ΣΕΜΦΕ, Κβαντομηχανική II
Διαγώνισμα 28/2/2005

Θέμα I $\qquad \frac{\partial \rho}{\partial t} = -\vec{\nabla}\cdot\vec{J}$

$\rho = \psi^*(\vec{r},t)\,\psi(\vec{r},t)$ πυκνότητα πιθανότητας

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + V(\vec{r},t)\,\psi$$

υποθέτουμε ότι $V(\vec{r},t)$ = πραγματική συνάρτηση

$$\Rightarrow\ -i\hbar \frac{\partial \psi^*}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi^* + V\psi^*$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \psi^*\frac{\partial \psi}{\partial t} + \psi\frac{\partial \psi^*}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar}\psi^*\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + V\psi\right)$$

$$+\frac{1}{-i\hbar}\psi\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi^* + V\psi^*\right) =$$

$$= \frac{i\hbar}{2m}\left[\psi^*\nabla^2\psi - \psi\nabla^2\psi^*\right]$$

έχουμε τη διανυσματική ταυτότητα:

$$\vec{\nabla}(\psi^*\vec{\nabla}\psi) = \vec{\nabla}\psi^*\,\vec{\nabla}\psi + \psi^*\nabla^2\psi$$

$$\Rightarrow \begin{cases} \psi^*\nabla^2\psi = \vec{\nabla}(\psi^*\vec{\nabla}\psi) - \vec{\nabla}\psi^*\vec{\nabla}\psi \\ \psi\nabla^2\psi^* = \vec{\nabla}(\psi\vec{\nabla}\psi^*) - \vec{\nabla}\psi\,\vec{\nabla}\psi^* \end{cases}$$

$$\Rightarrow \psi^* \nabla^2 \psi - \psi \nabla^2 \psi^* = \vec{\nabla}(\psi^* \vec{\nabla}\psi) - \vec{\nabla}(\psi \vec{\nabla}\psi^*) =$$

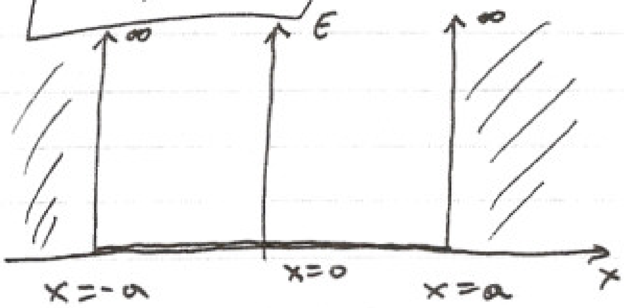
$$= \vec{\nabla}\left[\psi^* \vec{\nabla}\psi - \psi \vec{\nabla}\psi^* \right]$$

$$\Rightarrow \frac{\partial P}{\partial t} = \frac{i\hbar}{2m} \vec{\nabla}(\psi^* \vec{\nabla}\psi - \psi \vec{\nabla}\psi^*)$$

ορίζουμε το ρεύμα $\vec{J} = \frac{-i\hbar}{2m}(\psi^* \vec{\nabla}\psi - \psi \vec{\nabla}\psi^*)$

$$\Rightarrow \frac{\partial P}{\partial t} = -\vec{\nabla}\cdot\vec{J}$$

$\boxed{\text{Θέμα II}}$



α) Ιδιοσυναρτήσεις και ενεργειακές ιδιοτιμές.

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} + V(x)\psi = E\psi$$

$$-a < x < a \quad , \quad V(x) = 0$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi \Rightarrow \frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2}\psi \, , \quad \frac{d^2\psi}{dx^2} = -k^2\psi$$

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} > 0 \Rightarrow \psi(x) = e^{\pm ikx}$$

$$\psi(x) = \tilde{A}\, e^{ikx} + \tilde{B}\, e^{-ikx}$$

<u>οριακές συνθήκες</u> $\psi(x=-a) = 0$ και $\psi(x=a) = 0$

$$\psi(x=-a) = 0 \Rightarrow \tilde{A}\, e^{-ika} + \tilde{B}\, e^{ika} = 0 \Rightarrow \tilde{B} = -\tilde{A}\, e^{-2ika}$$

$$\Rightarrow \psi(x) = \tilde{A}\, e^{ikx} - \tilde{A}\, e^{-2ika} e^{-ikx} = \tilde{A}\, e^{-ika}\left(e^{ika}e^{ikx} - e^{-ika}e^{-ikx}\right)$$

$$= \tilde{A}\, e^{-ika}\left(e^{ik(x+a)} - e^{-ik(x+a)}\right)$$

$$\Rightarrow \psi(x) = A\sin(k(x+a))$$

$$\psi(x=a)=0 \Rightarrow \sin 2ka = 0 \Rightarrow 2ka = n\pi$$

$$\Rightarrow k = \frac{\pi}{2a}n \quad \text{με} \quad n = 1, 2, 3, \ldots$$

Θεμελιώδης στάθμη $(n=1)$ $\quad k_1 = \frac{\pi}{2a}$

$$\psi_1(x) = A\sin(k_1(x+a)) = A\sin\left(k_1 x + \frac{\pi}{2}\right) = A\cos\left(\frac{\pi x}{2a}\right)$$

Κανονικοποίηση $\quad \int_{-a}^{a} A^2 \cos^2\left(\frac{\pi x}{2a}\right)dx = 1 \Rightarrow A = \frac{1}{\sqrt{a}}$

$$\Rightarrow \psi_1(x) = \frac{1}{\sqrt{a}}\cos\left(\frac{\pi x}{2a}\right), \quad E_1 = \frac{\hbar^2}{2m}k_1^2 = \frac{\hbar^2\pi^2}{8ma^2}$$

Πρώτη διεγερμένη $(n=2)$ $\quad k_2 = \frac{2\pi}{2a} = \frac{\pi}{a}$

$$\psi_2(x) = A\sin(k_2(x+a)) = A\sin\left(\frac{\pi x}{a} + \pi\right) = -A\sin\left(\frac{\pi x}{a}\right)$$

Κανονικοποίηση $A = \frac{1}{\sqrt{a}}$, το πρόσημο (-1) δεν παίζει ρόλο.

$$\psi_2(x) = \frac{1}{\sqrt{a}}\sin\left(\frac{\pi x}{a}\right), \quad E_2 = \frac{\hbar^2}{2m}k_2^2 = \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}$$

Επειδή η αλληλεπίδραση (δυναμικό $V(x)$) είναι άρτια συνάρτηση χωρίζουμε τις λύσεις της Χαμιλτονιανής σε άρτιες συναρτήσεις και σε περιττές

$$\left\{\begin{array}{l} \psi_{\text{αρτ}}(x) = A\cos kx \\ \psi_{\text{περ.}}(x) = B\sin \lambda x \end{array}\right\}$$

και βρίσκουμε τα $k = \frac{\pi}{2a}n$ με $n =$ περιττός.
και τα $\lambda = \frac{\pi}{a}\ell = \frac{\pi}{2a}n$ με $n =$ άρτιος.

β) Μια διαταραχή $V(x) = \varepsilon \frac{|x|}{a}$ προστίθεται στο σύστημα. Υπολογίστε την μεταβολή στην ενέργεια της θεμελιώδους στάθμης.

$$E_n^{(1)} = \langle n | V | n \rangle = \Delta E_n$$

$$\Delta E_1 = \int_{-a}^{a} \psi_1^*(x)\, V(x)\, \psi_1(x)\, dx = \frac{\varepsilon}{a^2} \int_{-a}^{a} |x| \cos^2\left(\frac{\pi x}{2a}\right) dx$$

$$= \frac{\varepsilon}{a^2}\left[- \int_{-a}^{0} x \cos^2\left(\frac{\pi x}{2a}\right) dx + \int_{0}^{a} x \cos^2\left(\frac{\pi x}{2a}\right) dx \right] = \frac{2\varepsilon}{a^2} \int_{0}^{a} x \cos^2\left(\frac{\pi x}{2a}\right) dx$$

Εφαρμόζουμε την ταυτότητα:

$$\int x \cos^2 bx\, dx = \frac{x^2}{4} + x\,\frac{\sin(2bx)}{4b} + \frac{\cos(2bx)}{8b^2}$$

$$\Rightarrow \Delta E_1 = \frac{2\varepsilon}{a^2}\left[\frac{a^2}{4} + 0 - \left(\frac{1}{8\frac{\pi^2}{4a^2}} + \frac{1}{8\frac{\pi^2}{4a^2}} \right) \right]$$

$$\Delta E_1 = \frac{2\varepsilon}{a^2}\left[\frac{a^2}{4} - \frac{a^2}{\pi^2} \right] = \frac{\varepsilon}{2}\left(1 - \frac{4}{\pi^2} \right)$$

γ) Υπολογίστε την πιθανότητα μετάβασης από την θεμελιώδη στην πρώτη διεγερμένη.

Υπολογίζουμε το πλάτος μετάβασης:

$$V_{21} = \langle 2 | V | 1 \rangle = \int_{-a}^{a} \psi_2^*(x)\, V(x)\, \psi_1(x)\, dx$$

$$= \frac{\varepsilon}{a^2} \int_{-a}^{a} |x| \cos\left(\frac{\pi x}{2a}\right) \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) dx = \text{μηδέν}$$

ολοκλήρωμα περιττής συνάρτησης.

Θέμα III Σωματίδιο μάζας m κινείται στο 3-διάστατο χώρο υπό τη δράση του δυναμικού

$$V(r) = \begin{cases} \infty & \text{για } r < a \\ 0 & \text{για } a < r < b \\ \infty & \text{για } r > b \end{cases}$$

α) $\hat{H}\Psi = E\Psi$, $\hat{H}\Psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi + V(r)\Psi$

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2}\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right]$$

$$\vec{L}^2 = -\hbar^2\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right]$$

$$\Psi(r,\theta,\varphi) = R(r)\,Y_{\ell m}(\theta,\varphi) , \quad \vec{L}^2 Y_{\ell m} = \hbar^2 \ell(\ell+1) Y_{\ell m}$$

$$\hat{H}\Psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial R}{\partial r}\right)Y_{\ell m} + \frac{\hbar^2\ell(\ell+1)}{2mr^2}R\,Y_{\ell m} + V R\,Y_{\ell m}$$

ο τελεστής της στροφορμής είναι ο $\vec{L}^2$ και ο όρος της στροφορμής στην Χαμιλτονιανή είναι ανάλογος του $\ell(\ell+1)$

β) $\hat{H}\Psi = E\Psi \Rightarrow$ για $\Psi = R\,Y_{\ell m}$ ότι λύνουμε την εξίσωση $\hat{H}R = ER$.

για στροφορμή $\ell = 0$ έχουμε την εξίσωση

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial R}{\partial r}\right) + V(r)R = ER$$

ισχύει $\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial R}{\partial r}\right) = \frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}(rR)$

γράφω $rR = u \Rightarrow R(r) = \frac{u(r)}{r} \Rightarrow$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r}\frac{d^2}{dr^2}(rR) + V(r)R = ER$$

$$\Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r}\frac{d^2u}{dr^2} + V(r)\frac{u}{r} = E\frac{u}{r}$$

$$\Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2u}{dr^2} + V(r)u = Eu$$

μονοδιάστατη εξίσωση του Schroedinger.

$\underline{a<r<b}$ $\Rightarrow$ $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2u}{dr^2} = Eu$

$$\Rightarrow \frac{d^2u}{dr^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2}u = -k^2u \quad \text{και} \begin{cases} u(a)=0 \\ u(b)=0 \end{cases}$$

λύση της εξίσωσης η συνάρτηση

$u(r) = A\sin(k(r-a))$

ικανοποιεί την συνθήκη $u(a)=0$ αυτόματα

$u(b)=0 \Rightarrow \sin(k(b-a))=0$

$$\Rightarrow k(b-a)=n\pi \Rightarrow k = \frac{\pi}{b-a}n$$

$$\Rightarrow \frac{2mE}{\hbar^2} = \frac{\pi^2}{(b-a)^2}n^2 \Rightarrow E_n = \frac{\hbar^2\pi^2}{2m(b-a)^2}n^2$$

και $$R_n(r) = A_n\frac{\sin\left[\frac{\pi(r-a)}{(b-a)}n\right]}{r}$$

Κανονικοποίηση:

$$\int_a^b R_n^2(r)\, r^2 dr = \int_a^b u_n^2(r)\, dr = 1 \Rightarrow A_n^2\int_a^b \sin^2(k_n(r-a))\, dr = 1$$

$$\Rightarrow A_n = \sqrt{\frac{2}{b-a}}$$

Θέμα IV Δύο σωματίδια με spin $S_1=\frac{1}{2}$, $S_2=1$ αλληλεπιδρούν με την Χαμιλτονιανή του συστήματος να είναι: $\hat{H} = A\, \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2$

A = σταθερά με κατάλληλες μονάδες.

α) δυνατές τιμές της ολικής στροφορμής S

$$\vec{S} = \vec{S}_1 + \vec{S}_2 \quad , \quad |S_1 - S_2| \le S \le S_1 + S_2$$

$$\Rightarrow \begin{cases} S = S_{max} = \frac{3}{2} & \text{με εκφυλισμό } (2S+1) = 4 \\ S = S_{min} = \frac{1}{2} & \text{με εκφυλισμό } (2S+1) = 2 \end{cases}$$

β) $$\vec{S}^2 = (\vec{S}_1 + \vec{S}_2)^2 = \vec{S}_1^{\,2} + 2\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 + \vec{S}_2^{\,2}$$

$$\Rightarrow \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 = \frac{1}{2}\left[\vec{S}^2 - \vec{S}_1^{\,2} - \vec{S}_2^{\,2}\right]$$

γ) ενεργειακές ιδιοτιμές του συστήματος.
Τα $\vec{S}^2, \vec{S}_1^{\,2}, \vec{S}_2^{\,2}$ μετατίθενται άρα έχουν κοινό γνήσιο σύστημα ιδιοσυναρτήσεων Ψ.

$$\vec{S}^2 \Psi = \hbar^2 S(S+1)\Psi \quad , \quad \vec{S}_1^{\,2}\Psi = \hbar^2 (S_1+1)S_1 \Psi \quad , \quad \vec{S}_2^{\,2}\Psi = \hbar^2 S_2(S_2+1)\Psi$$

$$\hat{H}\Psi = A\,\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 \Psi = \frac{A}{2}\left[\vec{S}^2 - \vec{S}_1^{\,2} - \vec{S}_2^{\,2}\right]\Psi = \frac{A\hbar^2}{2}\left[S(S+1) - S_1(S_1+1) - S_2(S_2+1)\right]\Psi$$

$$\hat{H}\Psi_{max} = \frac{A\hbar^2}{2}\left[\frac{3}{2}\left(\frac{3}{2}+1\right) - \frac{1}{2}\left(\frac{1}{2}+1\right) - 1(1+1)\right]\Psi_{max} = \frac{A\hbar^2}{2}\Psi_{max}$$

$$\hat{H}\Psi_{min} = \frac{A\hbar^2}{2}\left[\frac{1}{2}\left(\frac{1}{2}+1\right) - \frac{1}{2}\left(\frac{1}{2}+1\right) - 1(1+1)\right]\Psi_{min} = -A\hbar^2\Psi_{min}.$$