Kvantová mechanika – cvičení s návody a výsledky

Ladislav Hlavatý, text návodů Libor Šnobl

September 29, 2003

Návody zde uvedené jsou záměrně uváděny ve stručné formě, jako nápověda a vodítko, jak při řešení úloh postupovat; nepředstavují a nenahrazují detailní popis řešení vyžadovaný při cvičeních. Obzvláště nejsou explicitně rozepisovány výpočty integrálů apod. V některých jednoduchých příkladech je návod nahrazen pouze výsledkem.

Uvítám jakékoliv komentáře a upozornění na možné chyby a překlepy (kontaktujte mě e-mailem na adrese Libor.Snobl@fjfi.cvut.cz).

Cvičení 1 *Napište rozdělovací funkci Gaussova pravděpodobnostního rozdělení. Interpretujte význam jejích parametrů. Vypočítejte jeho momenty. Napište vzorec pro*

$$I(n,a,b) := \int_{-\infty}^{\infty} x^n e^{-ax^2+bx} dx, \ n \in \mathbf{Z}, \ a,b \in \mathbf{C}, \ Re \ a > 0.$$

(Zapamatujte si jej pro n=0,1,2!)

Návod: Rozdělovací funkce

$$\rho(x) = N e^{-\frac{(x-\alpha)^2}{2\sigma^2}}$$

Normalizace: $\int_{-\infty}^{\infty} \rho(x) dx = N\sqrt{2\pi}\sigma = 1$, tj. $N = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma}$ (k výpočtu integrálu je vhodné počítat jeho kvadrát $(\int_{-\infty}^{\infty} \exp(-y^2) dy)^2 = \int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} \exp(-y^2 - z^2) dydz$ přechodem do polárních souřadnic)

Momenty: definice

$$\langle (x-\alpha)^n \rangle_\rho = N \int_{-\infty}^{\infty} (x-\alpha)^n e^{-\frac{(x-\alpha)^2}{2\sigma^2}} dx$$

Výsledky se liší pro n liché, resp. sudé:

$$\langle (x-\alpha)^{2n+1} \rangle_\rho = 0, \ \langle (x-\alpha)^{2n} \rangle_\rho = \sigma^{2n}(2n-1)!!$$

Hledaný vzorec:

$$I(n,a,b) := \int_{-\infty}^{\infty} x^n e^{-ax^2+bx} dx = e^{\frac{b^2}{4a}} \sum_{j=0}^{[\frac{n}{2}]} (\frac{b}{2a})^{n-2j} \frac{n!}{(n-2j)!j!2^{2j}} \frac{\sqrt{\pi}}{a^{j+\frac{1}{2}}}$$

Cvičení 2 *Jaká je hustota pravděpodobnosti nalezení klasického jednorozměrného oscilátoru s energií E v intervalu $(x, x+dx)$? Co potřebujeme znát, chceme-li tento pravděpodobnostní výrok změnit v deterministickou předpověď?*

Návod: $\rho(x)dx = \frac{doba\ strávená\ v\ intervalu \langle x, x+dx \rangle}{půlperioda} = \frac{\frac{dx}{|v(x)|}}{T/2} = \frac{2dx}{\frac{2\pi}{\omega}\sqrt{2(E-V(x))/m}} = \frac{dx}{\pi\sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}-x^2}}$,

je vhodné si ověřit normalizaci $\int_{-\sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}}}^{\sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}}} \rho(x)dx = 1$. K deterministické předpovědi potřebujeme znát polohu (nebo rychlost či hybnost) v jednom časovém okamžiku (tj. počáteční podmínku).

Cvičení 3 *Popište jednorozměrný harmonický oscilátor Hamiltonovskou formulací klasické mechaniky. Napište a vyřešte pohybové rovnice. Napište rovnici pro fázové trajektorie. Hodnotou jaké fyzikální veličiny jsou určeny?*

Návod: $H(p,q) = \frac{1}{2}(\frac{p^2}{m} + m\omega^2 q^2)$
Pohybové rovnice

$$\dot{q} = \frac{\partial H}{\partial p},\ \dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial q}$$

tj.

$$\dot{q} = \frac{p}{m},\ \dot{p} = -m\omega^2 q$$

Řešení: $q(t) = A\sin(\omega t + \alpha)$, $p(t) = A\omega m\cos(\omega t + \alpha)$,
Rovnice pro fázové trajektorie – získáme vyloučením času z pohybových rovnic, jsou určeny hodnotou energie

$$\frac{p^2}{2A^2\omega^2 m^2} + \frac{q^2}{2A^2} = 1$$

Cvičení 4 *Spočtěte charakteristickou dobu života elektronu v atomu vodíku pokud jej považujeme za klasickou částici pohybující se po kruhové dráze o (Bohrově) poloměru $a \approx 10^{-10}$ m. (viz skripta Štoll, Tolar* Teoretická fyzika*, příklad 9.52)*

Návod: viz skripta Štoll, Tolar *Teoretická fyzika*, příklad 9.52

Cvičení 5 *Nechť statistická rozdělovací funkce stavů klasického mechanického oscilátoru je dána Gibbsovou formulí*

$$P = a\ e^{-\frac{E}{kT}}.$$

Spočtěte střední hodnotu energie.

Návod: Energie mechanického oscilátoru

$$E : (p, q) \mapsto \frac{1}{2}(\frac{p^2}{m} + m\omega^2 q^2)$$

Normalizace: $\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} a e^{\frac{1}{2kT}(\frac{p^2}{m}+m\omega^2 q^2)} dp\, dq = 1$, tj. $a = \frac{\omega}{2\pi kT}$
Střední hodnota energie:

$$\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} \frac{a}{2}(\frac{p^2}{m} + m\omega^2 q^2) e^{\frac{1}{2kT}(\frac{p^2}{m}+m\omega^2 q^2)} dp\, dq = kT$$

Cvičení 6 *Jakou vlnovou délku má elektromagnetické záření, jehož zdrojem je elektron – pozitronová anihilace*

$$e^+ + e^- \to \gamma + \gamma$$

v klidu?

Návod: Ze zákona zachování energie je energie fotonu rovna $E = m_e c^2 =$ 0.511MeV, vlnová délka pak je $\lambda = \frac{c}{\nu} = \frac{ch}{m_e c^2} = 0.24\, 10^{-11}$m.

Cvičení 7 *Určete vlnovou délku a frekvenci de Broglieovy vlny pro molekulu kyslíku ve vzduchu vašeho pokoje a pro částici o hmotnosti 10 μg pohybující se rychlostí zvuku.*

Návod: Kyslík: $E = \frac{3}{2}kT \doteq 6,2\, 10^{-21} J$ $(T = 300K)$, $p = \sqrt{2m_{O_2}E} = \ldots$, z de Broglieho vztahů pak plyne $\lambda = \frac{h}{p} = 2,58\, 10^{-11}$m. Částice: obdobně $\lambda =$ $2\, 10^{-28}$m.

Cvičení 8 *Podle de Broglieovy hypotézy určete ohyb způsobený průletem tenisového míčku ($m = 0.1$ kg) rychlostí 0,5 m/s obdélníkovitým otvorem ve zdi o rozměrech 1×1.5 m.*

Návod: Z Vlnění, optiky ... je známo $\theta \doteq \lambda/L$, kde L je šířka štěrbiny, po dosazení $1.3\, 10^{-32}$ rad, resp. $9\, 10^{-33}$ rad.

Cvičení 9 *Na jakou rychlost je třeba urychlit elektrony aby bylo možno pozorovat jejich difrakci na krystalové mříži s charakteristickou vzdáleností atomů 0.1 nm?*

Návod: Z podmínky $\lambda \doteq 0,1$nm nalezneme přibližně $v = 7,3\, 10^6 \mathrm{ms}^{-1}$.

Cvičení 10 *Nechť $V(\vec{x}) = 0$ (volná částice). Pomocí Fourierovy transformace určete řešení Schrödingerovy rovnice, které v čase t_0 má tvar*

$$\psi(\vec{x}, t_0) = g(\vec{x}) = C \exp[-Ax^2 + \vec{B}\vec{x}] \tag{1}$$

kde Re $A > 0$, $\vec{B} \in \mathbf{C}^3$, $C \in \mathbf{C}$.

Návod: Při řešení používáme Fourierovu transformaci (FT) $\psi(\vec{x},t) = \int\int\int_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{i\vec{p}\vec{x}}{\hbar}} \tilde{\psi}(\vec{p},t) d^3\vec{p}$ a rozklad vlnové funkce na součin vlnových funkcí závisejících na jednotlivých kartézských souřadnicích $\psi(\vec{x},t) = \psi_1(x,t)\psi_2(y,t)\psi_3(z,t)$. Postupně nalezneme zpětnou FT počáteční podmínky

$$\tilde{\psi}_j(p_j,t_0) = \frac{C^{1/3}}{2\pi\hbar}\sqrt{\frac{\pi}{A}} e^{\frac{(B_j - \frac{i}{\hbar}p_j)^2}{4A}},$$

pak časový vývoj $\tilde{\psi}_j(p_j,t)$

$$\tilde{\psi}_j(p_j,t) = \tilde{\psi}_j(p_j,t_0) e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{p_j^2(t-t_0)}{2m}} = \frac{C^{1/3}}{2\pi\hbar}\sqrt{\frac{\pi}{A}} e^{\frac{(B_j - \frac{i}{\hbar}p_j)^2}{4A}} e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{p_j^2(t-t_0)}{2m}}$$

a konečně opět pomocí FT

$$\psi(\vec{x},t) = C\chi(t)^{-3/2} e^{\frac{\vec{B}^2}{4A}} e^{-A\frac{[\vec{x}-\vec{B}/(2A)]^2}{\chi(t)}},$$

kde $\chi(t) = 1 + \frac{2iA\hbar}{m}(t-t_0)$.

Cvičení 11 *Nechť $\psi(x,y,z,t)$ je řešením Schrödingerovy rovnice pro volnou částici. Ukažte, že*

$$\tilde{\psi}(x,y,z,t) := \exp[-i\frac{Mg}{\hbar}(zt + gt^3/6)]\, \psi(x,y,z+gt^2/2,t)$$

je řešením Schrödingerovy rovnice pro částici v homogenním poli se zrychlením g.

Návod: Dosaďte do Schrödingerovy rovnice a proveďte časovou derivaci.

Cvičení 12 *Čemu je úměrná pravděpodobnost nalezení částice popsané de Broglieovou vlnou*

$$\psi_{\vec{p},E}(\vec{x},t) = Ae^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\vec{x}-Et)}, \tag{2}$$

v oblasti $(x_1,x_2)\times(y_1,y_2)\times(z_1,z_2)$?

Návod: Protože $|\psi(\vec{x},t)|^2 = |A|^2 = konst.$, je pravděpodobnost nalezení částice popsané de Broglieovou vlnou úměrná objemu uvažované oblasti.

Cvičení 13 *Čemu je úměrná hustota pravděpodobnosti pro řešení*

$$\psi(\vec{x},t) = C\chi(t)^{-3/2} e^{\frac{\vec{B}^2}{4A}} e^{-A\frac{[\vec{x}-\vec{B}/(2A)]^2}{\chi(t)}} \tag{3}$$

$$\chi(t) = 1 + \frac{2iA\hbar}{m}(t-t_0)$$

z příkladu 10 pro $A > 0$? Jak se mění poloha jejího maxima s časem? Čemu je rovna její střední kvadratická odchylka? Jak se mění s časem? Za jak dlouho se zdvojnásobí "šířka" vlnového balíku pro elektron lokalisovaný s přesností 1 cm a pro hmotný bod o hmotě 1 gram jehož těžiště je lokalisováno s přesností $10^{-6}m$?

Návod: Je zapotřebí počítat $|\psi(x,t)|^2 \sim |e^{\frac{\vec{B}^2}{4A}} e^{-A\frac{[\vec{x}-\vec{B}/(2A)]^2}{\chi(t)}}|^2$ (nezajímá nás časový vývoj normalizace, i v dalším počítání je vhodné vynechávat celkové faktory nezávisející na x). Odvoďte si a využijte $|e^z|^2 = e^{2\Re z}$. Pro určení střední kvadratická odchylky atd. porovnejte výsledek s tvarem Gaussovy rozdělovací funkce a najdete

$$\vec{x}_0 = \frac{\Re\vec{B}}{2A} + \frac{\Im\vec{B}\hbar}{m}t,\ \sigma(t)^2 = \frac{1+4\frac{A^2\hbar^2}{m^2}(t-t_0)^2}{4A}.$$

Zdvojnásobení: pro elektron cca 3 s, pro hmotný bod cca 10^{12} let.

Cvičení 14 *Jaká je pravděpodobnost nalezení elektronu vodíkového obalu ve vzdálenosti $(r, r+dr)$ od jádra, je-li popsán (v čase t_0) funkcí*

$$g(x,y,z) = Ae^{-\sqrt{x^2+y^2+z^2}/a_0},$$

kde $a_0 = 0.53 \times 10^{-8}$ cm je tzv. Bohrův poloměr?

Návod: Převeďte do sférických souřadnic (nezapomeňte, že nestačí jen přepsat vzorec pro hustotu pravěpodobnosti, také tam přispěje Jakobián transformace), pak integrujte přes úhlové proměnné. Výsledek je úměrný $r^2 e^{-\frac{2r}{a}}$, nakreslete si graf.

Cvičení 15 *Nalezněte vlastní hodnoty energie kvantové částice pohybující se v jednorozměrné konstantní "nekonečně hluboké potenciálové jámě" t.j. v potenciálu $V(x) = 0$ pro $|x| < a$ a $V(x) = \infty$ pro $|x| > a$.*
Návod: Předpokládejte, že vlnové funkce jsou všude spojité a nulové pro $|x| \geq a$.

Návod: Uvnitř "jámy" má vlnová funkce tvar vlnové funkce pro volnou částici. Z podmínek na okrajích $\psi(-a) = 0 = \psi(a)$ dostáváme soustavu homogenních rovnic, požadavek nulovosti jejího determinantu dává rovnici pro energii, výsledek je $E = \frac{\hbar^2\pi^2k^2}{8ma^2},\ k \in \mathcal{N}$.

Cvičení 16 *Nalezněte vlastní hodnoty energie kvantové částice pohybující se v jednorozměrné konstantní potenciálové jámě t.j. v potenciálu $V(x) = -V_0 < 0$ pro $|x| < a$ a $V(x) = 0$ pro $|x| > a$.*
Návod: Předpokládejte, že vlnové funkce jsou spojité a mají spojité derivace pro $x \in \mathbf{R}$.

Návod: Nejprve si ukažte, že pro potenciály ve tvaru sudé funkce lze z libovolné vlastní funkce Hamiltoniánu $\psi(x)$ sestavit (ne nezbytně různou) vlastní funkci $\psi(-x)$ a odvoďte, že vlastní funkce lze v tomto případě volit sudé a liché. Využijte podmínek navázání (spojitost a spojitost 1. derivací) vlnových funkcí pro volnou částici v bodě $x = a$ (tím je díky symetrii splněna i podmínka v $x = -a$, jinak bychom měli 4 rovnice pro 4 konstanty) a opět požadujte nulovost determinantu příslušné homogenní soustavy. Výsledkem jsou vztahy

$$\frac{\sqrt{2m|E|}}{\hbar} = \frac{\sqrt{2m(E+V_0)}}{\hbar}\tan(\frac{\sqrt{2m(E+V_0)}}{\hbar}a), \text{ (sudý případ)}$$

resp.

$$-\frac{\sqrt{2m|E|}}{\hbar} = \frac{\sqrt{2m(E+V_0)}}{\hbar}\mathrm{cotg}(\frac{\sqrt{2m(E+V_0)}}{\hbar}a), \text{ (lichý případ)}$$

ty je nutno řešit graficky.

Cvičení 17 *Najděte ortonormální basi v* $\mathbf{C}^2$*, jejíž prvky jsou vlastními vektory matice*

$$\sigma_1 := \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

Výsledek: Vlastní čísla ± 1, normalizované vlastní vektory $\vec{x}_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$, $\vec{x}_{-1} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$.

Cvičení 18 *Ukažte, že Hermitovy polynomy lze definovat též způsobem*

$$H_n(z) := (-)^n e^{z^2}(\frac{d}{dz})^n e^{-z^2} \tag{4}$$

Návod: Ukažte že pravá strana (4) splňuje rovnici

$$u" = 2zu' - 2nu \tag{5}$$

Návod: Po dosazení zadaného tvaru $H_n(z)$ do $u" = 2zu' - 2nu$ využijte vhodně Lebnizova pravidla na $(n+1)$-ní derivaci součinu $2z.e^{-z^2}$ $(= -\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}z}e^{-z^2})$ a upravte. Shodnost definic pak plyne z věty o jednoznačnosti řešení diferenciálních rovnic (ještě porovnejte koeficient u nejvyšší mocniny z, aby bylo zaručeno splnění stejné počáteční podmínky).

Cvičení 19 *Ukažte, že*

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{H_n(x)}{n!}\xi^n = \exp[x^2 - (x-\xi)^2]$$

Návod: Ověřte, že $(-)^n e^{x^2}(\frac{d}{dx})^n e^{-x^2} = \frac{\partial^n}{\partial \xi^n}\exp[x^2 - (x-\xi)^2]|_{\xi=0}$, $\forall n$.

Cvičení 20 *Použitím vytvořující funkce ze cvičení 19 ukažte, že*

$$\int_{-\infty}^{\infty} H_n(x)H_m(x)e^{-x^2}dx = 2^n n!\pi^{1/2}\delta_{nm}.$$

Ukažte, že odtud plyne ortonormalita vlastních funkcí harmonického oscilátoru.

Návod: $\int_{-\infty}^{\infty} H_n(x)H_m(x)e^{-x^2}dx = \frac{\partial^n}{\partial\xi^n}\frac{\partial^m}{\partial\rho^m}\int_{-\infty}^{\infty} e^{x^2-(x-\xi)^2}e^{x^2-(x-\rho)^2}e^{-x^2}dx|_{\xi,\rho=0} = \frac{\partial^n}{\partial\xi^n}\frac{\partial^m}{\partial\rho^m}\sqrt{\pi}e^{2\xi\rho}|_{\xi,\rho=0}$.

Cvičení 21 *Jaká je hustota pravděpodobnosti nalezení kvantového jednorozměrného oscilátoru s energií $\hbar\omega(n+\frac{1}{2})$ v bodě x ? Spočítejte a nakreslete grafy této hustoty pro $n = 0, 1, 2, ...$ a srovnejte je s hustototu pravděpodobnosti výskytu klasického oscilátoru v daném místě.*

Výsledek:

$$n = 0 : \ |\psi_0(x)|^2 = |A_0|^2 e^{-\xi^2},$$
$$n = 1 : \ |\psi_1(x)|^2 = 4|A_1|^2\xi^2 e^{-\xi^2},$$
$$n = 2 : \ |\psi(x)|^2 = 4|A_2|^2(2\xi^2 - 1)^2 e^{-\xi^2}.$$

V grafech je počet maxim roven stupni příslušného Hermiteova polynomu +1.

Cvičení 22 *Spočítejte komutátory*

$$[L_j, X_k], \ [L_j, P_k], \ [L_j, L_k], \tag{6}$$

kde

$$\hat{L}_j := \epsilon_{jkl}\hat{X}_k\hat{P}_l \tag{7}$$

Výsledek: $[L_j, X_k] = i\hbar\epsilon_{jkl}\hat{X}_l$, $[L_j, P_k] = i\hbar\epsilon_{jkl}\hat{P}_l$, $[L_j, L_k] = i\hbar\epsilon_{jkl}\hat{L}_l$, tj. operátory $\hat{\vec{X}}, \hat{\vec{P}}, \hat{\vec{L}}$ jsou tzv. vektorové operátory (kvantová analogie vektorů $\vec{x}, \vec{p}, \vec{l}$, tj. objektů se správnými transformačními vlastnostmi vzhledem ke grupě rotací prostoru $SO(3)$).

Cvičení 23 *Ukažte, že vzájemně komutují operátory $\frac{1}{2}\hat{P}^2/m + V(|\vec{x}|)$, $\hat{L}_3 \equiv \hat{L}_z$ a*

$$\hat{L}^2 := \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2, \tag{8}$$

Návod: Přejděte do sférických souřadnic.

Cvičení 24 *Jak vypadají operátory $\hat{X}_j$, $\hat{P}_j$, $\hat{L}_j$, $j = 1, 2, 3 \equiv x, y, z$ ve sférických souřadnicích?*

Návod: Operátory $\hat{X}_j$ vzniknou dosazením definice sférických souřadnic, např. $\hat{X}_1 = r\cos\phi\sin\theta$. Pro výpočet operátorů $\hat{P}_j$ je vhodné využít pravidla pro derivaci složené funkce $\frac{\partial\psi}{\partial x_j} = \frac{\partial\psi}{\partial r}\frac{\partial r}{\partial x_j} + \frac{\partial\psi}{\partial\phi}\frac{\partial\phi}{\partial x_j} + \frac{\partial\psi}{\partial\theta}\frac{\partial\theta}{\partial x_j}$ a dosadit za $\frac{\partial r}{\partial x_j}$ atd. z definice sférických souřadnic. Výsledek je

$$\hat{P}_1 = -i\hbar(\cos\phi\sin\theta\frac{\partial}{\partial r} - \frac{\sin\phi}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi} + \frac{\cos\theta\cos\phi}{r}\frac{\partial}{\partial\theta}), \hat{P}_2 = \dots$$

$$\hat{P}_3 = -i\hbar(\cos\theta\frac{\partial}{\partial r} - \frac{\sin\theta}{r}\frac{\partial}{\partial\theta})$$

výsledky pro $\hat{L}_j$ jsou uvedeny ve "slabikáři". Nezapomínejte na správný postup při skládání operátorů (např. $x\frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x}x - \mathbf{id} \neq \frac{\partial}{\partial x}x$), pro názornost si lze na konci všech operátorových identit představit vlnovou funkci, a pak postupovat jako při derivování složené funkce.

Cvičení 25 *"Kvantové tuhé těleso" (např. dvouatomová molekula) s momentem setrvačnosti I_z volně rotuje v rovině. Najděte její možné hodnoty energie.*

Návod: $H = -\frac{\hbar^2}{2I_z}\frac{d^2}{d\phi^2}$ (viz princip korespondence a klasickou kinetickou energii $\frac{1}{2}I_Z\dot{\phi}^2$). Řešením stacionární Schrödingerovy rovnice nalezneme řešení ve tvaru $\psi(\phi) = Ae^{i\alpha\phi} + Be^{-i\alpha\phi}$, $\alpha = \dots$ a z požadavku jednoznačnosti $\psi(\phi) = \psi(\phi + 2\pi)$ najdeme možné hodnoty energie $E_m = \frac{m^2\hbar^2}{2I_z}$, $m \in \mathcal{Z}$.

Cvičení 26 *S použitím vzorců pro jednotlivé složky momentu hybnosti ukažte, že operátor $\hat{L}^2$ má ve sférických souřadnicích tvar*

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2[(\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2} + \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta})] \qquad (9)$$

Návod: Naučte se skládat (násobit) operátory !

Cvičení 27 *Odvoďte pravděpodobnosti nalezení částice v daném prostorovém úhlu pro stavy s, p, d.*

Výsledek:

$l = 0: \quad |Y_{0,0}|^2 = C_{0,0}$

$l = 1: \quad |Y_{1,-1}|^2 = C_{1,-1}\sin^2(\theta)$, $|Y_{1,0}|^2 = C_{1,0}\cos^2(\theta)$, $|Y_{1,1}|^2 = C_{1,1}\sin^2(\theta)$,

$l = 2: \quad |Y_{2,-2}|^2 = C_{2,-2}\sin^4(\theta)$, $|Y_{2,-1}|^2 = C_{2,-1}\sin^2(\theta)\cos^2(\theta)$,
$|Y_{2,0}|^2 = C_{2,0}(\frac{3}{2}\cos^2(\theta) - \frac{1}{2})^2$, $|Y_{2,1}|^2 = C_{2,1}\sin^2(\theta)\cos^2(\theta)$,
$|Y_{2,2}|^2 = C_{2,2}\sin^4(\theta)$

Nakreslete si grafy (nejlépe trojrozměrné na počítači).

Cvičení 28 *Napište všechny vlnové funkce harmonického oscilátoru pro stavy s energiemi $3/2\hbar\omega$, $5/2\hbar\omega$ a $7/2\hbar\omega$.*

Výsledek: Nezapomeňte na degeneraci energie, výsledek lze zapsat různými způsoby, např. jako součin vlastních funkcí jednorozměrného oscilátoru nebo pomocí vlastních funkcí $\hat{H}, \hat{L}^2, \hat{L}_z$.

Cvičení 29 *Napište operátor $\hat{L}^2$ vyjádřený pomocí posunovacích operátorů $\hat{L}_\pm$ a $\hat{L}_3$.*

Výsledek: $\hat{L}^2 = \hat{L}_+\hat{L}_- + \hat{L}_3^2 - \hbar\hat{L}_3 = \hat{L}_-\hat{L}_+ + \hat{L}_3^2 + \hbar\hat{L}_3$

Cvičení 30 *Posunovací operátory momentu hybnosti působí na kulové funkce způsobem*

$$\hat{L}_\pm Y_{lm} = \alpha^\pm_{lm} Y_{l,m\pm1}, \tag{10}$$

Spočítejte koeficienty $\alpha^\pm_{lm}$

Návod: Snadno lze nalézt s využitím předchozího cvičení $|\alpha^\pm_{lm}|^2$ (obložte předchozí výsledek (Y_{lm}, a Y_{lm}) a uvědomte si, že kulové funkce jsou vlastní funkce $\hat{L}^2$, L_3). Výsledek je

$$|\alpha^+_{lm}|^2 = \hbar^2[l(l+1) - m(m+1)],\ |\alpha^-_{lm}|^2 = \hbar^2[l(l+1) - m(m-1)].$$

Fáze $\alpha^\pm_{lm}$ neplyne z algebry operátorů, závisí na konkrétní volbě fází $Y_{l,m}$, pro standartní volbu uvedenou ve "slabikáři" jsou $\alpha^\pm_{lm}$ reálné.

Cvičení 31 *Kreační a anihilační operátory působí na vlastní funkce operátoru energie harmonického oscilátoru způsobem*

$$\hat{a}_\pm \psi_n = \alpha^\pm_n \psi_{n\pm1} \tag{11}$$

Spočítejte koeficienty $\alpha^\pm_n$.

Návod: Obložte $\hat{H} = \hbar\omega(\hat{a}_-\hat{a}_+ - \frac{1}{2})$, resp. $\hat{H} = \hbar\omega(\hat{a}_+\hat{a}_- + \frac{1}{2})$ vlastní funkcí harmonického oscilátoru (obdobně jako v předchozím cvičení), výsledek:

$$\alpha^+_n = \sqrt{n+1},\ \alpha^-_n = \sqrt{n}.$$

Ohledně fáze platí stejný komentář jako výše.

Cvičení 32 *Ukažte, že pro kreační a anihilační operátory energie harmonického oscilátoru platí*

$$\hat{a}_+\hat{a}_-\psi_n = n\ \psi_n$$

Návod: Využijte $\hat{H} = \hbar\omega(\hat{a}_+\hat{a}_- + \frac{1}{2})$.

Cvičení 33 *Spočtěte střední hodnoty složek hybnosti kvantové částice v Coulombově poli s energií* $-\frac{MQ^2}{2\hbar^2}$ *a nulovým momentem hybnosti (elektron v atomu vodíku ve stavu 1s).*

Návod: Využijte tvar $\hat{P}_i$ ve sférických souřadnicích (viz cvičení 24) a spočítejte $\langle \hat{P}_i \rangle_\psi = (\psi, \hat{P}_i \psi)/(\psi, \psi)$. Výsledek je $\langle \hat{P}_i \rangle_\psi = 0$ (jak lze ostatně očekávat ze symetrie vlnové funkce).

Cvičení 34 *Spočtěte střední hodnoty složek polohy kvantové částice popsané vlnovou funkcí (1).*

Výsledek: $\langle \hat{X}_i \rangle_\psi = \frac{\Re B_i}{2\Re A}$

Cvičení 35 *Spočtěte střední hodnoty složek hybnosti kvantové částice popsané vlnovou funkcí (1). Napište tvar vlnové funkce (1) popisující vlnový balík se střední hodnotou hybnosti* $\vec{p}_0$*, který má v čase* t_0 *střední hodnotu polohy* $\vec{x}_0$*.*

Výsledek: $\langle \hat{P}_i \rangle_\psi = -i\hbar (B_i - A\frac{\Re B_i}{\Re A}) \stackrel{A \in \mathbf{R}}{=} \hbar \Im B_i$
Vlnový balík:

$$\psi(x,t) = C\chi(t)^{-\frac{3}{2}} e^{-\frac{\vec{B}^2}{4A}} e^{-A\frac{(\vec{x}-\frac{\vec{B}}{2A})^2}{\chi(t)}},$$

kde $\vec{B} = 2A\vec{x}_0 + \frac{i}{\hbar}\vec{p}_0$.

Cvičení 36 *Určete pravděpodobnost nalezení hybnosti částice popsané vlnovou funkcí*

$$\psi(x) = Ce^{-\vec{x}^2 + ix_1} \tag{12}$$

v intervalu $(a_1, b_1) \times (a_2, b_2) \times (a_3, b_3)$*. Určete hustotu pravděpodobnosti nalezení hybnosti v okolí hodnoty* $\vec{p}_0$*.*

Výsledek: Ozn. $J = (a_1, b_1) \times (a_2, b_2) \times (a_3, b_3)$, $\vec{k} = (1, 0, 0)$

$$P_{\vec{p} \in J} = \frac{\int_J e^{-\frac{(\vec{k}-\frac{\vec{p}}{\hbar})^2}{2}} \, d^3\vec{p}}{(\sqrt{2\pi}\hbar)^3}.$$

Cvičení 37 *Nechť "jednorozměrná" částice s hmotou* M *v potenciálu harmonického oscilátoru s vlastní frekvencí* $\omega = \hbar/M$ *je ve stavu popsaném vlnovou funkcí*

$$\psi(x) = Ce^{-x^2 + ix} \tag{13}$$

S jakou pravděpodobností naměříme hodnoty její energie rovné $\frac{1}{2}\hbar\omega$ *resp.* $\hbar\omega$*,* $\frac{3}{2}\hbar\omega$*?*

Návod: S využitím znalosti vlastních funkcí harmonického oscilátoru a definice pravděpodobnosti přechodu do přísl. vlastních stavů lze snadno spočítat $P_{E=\frac{1}{2}\hbar\omega} = \frac{2\sqrt{2}}{3}e^{-\frac{1}{3}}$, $P_{E=\frac{3}{2}\hbar\omega} = \frac{4\sqrt{2}}{27}e^{-\frac{1}{3}}$, energii $\hbar\omega$ nelze naměřit (není ve spektru).

Cvičení 38 *Nechť částice s hmotou M v potenciálu harmonického oscilátoru s vlastní frekvencí $\omega = \hbar/M$ je ve stavu popsaném vlnovou funkcí*

$$\psi(x) = Ce^{-\vec{x}^2 + ix_1} \tag{14}$$

S jakou pravděpodobností naměříme hodnoty její energie rovné $\frac{5}{2}\hbar\omega$?

Návod: Nezapomeňte, že energie $\frac{5}{2}\hbar\omega$ třírozměrného harmonického oscilátoru je degenerovaná, musíte spočítat pravděpodobnosti přechodu do jednotlivých ortogonálních vlastních stavů příslušných k této energii a pak je sečíst. Výsledná pravděpodobnost: $e^{-\frac{1}{3}}\frac{32\sqrt{2}}{243}$.

Cvičení 39 *Nechť částice je ve stavu popsaném vlnovou funkcí*

$$\psi = (4\pi)^{-1/2}(e^{i\phi}\sin\theta + \cos\theta)g(r) \tag{15}$$

Jaké hodnoty L_z můžeme naměřit a s jakou pravděpodobností? Jaká je střední hodnota L_z v tomto stavu?

Návod: Uvědomte si, že vlastní funkce $\hat{L}^2, \hat{L}_z$ mají tvar $f(r)Y_{lm}(\theta,\phi)$ pro libovolnou funkci $f(r)$. Lze tedy uvažovat například $f(r) = g(r)$. Výsledek: $P_{11} = \frac{2}{3}$, $P_{10} = \frac{1}{3}$, ostatní pravděpodobnosti pak musí být rovny nule. Lze naměřit $L_z = 0$, $L_z = \hbar$. Střední hodnota L_z je $\frac{2\hbar}{3}$.

Cvičení 40 *Nechť částice je popsána vlnovou funkcí*

$$\psi = (x + y + 2z)\exp(-\alpha\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}),$$

Jaká je pravděpodobnost nalezení částice v prostorovém úhlu $(\theta, \theta + d\theta) \times (\phi, \phi + d\phi)$, kde θ, ϕ jsou polární, respektive azimutální úhel? Jaké hodnoty kvadrátu momentu hybnosti můžeme naměřit? Jaká je střední hodnota z-ové složky momentu hybnosti? Jaká je pravděpodobnost naměření z-ové složky momentu hybnosti $L_z = +\hbar$? Návod: zapište ψ pomocí kulových funkcí.

Návod: Převeďte vlnovou funkci do sférických souřadnic. Pravděpodobnost nalezení v prostorovém úhlu $d\Omega$ lze pak snadno nalézt

$$\begin{aligned} P_{d\Omega} &= K(\sin\theta\cos\phi + \sin\theta\sin\phi + 2\cos\theta)^2 d\Omega \\ &= K\sin\theta(\sin\theta\cos\phi + \sin\theta\sin\phi + 2\cos\theta)^2 d\theta d\phi,\ (K = \frac{1}{8\pi}). \end{aligned}$$

Pro další výpočet rozložte ψ do kulových funkcí (ukažte, že je lineární kombinací $Y_{1,-1}, Y_{1,0}$ a $Y_{1,1}$), je tedy vlastním vektorem kvadrátu momentu hybnosti příslušným $l = 1$, dále dopočítejte střední hodnotu z-ové složky momentu hybnosti (výsledek je 0) a pravděpodobnost naměření z-ové složky momentu hybnosti $L_z = +\hbar$ (výsledek je $\frac{1}{6}$).

Cvičení 41 *Spočtěte střední kvadratické odchylky složek polohy a hybnosti kvantové částice při měření na stavu popsaném vlnovou funkcí (1), kde $A > 0$. Ukažte, že pro tento stav platí*

$$\Delta_\psi(X_{\underline{k}})\Delta_\psi(P_{\underline{k}}) = \hbar/2 \tag{16}$$

Návod: Spočítejte $\langle \hat{X}_j \rangle_\psi = \frac{\Re B_j}{2A}$, $\langle \hat{X}_j^2 \rangle_\psi = \frac{(\Re B_j)^2 + A}{4A^2}$ a po dosazení do patřičného vzorce $\Delta_\psi(\hat{X}_j) = \sqrt{\frac{1}{4A}}$. Obdobně najdete $\Delta_\psi(\hat{P}_j) = \hbar\sqrt{A}$.

Cvičení 42 *Ukažte, že v jednorozměrném případě podmínka*

$$[\hat{A} - < \hat{A} >_\psi - i\alpha(\hat{B} - < \hat{B} >_\psi)]\psi = 0 \tag{17}$$

pro operátory $\hat{A} = \hat{X}, \hat{B} = \hat{P}$ je integrodiferenciální rovnicí, jejímiž jedinými řešeními jsou funkce

$$g(x) = C \exp[-Ax^2 + Bx],$$

které jsme nazvali minimální vlnové balíky.

Návod: Prozatím si označte $\langle \hat{X} \rangle_\psi = \mathbf{x}$, $\langle \hat{P} \rangle_\psi = \mathbf{p}$ a najděte řešení patřičné diferenciální rovnice

$$x\psi - \mathbf{x}\psi - i\alpha(-\imath\hbar\frac{\partial}{\partial x}\psi - \mathbf{p}\psi) = 0.$$

Na závěr určete vztah mezi α, integrační konstantou a $\mathbf{x}, \mathbf{p}$ nalezením středních poloh $\langle \hat{X} \rangle_\psi$, $\langle \hat{P} \rangle_\psi$ a jejich porovnáním s $\mathbf{x}, \mathbf{p}$ (můžete využít výsledek cvičení 34, 35).

Cvičení 43 *Nechť Hamiltonián kvantového systému má čistě bodové spektrum. Na systému byla naměřena hodnota a pozorovatelné A, která má čistě bodové spektrum a a je nedegenerovaná vlastní hodnota. Jaká je pravděpodobnost, že naměříme stejnou hodnotu, budeme-li měření opakovat po čase t?*

Návod: Rozložíme–li $\psi_a = \psi(0) = \sum_k c_k \psi_k$, kde ψ_k jsou vlastní funkce hamiltoniánu odpovídající energii E_k, pak s využitím znalosti časového vývoje vlastních funkcí hamiltoniánu najdeme

$$P_{A=a}(t) = |(\psi(0), \psi(t))|^2 = |\sum_k |c_k|^2 e^{-\frac{i}{\hbar}E_k t}|^2 = \sum_{j,k} |c_k|^2 |c_j|^2 e^{-\frac{i}{\hbar}(E_k - E_j)t}.$$

Cvičení 44 *Nechť částice hmoty M v jednorozměrné nekonečně hluboké potenciálové jámě šířky $2a$ je v čase $t = 0$ popsána vlnovou funkcí, (která je superposicí stacionárních stavů)*

$$\psi(x,0) = 0, \text{ pro } |x| > a, \quad \psi(x,0) = sin[\frac{\pi}{2a}(x-a)] + sin[\frac{\pi}{a}(x-a)], \text{ pro } |x| < a.$$

Jaká je pravděpodobnost, že částice se v čase $t = 0$ a $t = \frac{8Ma^2}{\pi\hbar}$ bude nacházet v intervalu (-a,0)?

Návod: V případě superpozice stacionárních stavů snadno naleznete časový vývoj, pak stačí prointegrovat $|\psi|^2$ přes $(-a, 0)$ a normovat. Výsledek:

$t = 0 \ldots P_0 = \frac{-8+3\pi}{6\pi}$,
$t = \frac{8Ma^2}{\pi\hbar} \ldots P = \frac{8+3\pi}{6\pi}$.

Cvičení 45 *Nechť jednorozměrná částice v poli harmonického oscilátoru je v čase $t = 0$ ve stavu*

$$\psi(x, 0) = A\psi_0 + B\psi_1$$

kde $A, B \in \mathbf{R}$, ψ_n vlastní stavy energie normalizované k 1. V jakém stavu je v libovolném čase $t > 0$?

Návod: Zůstává superpozicí stavů ψ_0, ψ_1, určete časový vývoj koeficientů lineární kombinace.

Cvičení 46 *Ukažte jak závisí na čase střední kvadratická odchylka souřadnice jednorozměrného harmonického oscilátoru.*

Návod: Jeden z možných postupů je následující: vyjděte z vyjádření $\psi = c_k(t)\hat{a}_+^k|vac\rangle$ a najděte (jednoduchý) časový vývoj $c_k(t)$. Pak vyjádřete $\hat{X}, \hat{X}^2$ pomocí $\hat{a}_\pm$ a po úpravách (s využitím $\hat{a}_-^k|vac\rangle = 0$, $\langle vac|\hat{a}_+^k = 0$) naleznete $(\Delta_\psi(A))^2 = K_1 e^{2i\omega t} + K_2 + K_3 e^{-2i\omega t}$, kde K_1, K_2, K_3 jsou konstanty závislé na počátečních podmínkách $c_k(0)$. Obecně lze tedy říci, že $(\Delta_\psi(A))^2$ vyhovuje diferenciální rovnici

$$f''' + 4\omega^2 f' = 0.$$

Cvičení 47 *Nalezněte operátor rychlosti pro částici v elektromagnetickém poli.*

Návod: $\hat{\dot{\vec{Q}}} = \frac{i}{\hbar}[\hat{H}, \hat{\vec{Q}}] = \ldots$, výsledek odpovídá dle principu korespondence (nikoliv překvapivě) výsledku v klasické mechanice.

Cvičení 48 *Ukažte, že vlastní čísla operátoru $\hat{\vec{\mu}} \cdot \vec{B}$ jsou $\pm\mu_0|\vec{B}|$. Najděte vlastní funkce.*

Návod: Využijte toho, že po nalezení vlastních čísel již víte, že rovnice pro odpovídající vlastní vektory má netriviální řešení, tj. řádky matice soustavy jsou lineárně závislé a tím pádem neřešíte soustavu, ale jednu rovnici pro 2 neznámé konstanty.

Cvičení 49 *Ukažte že $\hat{\vec{S}}^2 = \frac{3}{4}\hbar^2\mathbf{1}$. Porovnejte tento výsledek s $\hat{\vec{L}}^2$.*

Výsledek: Odpovídající l pro spin je $\frac{1}{2}$, tj. spin elektronu je “heločíselný”.

Cvičení 50 *Nechť pro volnou částici se spinem je naměřena hodnota z–ové složky spinu* $s_z = \hbar/2$. *Jestliže vzápětí měříme hodnotu spinu ve směru, který se z–ovou osou svírá úhel* Θ, *jaké můžeme naměřit hodnoty a s jakou pravděpodobností?*

Návod: Najděte si nějaký operátor spinu svírajícího se z–ovou osou úhel Θ (např. $\frac{\hbar}{2}\left(\cos(\Theta)\sigma_3 + \sin(\Theta)\sigma_1\right)$), příslušné pravděpodobnosti získáte patřičnými skalárnímy součiny vlastních vektorů, výsledky: $P(+\frac{\hbar}{2}) = \frac{1}{2}\cos\Theta + \frac{1}{2}$, $P(-\frac{\hbar}{2}) = -\frac{1}{2}\cos\Theta + \frac{1}{2}$.

Cvičení 51 *Uvažujte systém (tzv. supersymetrický harmonický oscilátor) popsaný na Hilbertovu prostoru* $L^2(\mathcal{R}, dx) \otimes \mathcal{C}^2$ *hamiltoniánem*

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta \otimes \mathbf{1} + \frac{m\omega^2}{2}x^2 \otimes \mathbf{1} + \frac{\hbar\omega}{2}\mathbf{1} \otimes \sigma_3.$$

Dále je dán operátor

$$\hat{Q} = \frac{1}{2\sqrt{m}}\sigma_1(\hat{P} + i\omega m\sigma_3\hat{X}).$$

Nalezněte $\hat{Q}^\dagger$, $\hat{Q}^2$, $[\hat{H}, \hat{Q}]$ *a výsledky vyjádřete pomocí operátorů* $\hat{H}$, $\hat{Q}$. *Jaké omezení lze vyvodit z těchto relací na spektrum hamiltoniánu (tj. zda je shora či zdola omezené a čím)? (Postačí uvažovat bodovou část spektra.)*

Návod: $\hat{Q}^\dagger = \hat{Q}$, $\hat{Q}^2 = \frac{1}{2}\hat{H}$, $[\hat{H}, \hat{Q}] = 0$. Omezení na spektrum získáme ze vztahu $\hat{H} = 2\hat{Q}^\dagger\hat{Q}$ (pozitivní operátor).

Cvičení 52 *Částice se spinem* $\hbar/2$ *je umístěna v konstantním magnetickém poli směřujícímím ve směru osy* x. *V čase* $t = 0$ *byla naměřena hodnota její z-ové složky spinu* $+\hbar/2$. *S jakou pravděpodobností nalezneme v libovolném dalším čase hodnotu její y-ové složky spinu* $+\hbar/2$*?*

Výsledek: $P_{S_y = \frac{\hbar}{2}} = \frac{1}{2}\left(\cos(\frac{B_x\mu t}{\hbar}) + \sin(\frac{B_x\mu t}{\hbar})\right)^2$.

Cvičení 53 *Ukažte, že pokud výraz* $\exp[i\vec{a}\cdot\vec{\sigma}]$ *definujeme pomocí řady*

$$\exp[i\vec{a}\cdot\vec{\sigma}] := \sum_{n=0}^{\infty}\frac{(i\vec{a}\cdot\vec{\sigma})^n}{n!}, \tag{18}$$

pak platí

$$\exp[i\vec{a}\cdot\vec{\sigma}] = \cos(|\vec{a}|) + i\frac{\vec{a}\cdot\vec{\sigma}}{|\vec{a}|}\sin(|\vec{a}|) \tag{19}$$

Návod: Spočtěte nejprve $(\vec{a}\cdot\vec{\sigma})^2$ a povšimněte si, že je to násobek jednotkové matice, pak sumu rozdělte na součet přes sudé a liché indexy.

Cvičení 54 *Napište vlnovou funkci $\psi(\vec{x},\xi)$ základního stavu částice v poli Coulombova potenciálu s hodnotou z–ové, resp. x–ové, resp. y–ové složky spinu rovné $\hbar/2$.*

Návod: Protože $\hat{H}$ je ve spinovém prostoru diagonální, bude mít základní stav stejnou energii, jako když spin neuvažujeme, a odpovídající vlastní vektor má tvar $\psi = \begin{pmatrix} \alpha e^{-\frac{r}{a}} \\ \beta e^{-\frac{r}{a}} \end{pmatrix}$. Konstanty α, β určíme tak, aby to byl současně vlastní vektor odpovídající složky spinu.

Cvičení 55 *Najděte energie a vlastní funkce základního a prvního excitovaného stavu dvou nerozlišitelných částic se spinem 0, respektive $\frac{1}{2}$ v poli harmonického oscilátoru.*

Výsledek:
Spin 0:

1. základní stav $E = 3\hbar\omega$, nedegenerovaný
2. 1. excitovaný stav $E = 4\hbar\omega$, 3 lineárně nezávislé stavy

Spin $\frac{1}{2}$:

1. základní stav $E = 3\hbar\omega$, nedegenerovaný
2. 1. excitovaný stav $E = 4\hbar\omega$, 12 lineárně nezávislých stavů

Cvičení 56 *Atom uhlíku má čtyři valenční elektrony (přesvědčte se). Můžeme na něj tedy nahlížet jako na systém čtyř elektronů ve sféricky symetrickém poli. Jaká je pak degenerace jeho základního stavu?*

Výsledek: 15.

Cvičení 57 *Najděte v 1. řádu poruchové teorie energii základního stavu atomu helia.*

Návod:
Neporušený systém ... 2 elektrony v poli jádra,
porucha ... elektrostatická interakce mezi elektrony $\hat{H}' = \tilde{e}^2/|\vec{x}^{(1)} - \vec{x}^{(2)}|$,
základní stav neporušeného $\hat{H}_0$ (zdůvodněte a ověřte normalizaci)

$$\phi(\vec{x}^{(1)}, \vec{x}^{(2)}, \xi^{(1)}, \xi^{(2)}) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\psi_0^{(1)}(\vec{x}^{(1)}, \xi^{(1)}) \psi_0^{(-1)}(\vec{x}^{(2)}, \xi^{(2)}) - \left((\vec{x}^{(1)}, \xi^{(1)}) \leftrightarrow (\vec{x}^{(2)}, \xi^{(2)}) \right) \right),$$

kde

$$\psi_0^{(\alpha)}(\vec{x}, \xi) = \pi^{-1/2} (Z/a)^{3/2} \exp(-Zr/a) \delta_{\xi,\alpha}, \quad \xi = \pm 1.$$

Při výpočtu $E_0^{(1)} = \langle\phi|\hat{H}'|\phi\rangle$ využijte (viz Formánek: Úvod do kvantové teorie)

$$\frac{1}{|\vec{x}-\vec{y}|} = \frac{1}{R}\sum_{l=0}^{\infty}(\frac{r}{R})^l P_l^0(\cos\theta), \qquad r < R, r = |\vec{x}|, R = |\vec{y}|, \, \vec{x}\vec{y} = rR\cos\theta$$

a

$$P_l^0(\vec{n}_1\vec{n}_2) = \frac{4\pi}{2l+1}\sum_{m=-l}^{l} Y_{lm}^*(\vec{n}_1)Y_{lm}(\vec{n}_2), \quad \forall\vec{n}_j : |\vec{n}_j| = 1.$$

Integrály pro $m \neq 0$, resp. $l \neq 0$ vymizí (proč?), zbývá provést triviální integraci přes úhly a per partes v r_1, r_2. Výsledek:

$$E_0^{(1)} = \frac{5\tilde{e}^2}{4a}, \quad E_0 = E_0^{(0)} + E_0^{(1)} + \ldots \simeq -74,8\text{eV}.$$