Prvi pismeni kolokvij iz kvantne kemije

25. studenoga 2013.

1. Ivek i Štefica Pauli imaju troje djece. Ako je jedno dijete djevojčica, izračunajte vjerojatnost da

   a) su preostala dva djeteta dječaci.

   b) su preostala dva djeteta djevojčica i dječak.

   c) su preostala dva djeteta djevojčice.

   d) je najstarije dijete djevojčica, ako je najmlađe dijete također djevojčica.

   Pretpostavljamo da su vjerojatnosti rađanja muške i ženske djece jednake.
   Rješenje:
   "Stanje" troje djece, s obzirom na spol, može se ostvariti na osam načina. Ako uvedemo oznake M za muško dijete i Ž za žensko dijete, ta stanja su: MMM, MMŽ, MŽM, ŽMM, MŽŽ, ŽMŽ, ŽŽM i ŽŽŽ. Od tih osam mogućnosti odbacujemo jednu, naime MMM, zato što znamo da je jedno dijete sigurno djevojčica. Preostaje nam sedam mogućnosti.
   a) Stanje s preostalim dvama dječica ostvareno je na tri načina: MMŽ, MŽM i ŽMM. Vjerojatnost toga stanja je $\frac{3}{7}$.
   b) Stanje s preostalim jednim dječakom i jednom djevojčicom ostvareno je na tri načina: MŽŽ, ŽMŽ i ŽŽM. Vjerojatnost toga stanja je $\frac{3}{7}$.
   c) Stanje s preostale dvije djevojčice ostvareno je na samo jedan način: ŽŽŽ. Vjerojatnost toga stanja je $\frac{1}{7}$. Ovaj smo rezultat mogli dobiti iz jednostavne činjenice da je slučaj c) treća preostala mogućnost, tj. zbroj vjerojatnosti pod a), b) i c) mora biti jednak 1.
   d) Uvjet "ako je najmlađe dijete djevojčica" ostvaren je na četiri načina: MMŽ, MŽŽ, ŽMŽ i ŽŽŽ. Od tih četiriju mogućnosti dva su stanja s djevojčicom kao najstarijim djetetom: ŽMŽ i ŽŽM. Vjerojatnost je, dakle, jednaka $\frac{2}{4} = \frac{1}{2}$.

2. Elektron se nalazi u dvodimenzijskoj neprobojnoj kvadratičnoj kutiji stranice $a = 1\,nm$. Koliko energijskih razina i stanja elektron ima ako je njegova energija $E \leq \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2} \cdot 15$? Kolika je razlika energija između prvog pobuđenog i osnovnog stanja elektrona?
   Rješenje:
   Energijske razine elektrona opisane su dvama kvantnim, prirodnim, brojevima, n_1 i n_2 na sljedeći način:

$$E_{n_1,n_2} = \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}\left(n_1^2 + n_2^2\right)$$

Ako stanjima pridružimo parove (n_1, n_2), onda za te parove uvjet $n_1^2+n_2^2 \leq 15$ možemo ispuniti na sljedeće načine: $(1,1), (1,2), (2,1), (2,2), (1,3), (3,1)$, $(2,3)$ i $(3,2)$. Ukupno imamo sedam stanja koje ispunjavaju uvjet na energiju. Međutim imamo samo **pet** različitih energijskih razina: osnovno stanje $(1,1)$, prva pobuđena stanja $(1,2)$ i $2,1)$, drugo pobuđeno stanje $(2,2)$, treća pobuđena stanja $(1,3)$ i $(3,1)$ te četvrta pobuđena stanja $(2,3)$ i $(3,2)$. Razlika energija između prvog pobuđenog stanja, $(1,2)$ ili $(2,1)$ i osnovnog stanja $(1,1)$ jednaka je $\Delta E = E_{1,2} - E_{1,1} = E_{2,1} - E_{1,1} = \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}(5-2) = 3\frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2} = 3\frac{h^2}{8ma^2} = 1,13\,eV$.

3. Imamo operatore $A = \frac{1}{x^2} + \frac{d}{dx}$ i $B = x^2\frac{d}{dx}$. Izračunajte komutator $C = [B, A]$.
Rješenje:

$$[A,B] = \left[\frac{1}{x^2} + \frac{d}{dx}, x^2\frac{d}{dx}\right] = \left[\frac{1}{x^2}, x^2\frac{d}{dx}\right] + \left[\frac{d}{dx}, x^2\frac{d}{dx}\right] =$$
$$= x^2\left[\frac{1}{x^2}, \frac{d}{dx}\right] + \left[\frac{d}{dx}, x^2\right]\frac{d}{dx} =$$
$$= x^2\frac{2}{x^3} + 2x\frac{d}{dx} = \frac{2}{x} + 2x\frac{d}{dx}$$

4. Iz otvora elektronskoga "topa" izlijeće 10^{20} elektrona u sekundi. Svaki se elektron giba slobodno po pravcu brzinom $v = 3\cdot 10^5\, ms^{-1}$. Elektroni nalijeću na potencijalnu stepenicu visine $V_0 = 3\,eV$. Koliko će elektrona u jednoj sekundi doći najdublje do dubine od $d = 0,3\,nm$ u stepenici?
Rješenje:
Energija upadnoga elektrona jednaka je $E = \frac{mv^2}{2} = 0,256\,eV < V_0$. Upadni ravni val Ae^{ikx} s amplitudom A "proizvodi" kvantnomehaničku struju $J_u = |A|^2 v = 10^{20}\,s^{-1}$, iz čega slijedi da je $|A|^2 = \frac{10^{15}}{3}\,m^{-1}$. U području stepenice $x \geq 0$ valna je funkcija jednaka $\psi(x) = \frac{2kA}{k+i\kappa}e^{-\kappa x}$, gdje su $k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} = 8,63\cdot 10^8\,m^{-1}$ i $\kappa = \sqrt{\frac{2m(V_0-E)}{\hbar^2}} = 8,4765\cdot 10^9\,m^{-1}$. Gustoća broja elektrona unutar stepenice jednaka je

$$|\psi(x)|^2 = \frac{4k^2}{k^2+\kappa^2}|A|^2 e^{-2\kappa x} = 4\frac{E}{V_0}|A|^2 e^{-2\kappa x}$$

Broj elektrona između $0 \leq x \leq d$ jednak je

$$\Delta N = \int_0^d |\psi(x)|^2\,dx = 2\frac{E}{\kappa V_0}|A|^2\left(1 - e^{-\kappa d}\right) = 6184$$

5. Harmonički oscilator u prvom pobuđenom stanju ima energiju $E_1 = 2\,eV$.

   a) Kolika je energija drugog pobuđenog stanja oscilatora?

   b) Kolika će biti frekvencija fotona što ga odašilje oscilator pri prijelazu iz drugog u prvo pobuđeno stanje?

c) Ako oscilator ima masu $m = 1,6 \cdot 10^{-26}\,kg$, kolika je elastična konstanta?

Rješenje:
a) Prvo pobuđeno stanje harmoničkoga oscilatora ima energiju $E_1 = \frac{3}{2}\hbar\omega = 2\,eV$. Iz toga podatka dobivamo $\hbar\omega = \frac{4}{3}\,eV$. Drugo pubuđeno stanje ima energiju $E_2 = \frac{5}{2}\hbar\omega = \frac{5}{2}\frac{4}{3} = \frac{10}{3}\,eV$.
b) Tražena frekvencija ν_{21} slijedi iz jednadžbe $h\nu_{21} = E_2 - E_1$, tj. $\nu_{21} = \frac{E_2 - E_1}{h} = \frac{\hbar\omega}{h} = \frac{4\,eV}{3h} = 3,2 \cdot 10^{14}\,Hz$
c) Elastična konstanta $k = m\omega^2 = m\left(\frac{4\,eV}{3\hbar}\right)^2 = 6,55 \cdot 10^6\,Nm^{-1}$.