# Drugi seminarski zadatak iz kvantne fizike

Svibanj 2010.

1. Dvije čestice spina 1/2 su odvojne na udaljenost $\vec{a} = a\vec{z}$ i interagiraju samo kroz energiju magnetskog dipola:

$$H = \frac{\vec{\mu_1}\vec{\mu_2}}{a^3} - 3\frac{(\vec{\mu_1}\vec{a})(\vec{\mu_2}\vec{a})}{a^5}$$

   Izrazite Hamiltonijan preko spin operatora. Napišite Hamiltonijan preko $S^2$ i $S_z$. Napišite svojstvene vrijednosti za sva stanja.

2. Dvije identične čestice mase $m$ i spina $s = 1/2$ interagiraju samo preko potencijala:

$$V = \frac{g}{r}\vec{\sigma_1}\vec{\sigma_2}$$

   gdje je $g > 0$ i $\vec{\sigma_k}$ su Paulijeve matrice koje djeluju na spin čestice $k$. Napišite vlastite funkcije za dvočestično stanje. Koja je očekivana vrijednost $V$ za svako od ta dva stanja? Napišite vlastite vrijednosti za sva vezana stanja.

3. Čestica spina 1/2 smještena je u jakom magnetskom polju $B_0$ u $z$ smjeru. Oscilacijsko polje $B_1 \ll B_0$ frekvencije $\omega$ je uključeno u $xy$ ravnini, tako da se totalno magnetsko polje može zapisati na način:

$$\vec{B} = (B_1 \cos\omega t, B_1 \sin\omega t, B_0)$$

   Hamiltonijan je $H = \mu\vec{B}\vec{\sigma}$ gdje je $\vec{\mu}$ magnetski moment. Koristite oznake $\hbar\Omega_{paralelno} = \mu B_0$, $\hbar\Omega_{okomito} = \mu B_1$. Ako je čestica u $t = 0$ u početnom položaju u $+z$ smijeru, kolika je vjerojatnost pronalaska čestice u smjeru $-z$ u kasnijem trenutku $t$? Zašto NMR eksperimenti najčešće prilagode $B_0$ tako da je $\Omega_{paralelno}$ proporcionalno sa $\omega/2$?

4. Pretpostavite da smo potencijal jezgre aproksimirali sferičnom potencijalnom jamom:

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

Izračunajte na kojim energijama dominira samo raspršenje s-vala. Uzmite da jezgra ima $A = 12$, a radijus jezgre je približno

$$R = r_0 \cdot A^{1/3}, \quad r_0 \approx 1.2 fm$$

Odredite diferencijalni udarni presjek ako uzmete u obzir samo s-val. Nacrtajte kako izgleda totalni udarni presjek kao funkcija dubine potencijala $V_0$ te objasnite kako biste eksperimentalno mogli dobiti $V_0$. Pokažite kako izgleda $l = 0$, $E = 0$ uvjet za vezano stanje te ga usporedite s uvjetom za rezonantno raspršenje ($\sigma \to \infty$).

5. U prvoj Bornovoj aproksimaciji odredite diferencijalni udarni presjek za raspršenje na sferičnoj potencijalnoj barijeri:

$$V(r) = \begin{cases} V_0\ , & r \le R \\ 0\ , & r > R \end{cases}$$

Nacrtajte $f_B(\theta)$. Odredite ukupni udarni presjek u limesu $V_0 \to \infty$

6. Za trodimenzionalnu potencijalnu ljusku:

$$V(r) = \alpha\delta(r - r_0)$$

gdje je $\alpha \le 0$ odredite:

a) $l = 0, E \ge 0$ valne funkcije (kao slobodan parametar u valnoj funkciji uzmite fazni pomak $\delta(k)$). Odredite duljinu raspršenja $d$ definiranu kao:

$$\delta(k \to \infty) = d\, k\,.$$

b) Koliko vezanih stanja imamo za slučaj $l = 0$ (pokažite grafički) i kako ona ovise o $\alpha$ ?

c) Kolika je duljina raspršenja $d$ ako imamo $E = 0$ vezano stanje? Opišite ponašanje duljine $d$ u trenutku kada se potencijal promjeni iz atraktivnog u repulzivni ($\alpha \ge 0$) i skicirajte $d$ kao funkciju $\alpha$.

7. Izračunajte diferencijalni udarni presjek u Bornovoj aproksimaciji za elastično raspršenje elektrona na vodikovom atomu. Odredite graničnu energiju za koju vrijedi Bornova aproksimacija. Na kojim energijama biste primijenili metodu parcijalnih valova?

8. Pretpostavimo da razmatramo raspršenja visokoenergetskih elektrona na fiksnoj jezgri naboja $Ze$ i distribuciji naboja $\rho(r)$. Neka je $f_e(\vec{k}, \vec{k'})$ amplituda raspršenja za raspršenje elektrona na točkastoj jezgri naboja $Ze$, a $f(\vec{k}, \vec{k'})$ amplituda raspršenja za raspršenje elektrona na jezgri koja ima strukturu.

   a) Pokažite da vrijedi

$$f(\vec{k}, \vec{k'}) = F(q^2) f_e(\vec{k}, \vec{k'})$$

   gdje je $F(q^2)$ direktno proporcionalno Fourierovom transformatu gustoće $\rho(r)$.

   b) Pretpostavimo da smo iz eksperimentalno izmjerenog $f(\vec{k}, \vec{k'})$ i poznatog $f_e(\vec{k}, \vec{k'})$ odredili $F(q^2)$. Pokažite da tada možemo na sljedeći način proračunati korijen srednjeg kvadrata radijusa jezgre:

$$\sqrt{\langle r^2 \rangle} = \sqrt{-6 \left. \frac{dF(q^2)}{dq^2} \right|_{q^2=0}} \, .$$

   c) Procijenite energiju elektrona ako želimo vidjeti strukturu jezgre (dimenzije jezgre su reda veličine $1\text{fm} = 10^{-13}\text{cm}$). Da li u tom području energija vrijedi Bornova aproksimacija (za doseg potencijala $a \approx a_0$)?

9. U Sommerfeldovom modelu metala elektroni su slobodne čestice koje popunjavaju sva stanja s kinetičkom energijom do Fermijevog nivoa $E_F$. U Bornovoj aproksimaciji odredite izraz za totalni udarni presjek za elektron-elektron raspršenje ako efektivnu interakciju među elektronima aproksimiramo

   a) kontaktnim potencijalom oblika

$$V(r) = g\delta(r) \, ,$$

   b) zasjenjenim Coulombskim potencijalom oblika:

$$V(r) = \frac{e^2}{r} e^{-k_{TF} r}$$

gdje je

$$k_{TF} = \left(\frac{4e^2 m k_F}{\pi}\right)^{\frac{1}{2}} .$$

Uzimajući u obzir činjenicu da se zbog Paulijevog principa dominantno raspršuju samo elektroni s kinetičkom energijom oko Fermijevog nivoa, odredite valjanost Bornove aproksimacije u b) slučaju. Uzmite da je $E_F \approx 10eV$.

10. Proton energije $1keV$ nalijeće na vodikov atom. Ako pretpostavimo da je doseg potencijala vodikovog atoma reda veličine 1 Bohrov radijus, objasnite da li je bolje za opis procesa raspršenja primijeniti metodu parcijalnih valova ili Bornovu aproksimaciju. Pomoću metode za koju ste se odlučili izračunajte diferencijalni i totalni udarni presjek za raspršenje protona na vodikovom atomu uzimajući pri tom u obzir elektronsku strukturu vodikovog atoma te činjenicu da su proton i vodikova jezgra identične čestice spina $S = \frac{1}{2}$.

11. Zadan je Lennard-Jonesov potencijal između dva atoma plemenitog plina:

$$V(r) = 4\epsilon \left\{ \left(\frac{\sigma}{x}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{x}\right)^{6} \right\} .$$

Izračunajte vjerojatnost prijelaza iz osnovnog u prvo pobuđeno stanje te iz prvog pobuđenog stanja u drugo pobuđeno stanje ako na sistem djeluje sljedeća smetnja

$$H' = E_0 x e^{i\omega t} .$$

Problem rješavajte u harmoničkoj aproksimaciji, tj za $H_0$ uzmite

$$H_0 = \hbar\omega \left(a^\dagger a + \frac{1}{2}\right) .$$

Za $\epsilon$, $\sigma$ $E_0$ odaberite realistične vrijednosti.

12. Na harmonički oscilator koji se u $t \to -\infty$ nalazio u osnovnom stanju djeluje sila oblika

$$f(t) = F e^{-\kappa t} .$$

Odredite populaciju stanja u $t \to \infty$ egzaktno te usporedite s perturbativnim računom.

13. Vodikov atom u osnovnom stanju smješten je između ploča kondenzatora i izložen homogenom električnom polju oblika

$$E = E_0 \Theta(t) e^{-\Gamma t}\,.$$

Izračunajte koja je vjerojatnost da će u $t \to \infty$ vodikov atom biti u bilo kojem pobuđenom stanju.

14. Nabijena čestica smještena je 1D potencijalnoj jami dubine $V_0$, širine $2a$ te se u trenutku $t = 0$ nalazi u osnovnom stanju. U trenutku $t = 0$ na sistem počinje djelovati elektromagnetsko zračenje opisano vektorskim potencijalom:

$$\vec{A}(x,t) = A_0 \vec{e} e^{kx - \omega t}\,.$$

Odredite koja je vjerojatnost da će u $t \to \infty$ čestica biti u bilo kojem pobuđenom stanju. Proračun napravite u dipolnoj aproksimaciji i bez nje. Variranjem parametara $k$ i $V_0$ objasnite kada je dipolna aproksimacija opravdana.

15. Čestica mase $M$ i naboja $e$ smještena je u atraktivni potencijal:

$$V(x,y,z) = k(x^2 + y^2 + z^2)\,.$$

Pretpostavite da se sistem nalazi u slabom magnetskom polju $\vec{B}$ u $z$-smjeru koje slabo razbija degeneraciju. Pretpostavite da sada na sistem primjenimo i slabu vremenski promjenjivu smetnju:

$$V(x,t) = Axcos\omega t$$

koja radi prijelaze između slabo pomaknutih stanja. Izračunajte vjerojatnosti za pojedine prijelaze te objasnite koji su prijelazi dozvoljeni. Ako je u $t = 0$ čestica u osnovnom stanju, koja je vjerojatnost za prijelaz u prvo pobuđeno stanje ako je sistem izložen samo vremenski ovisnoj smetnji.

16. Hamiltonijan 1D harmoničkog oscilatora u laserskom elektromagnetskom polju dan je izrazom:

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega_0^2 x^2 + \frac{ep}{2m\omega} E_0 sin\omega t - \frac{1}{2} e E_0 x cos\omega t$$

Pretpostavite da je u trenutku $t = 0$ laser isključen i oscilator je u osnovnom stanju. Ako elektromagnetsku interakciju tretiramo kao malu smetnju odredite vjerojatnost popunjenja bilo kojeg pobuđenog stanja u bilo kojem trenutku $t \geq 0$.

17. Hamiltonijan $H_2^+$ iona je oblika:

$$H = \frac{\vec{p}_e^2}{2m_e} + V(r) + \frac{\vec{P}_{p1}^2}{2m_p} + \frac{\vec{P}_{p2}^2}{2m_p} + V(|\vec{r} - \vec{R}_1|) + \frac{e^2}{R}$$

Izračunajte i nacrtajte energiju osnovnog stanja $H_2^+$ iona u Born-Oppenheimerovoj aproksimaciji (upotrijebite rezultate iznesene na predavanjima).
Odredite:
a) ravnotežni razmak između jezgara $R_0$,
b) minimalnu energiju $E_0$,
c) nultu energiju vibracija.

18. Napišite ukupni hamiltonijan dvoatomne molekule. Formalno, koristeći formalizam $H_2$ molekule pokažite da je doprinos zbog elektronskih stupnjeva slobode u Born-Oppenheimerovoj aproksimaciji sadržan u obliku efektivnog centralnosimetričnog potencijala $U(R)$. Nakon što ste problem sveli na problem dva tijela u centralnosimetričnom potencijalu pokažite kako se dalje separiraju vibracioni te rotacioni stupnjevi slobode. Ako formalizam primjenimo na molekulu NaCl-a gdje atomi intereagiraju potencijalom

$$V(r) = \frac{A}{r^2} - \frac{B}{r}$$

odredite (poznavajući ravnotežnu udaljenost $R_0 = 0.236\ nm$ i energiju disocijacije $U(R_0) = 4.26\ eV$ molekule NaCl-a) parametre $A$ i $B$. Odredite rotacioni te u harmonijskoj aproksimaciji vibracioni spektar. Pošto je ovaj problem i egzaktno riješiv egzaktne rezultate za zadane parametre usporedite s rezultatima u harmonijskoj aproksimaciji.

19. Pretpostavite da je interakcija između dva atoma plemenitog plina opisana Morseovim potencijalom oblika:

$$V(r) = D\left\{e^{-2\rho} - 2e^{-\rho}\right\}, \quad \rho = (r - r_m)$$

Izračunajte energije vibracija u harmoničkoj aproksimaciji. Problem riješite egzaktno (Schiff, Flugge) te objasnite kada treba uključiti i anharmoničke članove. Za parametre uzmite ravnotežne udaljenosti i energije kristala plemenitih plinova, iz tih podataka odredite parametre $r_m$ i $D$.

20. Odredite spektar vibracionih modova u 1D kristalu NaF-a. Konstante elastičnosti izračunajte na temelju poznavanja ravnotežne udaljenosti atoma u kristalu NaF-a $R_0 = 0.193\ nm$ te pretpostavke da atomi u ravnotežnom položaju osjećaju potencijal oblika:

$$V(r) = 4\epsilon \left\{ \left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r}\right)^{6} \right\}$$

Energija disocijacije molekule NaF je $5.38 eV$. Odredite kolike su frekvencije optičkih fotona u dugovalnom limesu te brzinu zvuka. Rezultate usporedite s eksperimentalnim rezultatima.
Napomena:
Energija disocijacije je energija potrebna da se molekula rastavi na beskonačno udaljene neutralne atome.

21. Pretpostavimo da imamo tri čestice mase $m$ koje se gibaju u jednoj dimenziji i međusobno su vezane harmoničkom silom, tj. osjećaju potencijal oblika:

$$V(x) = \frac{1}{2}\left[(x_1 - x_2)^2 + (x_2 - x_3)^2 + (x_3 - x_1)^2\right] \tag{1}$$

Napravite prijelaz u novi koordinatni sustav u kojem Schödingerova jednadžba separabilna. Pronađite energijski spektar te valne funkcije sistema.