

Prvi pismeni kolokvij iz kvantne kemije

21. prosinca 2009.

1. Dva elektrona se nalaze u jednodimenzionalnoj kutiji duljine 1 nm . Izračunajte energiju osnovnog stanja toga sustava ako zanemarimo međudjelovanje između elektrona i ako
 - a) je valna funkcija $\psi(x_1, x_2)$ antisimetrična na zamjenu $x_1 \leftrightarrow x_2$.
 - b) je valna funkcija $\psi(x_1, x_2)$ simetrična na zamjenu $x_1 \leftrightarrow x_2$.
 - c) nema nikakvog zahtjeva na simetriju valne funkcije pri zamjeni $x_1 \leftrightarrow x_2$. *Uputa:* Operator ukupne energije je $H = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{d^2}{dx_1^2} + \frac{d^2}{dx_2^2} \right)$, a valnu funkciju $\psi(x_1, x_2)$ izgradite pomoću umnožaka $f(x_1) \cdot g(x_2)$.
2. Neka je \vec{L} operator kutne količine gibanja (zamaha), i neka su \vec{a} i \vec{b} neki konstantni vektori. Izračunajte komutator $[\vec{a} \cdot \vec{L}, \vec{b} \cdot \vec{L}]$.
3. Neka je $y(x)$ rješenje diferencijalne jednačine $\frac{d^2y}{dx^2} + 4\frac{dy}{dx} - 5y = 0$. Koliko je $y(1)$ ako je $y(0) = 1$ i $y'(0) = 0$?
4. Elektron se nalazi u osnovnom stanju vodikova atoma. Izračunajte vjerojatnost nalaženja elektrona na udaljenosti $a_0 \leq r \leq 2a_0$ od jezgre, gdje je a_0 Bohrov polumjer.
5. Harmonički oscilator odašilje foton valne duljine $\lambda = 500\text{ nm}$.
 - a) Kolika je najviša moguća frekvencija ω tog oscilatora?
 - b) Kolika je sljedeća niža frekvencija moguća?
 - c) Ako čestica mase $m = 1,6 \cdot 10^{-26}\text{ kg}$ titra najvišom mogućom frekvencijom, kolika je elastična konstanta?
6. U prirodi nalazimo dva stabilna izotopa atoma litija: ${}^6\text{Li}$ i ${}^7\text{Li}$. Ako mase jezgara tih izotopa približno izrazimo kao 6 odnosno 7 masa protona, kolika će biti razlika ionizacijskih energija iona ${}^6\text{Li}^{++}$ i ${}^7\text{Li}^{++}$ po jednom molu.
7. Točno ili netočno:
 - a) Schrödingerova jednačba je u suprotnosti s Heisenbergovom matičnom mehanikom.
 - b) Paulijevo načelo je posljedica Heisenbergovih relacija neodređenosti.
 - c) De Broglieva relacija vrijedi za sve čestice, i za relativističke i za nerelativističke brzine.

- d) Ustanovljenje kvantne mehanike isključiva je posljedica matematičke nedosljednosti klasične mehanike.
- e) Operatori nekih fizičkih veličina ne mogu se predočiti matricama konačnog reda.
8. Izračunajte energiju osnovnog stanja harmoničkog oscilatora mase m i frekvencije ω s probnom valnom funkcijom $\psi(x) = Ne^{-\alpha|x|}$, gdje je α parametar optimizacije.
9. Operator A djeluje na valnu funkciju $\psi(x)$ na način $A\psi(x) = \frac{d\psi^*(x)}{dx}$. Ovdje znak * označava kompleksnu konjugaciju. Je li to linearan operator? Obrazložite svoj odgovor.
10. Stanje neke čestice je vlastito stanje kvadrata operatora zamaha \vec{L}^2 s vlastitom vrijednošću $12\hbar^2$ i projekcijom na z -os jednakom 0. Izračunajte srednju vrijednost operatora $L_-^2 L_+^2$ u tom stanju.