Zadatak 1.

Elektron ima spin ½ . Nađite sva moguća spinska stanja dvaju elektrona.

Rješenje:

Ukupni spin je jednak zbroju pojedinačnih spinova:

$$\vec{S}=\vec{S}_1+\vec{S}_2$$

Pri tome vrijedi $\vec{S}_1^{\,2}=\vec{S}_2^{\,2}=\frac{3}{4}$

Budući da svaki elektron ima dva spinska stanja, određeno spinsko stanje dvaju elektrona dobit ćemo "množeći" spinska stanja pojedinačnih elektrona. Naprimjer:

$$|\mu_1\rangle|\mu_2\rangle\equiv|\mu_1,\mu_2\rangle \quad , \quad \mu_{1,}\mu_2=\pm\frac{1}{2}$$

Dakle, ukupno imamo četiri spinska stanja $|\mu_1,\mu_2\rangle$

Vlastiti vektor ukupnoga spina označit ćemo kao $|S,M\rangle$
Dvije polovine se mogu "zbrojiti" u 1 ili u 0. To znači da S ima vrijednosti 1 ili 0. Pri tome M=-1,0,+1 odnosno M=0.
Dakle, imamo ukupno četiri vektora koji su vlastiti vektori ukupnog spina. Te vektore možemo, i moramo, prikazati kao linearne spojeve prethodnih četiriju vektora, dobivenih "množenjem" vektora pripadajućih pojedinačnim elektronima.
Spinski operatori pojedinačnih elektrona međusobno komutiraju zbog jednostavne činjenice što pripadaju različitim prostorima--jedan pripada prostoru prvog elektrona, a drugi prostoru drugog elektrona.

Izgradnju stanja ukupnoga spina možemo početi sa stanjem najviše ukupne projekcije spina, ili najniže. U prvom slučaju ćemo ostala stanja dobiti djelovanjem operatora S_- , a u drugom slučaju djelovanjem operatora S_+ . To su dva jednako vrijedna postupka. Tako imamo očitu jednakost

$$|1,+1\rangle = \left|+\frac{1}{2},+\frac{1}{2}\right\rangle$$

Sljedeće po redu vektore dobijemo ovako:

$$|1\,,0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}S_-|1\,,1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(S_{1,-}+S_{2,-}\right)\left|+\frac{1}{2},+\frac{1}{2}\right\rangle =$$
$$= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\left|-\frac{1}{2},+\frac{1}{2}\right\rangle + \left|+\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle\right)$$

$$|1\,,-1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}S_-|1\,,0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\frac{1}{\sqrt{2}}\left(S_{1,-}+S_{2,-}\right)\left(\left|-\frac{1}{2},+\frac{1}{2}\right\rangle + \left|+\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle\right) =$$
$$= \frac{1}{\sqrt{2}}\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\left|-\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle + \left|-\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle\right) = \left|-\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle$$

Ova tri vektora čine tzv. triplet, jer su vlastiti vektori operatora ukupnost spina 1.
Ostaje nam još vlastiti vektor ukupnog spina 0, tzv. singlet.
Njega možemo dobiti kao linearni spoj dvaju vektora:

$$|0\,,0\rangle = a\left|+\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle + b\left|-\frac{1}{2},+\frac{1}{2}\right\rangle$$

Koeficijente a i b dobit ćemo iz zahtjeva da oba operatora, S_+ i S_- , poništavaju ovaj vektor. Dobivamo:

$$|0\,,0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\left|+\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle - \left|-\frac{1}{2},+\frac{1}{2}\right\rangle\right)$$

Zadatak 2.
Napišite opći oblik valne funkcije helijeva atoma uzimajući u obzir Paulijevo načelo i smatrajući da se jezgra atoma ne giba, odnosno da ju možemo smatrati kao središte privlačne sile beskonačne mase.

Rješenje:
To da se jezgra ne giba znači da će valna funkcija ovisiti samo o položajima elektrona i njihovim spinovima. Paulijevo načelo kaže da valna funkcija dvaju, ili više, elektrona mijenja predznak kada (bilo koja) dva elektrona zamijene mjesta, tj. kada zamijene i svoje položaje i svoje spinove. Iz prethodnog zadatka vidimo da su tripletna stanja simetrična na zamjenu spinova dvaju elektrona, a singletno je stanje antisimetrično, tj. mijenja predznak pri toj zamjeni. Valna je funkcija umnožak prostornog dijela, koji ovisi samo o položajima elektrona, i spinskog dijela, koji ovisi samo o spinovima. Da bi ta valna funkcija bila antisimetrična, tripletana stanja se moraju pomnožiti s antisimetričnom funkcijom položaja, a singletno stanje sa simetričnom funkcijom položaja. Dakle, imamo dva moguća oblika valne funkcije helijeva atoma:

$$\Psi_1(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \mu_1, \mu_2) = \psi_A(\vec{r}_1, \vec{r}_2)\left|1, \mu\right\rangle$$
$$\Psi_2(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \mu_1, \mu_2) = \psi_S(\vec{r}_1, \vec{r}_2)\left|0, 0\right\rangle$$

Ovdje indeksi A i S označavaju antisimetrično odnosno simetrično.

Zadatak 3.
Pod sličnim uvjetima kao i u Zadatku 2., napišite opći oblik valne funkcije litijeva atoma.
Rješenje:
Što se tiče samo spinskog dijela valne funkcije, postoje ove mogućnosti: kvadrupletno stanje i dva dubletna stanja. Budući da je kvadrupletno stanje, kao stanje najvišeg mogućeg spina triju elektrona, simetrično na zamjenu bilo koja dva elektrona, prostorni dio mora tada biti antisimetričan na istu zamjenu. Međutim, dva dubletna spinska stanja nemaju nikakvu određenu simetriju na zamjenu dvaju elektrona, pa se valna funkcija litijeva atoma za ukupni spin ½ ne može napisati kao umnožak prostornog i spinskog dijela.
Potankosti pokazati na ploči!

Zadatak 4.

U osnovnom stanju vodikova atoma izračunajte:

a) prosječnu vrijednost od r^n , gdje je n prirodni broj.

b) prosječnu kinetičku i potencijalnu energiju elektrona.

c) razdiobu zaleta elektrona, tj. naći gustoću vjerojatnosti za zalet elektrona.

d) prosječni električni potencijal što ga stvara vodikov atom u prostoru oko sebe.

Rješenje:

a) Normalizirana valna funkcija elektrona u osnovnom stanju vodikona atoma je

$$\psi(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} \mathrm{e}^{-\frac{r}{a}}$$

pa je

$$\langle r^n \rangle = \frac{1}{\pi a^3} \int_0^\infty r^n |\psi(r)|^2 r^2 \, d r \, d\Omega = \frac{4}{a^3} \int_0^\infty r^{n+2} \mathrm{e}^{-\frac{2r}{a}} \, d r \, d\Omega =$$

$$= \frac{(n+2)!}{2} \left(\frac{a}{2} \right)^n$$

b) $$\vec{p}^{\,2} \psi(r) = -\hbar^2 \left(\frac{1}{a^2} - \frac{2}{a r} \right) \psi(r)$$

$$\langle E_{kin} \rangle = \left\langle \frac{\vec{p}^{\,2}}{2m} \right\rangle = -\frac{\hbar^2}{2m} \left\langle \frac{1}{a^2} - \frac{2}{a r} \right\rangle = \frac{\hbar^2}{2 m a^2}$$

$$\langle V(r) \rangle = -k e^2 \left\langle \frac{1}{r} \right\rangle = -k \frac{e^2}{a} = -2 \langle E_{kin} \rangle$$

c)

$$\Phi(p) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi\hbar)^3}} \int e^{-i\frac{\vec{p}\cdot\vec{r}}{\hbar}} \psi(r)\, d^3 r = \frac{2\sqrt{2}}{\pi} \left(\frac{\hbar}{a}\right)^{\frac{5}{2}} \frac{1}{\left(p^2 + \frac{\hbar^2}{a^2}\right)^2}$$

Gustoća vjerojatnosti da elektron ima zalet p je jednaka

$$|\Phi(p)|^2$$

d) Električni potencijal što ga vodikov atom stvara u prostoru oko sebe sastoji se od električnog potencijala točkastog pozitivnog naboja jezgre i potencijala elektronske gustoće

Podsjetiti se Gaussova zakona, i kako se izračunava potencijal iz poznate gustoće naboja!