Otázky na skúšku ku predmetu Počítačová fyzika, letný semester 2014/2015

29. mája 2015, Martin Konôpka.

1. Uvažujte elektrón pohybujúci sa v mriežke atómov s potenciálnou energiou popísanou operátorom

   $$\hat{V}(\vec{r}) = \sum_l \hat{v}_l(\vec{r})$$

   kde sumácia ide cez atómy mriežky. Pre model nezávislých elektrónov a minimálnu bázu atómových orbitalov $\varphi_l(\vec{r})$ (len jeden orbital na atóm) odvoďte maticový tvar bezčasovej Schrödingerovej rovnice (SchR). *(Preberané v časti **1.1.**)*

2. Uvažujte elektrón ako v predošlej otázke. Vysvetlite, čo v tomto kontexte znamená model tesnej väzby, definujte význam parametrov ϵ a γ a dokážte, že parameter γ, tak ako sme ho mali definovaný, je záporný. *(Preberané v časti **1.2.**)*

3. Aplikujte model tesnej väzby na nekonečnú periodickú lineárnu retiazku: Vyjdite z rovnice (je to vlastne sústava rovníc)

   $$\sum_{l'} H_{ll'} \psi_{l'} = \mathcal{E} \psi_l$$

   za $H_{ll'}$ dosaďte symbolické hodnoty zodpovedajúce modelu tesnej väzby, zvoľte vhodný tvar vlnovej funkcie a nájdite disperzný vzťah, t. j. závislosť vlastnej energie $\mathcal{E}$ od vlnového vektora $\mathcal{K}$ (ktorý je v danom prípade len jednozložkový). *(Preberané v časti **1.4.**)*

4. Aplikujte model tesnej väzby na nekonečnú periodickú lineárnu retiazku s periodickými okrajovými podmienkami danými dĺžkou $L = N\,a$. Nakoniec nájdite aj možné hodnoty vlnových čísiel a vlastných energií a určte, koľko z nich stačí uvažovať. Zvyšná časť zadania je ako v otázke 3. *(Preberané v časti **1.5.**)*

5. Aplikujte model tesnej väzby na konečnú periodickú lineárnu retiazku s dĺžkou $L = N\,a$. Nakoniec nájdite aj možné hodnoty vlnových čísiel a vlastných energií a určte, koľko z nich stačí uvažovať. Zvyšná časť zadania je ako v otázke 3. *(Preberané v časti **1.6.**)*

6. Ukážte, že ak v úlohe pre vlastné hodnoty a vektory zmeníme všetky diagonálne prvky danej matice o tú istú hodnotu, jej vlastné hodnoty sa tiež len posunú a tú hodnotu a vlastné vektory sa nezmenia. *(Preberané v časti **2.1.**)*

7. Ako je definovaná úloha nájsť ľavé vlastné vektory (VV) a úloha nájsť pravé VV danej štvorcovej matice A? Ukážte, že príslušné vlastné hodnoty pre tieto dva problémy sú rovnaké. Ukážte, že v prípade symetrickej matice majú ľavé a pravé vlastné vektory identické číselné zložky. *(Preberané v časti **2.3.**)*

8. Vysvetlite, čo je podobnostná transformácia (PT) a ukážte, že diagonalizácia všeobecnej matice sa dá chápať ako PT. *(Preberané v častiach **2.3, 2.4.**)*

9. Uvažujte bod P v rovine, ktorý má vzhľadom na súradnicovú sústavu S súradnice (x, y). Aké budú jeho súradnice (x', y') vzhľadom na súradnicovú sústavu S', ktorá je oproti S pootočená o uhol Φ okolo osi z? Ukážte, že vzťah medzi (x, y) a (x', y') sa dá vyjadriť maticovo a že príslušná matica je ortogonálna. *(Preberané v časti **2.6.1.**)*

10. Uvažujte bezstratové prostredie s reálnym symetrickým tenzorom dielektrickej permitivity. Ukážte, ako možno tento tenzor spraviť diagonálnym. (Dôkaz o možnosti diagonalizovať ortogonálnou transformáciou netreba robiť; túto vlastnosť len treba vedieť využiť.) *(Preberané v časti **2.7.**)*

11. Vysvetlite, ako sú definované matica rozptylu a matica prechodu (*transfer matrix*) pre elektrón pohybujúci sa v jednom rozmere a interagujúci s daným potenciálom. Nakreslite obrázok a napíšte základné vyjadrenia a vzťahy. *(Preberané v častiach **4.1, 4.2.**)*

12. Nájdite vyjadrenie prechodovej matice M pomocou prvkov matice rozptylu S. *(Preberané v časti **4.2.**)*

13. Vyjadrite prvky matice rozptylu pomocou amplitúd prenosu (t. j. prechodu) a odrazu, teda pomocou t, t', r, r'. (Toto vyjadrenie aj zdôvodnite.) *(Preberané v časti **4.3.**)*

14. Napíšte vyjadrenie matice prechodu pre voľný úsek priestoru dĺžky ℓ. Elektrón nech má vlnový vektor q. *(Preberané v časti **4.4.**)*

15. Elektrón interaguje so sústavou dvoch prekážok, ktoré (zľava doprava) majú matice prechodu M_1 a M_2. Situáciu zakreslite a zdôvodnite, že rozptyl (všeobecnejšie povedané interakciu) na takejto dvojprekážke možno popisovať jedinou maticou prechodu, ktorá sa dá vyjadriť súčinom $M = M_2\, M_1$. *(Preberané v časti **4.4.1.**)*

16. Uvažujte maticu prechodu pre sústavu, v ktorej sa zachováva prúd a existuje symetria voči obráteniu času. (Vtedy je stopa matice reálna a determinant jednotkový.) Ukážte, že v takom prípade pre vlastné hodnoty matice M platí $\lambda_+\, \lambda_- = 1$. (Úlohou je najprv nájsť vlastné hodnoty všeobecnej matice 2×2, potom na ne uplatniť spomínané zachovanie a symetriu a tak dokázať uvedenú vlastnosť.) *(Preberané v časti **4.4.2.**)*

17. Pomocou Čebyševovej identity (ČI) odvoďte koeficient prechodu $T = |t|^2$ elektrónu cez N rovnakých prekážok v prípade, keď sa zachováva prúd, teda $|t|^2 + |r|^2 = 1$. [ČI. a aj vzťahy (134), (135) z prednáškového dokumentu budú ako podklad pre vypracovanie poskytnuté.] *(Preberané v časti **4.4.4.**)*

18. Definujte (aj zakreslite) úlohu s pravouhlou prekážkou a analyzujte všetky možné situácie, čo sa týka vzťahu medzi V_0 a E a z toho vyplývajúcej reálnosti alebo imaginárnosti vlnových čísiel k a k'. Prekážka nech má dĺžku $\ell = 2a$ a nachádza sa v intervale $(-a; a)$. *(Preberané v častiach **5, 5.1.**)*

19. Využite podmienky spojitosti $\psi(x)$ a $\mathrm{d}\psi/\mathrm{d}x$ a odvoďte maticový prvok M_{11} pre pravouhlú prekážku. *(Preberané v časti **5.1.** Môže sa vyskytnúť aj úplne obdobne formulovaná otázka, kde bude treba počítať niektorý iný prvok matice M.)*

20. Pre pravouhlú prekážku určte koeficient prenosu T pre rozptylové stavy s $E > V_0$. Nájdite podmienku rezonačnej transmisie. (Vzťah pre M_{22} bude daný, nebude ho treba v tejto otázke odvodiť.) *(Preberané v častiach **5.2, 5.2.1.**)*

21. Pre pravouhlú prekážku určte koeficient prenosu T pre rozptylové stavy s $E > V_0$. Nájdite približnú podmienku maxima odrazivosti. (Vzťah pre M_{22} bude daný, nebude ho treba v tejto otázke odvodiť.) *(Preberané v častiach **5.2, 5.2.2.**)*

22. Pre pravouhlú prekážku analyzujte režim tunelovania, t. j. $0 < E < V_0$. V tejto otázke bude dané vyjadrenie prvkov matice M všeobecnými vzťahmi. V rámci analýzy zapíšte vyjadrenia pre k, k', κ', prepíšte maticový prvok M_{11} pomocou k, κ' a funkcií cosh a sinh. Vyjadrite M_{22} pomocou M_{11}. Odvoďte príslušný vzťah pre transmisiu T. *(Preberané v časti **5.3.**)*

23. Vysvetlite, ako je definovaná matica prechodu pre rovinnú elektromagnetickú vlnu prechádzajúcu rozhraním dvoch dielektrík. Uvažujte TE polarizáciu a homogénne izotropné bezstratové prostredia. Nakreslite obrázok a napíšte základné vyjadrenia a vzťahy.
Rada: súradnicovú sústavu si natočte tak, aby rozhranie bolo totožné s rovinou (x, y), aby os x smerovala zvisle nahor a os z doprava. *(Preberané v častiach **6.1, 6.1.1.**)*

24. Odvoďte maticu prechodu pre TE polarizáciu. Pomôcka: vyplývajú z hraničných vzťahov

$$\vec{E}_{1\mathrm{t}} = \vec{E}_{2\mathrm{t}}\,, \quad \vec{H}_{1\mathrm{t}} = \vec{H}_{2\mathrm{t}}$$

Rada: súradnicovú sústavu si natočte tak, aby rozhranie bolo totožné s rovinou (x, y), aby os x smerovala zvisle nahor a os z doprava. *(Preberané v časti **6.1.1.**)*

25. Načrtnite postup, ako sa počíta matica prechodu TE elektromagnetickej vlny cez planparalelnú vrstvu hrúbky ℓ. Určte prvok $M_{11}^{(s)}$ tejto matice prechodu. Matica prechodu pre jedno rozhranie bude v tejto otázke daná. *(Preberané v časti **6.2.**)*

26. Naformulujte problém časového vývoja vlnového balíka v jednom rozmere zo známej počiatočnej vlnovej funkcie $\psi(x, t = 0) \equiv \phi(x)$. (Treba zapísať hamiltonián, normovaciu podmienku pre $\phi(x)$, napísať, čo budeme počítať a pomocou akej rovnice to budeme počítať. Treba aj vysvetliť, prečo tá rovnica je parciálnou diferenciálnou rovnicou.) *(Preberané v úvode časti 7.)*

27. Popíšte postup, ako riešiť SchR pre pohyb balíka pomocou rozvoja do vlastných funkcií celkového hamiltoniánu. *(Preberané v časti 7.1.)*

28. Popíšte postup, ako riešiť SchR pre pohyb balíka pomocou rozvoja do vlastných funkcií čiastkového hamiltoniánu. *(Preberané v časti 7.2.)*

29. Vysvetlite, čo je to Eulerova metóda riešenia obyčajných diferenciálnych rovníc 1. rádu a prečo býva pre náročnejšie problémy nevhodná. Vysvetlite princíp metódy deliaceho bodu (t. j. metódy Runge-Kutta 2. rádu). *(Preberané v časti 7.3.)*

30. Uvažujte Poissonovu rovnicu v dvoch rozmeroch,

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = f(x, y)$$

ako problém s okrajovou hodnotou. Popíšte, ako by ste túto úlohu riešili metódou konečných diferencií. Úlohu treba riešiť na danej obdĺžnikovej oblasti, na okrajoch ktorej sú hodnoty funkcie u známe. *(Preberané v časti 8.2.)*

31. Parciálnu diferenciálnu rovnicu

$$\frac{\partial u}{\partial t} = -v\frac{\partial u}{\partial x}$$

aproximujte diferenčnou schémou FTCS (Forward Time, Centered Space). Spravte von Neumannovu analýzu stability tejto schémy a vysvetlite, v čom spočíva jej základný problém. *(Preberané v častiach 8.3.1, 8.3.2.)*

32. Parciálnu diferenciálnu rovnicu

$$\frac{\partial u}{\partial t} = -v\frac{\partial u}{\partial x}$$

aproximujte diferenčnou schémou s Laxovou úpravou. Spravte von Neumannovu analýzu stability tejto schémy a odvoďte, za akých podmienok je stabilná. *(Preberané v časti 8.3.3.)*

33. Popíšte, ako pracuje Newtonova metóda hľadania minima funkcie viacerých premenných. *(Preberané v časti 9.2.)*