1. Stanje kvantnomehanskega rotatorja popisuje valovna funkcija

$$\psi(\theta,\varphi) = C\left[\sin\theta\,(\cos\varphi + i\sin\varphi) + 2\sin^2\theta\sin 2\varphi\right].$$

Kolikšna je $\langle l_z \rangle$ v tem stanju? Kolikšne pa so vrednosti, ki nam jih lahko da posamezna meritev? S kolikšno verjetnostjo bomo izmerili posamezno vrednost?
Namig: Nekaj preprostejših lastnih funkcij kvantnomehanskega rotatorja je oblike:

$$Y_{0,0} = \sqrt{\frac{1}{4\pi}}, \qquad Y_{1,0} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta, \qquad Y_{1,\pm1} = \mp\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta \mathrm{e}^{\pm i\varphi},$$
$$Y_{2,0} = \sqrt{\frac{5}{16\pi}}\left(3\cos^2\theta - 1\right), \quad Y_{2,\pm1} = \mp\sqrt{\frac{15}{8\pi}}\sin\theta\cos\theta \mathrm{e}^{\pm i\varphi}, \quad Y_{2,\pm2} = \sqrt{\frac{15}{32\pi}}\sin^2\theta \mathrm{e}^{\pm 2i\varphi}.$$

Rešitev: Funkcijo $\psi(\theta,\varphi)$ najprej razvijemo po lastnih funkcijah,

$$\begin{aligned}\psi(\theta,\varphi) &= C\left[\sin\theta \mathrm{e}^{i\varphi} + 2\sin^2\theta\frac{\mathrm{e}^{2i\varphi} - \mathrm{e}^{-2i\varphi}}{2i}\right] \\ &= C\left[-\sqrt{\frac{8\pi}{3}}Y_{1,1} - i\sqrt{\frac{32\pi}{15}}\left(Y_{2,2} - Y_{2,-2}\right)\right] \\ &= D\left[Y_{1,1} + \frac{2i}{\sqrt{5}}\left(Y_{2,2} - Y_{2,-2}\right)\right].\end{aligned}$$

Iz pogoja normalizacije $\langle\psi|\psi\rangle = 1 = 13|D|^2/5$ določimo $D = \sqrt{5/13}$. Potem sledi

$$\langle l_z \rangle = |D|^2\left[\hbar + \frac{4}{5}\left(2\hbar - 2\hbar\right)\right] = \frac{5}{13}\hbar.$$

Ker so v funkciji ψ zastopane le lastne funkcije $Y_{1,1}$, $Y_{2,2}$ in $Y_{2,-2}$ operatorja l_z, nam posamezna meritev lahko da le naslednje vrednosti l_z s pripadajočimi verjetnostmi p:

$$\begin{aligned} l_z &= \hbar, & p &= |D|^2 = \frac{5}{13}, \\ l_z &= 2\hbar, & p &= \frac{4}{5}|D|^2 = \frac{4}{13}, \\ l_z &= -2\hbar, & p &= \frac{4}{5}|D|^2 = \frac{4}{13}. \end{aligned}$$

2. Atom vodika je ob času $t = 0$ v stanju

$$\psi = c_1\,\psi_{210} + c_2\,\psi_{211} + c_3\,\psi_{310},$$

za katero je $\langle l_z \rangle = \hbar/4$ in $\langle E \rangle = W_0/5$, kjer je W_0 energija osnovnega stanja. Kolikšna je njegova povprečna potencialna energija ob času

$$t = \frac{18\pi}{5}\frac{\hbar}{|W_0|}?$$

Namig: Upoštevaj $\langle n|1/r|n\rangle = 1/\left(r_{\mathrm{B}} n^2\right)$.

Rešitev: Iz normalizacije, $\langle l_z \rangle = \hbar/4$ in $\langle E \rangle = E_{\mathrm{Ry}}/5$ dobimo:

$$c_1^2 + c_2^2 + c_3^2 = 1, \qquad c_2^2 = \frac{1}{4}, \qquad \left(1 - c_3^2\right)\frac{E_{\mathrm{Ry}}}{4} + c_3^2\frac{E_{\mathrm{Ry}}}{9} = \frac{E_{\mathrm{Ry}}}{5},$$
$$c_1 = \frac{\sqrt{39}}{10}, \qquad c_2 = \frac{1}{2}, \qquad c_3 = \frac{3}{5}.$$

Za povprečno vrednost potencialne energije potrebujemo časovni razvoj

$$\psi(t) = e^{-iE_{\mathrm{Ry}}t/4\hbar}\left(c_1\psi_{210} + c_2\psi_{211}\right) + e^{-iE_{\mathrm{Ry}}t/9\hbar}c_3\psi_{310}.$$

Zaradi ortogonalnosti kotnega dela v splošnem dobimo samo štiri neničelne prispevke

$$\left\langle \frac{1}{r} \right\rangle = \left(c_1^2 + c_2^2\right)\left\langle \psi_{210} \left| \frac{1}{r} \right| \psi_{210} \right\rangle + c_3^2 \left\langle \psi_{310} \left| \frac{1}{r} \right| \psi_{310} \right\rangle + 2\cos\left[\left(\frac{1}{9} - \frac{1}{4}\right)\frac{E_{\mathrm{Ry}}}{\hbar\, t}\right] \times$$
$$c_2 c_3 \left\langle \psi_{210} \left| \frac{1}{r} \right| \psi_{310} \right\rangle = \left(c_1^2 + c_2^2\right)\frac{1}{4r_B} + c_3^2\frac{1}{9r_B} = \frac{1}{5r_B}.$$

Za izbrani čas $t = \frac{18\pi}{5}\frac{\hbar}{E_{\mathrm{Ry}}}$ mešani člen izgine in je

$$\left\langle V\left(t = \frac{18\pi}{5}\frac{\hbar}{E_{\mathrm{Ry}}}\right)\right\rangle = -\frac{\alpha\hbar c}{5r_B} = \frac{2}{5}W_0 = -5.4 \text{ eV}.$$

3. Elektron s kinetično energijo E sipamo na dveh zaporednih stopnicah višin $V_1 = -3E$ in $V_2 = -8E$, ki sta med sabo oddaljeni za

$$a = \frac{\pi}{4} \frac{\hbar c}{\sqrt{8\, E\, m_e c^2}}.$$

Kolikšna je prepustnost tega sistema?

Rešitev: Označimo valovne funkcije na posameznih področjih potenciala z

$$\psi_1 = A\mathrm{e}^{ik_1 a} + B\mathrm{e}^{-ik_1 a}, \qquad \psi_2 = C\mathrm{e}^{ik_2 a} + D\mathrm{e}^{-ik_2 a}, \qquad \psi_3 = E\mathrm{e}^{ik_3 a},$$

kjer so

$$k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}, \qquad k_2 = \frac{\sqrt{2m(E - V_1)}}{\hbar}, \qquad k_3 = \frac{\sqrt{2m(E - V_2)}}{\hbar}.$$

Robni pogoji pri $x = 0$ in $x = a$ dajo

$$A + B = C + D, \qquad A - B = \frac{k_2}{k_1}(C - D), \tag{1}$$

$$C\mathrm{e}^{i\pi/4} + D\mathrm{e}^{-i\pi/4} = E\mathrm{e}^{ik_3 a}, \qquad C\mathrm{e}^{i\pi/4} - D\mathrm{e}^{-i\pi/4} = \frac{k_3}{k_2} E\mathrm{e}^{ik_3 a}, \tag{2}$$

kjer smo upoštevali $k_2 a = \pi/4$. Iz enačb (1) in (2) sledi

$$\begin{aligned} 2A &= \left(1 + \frac{k_2}{k_1}\right) C + \left(1 - \frac{k_2}{k_1}\right) D, \\ 2C &= \left(1 + \frac{k_3}{k_2}\right) E\mathrm{e}^{i(k_3 a - \pi/4)}, \\ 2D &= \left(1 - \frac{k_3}{k_2}\right) E\mathrm{e}^{i(k_3 a + \pi/4)}, \end{aligned}$$

oziroma zveza med A in E

$$4A = E\mathrm{e}^{i(k_3 a - \pi/4)} \left[\left(1 + \frac{k_2}{k_1}\right)\left(1 + \frac{k_3}{k_2}\right) + i\left(1 - \frac{k_2}{k_1}\right)\left(1 - \frac{k_3}{k_2}\right)\right],$$

ki nastopa v končnem izrazu za prepustnost

$$T = \frac{k_3}{k_1}\frac{|E|^2}{|A|^2} = \frac{k_3}{k_1} \frac{16}{\left(1 + \frac{k_2}{k_1}\right)^2 \left(1 + \frac{k_3}{k_2}\right)^2 + \left(1 - \frac{k_2}{k_1}\right)^2 \left(1 - \frac{k_3}{k_2}\right)^2} = \frac{96}{113} \simeq 0{,}85.$$

Tri tem smo upoštevali $\left|\mathrm{e}^{i(k_3 a - \pi/4)}\right| = 1$ ter

$$\frac{k_2}{k_1} = \sqrt{\frac{E - V_1}{E}} = 2, \qquad \frac{k_3}{k_2} = \sqrt{\frac{E - V_2}{E - V_1}} = \frac{3}{2}, \qquad \frac{k_3}{k_1} = \sqrt{\frac{E - V_2}{E}} = 3.$$

4. Med dvema elektronoma s spinom 1/2 deluje izmenjalna interakcija, ki jo popisuje hamiltonka

$$\mathcal{H}_{\text{ex}} = \frac{J}{\hbar^2}\vec{s}_1 \cdot \vec{s}_2.$$

Izračunaj degeneracijo posameznih energijskih nivojev in razcep med njimi.

Rešitev: Naj bo $\vec{S} = \vec{s}_1 + \vec{s}_2$. Dva spina 1/2 se lahko vektorsko seštejeta bodisi v skupni spin 0 ali 1. Prvo stanje je singlet, torej nedegenerirano, drugo pa triplet, torej 3-krat degenerirano. Upoštevamo, da je

$$\vec{s}_1 \cdot \vec{s}_2 = \frac{1}{2}\left(S^2 - s_1^2 - s_2^2\right),$$

torej

$$\begin{aligned}\langle \vec{s}_1 \cdot \vec{s}_2 \rangle &= \frac{\hbar^2}{2}\left[S(S+1) - s_1(s_1+1) - s_2(s_2+1]\right) \\ &= \hbar^2 \begin{cases} +\frac{1}{4} & ; \quad S = 1, \\ -\frac{3}{4} & ; \quad S = 0. \end{cases}\end{aligned}$$

Energija tripletnega stanja je torej $E_t = \frac{J}{4}$, singletnega pa $E_s = -\frac{3J}{4}$, kar da razcep $\Delta E = J$.