1. Pri sipanju elektronov na potencialni plasti opazimo prvi maksimum prepustnosti ($T = 1$) pri energiji elektronov $E_1 = 2.5$ meV, naslednjega pa pri $E_2 = 4.0$ meV. Kolikšni sta višina in širina plasti?

   Rešitev: Z V_0 in a označimo višino in širino potencialne plasti, z E pa energijo elektrona. Za $0 < E < V_0$ prepustnost narašča z E, zato se omejino na energije $E \geq V_0$, kjer velja

$$T = \frac{1}{1 + \frac{1}{4}\left(\frac{k'}{k} - \frac{k}{k'}\right)^2 \sin^2 k'a}$$

   in sta $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$ in $k' = \frac{\sqrt{2m(E-V_0)}}{\hbar}$. Pri $k'a = 0$ ($E = V_0$) je $T = \frac{1}{1+(ka)^2/4} < 1$, prvi in drugi maksimum v T pa najdemo pri

$$\begin{aligned} k_1'a &= \pi \Rightarrow E_1 = \frac{1}{2m}\left(\frac{\pi\hbar}{a}\right)^2 + V_0, \\ k_2'a &= 2\pi \Rightarrow E_2 = \frac{1}{2m}\left(\frac{2\pi\hbar}{a}\right)^2 + V_0. \end{aligned}$$

   Od tod sledi

$$\begin{aligned} V_0 &= \frac{4E_1 - E_2}{3} = 2.0 \text{ meV}, \\ a &= \frac{\pi\hbar}{\sqrt{2m(E_1 - V_0)}} = 27 \text{ nm}. \end{aligned}$$

2. Molekula H_2 se nahaja v stanju

$$\psi = C\left(Y_{1,0} + \sqrt{2}\,Y_{2,-1}\right).$$

Kolikšni sta povprečna vrednost komponente z vrtilne količine in rotacijska energija te molekule, če je povprečna medatomska razdalja $r_0 = 0.074$ nm?

Rešitev: Valovno funkcijo ustrezno normiramo,

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{3}}\left(Y_{1,0} + \sqrt{2}\,Y_{2,-1}\right),$$

in dobimo

$$\langle l_z \rangle = \int \psi^* \hat{l}_z \psi \mathrm{d}\Omega = \frac{2}{3}(-\hbar)\int |Y_{2,-1}|^2 \mathrm{d}\Omega = -\frac{2}{3}\hbar.$$

Rotacijska energija molekule je

$$\begin{aligned}
E_{\mathrm{rot}} &= \frac{\langle l^2 \rangle}{2J} = \frac{\hbar^2}{2m_r r_0^2}\int \psi^* \hat{l}^2 \psi \mathrm{d}\Omega \\
&= \frac{\hbar^2}{2m_r r_0^2}\frac{1}{3}\int \left(Y_{10}^* + \sqrt{2}Y_{2,-1}^*\right)\left(2Y_{10} + \sqrt{2}\times 2\times 3Y_{2,-1}\right)\mathrm{d}\Omega \\
&= \frac{7}{3}\frac{\hbar^2}{m_r r_0^2} = \frac{14}{3}\frac{(\hbar c)^2}{m_p c^2 r_0^2} = 35 \text{ meV},
\end{aligned}$$

kjer je reducirana masa H_2 molekule $m_r = \frac{m_H^2}{2m_H} \simeq \frac{m_p}{2}$.

3. Atom vodika se nahaja v stanju ψ_{n,l,j,m_j} s kvantnimi števili $n = 2$, $l = 1$, $j = 3/2$, $m_j = 3/2$ ter z dipolnim sevalnim prehodom preide v $\psi_{2,0,1/2,1/2}$. Kolikšen je energijski razcep med tema stanjema zaradi ls sklopitve $\Delta E_{ls} = \lambda \left\langle \hat{\mathbf{l}} \cdot \hat{\mathbf{s}} \right\rangle$, če je $\lambda\hbar^2 = 3 \times 10^{-5}$ eV? Katere komponente matričnega elementa dipolnega operatorja so različne od 0? Izračunaj razpadni čas za eno izmed teh, če sta

$$\psi_{2,1,3/2,3/2} = \frac{1}{8\sqrt{\pi r_{\mathrm{B}}^3}} \frac{r}{r_{\mathrm{B}}} \mathrm{e}^{-\frac{r}{2r_{\mathrm{B}}}} \sin\theta \, \mathrm{e}^{i\phi}, \quad \psi_{2,0,1/2,1/2} = \frac{1}{\sqrt{8\pi r_{\mathrm{B}}^3}} \left(1 - \frac{r}{2r_{\mathrm{B}}}\right) \mathrm{e}^{-\frac{r}{2r_{\mathrm{B}}}}.$$

Rešitev: Popravek energije zaradi ls sklopitve je

$$\begin{aligned} E_{2,1,3/2,3/2} &= E_2 + \frac{\lambda\hbar^2}{2} \left(j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)\right) = E_2 + \frac{\lambda\hbar^2}{2}, \\ E_{2,0,1/2,1/2} &= E_2 + 0, \end{aligned}$$

torej je

$$E_{12} = \frac{\lambda\hbar^2}{2} = 1.5 \times 10^{-5} \text{ eV}.$$

Matrični elementi dipolnega prehoda so

$$\begin{aligned} \langle p_{x,y,z} \rangle &= e \int \psi^*_{2,0,1/2,1/2} \, r_i \, \psi_{2,1,3/2,3/2} \, \mathrm{d}V \\ &= e \int \psi^*_{2,0,1/2,1/2} \left(r \sin\theta \cos\phi, r \sin\theta \sin\phi, r\cos\theta\right) \psi_{2,1,3/2,3/2} r^2 \, \mathrm{d}r \, \mathrm{d}(\cos\theta) \, \mathrm{d}\phi \end{aligned}$$

Zaradi integracije po ϕ je z komponenta enaka 0, medtem ko je $-ip_y = p_x$, kjer je

$$\begin{aligned} p_x &= \frac{e \, r_B^3}{16\sqrt{2}\pi r_{\mathrm{B}}^3} \int \left(\frac{r}{r_{\mathrm{B}}}\right)^4 \mathrm{e}^{-\frac{r}{2r_{\mathrm{B}}}} \sin\theta^2 \cos\phi \, \mathrm{e}^{i\phi} \left(1 - \frac{1}{2}\frac{r}{r_{\mathrm{B}}}\right) \mathrm{e}^{-\frac{r}{2r_{\mathrm{B}}}} \mathrm{d}V \\ &= \frac{e \, r_B}{16\sqrt{2}} \int_{-1}^{1} \left(1 - \cos\theta^2\right) \mathrm{d}(\cos\theta) \int_0^\infty \left(\frac{r}{r_B}\right)^4 \left(1 - \frac{1}{2}\frac{r}{r_{\mathrm{B}}}\right) e^{-\frac{r}{r_B}} \frac{\mathrm{d}\, r}{r_B} \\ &= \frac{e \, r_B}{16\sqrt{2}} \, \frac{4}{3} \left(\Gamma(5) - \frac{1}{2}\Gamma(6)\right) \\ &= -e r_B \, \frac{3}{\sqrt{2}}. \end{aligned}$$

Razpadni čas za prehod v x smeri je tako

$$\tau_x = \tau_y = \frac{3}{4\,\alpha} \frac{\hbar c}{c} \frac{1}{E_{12}^3} \left| \frac{\hbar c \, e}{p_x} \right|^2 = 6 \times 10^7 \text{ s} \sim 2 \text{ yrs}.$$

4. Stanje elektrona v harmonskem potencialu je ob nekem trenutku podano z linearno kombinacijo lastnih stanj

$$\psi(x, t=0) = A\left(\frac{1}{2}\psi_0 + \frac{i}{3}\psi_1 + \frac{1}{5}\psi_2\right),$$

kjer je A normalizacijska konstanta. Kolikšna je polna energija ob poljubnem času in kolikšen je minimalni prispevek potencialne energije k tej energiji, če je $\omega = 30$ THz? *Namig*: Za lastne funkcije harmonskega oscilatorja velja

$$x\,\psi_n = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left(\sqrt{n+1}\,\psi_{n+1} + \sqrt{n}\,\psi_{n-1}\right).$$

Rešitev: Iz pogoja $\langle\psi|\psi\rangle = 1$ določimo $A = \frac{30}{19}$. Polna energija elektrona je potem

$$E = A^2\left(\frac{1}{4}\frac{\hbar\omega}{2} + \frac{1}{9}\frac{3\hbar\omega}{2} + \frac{1}{25}\frac{5\hbar\omega}{2}\right) = \frac{705}{722}\hbar\omega = 19 \text{ meV}.$$

Za izračun potencialne energije $V = \frac{1}{2}m\omega^2\langle x^2\rangle$ najprej $x^2\psi_n$ izrazimo z lastnimi funkcijami,

$$x^2\psi_n = \frac{\hbar}{2m\omega}\left(\sqrt{(n+1)(n+2)}\,\psi_{n+2} + (2n+1)\psi_n + \sqrt{n(n-1)}\,\psi_{n-2}\right).$$

Ob upoštevanju $\psi_n(t) = \psi_n \mathrm{e}^{-\left(n+\frac{1}{2}\right)\omega t}$ sledi

$$V(t) = A^2\frac{\hbar\omega}{4}\int_{x=-\infty}^{\infty}\mathrm{d}x\left(\frac{1}{2}\psi_0\mathrm{e}^{\frac{\omega t}{2}} - \frac{i}{3}\psi_1\mathrm{e}^{\frac{3\omega t}{2}} + \frac{1}{5}\psi_2\mathrm{e}^{\frac{5\omega t}{2}}\right)$$
$$\cdot\left(\frac{1}{2}\left(\sqrt{2}\psi_2 + \psi_0\right)\mathrm{e}^{-\frac{\omega t}{2}} + \frac{i}{3}\left(\sqrt{6}\psi_3 + 3\psi_1\right)\mathrm{e}^{-\frac{3\omega t}{2}} + \frac{1}{5}\left(\sqrt{12}\psi_4 + 5\psi_2 + \sqrt{2}\psi_0\right)\mathrm{e}^{\frac{-5\omega t}{2}}\right)$$
$$= \frac{E}{2}\left(1 + \frac{12\sqrt{2}}{47}\cos 2\omega t\right),$$

oziroma $V_{min} = \frac{E}{2}\left(1 - \frac{12\sqrt{2}}{47}\right) = 6.1$ meV.