

Zadatak 1.

Izračunajte \vec{L}^2 i izrazite ga s pomoću operatora zaleta \vec{p} .

Rješenje:

Upotrijebit ćemo oblik vektorskog umnoška $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$ takav da vodimo računa o nekomutativnosti operatora položaja i zaleta. Pri tome ćemo iskoristiti simbol Levi-Civita ϵ_{ijk} , $i, j, k = 1, 2, 3$ koji ima sljedeća svojstva:

$$\begin{aligned}\epsilon_{ijk} &= 1 && \text{za parnu permutaciju od } 1, 2, 3 \\ \epsilon_{ijk} &= -1 && \text{za neparnu permutaciju od } 1, 2, 3 \\ \epsilon_{ijk} &= 0 && \text{ako su bilo koja dva indeksa ista}\end{aligned}$$

Naprimjer, $\epsilon_{213} = -1$ zato što smo polazeći od početnog poretku 123 do poretku 213 došli samo jednim premetanjem, naime samo smo međusobno zamijenili 1 i 2. Slično tomu $\epsilon_{231} = 1$ zato što su potrebna dva (ili općenito paran broj) premetanja da bismo od poretku 123 došli do poretku 231.

Još ćemo iskoristiti dogovor da u izrazu gdje se jedan indeks nalazi na dva mesta to znači zbrajanje po tom indeksu.

Naprimjer,

$$\epsilon_{ijk} a_k \equiv \sum_{k=1}^3 \epsilon_{ijk} a_k$$

(tzv. Einsteinova konvencija)

Uza sve ovo, operator zamaha \vec{L} (i općenito bilo koji vektorski umnožak) može se napisati kao

$$L_i = \epsilon_{ijk} x_j p_k$$

Nadalje imamo

$$\vec{L} = L_i \vec{L}_i = \epsilon_{ijk} x_j p_k \epsilon_{ilm} x_l p_m = \epsilon_{ijk} \epsilon_{ilm} x_j p_k x_l p_m$$

Sada ćemo iskoristiti sljedeće svojstvo simbola Levi-Civita:

$$\epsilon_{ijk} \epsilon_{ilm} = \delta_{jl} \delta_{km} - \delta_{jm} \delta_{kl}$$

Dobivamo

$$\begin{aligned} \vec{L}^2 &= x_j p_k x_j p_k - x_j p_k x_k p_j = \\ &= x_j (x_j p_k - (i\hbar) \delta_{jk}) p_k - x_j p_k (p_j x_k + (i\hbar) \delta_{jk}) = \\ &= \vec{r}^2 \vec{p}^2 - (i\hbar) \vec{r} \cdot \vec{p} - x_j p_j (x_k p_k - (i\hbar) \delta_{kk}) - (i\hbar) \vec{r} \cdot \vec{p} = \\ &= \vec{r}^2 \vec{p}^2 - (\vec{r} \cdot \vec{p})^2 + (i\hbar) \vec{r} \cdot \vec{p} \end{aligned}$$

Ovdje smo upotrijebili komutacijsko pravilo

$$p_i x_j - x_j p_i = -(i\hbar) \delta_{ij}$$

i jednakost $\delta_{kk} = 3$

Nadalje vrijedi

$$\vec{r} \cdot \vec{p} = -(i\hbar) r \frac{\partial}{\partial r}$$

tako da dobivamo konačni izraz

$$\begin{aligned} \vec{L}^2 &= -\hbar^2 r^2 \vec{\nabla}^2 + \hbar^2 r \frac{\partial}{\partial r} + \hbar^2 \left(r \frac{\partial}{\partial r} \right)^2 = \\ &= -\hbar^2 r^2 \vec{\nabla}^2 + \hbar^2 r^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) \end{aligned}$$

Time smo dokazali sljedeći identitet

$$\vec{\nabla}^2 = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\vec{L}^2}{\hbar^2 r^2}$$

Zadatak 2.

Napišite Schrödingerovu jednadžbu za česticu u sferno simetričnom potencijalnom polju.

Rješenje:

Rabeći prethodni rezultat, Schrödingerovu jednadžbu u polju $V(r)$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2 + V(r) \right] \psi(\vec{r}) = E \psi(\vec{r})$$

možemo napisati kao

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\vec{L}^2}{2mr^2} + V(r) \right] \psi(\vec{r}) = E \psi(\vec{r})$$

Budući da operator zamaha djeluje samo na kutne koordinate, valnu funkciju možemo prikazati u obliku umnoška

$$\psi(\vec{r}) = R(r) Y_l^m(\theta, \phi)$$

Tada radijalni dio valne funkcije, $R(r)$, zadovoljava jednadžbu:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} + V(r) \right] R(r) = E R(r)$$

Uvedemo li novu funkciju

$$u(r) = r R(r)$$

ova jednadžba dobiva konačni oblik

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} + V(r) \right] u(r) = E u(r)$$

Dobili smo jednodimenziju Schrödingerovu jednadžbu za česticu u potencijalu

$$V_{ef}(r) = V(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}$$

Dodatak potencijalu $V(r)$ je **centrifugalna barijera**.

Zadatak 3.

Rabeći svojstvo Paulijevih matrica

$$\begin{aligned}\sigma_i \sigma_j + \sigma_j \sigma_i &= 2 \delta_{ij} \\ \sigma_i \sigma_j - \sigma_j \sigma_i &= 2i \epsilon_{ijk} \sigma_k\end{aligned}$$

dokažite jednakost

$$(\vec{\sigma} \cdot \vec{a})(\vec{\sigma} \cdot \vec{b}) = \vec{a} \cdot \vec{b} + i \vec{\sigma} \cdot (\vec{a} \times \vec{b})$$

Zadatak 4.

Dokažite da su srednje vrijednosti vektora \vec{L} , \vec{r} , \vec{p} u stanju s valnom funkcijom

$$\psi(\vec{r}) = e^{\frac{i \vec{p}_0 \cdot \vec{r}}{\hbar}} \phi(\vec{r})$$

gdje je \vec{p}_0 obični realni vektor i $\phi(\vec{r})$ realna funkcija, povezani klasičnom jednadžbom

$$\langle \vec{L} \rangle = \langle \vec{r} \rangle \times \langle \vec{p} \rangle$$

KVANTNA KEMIJA 7. vježbe