1. (a) **Zadanie:** Fotoelektrický jev je základem spektroskopické techniky zvané fotoelektronová spektroskopie. Foton o vlnové délce 150 pm pronikne do vnitřní části atomu a vyrazí elektron. Rychlost vyraženého elektronu je $2,14 \cdot 10^7$ m/s. Jak pevně byl elektron v atom u vázaný?

Riešenie: Vyrazený (voľný) elektrón má voči jadru nulovú potenciálnu energiu a popri tom kinetickú energiu danú ako:

$$KE = m_{e,0}c^2 \left(\frac{1}{\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}} - 1 \right), \tag{1}$$

kde KE je kinetická energia, $m_{e,0}$ pokojová hmotnosť elektrónu, c rýchlosť svetla a v rýchlosť elektrónu. Predpokladajme, že dopadajúci fotón má dostatočne veľkú energiu, ktorá sa po prienki premení na výstupnú prácu elektrónu a zvyšok na jeho kinetickú energiu. Vieme teda zapísať bilanciu:

$$h\nu = KE + \Phi, \tag{2}$$

kde $h\nu$ je Planckov vzťah pre energiu fotónu a Φ je výstupná práca elektrónu. Ak do (2) dosadíme za KE z (1) a vyjadríme ν z vlnovej dĺžky fotónu λ, dostávame pre výstupnú prácu:

$$\Phi = h\frac{c}{\lambda} - KE = h\frac{c}{\lambda} - m_{e,0}c^2 \left(\frac{1}{\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}} - 1 \right). \tag{3}$$

Po dosadení čísel do (3) máme:

$$\Phi = 6,626 \cdot 10^{-34}\ \mathrm{J\ s} \cdot \frac{3,00 \cdot 10^8\ \mathrm{m\ s^{-1}}}{150 \cdot 10^{-12}\ \mathrm{pm}} - 9,110 \cdot 10^{-31}\ \mathrm{kg} \cdot (3,00 \cdot 10^8\ \mathrm{m\ s^{-1}})^2 \cdot \left(\frac{1}{\sqrt{1-\frac{(2,14 \cdot 10^7\ \mathrm{m\ s^{-1}})^2}{(3,00 \cdot 10^8\ \mathrm{m\ s^{-1}})^2}}} - 1 \right).$$

Elektrón je v atóme viazaný energiou:

$$\Phi \approx 1,325 \cdot 10^{-15}\ \mathrm{J} = 8271\ \mathrm{eV}.$$

(b) **Zadanie:** Mějme např. kovový materiál, ve kterém je ionizační energie elektronů (tedy energie elektronů potřebná v vyražení elektronu z materiálu) IE = 3 eV. Jakou maximální vlnovou délku dopadajícího záření potřebujeme, abychom pozorovali fotoelektrický jev?

Riešenie: Na pozorovanie fotoelektrického javu je potrebné, aby elektróny materiál opustili, teda aby sa im dodala energia aspoň ionizačná. Vlnová dĺžka fotónu, ktorý energiu predá potom musí byť podľa Planckovho vzťahu najviac:

$$IE = h\nu = h\frac{c}{\lambda_{max}} \Longrightarrow \lambda_{max} = \frac{hc}{IE}, \tag{4}$$

kde IE je ionizačná energia, h Planckova konštanta a c rýchlosť svetla. Dosadením do (4) máme, že:

$$\lambda_{max} = \frac{6,626 \cdot 10^{-34}\ \mathrm{J\ s} \cdot 3,00 \cdot 10^8\ \mathrm{m\ s^{-1}}}{3 \cdot 1,602 \cdot 10^{-19}\ \mathrm{J}} \approx 413\ \mathrm{nm}.$$

2. **Zadanie:** Ukažte, že $e^{ix} = \cos(x) + i\sin(x)$.

Riešenie: Majme komplexnú alebo reálnu funkciu $f(x)$, definovanú na celej danej množine, ktorá je nekonečne diferencovateľná. Potom vieme v bode $x = 0$ rozvinút Maclaurinov polynóm $T_n(x)$:

$$T_n(x) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{f^{(n)}(0)}{n!} x^n. \tag{5}$$

Platí pritom, že:

$$\forall x : \lim_{n\to\infty} T_n(x) = f(x) \tag{6}$$

Uvedomme si ešte, že platí:

$$i^0 = 1 \quad i^1 = i \quad i^2 = -1 \quad i^3 = -i$$
$$i^4 = 1 \quad i^5 = i \quad i^6 = -1 \quad i^7 = -i \ldots \tag{7}$$

Zostavme Maclaurinov polynóm pre komplexnú funkciu $f(x) = e^{ix}$:

$$e^{ix} = 1 + ix + \frac{(ix)^2}{2!} + \frac{(ix)^3}{3!} + \frac{(ix)^4}{4!} + \frac{(ix)^5}{5!} + \frac{(ix)^6}{6!} + \frac{(ix)^7}{7!} + \frac{(ix)^8}{8!} + \ldots. \tag{8}$$

Podľa (5), (6), (7) potom z (8) máme:

$$e^{ix} = 1 + ix - \frac{(x)^2}{2!} - \frac{(ix)^3}{3!} + \frac{(x)^4}{4!} + \frac{i(x)^5}{5!} - \frac{(x)^6}{6!} - \frac{i(x)^7}{7!} + \frac{(x)^8}{8!} + \ldots. \tag{9}$$

Zostavme Maclaurinove polynómy pre funkcie $g(x) = \sin(x)$ a tiež $h(x) = \cos(x)$:

$$\sin(x) = x - \frac{x^3}{3!} + \frac{x^5}{5!} - \frac{x^7}{7!} + \frac{x^9}{9!} - \ldots \tag{10}$$

$$\cos(x) = 1 - \frac{x^2}{2!} + \frac{x^4}{4!} - \frac{x^6}{6!} + \frac{x^8}{8!} - \ldots \tag{11}$$

Ak (9) preusporiadame, dostaneme rovnaký výraz, ako keď (10) vynásobime i a sčítame s (11) (sumu v (9) môžeme preusporiadať, lebo vzniknuté výrazy sú oba absolútne konvergentné):

$$e^{ix} = \left(1 - \frac{(x)^2}{2!} + \frac{(x)^4}{4!} - \frac{(x)^6}{6!} + \frac{(x)^8}{8!} + \ldots\right) + i\left(x - \frac{(x)^3}{3!} + \frac{(x)^5}{5!} - \frac{(x)^7}{7!} + \ldots\right) = \cos(x) + i\sin(x). \text{ Q.E.D.} \tag{12}$$

Alternatíve môžeme dôkaz urobiť aj tým, že vezmeme funkciu $a(x) = e^{-ix}(\cos(x) + i\sin(x))$, ktorá je definovaná pre všetky x a urobíme jej deriváciu vo všetkých bodoch:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left(e^{-ix}(\cos(x) + i\sin(x))\right) = -e^{-ix}\sin(x) - ie^{-ix}\cos(x) + e^{-ix}\sin(x) + ie^{-ix}\cos(x) = 0. \tag{13}$$

Podľa (13) je derivácia všade nulová, takže daná funkcia $a(x)$ je všade konštantná (s hodnotou K). Potom platí, že:

$$Ke^{ix} = \cos(x) + i\sin(x). \tag{14}$$

Keďže (14) platí pre všetky čísla, tak nutne aj:

$$Ke^0 = \cos(0) + i\sin(0) = 1 \Longrightarrow \forall x : K = 1 \Longrightarrow \forall x : e^{ix} = \cos(x) + i\sin(x). \text{ Q.E.D.} \tag{15}$$

3. **Zadanie:** Ukažte, že řešení této Schrödingerovy rovnice pro částici uvězněné v pravoúhlé nekonečně hluboké jámě s potenciálem $V = 0$ pro $\forall x \in (0, L)$ splňuje funkce $\sqrt{2/L}\sin(\pi nx/L)$, kde $n = 1, 2, 3, \ldots$ je kvantové číslo.

   (a) Proč funkce nemá pro $n = 0$ fyzikální význam?

   (b) Čemu odpovídá kvadrát této vlnové funkce?

   (c) Kde je nejvyšší pravděpodobnost polohy částice v základním stavu částice (tj. s $n = 1$) a v prvním excitovaném stavu?

   (d) Popište, jak byste určili střední hodnotu hybnosti a polohy této částice v kvantovém stavu s $n = 1$ (nemusíte explicitně řešit sestavenou rovnici).

Riešenie: Zostavme nečasovú Schrödingerovu rovnicu daného systému. Elektrón uväznený v jame má potenciálnu energiu $V = 0$ a kinetickú energiu $p^2/2m$, kde p je jeho hybnosť a m hmotnosť. V operátorovom formalizme potom platí:

$$\hat{H}\Psi_n = E_n\Psi_n = \frac{\hat{p}^2}{2m}\Psi_n = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi_n}{\partial x^2}, \tag{16}$$

kde Ψ_n je hľadaná vlnová funkcia, E_n vlastná energia a $\hbar$ redukovaná Planckova konštanta. Keďže podľa zadania rovnicu netreba riešiť, ale stačí overiť správnosť daného riešenia. Stačí dosadiť do (16) za Ψ_n a overiť, že zadaná funkcia je vlastnou funkciou Hamiltoniánu:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\left(\sqrt{\frac{2}{L}}\sin\left(\frac{\pi n x}{L}\right)\right) = \frac{\hbar^2}{2m}\sqrt{\frac{2}{L}}\frac{\pi^2 n^2}{L^2}\sin\left(\frac{\pi n x}{L}\right) = \sqrt{\frac{2}{L}}\frac{\hbar^2\pi^2 n^2}{2mL^2}\Psi_n = \sqrt{\frac{2}{L}}E_n\Psi_n. \tag{17}$$

V (17) vidíme, že vzniknutá rovnica predstavuje charakteristickú rovnicu a teda zadaná Ψ_n je vlastnou funkciou Hamiltoniánu a teda je riešením danej rovnice.

(a) Fyzikálny význam vlnovej funkcie je taký, že jej štvorec predstavuje hustotu pravdepodobnosti výskytu častice. Funkcia mimo nekonečnej jamy musí byť nutne nulová (lebo tam sa častica nenáchadza). Ak by bolo $n = 0$, tak $\forall x \in (0, L)$ má vlnová funkcia aj v jame hodnotu: $\Psi_n = \sqrt{2/L}\sin(0 \cdot \pi x/L) = 0$. Potom ale neplatí Bornova podmienka, t.j., že:

$$\int_V \Psi_0^*\Psi_0 \mathrm{d}\tau = 0 \neq 1,$$

pretože v celom priestore je funkcia konštantne nulová a teda nie je normovateľná. Vlnová funkcia, ktorá nie je normovateľná nemá fyzikálny význam, lebo nepopisuje pravdepodobnosť výskytu (navyše v tomto prípade je vlnová funkcia všade nulová a teda častica sa ani nevyskytuje nikde).

(b) Ako bolo uvedené v (a), kvadrát vlnovej funkcie $|\Psi_n(x)|^2$ predstavuje hustotu pravdepodobnosti výskytu častice v stave n na súradnici x.

(c) Keďže pre pravdepodobnosť nájdenia častice v danom infinitezimálnom intervale dx platí: $P = |\Psi_n(x)|^2\mathrm{d}x$, stačí nám zistiť, kde má vlnová funkcia maximálny štvorec. Hľadajme extrémy hustoty (resp. stacionárne body) ako body s nulovou hodnotou derivácie podľa x:

$$\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{2}{L}\sin^2\left(\frac{\pi x}{L}\right)\right) = \frac{2}{L}2\sin\left(\frac{\pi x}{L}\right)\cos\left(\frac{\pi x}{L}\right)\frac{\pi}{L} = \frac{2\pi}{L^2}\sin\left(\frac{2\pi x}{L}\right) = 0 \Longleftrightarrow \frac{2\pi x}{L} = k\pi, \tag{18}$$

kde k je celé číslo také, že $k\pi \in (0, L)$. Vidíme, že vyhovuje len $k = 1$ (pre iné k leží príslušné x mimo jamy) a teda x_0 pri ktorom má derivácia extrém je $x_0 = L/2$. Teraz si stačí všimnúť, že štvorec vlnovej funkcie je všade nezáporný, spojitý a na krajoch definičného oboru má hodnotu 0 (resp. k nej limituje). Nájdený extrém je preto nutne maximum. Najvyššiu pravdepodobnosť nájdenia častice v stave $n = 1$ máme preto v $x_0 = L/2$, teda v strede jamy.

(d) Pre merateľnú veličinu $\hat{A}$ systému v stave Ψ_n platí:

$$\langle\hat{A}\rangle = \frac{\langle\Psi_n|\hat{A}|\Psi_n\rangle}{\langle\Psi_n|\Psi_n\rangle}. \tag{19}$$

Naša funkcia Ψ_n je pritom normovaná, takže pre stredné hodnoty hľadaných veličín bude podľa (19) platiť:

$$\langle\hat{x}\rangle = \langle\Psi_n|\hat{x}|\Psi_n\rangle = \int_{-\infty}^{\infty}\left(\sqrt{\frac{2}{L}}\sin\left(\frac{\pi n x}{L}\right)\right)^* \cdot x \cdot \left(\sqrt{\frac{2}{L}}\sin\left(\frac{\pi n x}{L}\right)\right)\mathrm{d}x, \tag{20}$$

$$\langle\hat{p}\rangle = \langle\Psi_n|\hat{p}|\Psi_n\rangle \int_{-\infty}^{\infty}\left(\sqrt{\frac{2}{L}}\sin\left(\frac{\pi n x}{L}\right)\right)^* \cdot \left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\left(\sqrt{\frac{2}{L}}\sin\left(\frac{\pi n x}{L}\right)\right)\right)\mathrm{d}x. \tag{21}$$

Ak si uvedomíme, že Ψ_n je reálna a teda aj jej komplexne združená funkcia je reálna a dosadíme $n = 1$ tak *per partes* vieme spočítať integrály (stredné hodnoty veličín) ako:

$$\langle\hat{x}\rangle = \sqrt{\frac{2}{L}}\int_0^L x\sin^2\left(\frac{\pi x}{L}\right)\mathrm{d}x = \frac{L}{2},$$

$$\langle\hat{p}\rangle = \frac{-i\hbar\pi}{L^2}\sqrt{\frac{2}{L}}\int_0^L \sin\left(\frac{\pi x}{L}\right)\cos\left(\frac{\pi x}{L}\right)\mathrm{d}x = 0.$$