

Mechanika kwantowa, zestaw 1

Układy skończenie wymiarowe

1. Rozważmy prosty model zachowania się dwóch elektronów typu π , tworzących podwójne wiązanie w cząsteczce formaldehydu $H_2 - C = O$. W oparciu o fakt, że tlen jest bardziej elektroujemny od węgla uzasadnij hamiltonian opisujący elektron w postaci

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} E_C & -A \\ -A & E_O \end{pmatrix}, \quad E_O < E_C$$

gdzie E_C, E_O to energie elektronu zlokalizowanego w pobliżu atomów węgla, tlenu. Zdefiniujmy $B = (E_C - E_O)/2$ oraz kąt θ przez równania $B = \sqrt{A^2 + B^2} \cos \theta, A = \sqrt{A^2 + B^2} \sin \theta$. Oblicz prawdopodobieństwo znalezienia elektronu typu π zlokalizowanego na atomie węgla lub tlenu, jako funkcję kąta θ . (M. Le Bellac, Quantum physics).

2. Cząsteczka składa się z trzech jednakowych atomów leżących w wierzchołkach trójkąta równobocznego. Ujemny jon takiej cząsteczki zawiera dodatkowy elektron, który może przeskakiwać z każdego z trzech atomów na dowolny inny.

(a) Przyjmując, że element macierzowy hamiltonianu dla takich przeskoków wynosi $-A$, oblicz odległości pomiędzy poziomami energetycznymi jonu.

(b) Jon umieszczono w zewnętrznym polu elektrycznym, którego kierunek leży w płaszczyźnie i jest prostopadły do jednego z boków. Jak zmieni się odległość między poziomami energetycznymi jonu, jeżeli natężenie pola jest takie, że energia potencjalna elektronu w „wierzchołku” trójkąta jest wyższa niż w pozostałych wierzchołkach o $\epsilon A = 0.01A$.

(R. P. Feynman, Wykłady z fizyki)

3. W cząsteczce metanu cztery atomy wodoru znajdują się w wierzchołkach czworościanu, w którego środku znajduje się pojedynczy atom węgla. W jonie metanu w jednym z czterech wiązań brakuje elektronu. Zamiast niego mamy dziurę, która może „przeskakiwać” z jednego wiązania na drugie. Jest to przykład układu o czterech stanach. Korzystając z własności symetrii sprowadź liczbę różnych elementów macierzowych hamiltonianu do minimum i wyznacz liczbę różnych poziomów energetycznych związanych ze strukturą elektronową jonu metanu. Pomiń oddziaływania wibracyjne i rotacyjne atomów. Odległość między poziomami wyraż za pomocą jak najmniejszej liczby elementów macierzowych.

(R. P. Feynman, Wykłady z fizyki)