

OSNOVE KVANTNE MEHANIKE

Drugi kolokvij 19. 5. 2022.

ZADATAK 1 Promotrite sustav od dva elektrona koji su u kvantnom stanju sa suprotno orijentiranim z -komponentama spina. Izračunajte prosječnu vrijednost spina S^2 u navedenom kvantnom stanju.

ZADATAK 2 (a) Izračunajte energije aksijalno simetričnog rotatora čiji je hamiltonijan zadan izrazom

$$H = \frac{L_x^2 + L_y^2}{2I_1} + \frac{L_z^2}{2I_2}$$

gdje su I_1 i I_2 momenti inercije rotatora.

(b) Kolika je degeneracija?

(c) Stavimo rotator u magnetsko polje $\mathbf{B} = B\mathbf{e}_z$. Pretpostavimo da se u prvoj aproksimaciji rotator može opisati modelom magnetskog dipola $\boldsymbol{\mu}_L = (q/2m)\mathbf{L}$, gdje je q naboj, a m masa rotatora. Kolike su sada energije i dokida li se degeneracija? Pojasnite na primjeru $l = 1$.

Uputa: pod (a), prisjetite se da je $\mathbf{L}^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2$.

ZADATAK 3 Elektron u vodikovom atomu je u kvantnom stanju s glavnim kvantnim brojem $n = 2$ i orbitalnim kvantnim brojem $l = 1$. Izračunajte vjerojatnost da elektron nađemo dalje od jezgre nego što dopušta klasična mehanika, odnosno, u klasično nedozvoljenom području.

Uputa: radijalna valna funkcija za stanje $n = 2, l = 1$ glasi

$$R_{21}(r) = \frac{1}{2\sqrt{6}} a_0^{-3/2} \left(\frac{r}{a_0} \right) e^{-r/2a_0}$$

ZADATAK 4 Razmotrite sustav od tri neinteragirajuće čestice koje se gibaju u 1D beskonačnoj potencijalnoj jami

$$V(x) = \begin{cases} 0, & 0 < x < a \\ \infty, & \text{drugo} \end{cases}$$

(a) Odredite energiju osnovnog i prvog pobuđenog stanja za ovaj sustav ako se radi o identičnim fermionima spina $1/2$.

(b) Usporedite energije pod (a) s odgovarajućim energijama čestica spina 0 , ali iste mase koje možemo razlikovati.

(c) Napišite valne funkcije za osnovno i prvo pobuđeno stanje za čestice pod (a).

1.

Sustao je počeo u stanju $|+-\rangle$, odnosno,

$$|m_1=1/2, m_2=-1/2\rangle$$

Je tablica, $1/2 \times 1/2$ imamo

$$|m_1=1/2, m_2=-1/2\rangle = \sqrt{\frac{1}{2}} |j=1, m=0\rangle + \sqrt{\frac{1}{2}} |j=0, m=0\rangle$$

Vektor s dene strane gaje jedinstveni svojstven za \vec{S}^2

$$\langle +- | \vec{S}^2 | +- \rangle = \frac{1}{2} (\langle j=1, m=0 | + \langle j=0, m=0 |)$$

$$\vec{S}^2 (|j=1, m=0\rangle + |j=0, m=0\rangle)$$

$$\begin{aligned} \vec{S}^2 |j=1, m=0\rangle &= j(j+1)\hbar^2 |j=1, m=0\rangle \\ &= 2\hbar^2 |j=1, m=0\rangle \end{aligned}$$

$$\vec{S}^2 |j=0, m=0\rangle = 0$$

Ostaje,

$$\langle +- | \vec{S}^2 | +- \rangle = \frac{1}{2} \cdot 2\hbar^2 (\langle j=1, m=0 | + \langle j=0, m=0 |)$$

$$= \hbar^2 \cdot (\underbrace{\langle j=1, m=0 | j=1, m=0 \rangle}_{=1} |j=1, m=0\rangle$$

$$+ \underbrace{\langle j=0, m=0 | j=1, m=0 \rangle}_{=0})$$

$$= \hbar^2$$

2.

(a) Napišimo hamiltonijan u sferiku

$$H = \frac{1}{2I_1} (\vec{L}^2 - L_z^2) + \frac{1}{2I_2} L_z^2$$

$$= \frac{\vec{L}^2}{2I_1} + \frac{L_z^2}{2} \left(\frac{1}{I_2} - \frac{1}{I_1} \right)$$

Svojstvene funkcije su sferni harmonici: $Y_e^m(\theta, \phi)$

$$H Y_e^m = \frac{1}{2I_1} \vec{L}^2 Y_e^m + \frac{1}{2} \left(\frac{1}{I_2} - \frac{1}{I_1} \right) L_z^2 Y_e^m$$

$$= \frac{1}{2I_1} \cdot l(l+1) \hbar^2 + \frac{1}{2} \left(\frac{1}{I_2} - \frac{1}{I_1} \right) m^2 \hbar^2$$

$$= E Y_e^m$$

Energije su jednake

$$E_{em} = \frac{1}{2I_1} l(l+1) \hbar^2 + \frac{1}{2} \left(\frac{1}{I_2} - \frac{1}{I_1} \right) m^2 \hbar^2$$

(b) Za fiksni l , vrijednosti koje popunjava m su

$$-l, -l+1, \dots, 0, 1, \dots, l$$

Isto je ukupno $2l+1$ vrijednost. No, zbog m^2 koji se javlja u energiji

$$-l, l$$

$$-l+1, l-1$$

imaju iste energije. Prema tome, degeneracija je 2 jer za l i m , te l i $-m$ imaju iste energije.

(c)

Hamiltonijan je sada

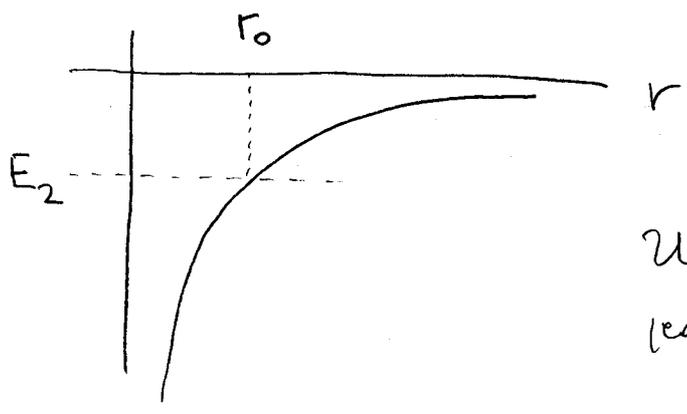
$$H = \frac{1}{2I_1} L^2 + \frac{1}{2I_2} L_z^2 \left(\frac{1}{I_2} - \frac{1}{I_1} \right) - \underbrace{\vec{\mu} \cdot \vec{B}}_{\frac{2}{2m_0} L_z B}$$

Svojtine funkcije su steno harmonički, a energije

$$E_{em} = \frac{1}{2I_1} \ell(\ell+1) \hbar^2 + \frac{1}{2} \left(\frac{1}{I_2} - \frac{1}{I_1} \right) m^2 \hbar^2 - \frac{2}{2m_0} B m$$

Vidimo da se sada degeneracije dokola jer m i -m imaju različitte energije

3.



U točki r_0 ukupna energija jednaka je potencijalnoj energiji

$$E_2 = - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{1}{r_0}$$

gdje je

$$E_2 = - \frac{m_e}{2\hbar^2} \cdot \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \cdot \frac{1}{4}, \quad n=2$$

Odatle,

$$r_0 = 8 \cdot \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{e^2 m_e} = 8 a_0$$

a_0 je Bohrov poluprečnik.

Usporednost

$$P = \int |\psi|^2 d^3r = \int \frac{dr r^2}{4 \cdot 6} \cdot a_0^{-3} \cdot \left(\frac{r}{a_0} \right)^2 e^{-r/a_0} \cdot \underbrace{\int d\Omega Y_2^1 Y_2^1}_{=1}$$

$$= \frac{1}{24 \cdot a_0^5} \int_{r_0}^{\infty} dr r^4 e^{-r/a_0}$$

Neodređeni integral

$$\int dr r^4 e^{-r/a_0} = -a_0 e^{-r/a_0} \cdot [24 a_0^4 + 24 a_0^3 r + 12 a_0^2 r^2 + 4 a_0 r^3 + r^4] + C$$

Uvrstimo granice; za $r \rightarrow \infty$, izlazi nula. Za $r = r_0$

$$P = \frac{1}{24 a_0^5} a_0 e^{-r_0/a_0} \cdot [24 a_0^4 + 24 a_0^3 r_0 + 12 a_0^2 r_0^2 + 4 a_0 r_0^3 + r_0^4]$$

Усредненная поправка

$$P = \frac{1}{24a_0^4} e^{-8} \cdot [24a_0^4 + 24 \cdot a_0^3 \cdot 8 \cdot a_0 + 12a_0^2 \cdot 64a_0^2 + 4a_0 \cdot 512a_0^3 + 4096 \cdot a_0^4]$$

$$= e^{-8} \cdot 297 = 0,0996 \approx 0,1$$

Отправка 10%

$$\text{In[1]} = \int r^4 * \text{Exp}[-r / a] dr$$

$$\text{Out[1]} = -a e^{-\frac{r}{a}} (24 a^4 + 24 a^3 r + 12 a^2 r^2 + 4 a r^3 + r^4)$$

4.

Energija čestice u beskonačnog potencijalnog jami

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2a^2} n^2$$

Valna funkcija je oblika

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a} x\right)$$

(a) Osnovno stanje za nitar fermiona: $n_1=1; n_2=1; n_3=2$

$$\begin{aligned}
 \uparrow \quad E_2 & & E_0 &= \frac{\hbar^2 \pi^2}{2a^2} \left(\underbrace{1^2 + 1^2 + 2^2}_6 \right) \\
 \uparrow \downarrow \quad E_1 & & &= \frac{6 \hbar^2 \pi^2}{2 \cdot a^2}
 \end{aligned}$$

Prvo pobudeno stanje

$$\begin{aligned}
 \uparrow \downarrow \quad E_2 & & E_1 &= \frac{\hbar^2 \pi^2}{2a^2} \left(1^2 + 2^2 + 2^2 \right) \\
 \uparrow \quad E_1 & & &= \frac{9 \hbar^2 \pi^2}{2a^2}
 \end{aligned}$$

(b) Osnovno stanje za čestice spin 0 koje možemo razlikovati

$$\begin{aligned}
 \text{—} \quad E_2 & & E_0 &= \frac{\hbar^2 \pi^2}{2a^2} \left(1^2 + 1^2 + 1^2 \right) \\
 \bullet \text{—} \bullet \text{—} \bullet \quad E_1 & & &= \frac{3 \hbar^2 \pi^2}{2a^2}
 \end{aligned}$$

Prvo pobudeno stanje

$$\begin{aligned}
 \text{—} \bullet \quad E_2 & & E_1 &= \frac{\hbar^2 \pi^2}{2a^2} \left(1^2 + 1^2 + 2^2 \right) \\
 \bullet \text{—} \bullet \quad E_1 & & &= \frac{6 \hbar^2 \pi^2}{2a^2}
 \end{aligned}$$

(c)

Valna funkcija za osnovno stanje; postoje 4 različite konfiguracije za spinove; jedna moguća konfiguracija je

$$\psi_0(z_1, z_2, z_3) = \frac{1}{\sqrt{3!}} \begin{vmatrix} \psi_1(x_1)\chi_+ & \psi_1(x_2)\chi_+ & \psi_1(x_3)\chi_+ \\ \psi_1(x_1)\chi_- & \psi_1(x_2)\chi_- & \psi_1(x_3)\chi_- \\ \psi_2(x_1)\chi_+ & \psi_2(x_2)\chi_+ & \psi_2(x_3)\chi_- \end{vmatrix}$$

$z = (x, \sigma)$

Posudeno stanje; postoje opet 4 različite konfiguracije

$$\psi_1(z_1, z_2, z_3) = \frac{1}{\sqrt{3!}} \begin{vmatrix} \psi_1(x_1)\chi_+ & \psi_1(x_2)\chi_- & \psi_1(x_3)\chi_- \\ \psi_2(x_1)\chi_+ & \psi_2(x_2)\chi_+ & \psi_2(x_3)\chi_+ \\ \psi_2(x_1)\chi_- & \psi_2(x_2)\chi_- & \psi_2(x_3)\chi_- \end{vmatrix}$$

Ovo je jedna mogućnost!