

Kolokvij Vol. 2

"Hasta la vista"

- A. Schwarzenegger

(I) Numerički zadaci:

1. *Brown note.* Fjodor Ivanič Sudislavskij sjedi na tajnom istraživačkom zahodu, u svrhu razvijanja novog akustičkog oružja za masovno onesposobljavanje žive sile – specifične frekvencije zvuka koja uzrokuje gubitak čovjekove kontrole nad probavnim organima, takozvane *smede note*.

(a) F.I. je izložen zvuku niske frekvencije $\nu = 6$ Hz i akustične snage $P = 130$ dB. Nađi snagu u W. (2 boda)

(b) Brzina širenja vala u tijelu je $c = 1.5$ m/s, a u zraku je $c = 340$ m/s. Nađi koeficijent amplitudne refleksije R pri prijelazu vala iz zraka u tijelo. Ako je snaga vala proporcionalna kvadratu amplitude, nađi koliko se snage od upadne reflektira? Iz toga, koliko snage od upadne prodire u tijelo? (4 boda)

(c) crijevo Fjodora Ivaniča modeliramo kao ravnu cijev duljine $L = 2$ m. Ako je brzina propagacije longitudinalnih valova po crijevu jednaka $c = 1.5$ m/s, nađi frekvencije prva tri vlastita moda oscilacija crijeva. (2 boda)

(d) napiši brzinu pomaka crijeva u ovisnosti o položaju niz crijevo i vremenu, za tri moda iz (c). Ako je gušenje proporcionalno brzini pomaka, koji mod će biti najlakše pobuditi? (2 boda)

Ukupno: 10 bodova

2. *Raspršenje neutrona.* Osim svima oznatih i dragih x-zraka, na materijalima se mogu raspršivati razne druge stvari. Od njih su možda najkorisniji (i najskuplji) neutroni, pa ćemo u ovom zadatku istražiti što se sve može saznati uz njihovu pomoć. Krećemo od slobodnih neutrona:

(a) napiši energiju slobodnog neutrona mase m u ovisnosti o njegovom impulsu, iskoristi de Broglievu relaciju i nađi disperziju – vezu između energije i valnog broja neutrona k . (4 boda)

(b) uvrsti kvantizaciju energije $E = \hbar\omega$ i nađi vezu frekvencije ω i valnog broja k . Skiciraj $\omega(k)$. (2 boda)

(c) želimo iskoristiti neutrone za proučavanje fonona – valova zvuka u nekom materijalu – s linearnom disperzijom $\omega = c|k|$ (c je brzina zvuka u materijalu). Pokaži da disperzija neutrona iz b) uvijek siječe fononsku disperziju i nađi ω i k u kojima se sijeku. (2 boda)

Vidimo da nelinearna disperzija neutronima omogućava međudjelovanje čak i s akustičkim fononima, koji su svjetlosti nedostupni. Štoviše, mjerenjem te interakcije može se izmjeriti brzina zvuka.

(d) neutron energije $E_0 = 4$ meV upada na monokristal aluminijske u smjeru x -osi, apsorbira longitudinalni fonon energije E_ν i izlijeće van s energijom $E_k = 7$ meV. Ako se fonon širio samo u smjeru x -osi, iskoristi da je $E_\nu = \hbar c |k_\nu|$, nađi iznos i smjer fononskog valnog vektora k_ν (vrijede zakoni očuvanja energije i impulsa). Izračunaj brzinu zvuka u aluminiju, ako je masa neutrona $m = 1.675 \cdot 10^{-27}$ kg. (5 bodova)

Ukupno: 14 bodova

3. *Kvantna kemija.* U ovom zadatku baviti ćemo se vezanjem (i razbijanjem) dvoatomnih molekula, a usput naučiti nešto o elektronegativnosti i kovalentnoj vezi. Zamislite dakle dva slobodna atoma A i B , s po jednim valentnim elektronom, od kojih gradimo molekulu AB . Rješenja atomskog problema su stanja $|A\rangle$, energije \mathcal{E}_A , i $|B\rangle$, energije \mathcal{E}_B . Uzimamo da su elektroni nezavisni, približavamo atome i za početak rješavamo jednoelektronski problem: dva atoma + jedan elektron (AB^+). Kad su atomi dovoljno blizu da počne tuneliranje, elektron će se naći u stanju $|\psi\rangle$ koje je superpozicija: $|\psi\rangle = \alpha|A\rangle + \beta|B\rangle$, a Hamiltonijan će imati matrice elemente

$$\langle A | \mathcal{H} | A \rangle = \mathcal{E}_A, \langle B | \mathcal{H} | B \rangle = \mathcal{E}_B \text{ i } \langle A | \mathcal{H} | B \rangle = \langle B | \mathcal{H} | A \rangle = -t.$$

(a) napiši Hamiltonijan kao 2x2 matricu u prostoru stanja čiji su jedinični vektori $|A\rangle$ i $|B\rangle$ (1 bod)

(b) Neka je $|\psi\rangle$ molekularna orbitala za koju vrijedi Schrödingerova jednačba

$$\mathcal{H} |\psi\rangle = E |\psi\rangle$$

Iskoristi da se $|\psi\rangle$ može prikazati kao superpozicija $|A\rangle$ i $|B\rangle$, pomnoži Schrödingerovu jednačbu s $\langle A |$ i $\langle B |$ i nađi sustav za nepoznate koeficijente α i β . (4 boda)

(c) izrazi α preko β , uvrsti, pokрати i nađi kvadratnu jednačbu za E . Riješi ju da dobiješ energije dviju molekularnih orbitala, E_1 i E_2 , u ovisnosti o \mathcal{E}_A , \mathcal{E}_B i t . Skiciraj energetski dijagram. (3 boda)

(d) 'stavi' dva elektrona u donju molekularnu orbitalu i izračunaj razliku energije takve molekule i dva slobodna atoma A i B s po jednim elektronom na njima. (1 bod)

Dobili smo molekularne orbitale, i energiju vezanja dvoatomne molekule koja ovisi samo o t i razlici atomskih energija $\mathcal{E}_A - \mathcal{E}_B$. Međutim, atomske energije govore koliko je lako ionizirati atom, odnosno koliko atom 'voli' svoj valentni elektron – što je poznato kao elektronegativnost.

(e) koristeći uvjet normiranja, $\alpha^2 + \beta^2 = 1$, nađi valnu funkciju vezanog stanja i napiši vjerojatnosti nalaženja elektrona na atomima A i B u ovisnosti o \mathcal{E}_A , \mathcal{E}_B i t . Pokaži da za slučaj jednakih atoma te vjerojatnosti postaju jednake. (4 boda)

(f) promotri limes u kojem je razlika elektronegativnosti velika, odnosno $\mathcal{E}_A - \mathcal{E}_B \gg t$, i pokaži da tada elektron skoro svo vrijeme provodi na elektronegativnijem atomu B . Taj slučaj odgovara jako polarnoj molekuli, koju se može smatrati ionskom: A^+B^- . (1 bod)

Tako smo mijenjajući razliku elektronegativnosti atoma u jednostavnoj kvantnoj teoriji vezanja došli od potpuno kovalentne molekule ($\mathcal{E}_A = \mathcal{E}_B$) do praktički ionskog spoja A^+B^- ! Naravno, za većinu realnih molekula AB možemo reći da su djelomično ionskog, a djelomično kovalentnog karaktera, a 'mjera kovalentnosti' je omjer $\frac{\mathcal{E}_A - \mathcal{E}_B}{t}$.

Ukupno: 16 bodova

(II) Konjceptualni zadaci ('objasni' se implicitno podrazumijeva):

1. Kako mogu žarulje iznad vaših glava svijetliti bijelo, a biti mnogo hladnije od ~ 5000 K? (2 boda)
2. Zašto je po noći lako izvana promatrati što se 'dogođa' u osvijetljenoj spavaćoj sobi, a po danu puno teže? (2 boda)
3. Stojite na pramcu tankera, kad se upali brodska sirena na krmi. Ako je brzina broda u odnosu na zrak v , što se dogođa s valovima zvuka (skiciraj)? Kakva će biti frekvencija u odnosu na početnu? (2 boda)
4. Otkud plinoviti helij u tlu (posebno u granitnim stijenama)? (2 boda)
5. Na $T = 0$ K molekula vode se nalazi u osnovnom stanju energije. Pretpostavi da je molekula vode kvantni harmonički oscilator. Koja je energija te molekule? Miruju li atomi? (2 boda)