

Chemia kwantowa B – zadania domowe

Zestaw 4.

Zadanie 1. Cząstka o energii kinetycznej $E > V_0$ napotyka schodek potencjału o wysokości V_0 . Przyjmując

$$V(x) = \begin{cases} V_0, & x \geq 0 \\ 0, & x < 0 \end{cases}, \quad (1.1)$$

obliczyć prawdopodobieństwo przejścia oraz odbicia cząstki.

Zadanie 2. Molekule dwuatomową można w przybliżeniu traktować jako oscylator harmoniczny. Przejście między dwoma poziomami oscylacyjnymi $|m\rangle$ i $|n\rangle$ jest dozwolone, jeśli dipolowy moment przejścia między tymi poziomami, μ_{mn} , jest niezerowy. Wielkość ta wyraża się wzorem

$$\mu_{mn} = e \langle n|x|m\rangle. \quad (2.1)$$

Wyprowadzić reguły wyboru dla przejść oscylacyjnych (warunki, jakie muszą spełniać m i n , aby $\mu_{mn} \neq 0$).
Wskazówka: Skorzystać z formalizmu drugiej kwantyzacji.

Zadanie 3. Sprawdzić, dla oscylatora harmonicznego, czy spełniona jest zasada nieoznaczoności Heisenberga dla położenia i pędu.