NAPREDNA KVANTNA MEHANIKA

Prvi kolokvij 23. 11. 2023.

ZADATAK 1 Neki autori definiraju da je operator A ***realan*** ako je svaki matrični element $\langle b'|A|b''\rangle$ u nekoj reprezentaciji $\{|b'\rangle\}$ realan broj. Je li taj koncept neovisan o reprezentaciji, odnosno, da li matrični elementi ostaju realni ukoliko promijenimo reprezentaciju? Provjerite vaš odgovor pomoću matrica operatora projekcije spina S_y i S_z za spin 1/2.

ZADATAK 2 Razmotrite elektron u atomu na kojeg djeluje potencijal oblika konačne sferne potencijalne jame

$$V(r) = \begin{cases} -V_0\,, & r < r_0 \\ 0\,, & r > r_0 \end{cases}$$

gdje je $V_0 > 0$. Neka je elektron u osnovnom stanju ovakvog atoma.
(a) Nađite rješenje radijalne jednadžbe za sfernu jamu u kojoj je elektron u osnovnom stanju ($l = 0$). Pri tome uvedite

$$k_1^2 \equiv \frac{2m\left(V_0 - |E_0|\right)}{\hbar^2}, \quad k_2^2 \equiv \frac{2m|E_0|}{\hbar^2}$$

gdje je $E_0 = -|E_0|$ poznata energija osnovnog stanja i vrijedi $0 < |E_0| < V_0$.
(b) Uključimo malu H' = const. neovisnu o vremenu t i vektoru položaja $\mathbf{r}$. Upotrijebite Fermijevo zlatno pravilo i izračunajte vjerojatnost po jediničnom vremenu da elektron izađe slobodan iz jame.

ZADATAK 3 Čestica mase m giba se po jednoj od dvije putanje u vremenu i prostoru koje povezuju dvije točke A i B s koordinatama $(x_A, t_A) = (0, 0)$ i $(x_B, t_B) = (D, T)$. Jedna od putanja je kvadratna po vremenu, $x_1(t) = at^2/2$, gdje je a konstanta. Druga putanja je linearna po vremenu, $x_2(t) = vt$, gdje je v konstanta. Pretpostavimo da je ***točna*** klasična putanja $x_1(t)$.
(a) Iskoristite vaše znanje iz elementarne mehanike da izrazite konstante a i v pomoću D i T.
(b) Upotrijebite Newtonov zakon da pokažete da je potencijalna energija

$$V(x) = -\frac{2mD}{T^2}x$$

(c) Za svaku od putanja $x_1(t)$ i $x_2(t)$ izrazite klasičnu akciju

$$S\left[x(t)\right] = \int_0^T \left(\frac{1}{2}m\dot{x}^2 - V(x)\right)dt$$

pomoću m, D i T.
(d) Potvrdite da je $S_1 \equiv S[x_1(\mathrm{t})] < S_2 \equiv S[x_2(\mathrm{t})]$ te nađite $\Delta S = S_2 - S_1$.
(e) Izračunajte numerički $\Delta S/\hbar$ za česticu koja prijeđe put od 1 mm za vrijeme 1 ms u dva slučaja: u prvom se radi o nanočestici sastavljenoj od 100 atoma ugljika, a u drugom slučaju je riječ o elektronu. U kojem slučaju se može reći da je gibanje kvantno-mehaničko i zašto?

$\boxed{1.}$

Neka je operator A u reprezentaciji $\{|b'\rangle\}$ dan matričnim elementom $\langle b'|A|b''\rangle$. U reprezentaciji $\{|n'\rangle\}$ imamo

$$\langle n'|A|n''\rangle = \sum_{b'}\sum_{b''} \langle n'|b'\rangle\langle b'|A|b''\rangle\langle b''|n''\rangle$$

Ako je $\langle b'|A|b''\rangle$ realan, amplitude $\langle n'|b'\rangle$ i $\langle b''|n''\rangle$ mogu biti kompleksni brojevi pa je tada $\langle n'|A|n'\rangle$ kompleksan.

Na primjer, operator S_y u bazi $\{|S_y;+\rangle, |S_y;-\rangle\}$ glasi

$$S_y \doteq \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

dok je u bazi $\{|S_z;+\rangle, |S_z;-\rangle\}$

$$S_y \doteq \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

Dakle, u jednoj je bazi S_y realan, ali u drugoj nije!

Drugi je primjer, operator položaja. U bazi $\{|p'\rangle\}$ imamo

$$\langle p'|x|p''\rangle = \int dx' \langle p'|x|x'\rangle\langle x'|p''\rangle = \int dx' \, x' \langle p'|x'\rangle\langle x'|p''\rangle$$

$$= \frac{1}{2\pi\hbar}\int dx' \, e^{i(p''-p')x'/\hbar} \cdot x'$$

Zbog

$$\delta(p''-p') = \frac{1}{2\pi\hbar}\int dx' \, e^{i(p''-p')x'/\hbar}$$

imamo

$$\frac{\partial}{\partial p''}\delta(p''-p') = \frac{1}{2\pi\hbar}\int dx' \, \frac{ix'}{\hbar} e^{i(p''-p')x'/\hbar}$$

Odavde,

$$\langle p' | x | p'' \rangle = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial p''} \delta(p'' - p')$$

pa je matrični element kompleksan, za razliku od $\langle x' | x | x'' \rangle$.

2.

(a) Rješavamo radijalnu Schrödingerovu jednadžbu

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2u}{dr^2} + \left[V(r) + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2}\right]u = Eu$$

U našem slučaju se radi o osnovnom stanju $l=0$ i $E_0=-|E_0|$.

Za $r<r_0$ imamo

$$\frac{d^2u}{dr^2} + k^2 u = 0 \quad , \quad k^2 = \frac{2m}{\hbar^2}\left(V_0 - |E_0|\right)$$

Za $r>r_0$ imamo

$$\frac{d^2u}{dr^2} - \varkappa^2 u = 0 \quad , \quad \varkappa^2 = \frac{2m}{\hbar^2}|E_0|$$

Rješenje za radijalni deo valne funkcije osnovnog stanja glasi

$$u_< = A\sin(kr)$$
$$u_> = B\,e^{-\varkappa r}$$

Na rubu $r=r_0$ valna funkcija i njena derivacija su neprekinute.

$$u_< = u_>\Big|_{r=r_0} \Rightarrow A\sin(kr_0) = B\,e^{-\varkappa r_0}$$

Odavdje

$$B = A\sin(kr_0)\,e^{\varkappa r_0} \qquad (1)$$

Normalizacija radijalne funkcije

$$|A|^2\int_0^{r_0}\sin^2(kr)\,dr + |B|^2\int_{r_0}^{\infty} e^{-2\varkappa r}\,dr = 1$$

$$A^2 \cdot \left[\frac{1}{2} r - \frac{1}{4K} \sin 2Kr\right] \Big|_0^{r_0} + B^2 \frac{e^{-2\varkappa r}}{-2\varkappa} \Big|_{r_0}^{\infty} = 1$$

$$A^2\left[\frac{1}{2} r_0 - \frac{1}{4K} \sin(2Kr_0)\right] + B^2 \cdot \frac{e^{-2\varkappa r_0}}{2\varkappa} = 1 \qquad (2)$$

Rješenje ovog sistava jednadžbi je

$$A = \frac{2\sqrt{K\varkappa}}{\sqrt{2K\left(r_0 \cdot \varkappa + \sin^2(Kr_0) - \varkappa \cdot \sin(2Kr_0)\right)}} \qquad (3)$$

$$B = \frac{2 e^{r_0 \varkappa} \sqrt{K\varkappa} \sin(Kr_0)}{\sqrt{2K\left(r_0 \varkappa + \sin^2(Kr_0) - \varkappa \sin(2Kr_0)\right)}}$$

Za kutni dio je rješenje Y_0^0 pa je ukupna valna funkcija za osnovno stanje

$$\psi_0(r) = R(r)\, Y_0^0 = \frac{u}{r} Y_0^0$$

$$= \begin{cases} A \dfrac{\sin(Kr)}{r} \cdot \dfrac{1}{\sqrt{4\pi}} & ; \ r < r_0 \\[2ex] B \dfrac{e^{-\varkappa r}}{r} \cdot \dfrac{1}{\sqrt{4\pi}} & ; \ r > r_0 \end{cases}$$

gdje su A i B dani jednadžbama (3).

(b) Uključimo smetnju $H' = $ konst. Početno se čestica nalazi u stanju $\psi_i = \psi_0$. Konačno stanje je ravni val

$$\psi_f = \frac{1}{L^{3/2}} e^{i\vec{K}_f \cdot \vec{r}}$$

gdje su vektori $\vec{K}_f$ diskretni

$$\vec{K}_f = \frac{2\pi n_x}{L} \vec{e}_x + \frac{2\pi n_y}{L} \vec{e}_y + \frac{2\pi n_z}{L} \vec{e}_z \ ; \ n_x, n_y, n_z = 1, 2, \ldots$$

Gustoća stanja za ravne valove je

$$\rho(E) = \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \frac{m}{\hbar^2} \cdot \underbrace{\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}}_{K} \, d\Omega$$

Fermijevo zlatno pravilo daje vjerojatnost po jediničnom vremenu (i po prostornom kutu, u ovom slučaju) za emisiju elektrona valnog vektora $\vec{k}_f$

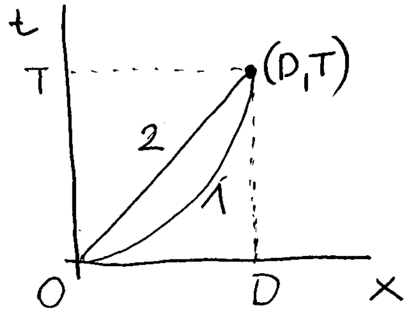
$$w = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \langle \psi_f | H' | \psi_i \rangle \right|^2 \delta(E_f - E_i) \qquad (*)$$

gdje je $E_i = E_0$, energija osnovnog stanja. Cijeli izraz $(*)$ treba još integrirati po energijama konačnih stanja, uzevši u obzir gustoću stanja za slobodnu čestici.

Međutim, za vremenski neovisnu smetnju, gornji izraz je različit od nule samo ako je $E_f \simeq E_i = E_0$. To se ne može dogoditi uz zadanu smetnju za $t \to \infty$, pa je $w = 0$.

Ako je t konačno vrijeme, vjerojatnost postaje konačna samo u slučaju da je $t \Delta E = t(E_f - E_i) \sim \hbar$, što je zaista moguće ako je $E_0 < V_0 \simeq 0$. Dakle, $E_0 \simeq 0$, odnosno blizu granice za kontinuum stanja. Tada je prijelaz u kontinuum stanja zaista moguć, no vjerojatnost za prijelaz je veoma mala.

3.



D je prevaljeni put, a T je vrijeme

(a) $x_1(t) = at^2/2$

Odavde je $a = 2D/T^2$. Na drugoj stazi putanja $x_2(t) = vt$ daje $v = D/T$.

Također,
$$\dot{x}_1 = at = \frac{2D}{T^2}t$$
$$\dot{x}_2 = v = \frac{D}{T}$$

(b) Iz 2. Newtonovog zakona
$$ma = -\frac{dV}{dx}$$
pa je
$$V = -max = -m\cdot\underbrace{\frac{2D}{T^2}}\cdot x$$
jer je x_1 "prava" putanja!

(c)
$$S[x(t)] = \int_0^T \left[\frac{1}{2}m\dot{x}^2 - V(x)\right]dt = \int_0^T \left[\frac{1}{2}m\dot{x}^2 + \frac{2Dm}{T^2}x\right]dt$$
$$S[x_1(t)] = m\int_0^T \left[\frac{1}{2}\,\frac{4D^2}{T^4}t^2 + \frac{2D}{T^2}\cdot\frac{2D}{T^2}\cdot\frac{t^2}{2}\right]dt$$
$$= m\cdot\left[\frac{1}{2}\cdot\frac{4D^2}{T^4}\cdot\frac{t^3}{3} + \frac{4D^2}{T^4}\cdot\frac{t^3}{6}\right]\Big|_0^T = \frac{4}{3}m\frac{D^2}{T},$$

$$S[x_2(t)] = m \int_0^T \left[\frac{1}{2} \cdot \frac{D^2}{T^2} + \frac{2D}{T^2} \cdot \frac{D}{T} \cdot t \right] dt$$

$$= m \cdot \left[\frac{1}{2} \cdot \frac{D^2}{T^2} t + \frac{2D}{T^2} \cdot \frac{D}{T} \cdot \frac{t^2}{2} \right] \Big|_0^T = \frac{3}{2} m \frac{D^2}{T}$$

(d) Vidimo da je

$$S_1 = \frac{8}{6} m \frac{D^2}{T} < S_2 = \frac{9}{6} m \frac{D^2}{T}$$

$$\Delta S = \frac{1}{6} m \frac{D^2}{T}$$

(e) $D = 10^{-3}\,m$

$T = 10^{-3}$

$$\frac{D^2}{T} = \frac{10^{-6}}{10^{-3}} = 10^{-3}\, m s^{-1}$$

$$\hbar = 1{,}05 \cdot 10^{-34}\, kg\, m^2 \cdot s^{-2}$$

Prvi slučaj: nanočestice, $m = 12 \cdot 100 \cdot u = 1{,}99 \cdot 10^{-24}\, kg$

$$\frac{\Delta S}{\hbar} = \frac{1}{6} \cdot 1{,}99 \cdot 10^{-24} \cdot 10^{+3} \cdot \frac{1}{1{,}05 \cdot 10^{-34}} = 3{,}15 \cdot 10^{6}$$

Drugi slučaj: elektroni, $m = 9{,}11 \cdot 10^{-31}\, kg$

$$\frac{\Delta S}{\hbar} = \frac{1}{6} \cdot 9{,}11 \cdot 10^{-31} \cdot 10^{-3} \cdot \frac{1}{1{,}05 \cdot 10^{-34}} = 1{,}44$$

U Feynmanovom integralu po stazi pojavljuje se

$$\exp\left(i \frac{S}{\hbar}\right)$$

a integral po "krivoj" stazi uzrokuje promjenu $\exp\left(i \frac{\Delta S}{\hbar}\right)$.

Što je ΔS veća promjena veće su oscilacije uslijed interferencije pa je vjerojatnost da čestica bude na putanji koja nije "klasična" puno manja.

Vidimo da je u prvom slučaju ΔS jako velik pa je vjerojatnost da čestica nije na klasičnoj putanji jako mala; takav slučaj nije "kvantno-mehaničko" gibanje.

U drugom slučaju za elektron $\Delta S \sim 1$ i postoji znatna vjerojatnost da elektron nije na klasičnoj putanji. Takvo gibanje možemo nazvati kvantno-mehaničkim.