KVANT KODUTÖÖ 6 TAAVI TAMMARU

①

operaatorid on defineeritud järgmiselt

$L_+ = L_x + iL_y \quad L_- = L_x - iL_y$

lahendame võrrandisüsteemi L_x ja L_y jaoks

ning saame

$$L_x = \frac{L_+ + L_-}{2} \qquad L_y = \frac{L_+ - L_-}{2i}$$

meile on täpselt ette öeldud

kuidas operaatorid $L_\pm$ mõjuvad

seisundile $|l, m\rangle$, kasutame seda teadmist

et arvutada operaatorite keskväärtused selles

seisundis.

L_x keskväärtus

$$\langle L_x \rangle = \langle l, m | L_x | l, m \rangle$$

asendame $L_x = \frac{L_+ + L_-}{2}$ antud võrrandisse

ja saame

$$\langle L_x \rangle = \frac{1}{2}\left(\langle l, m | L_+ | l, m \rangle + \langle l, m | L_- | l, m \rangle \right)$$

$$\langle L_x \rangle = \frac{1}{2}\left(\langle l, m | l, m+1 \rangle + \langle l, m | l, m-1 \rangle \right)$$

operaatorid $L_\pm$ viivad seisundid ortogonaalsete -sse seisunditesse, mis tähendab et nende siseкorrutis algse seisundiga annab väärtuse 0.

$$\langle L_x \rangle = 0$$

Samamoodi saame ka L_y keskväärtuse

$\langle L_y \rangle = \langle l, m | L_y | l, m \rangle$

asendame $L_y = \frac{L_+ - L_-}{2i}$ antud võrrandisse

ja saame

$$\langle L_y \rangle = \frac{1}{2i}\left(\langle l, m | L_+ | l, m \rangle - \langle l, m | L_- | l, m \rangle \right)$$

$$\langle L_y \rangle = \frac{1}{2i}\left(\langle l, m | l, m+1 \rangle - \langle l, m | l, m-1 \rangle \right)$$

ja samal põhjusel, mis eelmine kord saame, tekivad ortogonaalsed seisundid.

$$\langle L_y \rangle = 0$$

ehk keskväärtused L_x ja L_y jaoks seisundis $|l, m\rangle$ on 0

$$\langle L_x \rangle = 0 \quad \text{ja} \quad \langle L_y \rangle = 0$$

(2)

kasutame teadmist, et $L_y = \frac{1}{2i}(L_+ - L_-)$

asendame sellesse võrrandisse $L_\pm$

maatriksi kuju.

saame

$$L_y = \begin{bmatrix} 0 & -\frac{1}{2}i & 0 \\ \frac{1}{2}i & 0 & -\frac{1}{2}i \\ 0 & \frac{1}{2}i & 0 \end{bmatrix}$$

arvutame omaväärtused

$\det(L_y - \lambda I)$

$$\begin{vmatrix} -\lambda & -\frac{1}{2}i & 0 \\ \frac{1}{2}i & -\lambda & -\frac{1}{2}i \\ 0 & \frac{1}{2}i & -\lambda \end{vmatrix} = 0$$

kasutades arvutit saame $\lambda = \pm \frac{1}{\sqrt{2}}, 0$

et saada omavektorid lahendame $L_y \vec{v} = \lambda \vec{v}$

$$L_y - \frac{1}{\sqrt{2}} I = 0$$

$$\left(\begin{bmatrix} 0 & -\frac{1}{2}i & 0 \\ \frac{1}{2}i & 0 & -\frac{1}{2}i \\ 0 & \frac{1}{2}i & 0 \end{bmatrix} - \frac{1}{\sqrt{2}} I \right) v = 0$$

$$\begin{bmatrix} -\frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{2}i & 0 \\ \frac{1}{2}i & -\frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{2}i \\ 0 & \frac{1}{2}i & -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \\ v_3 \end{bmatrix} = 0$$

seega saame võrrandisüsteemi

$$-\frac{1}{\sqrt{2}} v_1 - \frac{1}{2} i v_2 = 0$$

$$\frac{1}{2} i v_1 - \frac{1}{\sqrt{2}} v_2 - \frac{1}{2} i v_3 = 0$$

$$\frac{1}{2} i v_2 - \frac{1}{\sqrt{2}} v_3 = 0$$

mille lahenditeks on

$$\bar{v}_1 = \begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \\ v_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -1/2 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} i \\ 1/2 \end{bmatrix} \qquad \text{kui } \lambda = -\frac{1}{\sqrt{2}}$$

teised teeme analoogiliselt, aga arvuti abiga et säästa arvutamise vaeva, ning saame

$$\bar{v}_2 = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 \\ 1/\sqrt{2} \end{bmatrix} \qquad \text{kui } \lambda = 0$$

$$\bar{v}_3 = \begin{bmatrix} 1/2 \\ 1/\sqrt{2}\, i \\ -1/2 \end{bmatrix} \qquad \text{kui } \lambda = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

3

ringi omaväärtuse tõenäosus on

$$p(\lambda) = |\langle \vec{v}_\lambda | \psi \rangle|^2$$

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{13}}\begin{bmatrix}2\\0\\3\end{bmatrix}$$

$$P\left(-\tfrac{1}{\sqrt{2}}\right) = |\langle v_1|\psi\rangle|^2$$

$$= \left|\left[-1/2\ ,\ -\tfrac{1}{\sqrt{2}}i\ ,\ 1/2\right]\frac{1}{\sqrt{13}}\begin{bmatrix}2\\0\\3\end{bmatrix}\right|^2$$

$$= \left|\frac{1}{\sqrt{13}}(-1 + 1{,}5)\right|^2$$

$$= \frac{1}{52}$$

$$P\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right) = |\langle v_3|\psi\rangle|^2$$

$$= \left|\left[1/2\ ,\ -\tfrac{1}{\sqrt{2}}i\ ,\ -1/2\right]\frac{1}{\sqrt{13}}\begin{bmatrix}2\\0\\3\end{bmatrix}\right|^2$$

$$= \left|\frac{1}{\sqrt{13}}(1 - 1{,}5)\right|^2$$

$$= \frac{1}{52}$$

$$P(0) = |\langle \varphi_2 | \psi \rangle|^2$$

$$= \left| \left[\frac{1}{\sqrt{2}} , 0 , \frac{1}{\sqrt{2}} \right] \frac{1}{\sqrt{13}} \begin{bmatrix} 2 \\ 0 \\ 3 \end{bmatrix} \right|^2$$

$$= \left| \frac{1}{\sqrt{13}} \left(\sqrt{2} + \frac{3}{\sqrt{2}} \right) \right|^2$$

$$= \frac{25}{26}$$

4

kasutame "Kramers recursion rule"
mis võimaldab meil rasketest
integraalidest pääseda.

$$\langle r \rangle = \frac{a_0}{2Z} \left(3n^2 - \ell(\ell+1) \right)$$

2s jaoks saame

$$\langle r \rangle_{2s} = \frac{a_0}{2} \left(3(2)^2 - 0(0+1) \right) = \frac{a_0}{2} \cdot 12 = 6 a_0$$

2p jaoks saame

$$\langle r \rangle_{2p} = \frac{a_0}{2}\left(3(2)^2 - 1(1+1)\right)$$

$$= \frac{a_0}{2}(12-2) = 5a_0$$

2s orbitaali puhul on elektron kaugemal.

5

leiame keskmise kineetilise energia kasutades viriaal teoreemi

$$\langle T \rangle = -\frac{E}{2}$$

põhioleku koguenergia on

$$E = -\frac{Z^2 e^2}{2a_0} \Rightarrow E = -\frac{e^2}{2a_0}$$

asendame esimesse võrrandisse selle energia ja saame

$$\langle T \rangle = \frac{e^2}{4a_0}$$