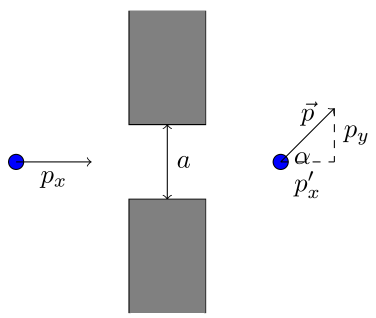
Prvi seminar iz kvantne kemije s rješenjima

1. **a) Izračunajte energiju fotona infracrvenoga zračenja valne duljine** $1064\,nm$**.**
   b) Nd:YAG laser emitira puls zračenja valne duljine $1064\,nm$ **s prosječnom snagom od** $5\cdot 10^{6}\,W$ **u trajanju od** $2\cdot 10^{-8}\,s$**. Koliko je fotona emitirano u tom pulsu?**
   Rješenje:
   a) Energija fotona jednaka je $E = h\nu = h\frac{c}{\lambda} = 6,626\cdot 10^{-34}\frac{3\cdot 10^{8}}{1,064\cdot 10^{-6}} = 1,86696\cdot 10^{-19}\,J = 1,165\,eV$.
   b) Najprije ćemo s pomoću snage lasera i trajanja pulsa izračunati ukupnu energiju: $\Delta E = P\Delta t = 5\cdot 10^{6}\cdot 2\cdot 10^{-8} = 0,1\,J$. Taj puls energije sadrži broj fotona $\Delta N = \frac{\Delta E}{h\nu} = \frac{0,1}{1,86696\cdot 10^{-19}} = 5,356\cdot 10^{17}$.

2. **Kad je J.J. Thomson istraživao elektrone u katodnoj cijevi, opazio je da se njihovo ponašanje ravna po klasičnoj mehanici**. **a) Elektroni se ubrzavaju kroz razliku potencijala od** $1000\,V$ **i prolaze kroz pukotinu širine** $0,100\,cm$**. Izračunajte kut ogiba elektrona.**
   b) Kolika bi morala biti širina pukotine da bi ogibni kut bio $1,00°$ **za elektrone energije** $1000\,eV$**?**



Rješenje:
a) Ovdje je riječ o relacijama neodređenosti. Elektron, koji je pri ulazu u pukotinu imao količinu gibanja samo u x-smjeru, zbog pukotine širine a u smjeru osi y, dobije količinu gibanja p_y. Razlog tomu je relacija neodređenosti $ap_y \geq h$. Jasno je da se pri tome ne mijenja kinetička energija elektrona, pa zato elektron pri izlasku iz pukotine ima dvije sastavnice količine gibanja, naime p'_x i p_y, takve da mora vrijediti ${p'_x}^2 + p_y^2 = p_x^2$. Kut ogiba α određen je jednadžbom $\sin(\alpha) = \frac{p_y}{|\vec{p}|} = \frac{p_y}{p_x}$. Iz relacije neodređenosti procjenjujemo da je $p_y = \frac{h}{a} = 6,626\cdot 10^{-31}\,kgms^{-1}$. Veličinu p_x određujemo iz kinetičke energije E:

$$E = \frac{p_x^2}{2m} \Rightarrow p_x = \sqrt{2mE} \tag{1}$$

Kinetička energija elektrona jednaka je razlici potencijalnih energija elektrona $E = eU$, gdje je e elementarni naboj. Tako iz jednadžbe (1) dobivamo $p_x = \sqrt{2meU} = \sqrt{2\cdot 9,1\cdot 10^{-31}\cdot 1,6\cdot 10^{-19}\cdot 1000} = 2,7\cdot 10^{-23}\,kgms^{-1}$.

Vidimo da je p_x za osam redova veličina veći od p_y, tj. $p_x >> p_y$. Kut ogiba α zadovoljava jednadžbu $\sin(\alpha) = \frac{p_y}{p_x} \approx 3,9 \cdot 10^{-8}$. To znači da je α premali da bi uopće mogao biti izmjeren, tj. praktički nema ogiba. Da bi Thomson bio mogao uočiti ogib elektrona morao je smanjiti veličinu pukotine a i/ili energiju elektrona. Možemo to izreći i ovako: de Broglieva valna duljina elektrona jednaka je $\lambda = \frac{h}{p_x} = 2,45 \cdot 10^{-11}\,m$, što je za osam redova veličine manje od širine pukotine a. Ogib se očituje tek kada je valna duljina upadnoga vala sumjerljiva sa širinom pukotine. Uglavnom, pod postavljenim uvjetima u svojemu pokusu on nije mogao uočiti ogib elektrona.
b) Ako uzmemo $\alpha = 1,00^\circ$, tj. $\sin(\alpha) = 0.017$, tada je $p_y = p_x \sin(\alpha) p_x = 4,7 \cdot 10^{-25}\,kgms^{-1}$. Iz relacije neodređenosti procjenjujemo da je $a = \frac{h}{p_y} = \frac{6,626 \cdot 10^{-34}}{4,7 \cdot 10^{-25}} = 1,4 \cdot 10^{-9}\,m$, tj. širina pukotine trebala bi biti u nanometarskom području.

3. **Stanje određene čestice u jednoj prostornoj dimenziji opisano je valnom funkcijom $\Psi(x,t) = ae^{-ibt}e^{-\frac{bmx^2}{\hbar}}$, gdje su a i b konstante, a m je masa čestice. Izračunajte potencijalnu energiju $V(x)$ te čestice**
Rješenje:
Valna funkcija mora biti rješenjem Schrödingerove jednadžbe:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi(x,t)}{\partial x^2} + V(x)\Psi(x,t) = i\hbar\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t} \tag{2}$$

Za parcijalne derivacije valne funkcije po prostornoj koordinati x i vremenu t dobivamo:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial x} &= -\frac{2bm}{\hbar}x\Psi(x,t) \\
\frac{\partial^2\Psi(x,t)}{\partial x^2} &= \frac{\partial}{\partial x}\left(-\frac{2bm}{\hbar}x\Psi(x,t)\right) = \\
&= -\frac{2bm}{\hbar}\Psi(x,t) + \left(-\frac{2bm}{\hbar}x\right)^2\Psi(x,t) = \\
&= -\frac{2bm}{\hbar}\left(1 - \frac{2bm}{\hbar}x^2\right)\Psi(x,t) \qquad (3)
\end{aligned}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x,t) = -ib\Psi(x,t) \tag{4}$$

U računanju je iskorišteno Leibnizovo pravilo deriviranja umnoška funkcija i činjenica da je derivacija eksponencijalne funkcije razmjerna samoj toj eksponencijalnoj funkciji. Uvrštavanjem jednadžbi (3) i (4) u jednadžbu (2), dobivamo jednadžbu:

$$\frac{\hbar^2}{2m}\frac{2bm}{\hbar}\left(1 - \frac{2bm}{\hbar}x^2\right)\Psi(x,t) + V(x)\Psi(x,t) = i\hbar(-ib)\Psi(x,t)$$

dijelimo s $\Psi(x,t)$

$$b\hbar\left(1 - \frac{2bm}{\hbar}x^2\right) + V(x) = b\hbar \Rightarrow V(x) = 2mb^2x^2$$

4. **a) Franjo i Katica Heisenberg imaju dvoje djece, od kojih je jedno djevojčica. Kolika je vjerojatnost da je drugo dijete djevojčica?**
b) Stipe i Mare Schrödinger imaju dvoje djece. Starije dijete je djevojčica. Kolika je vjerojatnost da je mlađe dijete dječak? Pretpostavljamo da se ženska i muška djeca rađaju s jednakom vjerojatnošću.
Rješenje:
a) Jedno dijete može biti muškoga (M) ili ženskoga (Ž) spola. Tu, dakle, imamo samo dvije mogućnosti. Te mogućnosti mogu, ali ne moraju, biti jednako vjerojatne. Ustvari, ženska se djeca rađaju nešto češće od muških. Uzmimo da je vjerojatnost rođenja ženskoga djeteta jednaka p_z. Tada je vjerojatnost rođenja muškoga djeteta, p_m, jednaka $p_m = 1-p_z$. Od ukupnoga broja N bračnih parova s jednim djetetom imat ćemo $N_z = Np_z$ parova s djevojčicom, odnosno $N_m = Np_m = N(1-p_z)$ parova s dječakom. S dvoje djece imamo četiri mogućnosti rađanja: muško-muško (MM), muško-žensko (MŽ), žensko-muško (ŽM) i žensko-žensko (ŽŽ). Pripadajuće vjerojatnosti za nabrojane mogućnosti su: $p_{mm} = p_m^2 = (1-p_z)^2$, $p_{mz} = p_m p_z = p_z(1-p_z)$, $p_{zm} = p_z p_m = p_z(1-p_z)$ i $p_{zz} = p_z^2$. Od ukupnoga broja N bračnih parova s dvoje djece imat ćemo $N_{mm} = Np_{mm}$ parova s dva dječaka, $N_{mz} = Np_{mz}$ parova s dječakom rođenim prije djevojčice, $N_{zm} = Np_{zm}$ parova s djevojčicom rođenom prije dječaka i $N_{zz} = Np_{zz}$ parova s dvije djevojčice. Svi parovi, osim N_{mm} parova s dva dječaka, imaju barem jednu djevojčicu. Taj uvjet možemo zvati "rubnim uvjetom", što znači da smo apstraktni prostor od N jednakovjerojatnih bračnih parova suzili na manji prostor od $N_{zz} + N_{zm} + N_{mz}$ jednakovjerojatnih parova s barem jednom djevojčicom. Tražena vjerojatnost da određeni par, koji ima jednu djevojčicu, ima i drugu djevojčicu, jednaka je omjeru broja N_{zz}, što je jedina mogućnost za dvije djevojčice, i ukupnoga broja sviju parova s barem jednom djevojčicom. Dakle, tražena je vjerojatnost jednaka:

$$p = \frac{N_{zz}}{N_{zz}+N_{zm}+N_{mz}} = \frac{p_{zz}}{p_{zz}+p_{mz}+p_{zm}} = \frac{p_z^2}{p_z^2+2p_z(1-p_z)} =$$
$$= \frac{p_z}{2-p_z} = \frac{1}{3} \text{ za } p_z = \frac{1}{2}$$

b) Ovdje nam je "rubni uvjet" taj da je starije dijete djevojčica, tj. da nam se ukupni prostor događaja sužava na broj $N_{zz} + N_{zm}$, a traženi je broj događaja (tj. mlađe je dijete dječak) jednak broju N_{zm}. Vjerojatnost toga događaja jednaka je:

$$p = \frac{N_{zm}}{N_{zz}+N_{zm}} = \frac{p_z(1-p_z)}{p_z^2+p_z(1-p_z)} = 1-p_z = \frac{1}{2} \text{ za } p_z = \frac{1}{2}$$

5. **Imamo dva novčića i jednu kocku. "Pismu" novčića pripisujemo vrijednost $\frac{1}{2}$, a "glavi" vrijednost $-\frac{1}{2}$. Vrijednosti pripisane stranicama kocke su $-\frac{5}{2}$, $-\frac{3}{2}$, $-\frac{1}{2}$, $\frac{1}{2}$, $\frac{3}{2}$, $\frac{5}{2}$. Kolika je vjerojatnost da**

ćemo pri bacanju toga sustava od dvaju novčića i jedne kocke dobiti ukupnu vrijednost $\frac{3}{2}$?

Rješenje:

Svaki novčić pokazuje dva elementarna događaja, tj. vrijednosti $+\frac{1}{2}$, odnosno $-\frac{1}{2}$. Dva će novčića pokazivati $2 \cdot 2 = 4$ elementarna događaja:$-\frac{1}{2} - \frac{1}{2} = -1$, $-\frac{1}{2} + \frac{1}{2} = 0$, $+\frac{1}{2} - \frac{1}{2} = 0$ i $+\frac{1}{2} + \frac{1}{2} = 1$. Vidimo da se elementarni događaj s vrijednošću 0 može ostvariti na dva načina, a ostala dva elementarna događaja, $+1$ i 1 svaki na samo jedan način. Kocka pokazuje 6 elementarnih događaja, svaki na samo jedan način. Ukupni je broj događaja jednak $4 \cdot 6 = 24$. Elementarni se događaj s rezultatom $\frac{3}{2}$ može ostvariti na sljedeće načine: $0 + \frac{3}{2}$ (dva puta, jer se 0 ostvaruje na dva načina), $-1 + \frac{5}{2}$ (jedan način) i $+1 + \frac{1}{2}$ (jedan način). Traženi se događaj, dakle, može ostvariti na 4 načina, pa je tražena vjerojatnost $p = \frac{4}{24} = \frac{1}{6}$.