovte:
(a) Normovací konstantu N.
(b) Střední hodnotu energie a r^2 ve stavu popsaném $\psi(\boldsymbol{r})$.
(c) Optimální hodnotu a ve smyslu variační metody. Příslušnou střední hodnotu energie a r^2 porovnejte s exaktními výsledky pro vodíkový atom.

6.5 Polarizovatelnost atomu vodíku ✡

Elektron v základním stavu atomu vodíku má vlnovou funkci $\psi_0(\boldsymbol{r}) \sim \exp(-r/a_0)$. Atom vodíku vložíme do homogenního elektrického pole ve směru osy z. Hledejte novou vlnovou funkci elektronu ve tvaru $\psi = \psi_0(1 + \gamma z) = \psi_0 + \delta\psi$ a určete γ z minima energie. Ze známé hodnoty γ

určete dipólový moment atomu vodíku pomocí vztahu

$$p = \int \mathrm{d}^3\boldsymbol{r}\,(-e)z(\psi_0\delta\psi^* + \psi_0^*\delta\psi)$$

a ukažte, že polarizovatelnost atomu vodíku je rovna $\alpha = 4a_0^3$ (v CGS jednotkách).

6.6 Deuteron ✡

Interakci mezi dvěma nukleony – protonem a neutronem – v jádře deuteria lze přibližně vystihnout Yukawovým potenciálem

$$V(r) = -V_0 \frac{r}{a} \exp\left(-\frac{r}{a}\right) \ .$$

Najděte vazebnou energii jádra pomocí variační metody v nejjednodušším případě s $l = 0$. Relativní pohyb nukleonů přitom popište zkušební vlnovou funkcí

$$\psi(\boldsymbol{r}) = C \exp\left(-\lambda\frac{r}{a}\right) \ ,$$

kde λ je variační parametr. Zformulujte podmínku existence vázaného stavu. Dále zaveďte vhodnou veličinu, která by vyjadřovala rozprostřenost jádra v prostoru a stanovte její hodnotu. Počítejte nejprve obecně, poté pro konkrétní hodnoty: $a = 1.4 \times 10^{-13}$ cm, $V_0 = 50\,\mathrm{MeV}$.

6.7 Vibrace dvouatomových molekul ✡

Vibrace dvouatomových molekul jsou výtečně popsány Morseovým potenciálem

$$V(r) = D(\mathrm{e}^{-2\alpha x} - 2\mathrm{e}^{-\alpha x}) \ , \qquad x = \frac{r - r_0}{r_0} \ .$$

Následující tabulka udává hodnoty parametrů potenciálu pro vybrané molekuly.

molekula	$\hbar^2/2Mr_0^2$ [cm^{-1}]	D [cm^{-1}]	α
H_2	60.8296	38292	1.440
HCl	10.5930	37244	2.380
I_2	0.0374	12550	4.954

Zde M je redukovaná hmotnost a $E(\mathrm{eV}) = E(\mathrm{cm}^{-1}) \times 1.2398 \times 10^{-4}$. V prvním přiblížení lze potenciál nahradit harmonickým potenciálem $V_{\mathrm{harm}}(r)$ získaným Taylorovým rozvojem $V(r)$ kolem $r = r_0$. Vlnové funkce a energie pak snadno získáme z řešení úlohy o harmonickém oscilátoru. Poruchovým přístupem určete korekce energie základního a prvního excitovaného stavu
(a) způsobené rozdílem $V(r) - V_{\mathrm{harm}}(r)$,
(b) způsobené rotačním pohybem molekuly, který charakterizujeme kvantovým číslem l.

6.8 Izotopový posuv hrany K thalia •

Orbital K elektronu v těžkém atomu má střední kvadratický poloměr jen asi stokrát větší než je poloměr jádra. Zahrnutí vlivu konečné velikosti jádra přináší měřitelný posuv příslušné energie. S užitím poruchové teorie vyčíslete tento posuv. Předpokládejte přitom, že náboj jádra je rovnoměrně rozložen v kouli o poloměru R a zanedbejte stínění K elektronu. Pomocí získané formule určete posuv K-hrany dvou izotopů thalia ($Z = 81$), ^{203}Tl a ^{205}Tl. Poloměr jádra je daný vztahem $R = r_0 A^{1/3}$, kde $r_0 = 1.2 \times 10^{-13}$ cm.

6.9 Variační odhad energie základního stavu atomu vodíku •

Variační metodou odhadněte energii základního stavu atomu vodíku. Použijte přitom sféricky symetrickou zkušební funkci

$$\psi(\boldsymbol{r},\alpha)=\begin{cases} C\left(1-\frac{r}{\alpha}\right) & r\le\alpha\ ,\\ 0 & r>\alpha\ ,\end{cases}$$

kde C je normovací konstanta a α je variační parametr. Porovnejte optimální hodnotu α s Bohrovým poloměrem a příslušný odhad energie se skutečnou energií základního stavu atomu vodíku.

6.10 Atom vodíku v kondenzátoru •

Kondenzátor o kapacitě C je v čase $t=0$ zkratován rezistorem o odporu R. Intenzita elektrického pole v kondenzátoru se od tohoto okamžiku zmenšuje podle vztahu $E=E_0\,\mathrm{e}^{-t/\tau}$, kde E_0 je počáteční intenzita a $\tau=RC$ je charakteristický čas vybíjení. Předpokládejme, že v kondenzátoru se nachází atom vodíku, který je v čase $t=0$ v základním stavu. S pomocí nestacionární poruchové teorie stanovte pravděpodobnosti, že během vybíjení kondenzátoru přejde atom vodíku do stavu (a) $2s$, (b) $2p$. Odhadněte hodnoty těchto pravděpodobností pro $E_0=1\,\mathrm{kV\,mm^{-1}}$ a $\tau=1\,\mathrm{s}$.

6.11 Harmonicky porušený harmonický oscilátor ✡

Hamiltonián harmonického oscilátoru s frekvencí ω nechť naruší harmonická porucha

$$\hat{H}=\hat{H}_0+\Delta\hat{V}\ ,\qquad \hat{H}_0=\frac{\hat{p}^2}{2m}+\frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2\ ,\quad \Delta\hat{V}=\frac{1}{2}k\hat{x}^2\ .$$

(a) Vypočtěte korekce $\Delta E_n^{(1)}$ energiových hladin $E_n^{(0)}$ v prvním řádu poruchové teorie.
(b) Vypočtěte korekce $\Delta E_n^{(2)}$ energiových hladin $E_n^{(0)}$ v druhém řádu poruchové teorie.
(c) Srovnejte své výsledky s exaktními hodnotami a přesvědčte se, že exaktní energie lze napsat ve tvaru mocninné řady v poruchovém parametru, jejíž první koeficienty se shodují s výsledky získanými v bodech (a) a (b). Vyjádřete se k rychlosti konvergence poruchového rozvoje pro různé hodnoty $k/m\omega^2$.

6.12 Starkův jev ✡

Atom vodíku je vystaven působení elektrického pole E ve směru osy z, které pro elektron s nábojem $-e$ odpovídá dodatečnému potenciálu

$$\Delta V(r)=eEz\ .$$

Vyšetřete rozštěpení a posuv energiových hladin s $n=1$ a $n=2$ s využitím poruchové teorie prvního řádu.

6.13 Částice na kouli ✡

Částice s hmotností m se pohybuje na kouli o poloměru R. Vhodným způsobem zapište odpovídající hamiltonián a najděte spektrum vlastních stavů, energiové hladiny a jejich degeneraci. Za poruchu nyní považujme tíhové pole s tíhovým zrychlením o velikosti g. Najděte operátor, který komutuje s $\hat{H}_0$ i s poruchou, ten poslouží ke klasifikaci skupin porušených stavů podle příslušných vlastních hodnot. Ukažte, že poruchová teorie prvního řádu dává nulovou opravu

energií. K posuvu a rozštěpení degenerovaných hladin vede až poruchová teorie druhého řádu, pomocí níž přibližně vypočítejte nové energiové spektrum.
Pomůcka:

$$\cos\vartheta\, Y_{lm}(\vartheta,\varphi) = \sqrt{\frac{(l+1)^2-m^2}{(2l+1)(2l+3)}}\,Y_{l+1,m}(\vartheta,\varphi) + \sqrt{\frac{l^2-m^2}{(2l+1)(2l-1)}}\,Y_{l-1,m}(\vartheta,\varphi)$$

6.14 Harmonický oscilátor ve střídavém poli ✡

Jednorozměrný harmonický oscilátor s hmotností m, frekvencí ω_0 a nábojem q je pro $t > 0$ vystaven působení střídavého elektrického pole $E(t) = E_0 \cos\omega t$. Vypočtěte v prvním řádu poruchové teorie časovou závislost střední hodnoty elektrického dipólového momentu $\langle d\rangle = \langle\psi|q\hat{z}|\psi\rangle$. Předpokládejte přitom, že v okamžiku $t = 0$ se oscilátor nacházel ve vlastním stavu $|n\rangle$.

6.15 Elektrický pulz ✡

Jednorozměrný harmonický oscilátor popsaný Hamiltoniánem

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2$$

je v čase $t = -\infty$ v základním stavu. Na náboj q oscilátoru působí časově závislé elektrické pole

$$E(t) = E_{\mathrm{max}}\mathrm{e}^{-\alpha t^2}\ .$$

Nestacionární poruchovou teorií prvního řádu stanovte pravděpodobnost, s jakou se bude oscilátor nacházet v základním stavu poté, co se pulz přežene.