NAPREDNA KVANTNA MEHANIKA

Drugi kolokvij 21. 12. 2023.

ZADATAK 1 Razmotrite sustav koji se sastoji od dvije čestice spina 1/2. Promatrač A mjeri komponente spina jedne od čestica (s_{1x} , s_{1z} , …) dok promatrač B mjeri komponente spina druge čestice. Pretpostavimo da je poznato da je sustav u singletnom spinskom stanju, odnosno, da je ukupni spin $S_{\text{total}} = 0$.
(a) Kolika je vjerojatnost da će promatrač A dobiti vrijednost $s_{1z} = \hbar/2$ ako promatrač B ne izvrši mjerenje? Isto pitanje za $s_{1x} = \hbar/2$.
(b) Promatrač B mjerenjem utvrdi da je čestica 2 sigurno u stanju $s_{2z} = \hbar/2$. Što možemo zaključiti o ishodu mjerenja promatrača A ako, (i) A izmjeri s_{1z} , (ii) A izmjeri s_{1x}? Objasnite!

ZADATAK 2 Pretpostavite da su oba elektrona u helijevom atomu ili u heliju sličnom ionu u kvantnom stanju opisanom jednakom valnom funkcijom

$$\psi(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{\pi}}\beta^{-3/2}e^{-r/\beta}$$

Za koju će vrijednost β prosječna vrijednost hamiltonijana za dva elektrona

$$H = \sum_{i=1}^{2}\left(\frac{\mathbf{p}_i^2}{2\mu} - \frac{Ze^2}{r_i}\right) + \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}$$

biti minimalna? Pri tome je μ reducirana masa za elektron i jezgru, a Ze naboj jezgre.
***Uputa*:** za proračun prosjeka za jednočestični dio hamiltonijana, koristite virijalni teorem. Za proračun dvočestičnog dijela, koristite razvoj funkcije $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^{-1}$ po sfernim harmonicima.

ZADATAK 3 (a) Za potencijal

$$V(r) = \frac{V_0}{r^2 + a^2}$$

izračunajte veličinu $\Delta(b)$ u eikonalnoj aproksimaciji.
(b) Pretpostavimo da uspijemo "ugasiti" potencijal pod (a) za $r \geq r_0$. Izračunajte $\Delta(b)$ u ovom slučaju.
(c) Za potencijal pod (b), ako je r_0 jako velik, napišite izraz za amplitudu raspršenja u eikonalnoj aproksimaciji pomoću integrala.

1.

(a) Vjerojatnost da će promatrač A dobiti mjerenjem $s_{1z} = +\frac{\hbar}{2}$ je 0,5. Slično, da će mjerenjem dobiti $s_{1x} = \frac{\hbar}{2}$, vjerojatnost je 0,5. Naime, promatrač A ne može razlikovati ova dva mjerenja, ekvivalentni su.

(b) Neka promatrač B izmjeri da je čestica 2 u stanju $s_{2z} = \hbar/2$. Budući je sustav u stanju s ukupnim spinom nula (singlet),

$$|s=0, m=0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|+-\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}|-+\rangle$$

promatrač B je izabrao stanje $|-+\rangle$ pa će A sa vjerojatnošću jednakom 1, izmjeriti $s_{1z} = -\hbar/2$.
Ako A mjeri x-komponentu spina, izmjerit će $\pm\frac{\hbar}{2}$ s vjerojatnostima jednakom 0,5, budući se stanje $|-+\rangle$ može razviti po stanjima

$$|S_x;+\rangle|+\rangle \text{ i } |S_x;-\rangle|+\rangle$$

Naime,

$$|-+\rangle = c_1|S_x;+\rangle|+\rangle + c_2|S_x;-\rangle|+\rangle$$

$$c_1 = \left(\langle S_x;+|\langle +|\right)\cdot\left(|-\rangle|+\rangle\right) = \left(\frac{1}{\sqrt{2}}\langle +| + \frac{1}{\sqrt{2}}\langle -|\right)\langle +|\cdot\left(|-\rangle|+\rangle\right)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}}\underbrace{\left(\langle +|\langle +|\right)\cdot\left(|-\rangle|+\rangle\right)}_{=0} + \frac{1}{\sqrt{2}}\underbrace{\left(\langle -|\langle +|\right)\cdot\left(|-\rangle|+\rangle\right)}_{=1}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}}$$

Odavdje je, $|c_1|^2 = 1/2$, a slično vrijedi i za $|c_2|^2 = 1/2$

$\boxed{2.}$

Valna funkcija koja je zadana u zadatku

$$\psi(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \zeta^{-3/2} e^{-r/\zeta}$$

podudarat će se 1s valnom funkcijom u vodiku ili vodiku sličnom ionu, uzmemo li

$$\zeta \equiv \frac{\hbar^2}{Z' \mu e^2}$$

Za $Z'=1$ dobijemo zapravo vodik, a $\hbar^2/\mu e^2$ je Bohrov polumjer, $\mu \simeq m_e$. Veličina Z' je ustvari efektivni naboj, a u ovom zadatku je varijacijski parametar ζ, a ne Z' kao što je uobičajeno.

Ukupna prostorna valna funkcija za osnovno stanje helija može biti samo simetrična

$$\Psi(r_1, r_2) = \psi(r_1)\psi(r_2) = \psi_1 \psi_2$$

Spinska valna funkcija za osnovno stanje je antisimetrična, no hamiltonijan ne ovisi o spinu pa spinski dio ne moramo uzeti u obzir, skalarni umnožci daju jedinicu.

U ovom zadatku koristimo varijacijski princip. Funkcija Ψ je probna funkcija, a ζ je varijacijski parametar.

Potražimo najprije prosječnu vrijednost u stanju Ψ za jednočestični dio hamiltonijana

$$\langle \Psi | \sum_{i=1}^{2} \left(\frac{\vec{p}_i^{\,2}}{2\mu} - \frac{Ze^2}{r_i} \right) | \Psi \rangle$$

$$= \langle \psi_1 | \frac{p_1^2}{2\mu} - \frac{Ze^2}{r_1} | \psi_1 \rangle \underbrace{\langle \psi_2 | \psi_2 \rangle}_{=1} + \underbrace{\langle \psi_1 | \psi_1 \rangle}_{=1} \langle \psi_2 | \frac{p_2^2}{2\mu} - \frac{Ze^2}{r_2} | \psi_2 \rangle$$

Prosječnu vrijednost kinetičke energije izračunat ćemo pomoću virijalnog teorema. Za Coulombski potencijal

$$V' = -\frac{z'e^2}{r}$$

virijalni teorem kaže da je

$$2\langle T\rangle = \langle \vec{r}\cdot\vec{\nabla}V'\rangle = \langle \vec{r}\cdot\left(\frac{z'e^2}{r^2}\vec{e}_r\right)\rangle = \langle \underbrace{\vec{r}\cdot\vec{e}_r}_{r}\frac{z'e^2}{r^2}\rangle$$

$$= -\langle V'\rangle$$

Probna valna funkcija je svojstvena za hamiltonijan

$$H' = \frac{\vec{p}^{\,2}}{2\mu} - \frac{z'e^2}{r}$$

pa je

$$\langle H'\rangle = \langle T\rangle + \langle V'\rangle = \langle T\rangle - 2\langle T\rangle = -\langle T\rangle$$

gdje je

$$\langle H'\rangle = -z'^2\frac{e^2}{2a_0} = -z'^2 R_0$$

$$R_0 = \frac{e^2}{2a_0} \quad \text{(Rydbergova energija)}$$

Odavdje je kinetička energija

$$\langle T\rangle = z'^2 R_0 = \left(\underbrace{\frac{\hbar}{\mu e^2}}_{a_0}\right)^2\cdot\frac{1}{\zeta^2}R_0 = a_0^2 R_0\cdot\frac{1}{\zeta^2}$$

Prosječnu vrijednost potencijalne energije

$$V = -\frac{ze^2}{r}$$

pomoću V' i virijalnog teorema

$$\langle V'\rangle = -2\langle T\rangle \Big/ \cdot \frac{z}{z'}$$

$$\langle V'\rangle \cdot \frac{Z}{Z'} = \langle V\rangle = -2\frac{Z}{Z'}\langle T\rangle = -2\frac{Z}{Z'}\cdot Z'^2 R_o$$
$$= -2 Z Z' R_o$$

Ukupna kinetička i potencijalna energija za dva četice glasi

$$\left(2Z'^2 - 4ZZ'\right) R_o = \left(2\cdot\frac{a_o^2}{\mathfrak{z}^2} - 4Z\frac{a_o}{\mathfrak{z}}\right) R_o$$

Još treba izračunati prosječnu vrijednost po probnoj funkciji za $e^2/|\vec{r}_1-\vec{r}_2|$. Razvoj za $|\vec{r}_1-\vec{r}_2|^{-1}$ po sfernim harmonicima glasi:

$$\frac{1}{|\vec{r}_1-\vec{r}_2|} = 4\pi\sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{l}\frac{Y^*_{lm}(\Omega_1)\,Y_{lm}(\Omega_2)}{2l+1}\cdot\frac{r_<^l}{r_>^{l+1}}$$

gdje je $r_<$ ($r_>$) manja (veća) varijabla od r_1 i r_2.

Imamo,

$$\langle\Psi|\frac{1}{|\vec{r}_1-\vec{r}_2|}|\Psi\rangle = \frac{4\pi e^2}{\pi^2\mathfrak{z}^6}\sum_{l,m}\int dr_1\int dr_2\, e^{-2r_1/\mathfrak{z}}e^{-2r_2/\mathfrak{z}}$$
$$\cdot\frac{1}{2l+1}\cdot\frac{r_<^l}{r_>^{l+1}}\, r_1^2 r_2^2\int d\Omega_1\int d\Omega_2\, Y^*_{lm}(\Omega_1)\,Y_{lm}(\Omega_2)$$

Integral po kutnim varijablama

$$\sqrt{4\pi}\int d\Omega_1\, Y^*_{lm}(\Omega_1)\cdot\underbrace{\frac{1}{\sqrt{4\pi}}}_{Y_{00}} = \sqrt{4\pi}\,\delta_{l0}\,\delta_{m0}$$

$$\int Y_{00}(\Omega_2)\,d\Omega_2 = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}\cdot 4\pi$$

Ostaje samo član $\ell = 0$. Integrali po kutnim varijablama daju 4π. Imamo

$$\langle \Psi | \frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} | \Psi \rangle = \frac{(4\pi)^2 e^2}{\pi^2 z^6} \int_0^\infty dr_1 \int_0^\infty dr_2 \, \frac{r_1^2 r_2^2}{r_>} e^{-2r_1/z} e^{-2r_2/z}$$

Računamo integrale po r_1 i r_2. Treba biti oprezan prilikom integriranja zbog mogućnosti $r_1 > r_2$ i $r_2 > r_1$.

$$\int_0^\infty dr_1 \, r_1^2 e^{-2r_1/z} \cdot \Big[\underbrace{\frac{1}{r_1} \int_0^{r_1} dr_2 \, r_2^2 e^{-2r_2/z}}_{r_1 > r_2} + \underbrace{\int_{r_1}^\infty dr_2 \, r_2 \, e^{-2r_2/z}}_{r_1 < r_2} \Big]$$

Bronštejn;

$$\int_0^{r_1} dr_2 \, r_2^2 e^{-2r_2/z} = \frac{1}{4} z^3 - \frac{1}{4} z e^{-2r_1/z} \left(2r_1^2 + 2r_1 z + z^2 \right)$$

$$\int_{r_1}^\infty dr_2 \, r_2 \, e^{-2r_2/z} = \frac{1}{4} z e^{-2r_1/z} (2r_1 + z)$$

Integrali postaju

$$\int_0^\infty dr_1 \, r_1^2 e^{-2r_1/z} \Big[\frac{1}{4} \cdot \frac{z^3}{r_1} - \frac{1}{4} z e^{-2r_1/z} \left(2r_1 + 2z + \frac{z^2}{r_1} \right) + \frac{1}{4} z^2 e^{-2r_1/z} + \frac{1}{2} e^{-2r_1/z} r_1 \cdot z \Big]$$

$$\int_0^\infty dr_1 r_1^2 e^{-2r_1/3} \cdot \left[\frac{1}{4} \cdot \frac{3^3}{r_1} - \frac{1}{4} 3^2 e^{-2r_1/3} - \frac{1}{4} \frac{3^3}{r_1} e^{-2r_1/3} \right]$$

$$= \frac{5 3^5}{128}$$

Prema tome,

$$\langle \Psi | \frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} | \Psi \rangle = \frac{16 \pi^2 e^2}{\pi^2 \cdot 3^6} \cdot \frac{5 3^5}{128} = \frac{5e^2}{8 3} = \frac{5}{4} z' R_0$$

Vaupajući izraz glasi

$$E(z') = \left(2 z'^2 - 4 z z' + \frac{5}{4} z' \right) R_0$$

Tražimo da je

$$\frac{\partial E}{\partial z'} = 0$$

$$4 z' - 4 z + \frac{5}{4} = 0$$

$$(z')_0 = z - \frac{5}{16}$$

dok je

$$3_0 = \frac{\hbar}{\mu e^2} \cdot \frac{1}{z - 5/16}$$

Minimum za $E(z')$ je

$$E_{min} = \left(-2 z^2 + \frac{5}{4} z - \frac{25}{128} \right) R_0$$

$\boxed{3.}$

(a) $$\Delta(b) = -\frac{m}{2\hbar^2 k}\int_{-\infty}^{\infty} dz\, V\left(\sqrt{b^2+z^2}\right) = -\frac{mV_0}{2\hbar^2 k}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{dz}{z^2+a^2+b^2}$$

Iz Bronštejna,

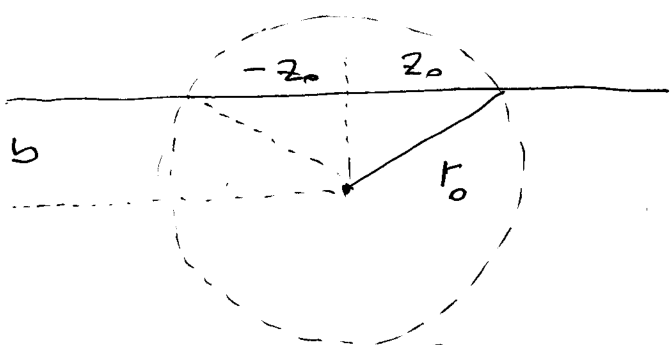
$$\int_{-\infty}^{\infty}\frac{dz}{z^2+a^2+b^2} = \frac{1}{\sqrt{a^2+b^2}}\arctan\left[\frac{z}{\sqrt{a^2+b^2}}\right]\Bigg|_{-\infty}^{\infty}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{a^2+b^2}}\left(\frac{\pi}{2}-\left(-\frac{\pi}{2}\right)\right) = \frac{\pi}{\sqrt{a^2+b^2}}$$

$$\Delta(b) = -\frac{mV_0\pi}{2\hbar^2 k\sqrt{a^2+b^2}}$$

(b) Sada je potencijal oblika

$$V(r) = \begin{cases} \dfrac{V_0}{r^2+a^2}; & r < r_0 \\ 0; & r \geq r_0 \end{cases}$$



$-z_0 \leq z \leq z_0$

$z_0 = \sqrt{r_0^2-b^2}$

$$\Delta(b) = -\frac{mV_0}{2\hbar^2 k}\int_{-\sqrt{r_0^2-b^2}}^{\sqrt{r_0^2-b^2}} dz\,\frac{1}{z^2+a^2+b^2} = -\frac{mV_0}{2\hbar^2 k}\cdot\frac{1}{\sqrt{a^2+b^2}}$$

$$\cdot\arctan\left(\frac{z}{\sqrt{a^2+b^2}}\right)\Bigg|_{-\sqrt{r_0^2-b^2}}^{\sqrt{r_0^2-b^2}}$$

$$= -\frac{mV_0}{2\hbar K}\cdot\frac{1}{\sqrt{a^2+b^2}}\left[\arctan\left[\frac{\sqrt{r_0^2-b^2}}{\sqrt{a^2+b^2}}\right]\underbrace{-\arctan\left[\frac{-\sqrt{r_0^2-b^2}}{\sqrt{a^2+b^2}}\right]}_{-\arctan\left[\frac{\sqrt{r_0^2-b^2}}{\sqrt{a^2+b^2}}\right]}\right]$$

$$= -\frac{mV_0}{\hbar^2 K}\cdot\frac{1}{\sqrt{a^2+b^2}}\arctan\left[\frac{\sqrt{r_0^2-b^2}}{\sqrt{a^2+b^2}}\right]$$

(c) $r_0 \gg a, b$

$$f(\vec{k}',\vec{k}) = -ik\int_0^{r_0} db\, b\, J_0(kb\Theta)\left[e^{2i\Delta(b)}-1\right]$$

$$\arctan\left[\frac{\sqrt{r_0^2-b^2}}{\sqrt{a^2+b^2}}\right]\xrightarrow[r_0\gg a,b]{}\frac{\pi}{2}.$$

pa je

$$\Delta(b) \simeq -\frac{mV_0\pi}{2\hbar^2 K}\cdot\frac{1}{\sqrt{a^2+b^2}}$$

$$f(\vec{k}',\vec{k}) = -ik\int_0^{\infty} db\, b\, J_0(kb\Theta)\left[\exp\left(-\frac{\pi i V_0 m}{\hbar^2 K\sqrt{a^2+b^2}}\right)-1\right]$$

Možemo još promijeniti varijablu integracije

$$kb\Theta = y$$

$$b = \frac{y}{k\Theta}\ ; \quad db = \frac{dy}{k\Theta}$$

$$f(\vec{k}',\vec{k}) = \frac{1}{ik\Theta^2}\int_0^{\infty} dy\, y\, J_0(y)\left[\exp\left(-\frac{i\pi V_0 m\Theta}{\hbar^2\sqrt{a^2k^2\Theta^2+y^2}}\right)-1\right]$$