Niniejszy plik zawiera kilka zadań mających ułatwić opanowanie materiału wymaganego na pierwszym kolokwium (19.12.2016). Pierwsze dwa zadania stanowią swego rodzaju „rozgrzewkę" przed przystąpieniem do trzeciego, najbardziej obszernego. W razie jakichkolwiek wątpliwości oczywiście zapraszam na konsultacje.

Wzory, które mogą się przydać:
Element objętości w układzie sferycznym: $dV = r^2 \sin(\theta) dr d\theta d\phi$.
Laplasjan: $\Delta = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2 \frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2 \sin(\theta)}\frac{\partial}{\partial \theta}\left(\sin(\theta)\frac{\partial}{\partial \theta}\right) + \frac{1}{r^2 \sin^2(\theta)}\frac{\partial^2}{\partial \phi^2}$
Często pojawiająca się całka: $\int_0^\infty dx \;\; x^n \;\; exp\left[-\alpha x\right] = n! \alpha^{-(n+1)}, \;\; n \geq 0$

ZADANIE 1.

Mamy układ dwóch funkcji bazowych w przestrzeni Hilberta (iloczyn skalarny zdefiniowany jak zwykle, jako $\langle \phi_1 | \phi_2 \rangle = \int dV \phi_1^* \phi_2$*, sferyczny układ współrzędnych):* $\phi_1 = e^{-r}$ *oraz* $\phi_2 = re^{-2r}$*. Stwórz z nich ortonormalną bazę, przeprowadzając:*

(a) Ortogonalizację Schmidta. *[Odp:* $\phi_1^{norm} = 0.56419\phi_1, \ \phi_2^{norm} = 1.84264\phi_2, \ \phi_1^{ortn} = \phi_1^{norm}, \ \phi_2^{ortn} = 3.96659(\phi_2^{norm} - 0.9677\phi_1^{norm})$*]*

(b) Ortogonalizację symetryczną Löwdina. *[Odp:* $\phi_1' = 1.77\phi_1 - 4.47\phi_2, \ \phi_2' = -1.37\phi_1 + 5.78\phi_2$*]*

ZADANIE 2.

Zdiagonalizuj następującą macierz (podpowiedź w pliku „Ritz.pdf"):

$$\boldsymbol{M} = \begin{bmatrix} 12 & -3 \\ -3 & 13 \end{bmatrix}$$

Odpowiedź:

$$\boldsymbol{M_{diag}} = \begin{bmatrix} 9.459 & 0 \\ 0 & 15.54 \end{bmatrix}$$

ZADANIE 3.

Rozważmy tzw. „wodór mionowy". Jest to po prostu atom wodoru, w którym elektron został zastąpiony przez mion - cząstkę taką jak elektron, ale o masie 206.768*-krotnie większej. Taki atom związany jest ze słynną ostatnimi czasy „zagadką promienia protonu" - z eksperymentalnych pomiarów promienia protonu w atomie wodoru (zwykłym) dostaje się istotnie inną wartość, niż dla takich samych pomiarów dla atomu mionowego, co wydaje się dość absurdalne*[1].

(a) Oblicz energię oczekiwaną atomu wodoru mionowego używając metody wariacyjnej, posługując się funkcją próbną postaci $Ne^{-\alpha r}$, gdzie N - stała normalizacyjna, α - parametr wariacyjny, r - odległość mion-proton. Pracujemy w przybliżeniu „zamrożonego jądra". *[Odp:* $E_0 = -103.384[Hartree], \ \alpha = 206.768$*]*

(b) To samo co powyżej, ale posłuż się metodą wariacyjną Ritza - weź bazę dwóch funkcji Gaussa: $N_i e^{-\alpha_i r^2}$, $\alpha_1 = 43000$, $\alpha_2 = 6900$. *[Odp:* $E_0 = -100.042[Hartree]$*, wskazówki i potrzebne całki w pliku „Ritz.pdf"]*

(c) To co w punkcie (a), ale bez przybliżenia - uwzględniamy ruch jądra. *[Odp:* $E_0 = -92.9203[Hartree]$*, wskazówki w pliku „H_full.pdf"]*

(d) Skomentuj, skąd pochodzą różnice między wynikami poprzednich punktów. Porównaj i wyjaśnij skalę tych różnic w porównaniu z przypadkiem „zwykłego" atomu wodoru rozwiązywanym na zajęciach.

---

[1] W chwili układania tego zadania problem jest nadal otwarty, choć istnieją różne hipotezy - niektóre nawet zakładające istnienie nowego typu oddziaływania!