

Prvi seminarski zadatak iz kvantne fizike

Prosinac 2009.

1. Pretpostavimo da potencijal koji osjećaju elektroni u egzotičnoj 1D molekuli možemo aproksimirati dvostrukom potencijalnom jamom oblika:

$$V(x) = \begin{cases} V_0, & |x| \leq a \\ 0, & a < |x| \leq a + b \\ \infty, & |x| > a + b \end{cases}$$

gdje su $V_0 = 2eV$, $a = 1A$ i $b = 2A$. Odredite energijske nivoe pojedinih vezanih stanja te valne funkcije. Objasnite što bi se dogodilo kad bi elektron u nekom početnom trenutku bio opisan valnom funkcijom beskonačno duboke potencijalne jame smještene na mjestu jedne od jama zadanog potencijala. Objasnite posebne slučajeve $a \rightarrow \infty$, $V_0 \rightarrow \infty$.

2. Elektron dolazi s lijeva i naliće na potencijal oblika:

$$V(x) = \begin{cases} 0; & x < -a \\ V_0; & -a \leq x < 0 \\ -V_1; & 0 < x \leq b \\ 0; & x > b \end{cases}$$

Izračunajte koeficijente transmisije i refleksije. Posebnu pažnju obratite energijama na kojima se zapažaju valnomehanički efekti; konstruktivna i destruktivana interferencija, rezonantni uхват, itd.

3. Pretpostavimo da se elektron giba u potencijalu 1D vodikova atoma:

$$V(x) = -\frac{e}{|x|}.$$

Izračunajte valne funkcije i energije vezanih stanja.

4. Izračunajte energije i valne funkcije čestice koja se nalazi u centralnosimetričnom potencijalu oblika:

$$V(r) = \frac{A}{r^2} + Br^2,$$

gdje su $A, B > 0$. Nacrtajte potencijal, a preko njega energije i valne funkcije.

5. Čestica mase m je ograničena u desnoj polovici, u 1D problemu, sa beskonačnim potencijalom u ishodištu. Postoji privlačni potencijal:

$$V(x) = -V_0 a \delta(x - a),$$

za $a > 0$.

- a) Nađite izraz za energiju vezanog stanja
b) Koja je minimalna vrijednost V_0 dovoljna za vezano stanje?

6. Atom s atomskim brojem Z uronjen je u Fermijevo more (npr. lokalizirana nečistoća u metalu). Pretpostavimo da zbog Paulijevog principa okolni sistem za elektrone predstavlja beskonačno repulzivnu barijeru, odnosno možemo reći da elektroni efektivno osjećaju potencijal:

$$V(r) = \begin{cases} -\frac{Ze}{r}; & r < r_0 \\ \infty; & r \geq r_0 \end{cases}$$

Izračunajte energijske nivoe i valne funkcije elektrona te ih usporedite s onima dobivenim za slobodni atom s atomskim brojem Z . Objasnite

je li atomu energetski povoljnije dok je uronjen u Fermijevo more.

7. Sferična potencijalna jama zadana je sa

$$V(r) = \frac{V_0}{1 + e^{r - \frac{R}{a}}}$$

za $a \ll R$. Odredite vezana stanja za $l = 0$. Nacrtajte potencijal energije i valne funkcije.

8. Rješite Schrodingerovu jednadžbu za potencijal

$$V(r) = -V_0 \frac{e^{-\frac{r}{a}}}{1 - e^{-\frac{r}{a}}}$$

za slučaj $l = 0$ i odredite vlastite energije. Nacrtajte potencijal, energije i valne funkcije.

9. Potencijal za rotacije i vibracije dvoatomne molekule ima oblik

$$V(r) = -2D \left(\frac{a}{r} - \frac{1}{2} \frac{a^2}{r^2} \right)$$

Potencijal ima minimum $V(a) = -D$. Rješite Schrodingerovu jednadžbu u sustavu centra mase. Nacrtajte potencijal, energije i valne funkcije.

10. Čestica mase m giba se u 1D potencijalu

$$V(x) = -\frac{\hbar^2 P}{m} \delta(x^2 - a^2)$$

gdje je P pozitivna bezdimenzionalna konstanta. Diskutirajte vlastita stanja kao funkciju od P .

11. Pretpostavimo atom koji se sastoji od piona π^+ ($m_{\pi^+} = 237.2m_e$) i miona μ^- ($m_{\mu^-} = 206.77m_e$). Pretpostavimo da je pionski naboj homogeno nabijena sferična ljuska radijusa $R_0 = 10^{-13}cm$ te da je mion točkasti naboj. Koristeći račun smetnje odredite relativni pomak u energiji $1s$ i $2p$ stanja. Zanimarite efekte vezanja spina i staze.

12. Vodikov atom se nalazi u homogenom električnom polju \vec{E} . Izračunajte koliki je pomak u energiji $n = 1$ i $n = 2$ stanja. Objasnite zašto u slučaju $n = 1$ imamo kvadratični, a u slučaju $n = 2$ linearni Starkov efekt. Zašto je najniža popravka $n = 2$ stanja linearna u E i u kojim granicama to više ne vrijedi?

13. Pretpostavimo da se atom nalazi u homogenom električnom \vec{E} i magnetskom \vec{B} polju koja su međusobno okomita. Izračunajte najniže popravke energije $n = 2$ stanja. Pretpostavite da su jezgra i elektron čestice spina $S = 0$ te zanemarite relativističke efekte.

14. Elektron na udaljenosti x od površine tekućeg helija osjeća potencijal:

$$V(x) = \begin{cases} \infty, & x \leq 0 \\ -\frac{K}{x}, & x \geq 0 \end{cases} .$$

a) Izračunajte energije i valne funkcije osnovnog stanja.

b) Izračunajte Starkov pomak osnovnog stanja u prvom i drugom redu računa smetnje. Uzmite da je električno polje u x smjeru.

15. Razmotrimo sljedeći model Van der Waalove sile između dva atoma. Svaki atom se sastoji od jednog elektrona koji je potencijalom:

$$V(r_i) = \frac{1}{2}m\omega^2r_i^2$$

vezan za beskonačno tešku jezgru. Dvije jezgre su na udaljenosti d uzduž x osi, a interakcija između atoma dana je izrazom:

$$V_{12} = -\beta \frac{x_1 x_2 e^2}{d^3}$$

- a) Razmotrite osnovno stanje cijeloga sistema kada je $\beta = 0$. Napišite kako izgleda ukupna valna funkcija $\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ te ukupna energija.
 b) Izračunajte najnižu doprinoseću korekciju energije i valne funkcije osnovnog stanja kada je $\beta \neq 0$.

16. Za atom bez permanentnog magnetskog momenta kažemo da je dijamagnetski. Fokus problema u ovom zadatku biti će proračun inducirano dijamagnetskog momenta za vodikov atom u slabom magnetskom polju \vec{B} uz zanemarivanje spina elektrona i protona.

- a) Napišite nerelativistički Hamiltonijan za česticu mase m i naboja e u elektromagnetskom polju.
 b) Ako član:

$$H' = -\frac{e}{mc} \vec{A} \vec{p} + \frac{e^2}{2mc^2} \vec{A}^2$$

tretiramo kao smetnju odredite najnižu doprinoseću popravku energije osnovnog stanja.

- c) Odredite inducirani dijamagnetski moment po atomu.

17. Prvo pobuđeno stanje trodimenzionalnog harmoničkog oscilatora (frekvencije ω_0 i mase m) je trostruko degenerirano. Koristeći perturbativnu teoriju izračunajte pomake u energiji trostruko degeneriranih stanja ako na sistem primjenimo malu perturbaciju oblika:

$$H' = \epsilon xy$$

ϵ je perturbacijski parametar. Kako izgledaju valne funkcije u prvom redu, prikazane pomoću nesmetanih valnih funkcija.

18. Pretpostavimo da promatramo elektronska stanja u metalnoj pločici površine $4L^2$, gdje $L \rightarrow \infty$ i debljine $2d = 2nm$, koja je naparena na podlogu koja ima svojstva vakumma. Neka je potencijal koji elektroni osjećaju u metalnoj pločici opisan sledećim izrazima:

$$V(x) = \begin{cases} 0; & |x| < L \\ \infty; & |x| \geq L \end{cases}$$

$$V(y) = \begin{cases} 0; & |y| < L \\ \infty; & |y| \geq L \end{cases}$$

$$V(z) = \begin{cases} 0; & |z| < d \\ \infty; & |z| \geq d \end{cases}$$

Podloga se proteže u području $z > d$. U jednom trenutku iz $z_0 \rightarrow -\infty$ počinje se približavati metalna površina. Metalna površina za stanja metalne pločice predstavlja smetnju koju možemo predočiti potencijalom oblika:

$$V(x) = -\frac{e^2}{4(z + z_0)}$$

gdje je položaj površine polubeskonačnog metala $z = -z_0$.

Skicirajte problem!

Izračunajte koliki su pomaci energijskih nivoa u tankoj metalnoj pločici zbog utjecaja metalne površine. Račun provedite u prvom i drugom redu računa smetnje. Parametar z_0 naštimate tako da stvar možete tretirati perturbativno. **Na istom** grafu nacrtajte položaj energijskih nivoa prije i poslije primjenjivanja smetnje. Nacrtajte energijske pomake kao funkciju parametra z_0 , tj. $\Delta E_n^1(z_0)$.

19. Pretpostavite da promatramo molekulu NaCl-a, koja se sastoji od pozitivnog iona Na^+ i negativnog iona Cl^- koje u prvoj aproksimaciji smatramo kao točkaste monopole koji na velikoj udaljenosti interagiraju privlačnom kulonskom silom opisanom potencijalom:

$$V_\infty(r) = -\frac{e^2}{r}$$

Na malim udaljenostima elektronska struktura iona počinje igrati dominantnu ulogu, naime počinje dolaziti do prekrivanja elektronskih orbitala što efektivno djeluje kao odbojna centralno-simetrična interakcija oblika:

$$V_0(r) = \frac{C}{r^2}$$

gdje konstantu C potražite u literaturi. Dakle ukupni potencijal je oblika:

$$V(r) = V_\infty(r) + V_0(r)$$

Koliki je pomak u energiji osnovnog stanja molekule NaCl-a koja se nalazi u osnovnom stanju ako molekulu stavimo u homogeno električno polje $\vec{E} = E\hat{z}$. Koliki je pomak prvog pobuđenog stanja. Rezultate za energijske pomake usporedite sa klasičnim dipolom, dipolnog momenta $\vec{p} = e\langle r \rangle \hat{r}_0$ gdje je $\langle r \rangle$ prosječna udaljenost između iona u promatranim kvantnomehaničkim stanjima.

20. Čestica mase m se nalazi u dvodimenzionalnoj kutiji duljine L . U njoj djeluje slabi potencijal dan sa:

$$V(x, y) = V_0 L^2 \delta(x - x_0) \delta(y - y_0)$$

- Izračunajte korekciju prvog reda u energiji osnovnog stanja.
- Napiši izraz za korekciju drugog reda u energiji i korekciju prvog reda valne funkcije osnovnog stanja. Objasni kako bi se izračunao izraz za $(x_0, y_0) = (L/2, L/2)$.
- Nađite izraz za energiju prvog pobuđenog stanja u prvom redu po V_0 . Koja je razlika između energijskih podnivoa za $(x_0, y_0) = (L/4, L/4)$.
- Za prvo pobuđeno stanje, nađi točke (x_0, y_0) koje definiraju potencijal $V(x, y)$ koji ne miče degeneraciju. Objasni rezultat pomoću simetrije problema.

21. Pronađite energijski spektar i valne funkcije sistema opisanog Hamiltonijanom:

$$H = H_0 + H' = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 + ax^3 + bx^4$$

gdje su a i b perturbacijski parametri.

22. Ravninski rotator momenta inercije I i električnog dipolnog momenta \mathbf{d} smješten je u homogeno električno polje \mathbf{E} . Uz pretpostavku da električno polje tretiramo kao slabu smetnju, odredite popravke energijskih nivoa i valnih funkcija ravninskog rotatora u najnižem doprinosećem redu računa smetnje. Isti problem riješite (egzaktno u drugom redu računa smetnje) za slučaj kada kruti rotator nije ograničen samo na gibanje u ravnini.

23. Čestica mase m se nalazi u polju dviju potencijalnih jama oblika δ -funkcija:

$$U(x, t) = -\alpha \left[\delta \left(x - \frac{L(t)}{2} \right) + \delta \left(x + \frac{L(t)}{2} \right) \right].$$

U trenutku $t \rightarrow -\infty$ potencijalne jame su se nalazile na beskonačnoj udaljenosti jedna od druge, a čestica je bila u vezanom stanju u jednoj od jama. Udaljenost medju jamama se vrlo polako smanjvala i u nekom trenutku T došlo je do stapanja dviju jama u jednu, koja ima oblik

$$U(x, T) = -2\alpha\delta(x).$$

Kolika je vjerojatnost da će pri tome čestica ostati u vezanom stanju?

24. Čestica mase m se nalazi u beskonačnoj potencijalnoj jami koja ima oblik rotacionog elipsoida

$$\frac{x^2 + y^2}{a^2} + \frac{z^2}{b^2} = 1,$$

pri čemu vrijedi da je

$$|a - b| \ll a.$$

Prema tome, potencijal čestice se može prikazati u obliku

$$U(x, y, z) = \begin{cases} 0, & \text{unutar elipsoida,} \\ \infty, & \text{izvan elipsoida.} \end{cases}$$

- (a) Izračunajte, u prvom redu računa smetnje, pomak energije osnovnog stanja čestice relativno prema energiji osnovnog stanja čestice, koja se giba u beskonačnoj sferno–simetričnoj potencijalnoj jami, istog volumena kao elipsoid.
- (b) Poopćite rezultat dijela a) zadatka na pobudjena stanja čestice.
- (c) Razmotrite pitanje karaktera uklanjanja degeneracije s obzirom na projekcije angularnog momenta čestice u prvom i višim redovima računa smetnje.

25. Čestica se nalazi u polju $U(x)$ oblika

$$U(x) = \begin{cases} \tilde{U}(x), & x > 0, \\ \infty, & x < 0. \end{cases}$$

Izrazite srednju silu s kojom čestica djeluje na stjenku $x = 0$ u stacionarnom stanju diskretnog spektra, pomoću vrijednosti $\Psi'_n(0)$ normirane valne funkcije.

26. Na vodikov atom djelujke smetnja V koja ima matrične elemente

$$V_{nlm,n'l'm'} = \alpha \frac{mZ^2 e^4}{2\hbar^2} \sqrt{\frac{|n'^2 - n^2|}{n_>^6}}$$

gdje je α –bezdimenzionalna konstanta, a $n_> = \max(n, n')$. Odredite korekciju energetskeg nivoa $n = 2$ u drugom redu računa smetnje.

27. Neka je potencijalna energija $V(x, y, z)$ homogena funkcija koordinata stupnja homogenosti ν , tj.

$$V(\lambda x, \lambda y, \lambda z) = \lambda^\nu V(x, y, z).$$

Dokažite da je srednja vrijednost kinetičke energije u stanju diskretnog spektra vezana sa srednjom vrijednošću potencijalne energije relacijom

$$2\langle T \rangle = \nu \langle V \rangle.$$

Ovo je virijalni teorem!

28. (a) Čestica mase m se nalazi u jednodimenzionalnoj potencijalnoj jami oblika

$$V(x) = \begin{cases} -V_0, & |x| < a, \\ 0, & |x| > a. \end{cases}$$

Dokažite da za svaku pozitivnu vrijednost od $V_0 a^2$ postoji vezano stanje.

- (b) Čestica mase m se giba u trodimenzionalnom sferno–simetričnom potencijalnoj jami

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

Dokažite da, u ovom slučaju, postoji vezano stanje samo ako je ispunjen uvjet

$$V_0 a^2 > \frac{\pi^2 \hbar^2}{8m}.$$

- (c) Kako izgleda analogna situacija za dvodimenzionalnu potencijalnu jamu oblika

$$V(\rho) = \begin{cases} -V_0, & \rho < a, \\ 0, & \rho > a. \end{cases}$$

Koje je, ako postoji, fizikalno značenje ovih rezultata.