Kolokvij Vol. 2 – rješenja

(II) Numerički zadaci:

1. *Brown note.*

(a) *(2 boda)* Frekvencija zvuka $\nu = 6$ Hz, akustična snaga $P_{dB} = 130$ dB.

$$P_{dB} = 10 \log \frac{P_W}{P_0} \ , \ P_0 = 10^{-12}$$

$$P_W = P_0 10^{P_{dB}/10} = 10^{-12} 10^{13} = 10\text{W}$$

(b) Brzina vala u tijelu $c_t = 1.5$ m/s i u zraku $c_z = 340$ m/s. Znamo:

$$k = \frac{\omega}{c}$$

Koeficijent amplitudne refleksije: $R = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}$. Područje 2 je tijelo, područje 1 je zrak, pa imamo:

$$R = \frac{\frac{\omega}{c_1} - \frac{\omega}{c_2}}{\frac{\omega}{c_1} + \frac{\omega}{c_2}}$$

$$R = \frac{c_t - c_z}{c_t + c_z} = -0.99$$

Vidimo da se 99% amplitude vala reflektira, predznak minus govori o fazi reflektiranog vala (suprotno od upadnog). Ako je $P \propto$ amplituda onda slijedi da se reflektira $P_{ref}/P_{up} = R^2 = 0.98$. 98% upadne snage se reflektira. Naravno, to znači da 2% snage prodire u tijelo.

(c) Ravna cijev duljine $L = 2$ m. Valna brzina $c = 1.5$ m/s. Stojni valovi:

$$\lambda_n = \frac{2L}{n} \ , \ k_n = \frac{2\pi}{\lambda_n} = \frac{\pi n}{L} \ , \ \omega_n = ck_n = \frac{\pi n c}{L}$$

Frekvencija je dana s $\nu = \omega/2\pi$:

$$\nu_n = \frac{cn}{2L} \ , \ \nu_1 = 0.375\text{Hz} \ , \ \nu_2 = 0.75\text{Hz} \ , \ \nu_3 = 1.125\text{Hz}$$

(d) Pomak pišemo:

$$y_n(x,t) = A \sin k_n x \cdot \sin \omega_n t = A \sin\left(\frac{\pi n}{L} x\right) \sin\left(\frac{c\pi n}{L} t\right)$$

Brzina pomaka je dakle:

$$v_n(x,t) = \frac{\partial y_n}{\partial t} = A \frac{c\pi n}{L} \sin\left(\frac{\pi n}{L} x\right) \cos\left(\frac{c\pi n}{L} t\right)$$

Vidimo da što veći n, veća brzina pomaka, a samim time i gušenja (proporcionalno pomaku). Stoga će najlakše biti pobuditi najmanje gušen mod, $n = 1$.

Ukupno: 10 bodova

2. *Raspršenje neutrona.*

(a) Slobodni neutron mase m ima samo potencijalnu energiju $E = \frac{1}{2}mv^2$ i impuls $p = mv$:

$$v = p/m \rightarrow E = \frac{m}{2} \frac{p^2}{m^2} = \frac{p^2}{2m}$$

Iskoristiti de Broglievu relaciju: $\lambda = h/p$ da se dobije $E(k)$:

$$p = \frac{h}{\lambda} = \frac{h}{\frac{2\pi}{k}} = \frac{h}{2\pi} k = \hbar k$$

$$E = \frac{(\hbar k)^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m} k^2$$

(4 boda)

(b) Kvantizacija energije $E = \hbar\omega$. Veza frekvencije i k je tada:

$$\omega = \frac{E}{\hbar} = \frac{\hbar}{2m}k^2$$

Vidimo da je funkcija $\omega(k)$ kvadratna u k. *(2 boda)*

(c) Fononska disperzija $\omega = c|k|$ (c je brzina zvuka u materijalu). Neutronska disperzija $\omega_n(k)$ je parabola, a fononska disperzija $\omega_\nu(k)$ je pravac. Da bi se sjekli mora vrijediti $\omega_n(k_x) = \omega_\nu(k_x)$, gdje je k_x vrijednost u kojoj se sijeku.

$$\frac{\hbar}{2m}k_x^2 = ck_x \quad /: k_x$$

$$\frac{\hbar}{2m}k_x = c \to k_x = \frac{2mc}{\hbar}$$

Frekvencija koju neutroni i fononi imaju u toj točki:

$$\omega_\nu(k_x) = \omega_n(k_x) = \frac{2mc^2}{\hbar}$$

(2 boda)

(d) Početna energija neutrona: $E_0 = 4$ meV. Konačna energija neutrona $E_k = 7$ meV. Pišemo zakon očuvanja impulsa i energije. Oznake: 0 - početna energija i impuls neutrona, k - konačna energija i impuls neutrona, ν - energija i impuls fonona.

$$\vec{k_0} + \vec{k_\nu} = \vec{k_k}$$

$$E_0 + E_\nu = E_k$$

Kako su svi vektori na osi x, možemo prestati pisati vektore i razmotriti samo dva slučaja. Ili je fonon imao impuls u smjeru neutrona: $k_0 + k_\nu = k_k$ ili je fonon imao suprotan smjer: $k_0 - k_\nu = k_k$. S druge strane, ako izrazimo energije u zakonu očuvanja energije preko k:

$$\frac{\hbar^2}{2m}k_0^2 + \hbar c k_\nu^2 = \frac{\hbar^2}{2m}k_k^2$$

$$k_0^2 + \frac{2mc}{\hbar}k_\nu = k_k^2$$

vidimo da $k_k > k_0$, što znači da je fonon morao imati isti smjer kao i upadni neutron ($k_0 + k_\nu = k_k$).

Iznos valnog vektora k_ν dobijemo preko vrijednosti k_k i k_0:

$$k = \frac{\sqrt{2mE_k}}{\hbar}$$

$$k_k = 1.84 \cdot 10^{10}\ \mathrm{m}^{-1}\ k_0 = 1.39 \cdot 10^{10}\ \mathrm{m}^{-1}\ k_\nu = k_k - k_0 = 4.5 \cdot 10^9\ \mathrm{m}^{-1}$$

Brzinu zvuka nađemo iz:

$$c = \frac{\hbar()k_k^2 - k_0^2)}{2mk_\nu} = \frac{\frac{\hbar^2}{2m}(k_k^2 - k_0^2)}{\hbar(k_k - k_0)} = \frac{E_k - E_0}{\sqrt{2m}\frac{\hbar}{\sqrt{2m}}(k_k - k_0)}$$

$$c = \frac{E_k - E_0}{\sqrt{2m}\left(\sqrt{E_k} - \sqrt{E_0}\right)}$$

Uvrštavanjem vrijednosti u formulu dobije se sljedeća brzina: $c = 1040$ m/s.
(6 bodova)

Ukupno: 14 bodova

3. *Kvantna kemija.*

(a) Hamiltonijan u matričnom zapisu je zadan na sljedeći način:

$$\mathcal{H} = \begin{pmatrix} \langle A \mid \mathcal{H} \mid A \rangle & \langle A \mid \mathcal{H} \mid B \rangle \\ \langle B \mid \mathcal{H} \mid A \rangle & \langle B \mid \mathcal{H} \mid B \rangle \end{pmatrix}$$

Uvrštavanjem vrijednosti dobivamo:

$$\mathcal{H} = \begin{pmatrix} \mathcal{E}_A & -t \\ -t & \mathcal{E}_B \end{pmatrix}$$

(1 bod)

(b) Molekularna orbitala $\mid \psi \rangle$ se može prikazati kao superpozicija atomskih stanja $\mid A \rangle$ i $\mid B \rangle$:

$$\mid \psi \rangle = \alpha \mid A \rangle + \beta \mid B \rangle$$

$$\mathcal{H} \mid \psi \rangle = E \mid \psi \rangle = \alpha \mathcal{H} \mid A \rangle + \beta \mathcal{H} \mid B \rangle = \alpha E \mid A \rangle + \beta E \mid B \rangle$$

Pomnožimo li cijelu jednadžbu prvo s $\langle A \mid$ pa s $\langle B \mid$ dobijemo sljedeće dvije jednadžbe:

$$\alpha \mathcal{E}_A + \beta(-t) = E\alpha$$

$$\alpha(-t) + \beta \mathcal{E}_B = E\beta$$

(4 boda)

(c) Izrazimo li iz prve jednadžbe α o β, dobijemo:

$$\alpha = \frac{t}{\mathcal{E}_A - E}\beta$$

Uvrštavajući u drugu jednadžbu, imamo sljedeću relaciju:

$$-\frac{t^2\beta}{\mathcal{E}_A - E} + \beta\left(\mathcal{E}_B - E\right)$$

Iz te jednadžbe možemo pokratiti β i dobiti kvadratnu jednadžbu po energiji E:

$$E^2 - \left(\mathcal{E}_A + \mathcal{E}_B\right) E + \mathcal{E}_A \mathcal{E}_B - t^2$$

rješenja koje su:

$$E_{1,2} = \frac{\mathcal{E}_A + \mathcal{E}_B}{2} \pm \frac{\sqrt{\left(\mathcal{E}_A + \mathcal{E}_B\right)^2 - 4\mathcal{E}_A\mathcal{E}_B + 4t^2}}{2}$$

Prvi i drugi član pod korjenom možemo srediti i dobiti:

$$E_{1,2} = \frac{\mathcal{E}_A + \mathcal{E}_B}{2} \pm \frac{\sqrt{\left(\mathcal{E}_A - \mathcal{E}_B\right)^2 + 4t^2}}{2}$$

Dvije različite energije su zapravo dvije molekularne orbitale, energija E_- i E_+, gdje $-$ i $+$ predstavljaju predznak ispred korjena. U skici je važno naznačiti sve četiri bitne energije: $\mathcal{E}_A, \mathcal{E}_B, E_-, E_+$. Primjetiti da je najniža energija E_- i da je energija E_+ nevezano stanje, jer je viša od zbroja atomskih energija (povoljnije je biti atomima odvojeno).
(4 boda)

(d) Zbog paulijevog principa dva elektrona mogu stati u donju orbitalu samo ako imaju različit spin. Tada je njihova ukupna energija:

$$E_{2e} = 2E_- = \mathcal{E}_A + \mathcal{E}_B - \sqrt{\left(\mathcal{E}_A - \mathcal{E}_B\right)^2 + 4t^2}$$

Da je svaki elektron na svojem atomu, njihova ukupna energija bi tada bila:

$$E_{2e} = \mathcal{E}_A + \mathcal{E}_B$$

Očito je energija elektrona u molekuli niža, i to za iznos:

$$\Delta E = \sqrt{(\mathcal{E}_A - \mathcal{E}_B)^2 + 4t^2}$$

(2 boda)

(e) Iz uvjeta normiranja i iz relacije koja povezuje α i β preko energije možemo naći valnu funkciju vezanog stanja ($E = E_-$):

$$\alpha = \frac{t}{\mathcal{E}_A - E_-}\beta$$

$$\alpha^2 + \beta^2 = 1$$

Uvrštavanjem prve u drugu:

$$\left(\frac{t^2}{(\mathcal{E}_A - E_-)^2} + 1\right)\beta^2 = 1$$

$$\beta^2 = \frac{(\mathcal{E}_A - E_-)^2}{(\mathcal{E}_A - E_-)^2 + t^2}$$

$$\beta^2 = \frac{1}{1 + \left(\frac{t}{\mathcal{E}_A - E_-}\right)^2}$$

Uvrštavanjem svega i korjenovanjem:

$$\beta = \frac{1}{\sqrt{1 + \left(\frac{2t}{\mathcal{E}_A - \mathcal{E}_B + \sqrt{(\mathcal{E}_A - \mathcal{E}_B)^2 + 4t^2}}\right)^2}}$$

$$\alpha = \frac{t}{\mathcal{E}_A - E_-}\frac{1}{\sqrt{1 + \left(\frac{t}{\mathcal{E}_A - E_-}\right)^2}}$$

$$\alpha = \frac{1}{\sqrt{\left(\frac{\mathcal{E}_A - E_-}{t}\right)^2 + 1}}$$

$$\alpha = \frac{1}{\sqrt{1 + \left(\frac{\mathcal{E}_A - \mathcal{E}_B + \sqrt{(\mathcal{E}_A - \mathcal{E}_B)^2 + 4t^2}}{2t}\right)^2}}$$

Za slučaj jednakih atoma $\mathcal{E}_A = \mathcal{E}_B$, što vodi na:

$$\alpha = \beta = \frac{1}{\sqrt{1+1}} = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

(4 boda)

(f) Što ako imamo $\mathcal{E}_A - \mathcal{E}_B \gg t$?

$$\sqrt{(\mathcal{E}_A - \mathcal{E}_B)^2 + 4t^2} \to \mathcal{E}_A - \mathcal{E}_B$$

$$\frac{\mathcal{E}_A - \mathcal{E}_B + \mathcal{E}_A - \mathcal{E}_B}{2t} \text{ je po definiciji} \gg 1$$

Zbog ove aproksimacije slijedi:

$$\beta = 1 \quad , \quad \alpha = 0$$

Vidimo da elektron svo vrijeme provodi na atomu koji ima negativniju energiju vezanja $\mathcal{E}_B < \mathcal{E}_A$. *(2 boda)*

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)*
   Za razliku od ne-štednih žarulja koje svijetle zbog termalne energije (crno tijelo) neonske žarulje svijetle zbog emisije fotona iz atoma – nisu crno tijelo. Zbog toga im spektar nije kontinuiran i po Planckovoj raspodjeli.
2. *Zašto je po noći lako izvana promatrati što se 'događa' u osvijetljenoj spavaćoj sobi, a po danu puno teže? (2 boda)*
   Količina svjetlosti koju staklo reflektira nam po danu smeta da vidimo svjetlost koja dolazi s druge strane stakla. Tokom noći vani nema svjetlosti koja se reflektira, pa jedino vidimo svjetlost koja prolazi s druge strane.
3. *Stojite na pramcu tankera, kad se upali brodska sirena na krmi. Ako je brzina broda u odnosu na zrak v, skiciraj što se događa s valovima zvuka? Kakva će biti frekvencija u odnosu na početnu? (2 boda)*
   Budući da stojite na istom brodu na kojem se nalazi i sirena, frekvencija vala se neće promijeniti. Promatraču izvan broda sirena putuje s brodom pa zato ispred nje su valovi zvuka zgusnuti – frekvencija je veća, a iza su rastegnuti – frekvencija je niža.
4. *Otkud plinoviti helij u tlu (posebno u granitnim stijenama)? (2 boda)*
   U Zemlji se nalaze radioaktivne stijene koje zrače (npr. granit), među ostalim, alfa-čestice. Ako su duboko u zemlji, alfa-čestice ne mogu pobjeći sa Zemlje već skupe elektrone i postanu atom helija.
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)*
   Energija molekule vode je najniža moguća, $E_0 = (1/2)\hbar\omega$. Atomi ne miruju, baš zato jer je najniža moguća energija različita od nule.