2. kolokvij iz Moderne fizike, 16.1.2014 - rešitve

1. Prvi dve stanji ustrezati enačbi $-\hbar^2/(2m)\partial^2\psi/\partial x^2 = E\psi$ ter robnim pogojem $\psi(0) = \psi(a) = 0$. Rešitvi sta

$$\psi_1 = \sqrt{2/a}\sin\left(\frac{\pi x}{a}\right), \quad E_1 = \frac{\hbar^2\pi^2}{2a^2m} = 1.5 \text{ eV}, \tag{1}$$

$$\psi_2 = \sqrt{2/a}\sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right), \quad E_2 = \frac{4\hbar^2\pi^2}{2a^2m} = 6 \text{ eV}. \tag{2}$$

Elektron se najverjetneje nahaja tam, kjer je maksimum verjetnostne gostote, ta pa nastopi tam, kjer imamo ekstrem valovne funkcije. Za sin vemo, da doseže maksimum ob vrednosti argumenta $2\pi x/a = \pi/2$ ali $3\pi/2$. Torej pri $x = a/4$ in $x = 3a/4$.

2. Spekter harmoničnega oscilatorja z danima parametroma k in m je

$$E_n = \hbar\omega(n + 1/2), \qquad \omega = \sqrt{k/m}, \tag{3}$$

torej moramo osnovnemu stanju $n = 0$ dovesti $\hbar\sqrt{k/m} = 0.266$ eV energije, da ga vzbudimo v prvo vzbujeno stanje. Pričakovana vrednost $\langle x^2\rangle$ v osnovnem stanju

$$\psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}} \tag{4}$$

je

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}x\, x^2 \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/2} e^{-\frac{m\omega x^2}{\hbar}}. \tag{5}$$

Sedaj v priloženo formulo za določeni integral vstavimo $A = m\omega/\hbar$ in dobimo

$$\langle x^2\rangle = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/2} \frac{\sqrt{\pi}}{2\left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{3/2}} = \frac{\hbar}{2m\omega} = 1.15 \cdot 10^{-5} \text{ nm}^2. \tag{6}$$

3. Elektron ima torej glavno kvantno število $n = 3$ in tirno vrtilno količino $l = 2$. Zaradi magnetnih kvantnih števil imamo 10 degeneriranih stanj:

(m_l, m_s)	(m_l, m_s)
$(-2, 1/2)$	$(-2, -1/2)$
$(-1, 1/2)$	$(-1, -1/2)$
$(0, 1/2)$	$(0, -1/2)$
$(+1, 1/2)$	$(+1, -1/2)$
$(+2, 1/2)$	$(+2, -1/2)$

Stanja z nižjo energijo so

$$1s\, 2s\, 2p, \tag{7}$$

medtem ko sta stanji $3s$ in $3p$ degenerirani s $3d$. Ko nadalje upoštevamo izbirno pravilo za dipolno sevanje, $l - l' = \pm 1$, nam ostane odprt le prehod v stanje $2p$. Razlika energij med nivojema je

$$\Delta E = E_{3d} - E_{2p} = -W_R \left(\frac{1}{3^2} - \frac{1}{2^2} \right) = \frac{5}{36} W_R = 1.89 \text{ eV}\,, \tag{8}$$

in pripadajoča valovna dolžina fotona je

$$\lambda = \frac{c}{\nu} = \frac{hc}{\Delta E} = 655 \text{ nm}\,. \tag{9}$$

Skupna vrtilna količina lahko zavzame vrednosti $j = l \pm 1/2$, medtem ko $m_j = -j, -j+1, \ldots, j$. Vsa stanja so

(j, m_j)	(j, m_j)
$(5/2, -5/2)$	
$(5/2, -3/2)$	$(3/2, -3/2)$
$(5/2, -1/2)$	$(3/2, -1/2)$
$(5/2, +1/2)$	$(3/2, +1/2)$
$(5/2, +3/2)$	$(3/2, +3/2)$
$(5/2, +5/2)$	

4. Radialna verjetnostna gostota za elektron je

$$\rho(r) = r^2 \left| \mathcal{R}_{10}(r) \right|^2 \,, \tag{10}$$

in elektron se najverjetneje nahaja tam, kjer $\rho(r)$ doseže maksimum. Ker je $r\mathcal{R}_{10}(r)$ realna funkcija, lahko iščemo ekstreme te funkcije:

$$\frac{d(r\mathcal{R}_{10})}{dr} \sim \frac{d}{dr}(re^{-r/r_B}) = (1 - r/r_B)e^{-r/r_B} = 0\,. \tag{11}$$

Maksimum nastopi pri $r_0 = r_B$. Zadnji del naloge zahteva naslednji izračun integrala po $\rho(r)$:

$$P(r_B/2 < r < 2r_B) = \int_{r_B/2}^{2r_B} dr\, \frac{4r^2}{r_B^3} e^{-2r/r_B} \tag{12}$$

$$= \frac{1}{2} \int_1^4 du\, u^2 e^{-u}\,. \tag{13}$$

Upoštevamo, da je nedoločen integral

$$\int du\, u^2 e^{-u} = -e^{-u}(u^2 + 2u + 2)\,, \tag{14}$$

da dobimo rezultat

$$P(r_B/2 < r < 2r_B) = \frac{5e^3 - 26}{2e^4} = 0.682\,. \tag{15}$$