ΕΛΛΗΝΙΚΗ ΔΗΜΟΚΡΑΤΙΑ
Εθνικόν και Καποδιστριακόν
Πανεπιστήμιον Αθηνών

Κβαντική Μηχανική ΙΙ

Ενότητα 8: Ερωτήσεις και Ασκήσεις (Θέματα Εξετάσεων)

Αθανάσιος Λαχανάς
Σχολή Θετικών Επιστημών
Τμήμα Φυσικής

ΘΕΜΑΤΑ ΕΞΕΤΑΣΕΩΝ

Τα θέματα που ακολουθούν έχουν διατυπωθεί σε διάφορες εξεταστικές περιόδους και δεν ακολουθούν απαραίτητα συγκεκριμένη θεματολογική ενότητα. Για κάποιες ασκήσεις χρειάζεται να συνδυασθούν γνώσεις από διάφορες θεματολογικές ενότητες. Ο τρόπος επίλυσης που υποδεικνύεται, η δίνεται αναλυτικά, δεν είναι ενδεχόμενα μοναδικός και ο αναγνώστης μπορεί να βρεί άλλον πιο εύκολο η έξυπνο τρόπο επίλυσης. Τα παροράμματα είναι αναπόφευκτα και θα καταβληθεί προσπάθεια να διορθωθούν μελλοντικα.

Θέματα εξετάσεων - Κβαντομηχανική ΙΙ

Εξετάσεις - 5ης Ιουλίου 2005 , (Τμήμα Α. Λαχανά)

<u>ΘΕΜΑ 1)</u>

Υποθέστε ότι η κίνηση φορτισμένου σωματιδίου γίνεται σε επίπεδο. Κάθετα στο επίπεδο εφαρμόζεται σταθερό μαγνητικό πεδίο. Δείξατε ότι το πρόβλημα είναι ισοδύναμο με αυτό μονοδιάστατου γραμμικού αρμονικού ταλαντωτή. Με γνωστό το ενεργειακό φάσμα του ταλαντωτή να βρεθεί το ενεργειακό φάσμα του συστήματος.

<u>ΘΕΜΑ 2)</u>

Σωματίδιο με μάζα m και μαγνητική ροπή $\vec{\mu} = g\,\vec{s}$, όπου g σταθερά, κινείται στο εσωτερικό σφαίρας ακτίνας R με απολύτως ανακλώντα τοιχώματα. Στο εσωτερικό της σφαίρας υπάρχει σταθερό μαγνητικό πεδίο $\vec{B}$. Ποιό είναι το ενεργειακό φάσμα του σωματιδίου όταν αυτό έχει μηδενική τροχιακή στροφορμή και χαρακτηρίζεται από σπίν $s = 2$;

<u>ΘΕΜΑ 3)</u>

Σωματίδιο κινείται σε απειρόβαθο πηγάδι δυναμικού εύρους L με τα τοιχώματα του στις θέσεις 0 και L αντίστοιχα. Το σύστημα υφίσταται την επίδραση πρόσθετης δύναμης που χαρακτηρίζεται από δυναμικό

$$V(x) \;=\; \begin{cases} 0 & , \quad x \;<\; L/4 \\ g\,V_0 & , \quad L/4 \;\leq\; x \;\leq\; 3L/4 \\ 0 & , \quad x \;>\; 3L/4 \end{cases}$$

με την αδιάστατη σταθερά g αρκούντως μικρή ώστε να αποτελεί διαταραχή στο αρχικό σύστημα. Να βρεθεί η διόρθωση της θεμελειώδους ενέργειας του σε πρώτη ταξη στην σταθερά ζεύξης g . Αν η θεμελειώδης ενέργεια E_1 του απειρόβαθου πηγαδιού είναι $1\;eV$ και $V_0 = 10\;eV$ εκτιμήστε την τιμή της g έτσι ώστε η πρώτης ταξης διόρθωση να είναι το πολύ 10% της E_1 .

<u>ΘΕΜΑ 4)</u>

Δύο ηλεκτρόνια αναγκάζονται να κινούνται σε σωλήνα απείρου μήκους και αμελητές διατομής και αλληλεπιδρούν με δυναμικό της μορφής

$$V(x_1, x_2) \;=\; g\;\vec{s_1}\cdot\vec{s_2}\;(x_1 - x_2)^2$$

όπου $x_{1,2}$ οι θέσεις των ηλεκτρονίων κατά μήκος του σωλήνα και $\vec{s}_{1,2}$ οι ιδιοστροφορμές τους. Να βρεθούν οι ενέργειες δέσμευσης του συστήματος των δύο ηλεκτρονίων και ο εκφυλισμός των αντίστοιχων ενεργειακών επιπέδων στις περιπτώσεις όπου $g > 0$ και $g < 0$.

(<u>Υπόδειξη</u>: Οι καταστάσεις που περιγράφουν το σύστημα των 2 ηλεκτρονίων πρέπει να είναι πλήρως αντισυμμετρικές στην εναλλαγή $s_1, m_1 \Leftrightarrow s_2, m_2$ και $x_1 \Leftrightarrow x_2$ όπου s_i, m_i είναι ο κύριος κβαντικός αριθμός του σπιν και αυτός της τρίτης συνιστώσας για το ηλεκτρόνιο $i = 1, 2$. Υπενθυμίζεται ότι οι καταστασεις των 2 ηλεκτρονίων με συνολικό σπιν $s = 0$ και $s = 1$ είναι αντισυμμετρικές και συμμετρικές αντίστοιχα στην εναλλαγή $s_1, m_1 \Leftrightarrow s_2, m_2$.)

ΛΥΣΕΙΣ ΘΕΜΑΤΩΝ

ΘΕΜΑ 1)

Εχει διδαχθεί στο μάθημα.

ΘΕΜΑ 2)

Για μηδενική τροχιακή στροφορμή η ιδιοκατάσταση της ενέργειας είναι της μορφής $\psi(\vec{r}) = f(r)$ εξαρτάται δηλαδή μόνον από την απόσταση r. Κατά τα γνωστά αν $f(r) = \chi(r)/r$, και αν αγνοήσουμε προς στιγμήν την επίδραση του μαγνητικού πεδίου, η $\chi(r)$ ικανοποιεί την εξίσωση

$$-\frac{\hbar^2}{2\,m}\,\chi'' \;=\; E\chi \;\; .$$

Στην αρχή $r = 0$ πρέπει να έχουμε την συνοριακή συνθήκη $\chi(0) = 0$ ενώ λόγω των τοιχωμάτων της σφαίρας πρέπει $\chi(r) \;=\; 0$ για $r \;\geq\; R$, και αρα $\chi(R) \;=\; 0$. Το πρόβλημα επομένως είναι ισοδύναμο με αυτό της μονοδιάστατης κίνησης σε ένα πηγάδι δυναμικού εύρους R του οποίου τα ενεργειακά του επίπεδα δίνονται από

$$E_n \;=\; \frac{n^2\,\pi^2\,\hbar^2}{2\,m\,R^2} \;\;,\;\; n = 1, 2, ...$$

Αν λάβουμε υπ όψη την επίδραση του μαγνητικού πεδίου υπεισέρχεται ένας πρόσθετος όρος $-\vec{\mu}\cdot\vec{B}$. Αρα έχουμε την περίπτωση του κανονικού φαινομένου Zeemann για το συγκεκριμμένο πρόβλημα. Αν ο άξονας των z ληφθεί κατά την κατεύθυνση του μαγνητικού πεδίου ο όρος ζεύξης σπιν και μαγνητικού πεδίου είναι $-gB\hat{s}_z$. Οι ιδιοτιμές του $\hat{s}_z$ είναι $\hbar m_s$ με $m_s = 2, 1, 0, -1, -2$ γιατί το σωματίδιο χαρακτηρίζεται από σπιν $s = 2$. Αρα οι ενεργειακές στάθμες του προβλήματος δίνονται από την

$$E_{n,m_s} \;=\; E_n \;-\; g\hbar B m_s,$$

όπου $n = 1, 2...$ και $m_s = 2, 1, 0, -1, -2$.

ΘΕΜΑ 3)

Ο πρόσθετος διαταρακτικός όρος επιφέρει στην ενέργεια E_1 της θεμελειώδους κατάστασης $|\psi_1\rangle$ μιά διόρθωση $\Delta E_1 \;=\; \langle\psi_1|\,V(x)\,|\psi_1\rangle$, με την κατάσταση $|\psi_1\rangle$ κανονικοποιημένη στην μονάδα. Η μορφή της κανονικοποιημένης κυματικής συνάρτησης της θεμελειώδους ενέργειας είναι $\sqrt{\frac{2}{L}}\;sin^2(\frac{\pi x}{L})$ και λόγω της μορφής του $V(x)$ έχουμε

$$\Delta E_1 \;=\; \frac{2gV_0}{L}\int_{L/4}^{3L/4} sin^2(\frac{\pi x}{L})\,dx\;.$$

Η τετριμμένη ολοκλήρωση δίνει ως αποτέλεσμα

$$\Delta E_1 \;=\; gV_0\,(\,\frac{1}{2}\;+\;\frac{1}{\pi}\,)$$

Για να έχουμε διόρθωση το πολύ 10 % της E_1 θα πρέπει $|\Delta E_1| \;\leq\; 0,1\;E_1$. Για τις τιμές που δίνονται αυτή δίνει $|g|\;(\,\frac{1}{2}\;+\;\frac{1}{\pi}\,) \leq 0,01$ η $|g| \leq\approx 0,0122$.

ΘΕΜΑ 4)

Για την σχετική κίνηση των 2 ηλεκτρονίων η ανηγμένη μάζα είναι $m = m_e/2$ και τα ηλεκτρόνια αλληλεπιδρούν με δυναμικό $g\ \vec{s}_1 \cdot \vec{s}_2\ x^2$ όπου $x = x_1 - x_2$ η σχετική τους θέση. Ο όρος αλληλεπίδρασης σπιν-σπιν $\vec{s}_1 \cdot \vec{s}_2$ γράφεται ως $\vec{s}_1 \cdot \vec{s}_2 = \frac{1}{2}(\vec{s}^{\,2} - \vec{s}_1^{\,2} - \vec{s}_2^{\,2})$, όπου $\vec{s}$ το συνολικό σπιν, η ισοδύναμα $\vec{s}_1 \cdot \vec{s}_2 = \frac{\hbar^2}{2}\,[S(S+1) - s_1(s_1+1) - s_2(s_2+1)]$, όπου $s_1 = s_2 = 1/2$ οι κβαντικοί αριθμοί των σπιν των ηλεκτρονίων και S ο κβαντικός αριθμός του συνολικού σπιν που μπορεί να πάρει τις τιμές $S = 0, 1$. Το δυναμικό λοιπόν είναι

$$V(x) \;=\; \frac{g\hbar^2}{2}\,(S(S+1) - \frac{3}{2})\,x^2$$

Περίπτωση όπου $g > 0$:

Για δέσμια κατάσταση πρέπει $S(S+1) - \frac{3}{2} > 0$, για να έχουμε ελκτικό και όχι απωστικό δυναμικό, και αυτό συμβαίνει για $S = 1$ και μόνο. Σε αυτήν την περίπτωση έχουμε λοιπόν ένα δυναμικό της μορφής του γραμμικού αρμονικού ταλαντωτή $\frac{k_1}{2}\,x^2$ με $k_1 = g\hbar^2/2$ για το οποίο γνωρίζουμε τις ιδιοκαταστασεις και ιδιοτιμές της ενέργειας. Ομως οι καταστάσεις σπιν για $S = 1$ είναι συμμετρικές στην εναλλαγη των σπιν και για να έχουμε ολικά αντισυμμετρική κατάσταση θα πρέπει το χωρικό μέρος να είναι αντισυμμετρικό στην εναλλαγή $x_1 \Leftrightarrow x_2$ η ισοδύναμα στην εναλλαγη $x \Leftrightarrow -x$. Αρα μόνον οι περιττές ιδιοκαταστάσεις της ενέργειας του ταλαντωτή είναι αποδεκτές για το πρόβλημα των δύο ηλεκτρονίων όταν $g > 0$. Αυτές χαρακτηρίζονται από ενέργειες

$$E_{2n+1} = \hbar\omega\ (\ 2n + \frac{3}{2}\ ) \quad , \quad n = 0, 1, 2...$$

όπου $m\omega^2 \equiv k_1$ με $m = m_e/2$, και θα είναι τριπλά εκφυλισμένες αφού για $S = 1$ η τρίτη συνιστώσα μπορεί να πάρει τιμές $M = 1, 0, -1$.

Περίπτωση όπου $g < 0$:

Τώρα για δέσμια κατάσταση πρέπει $S(S+1) - \frac{3}{2} < 0$, για να έχουμε ελκτικό και όχι απωστικό δυναμικό, και αυτό συμβαίνει για $S = 0$. Σε αυτήν την περίπτωση έχουμε ένα δυναμικό της μορφής του γραμμικού αρμονικού ταλαντωτή $\frac{k_2}{2}\,x^2$ με $k_2 = -3g\hbar^2/2 > 0$. Ομως οι καταστάσεις σπιν για $S = 0$ είναι αντισυμμετρικές στην εναλλαγη των σπιν και για να έχουμε ολικά αντισυμμετρική κατάσταση θα πρέπει το χωρικό μέρος να είναι συμμετρικό στην εναλλαγη $x_1 \Leftrightarrow x_2$ η ισοδύναμα στην εναλλαγή $x \Leftrightarrow -x$. Αρα μόνον οι άρτιες ιδιοκαταστάσεις της ενέργειας του ταλαντωτή είναι αποδεκτές για το πρόβλημα των δύο ηλεκτρονίων όταν $g < 0$. Αυτές χαρακτηρίζονται από ενέργειες

$$E_{2n} = \hbar\omega\ (\ 2n + \frac{1}{2}\ ) \quad , \quad n = 0, 1, 2...$$

όπου $m\omega^2 \equiv k_2$ με $m = m_e/2$, και θα είναι απλά εκφυλισμένες αφού για $S = 0$ η τρίτη συνιστώσα μπορεί να πάρει μόνο την τιμή $M = 0$.

Θέματα εξετάσεων - Κβαντομηχανική ΙΙ

Εξετάσεις - 15ης Σεπτεμβρίου 2005 , (Τμήμα Α. Λαχανά)

ΘΕΜΑ 1)

α. Για στροφορμή $J = 1$ να ευρεθούν οι πίνακες της στροφορμής $J_x\,, J_y\,, J_z$ στην βάση όπου ο J_z είναι διαγώνιος.

(Δίνεται ότι $J_\pm\,|j,m\rangle = \hbar\sqrt{j(j+1)-m(m\pm1)}\,|j,m\pm1\rangle$)

β. Έστω $|\psi\rangle$ ιδιοκατάσταση του J_y με ιδιοτιμή $\hbar$. Ποιές είναι οι πιθανότητες να μετρηθούν τιμές $\hbar\,, 0\,, -\hbar$ για την z-συνιστώσα;

ΘΕΜΑ 2)

Ποία είναι η διόρθωση στις ενεργειακές στάθμες του ατόμου του υδρογόνου εάν ληφθεί υπ΄ όψιν και η βαρυτική αλληλεπίδραση ηλεκτρονίου, πρωτονίου ;

($\alpha \equiv \frac{e^2}{\hbar c} \simeq 1/137$, $\frac{G_N}{\hbar c}m_p^2 \simeq 0.6\times10^{-38}$)

ΘΕΜΑ 3)

Η μαγνητική ροπή του ηλεκτρονίου του ατόμου του υδρογόνου είναι:

$$\vec{\mu} = \frac{e}{2mc}(\vec{L}+2\vec{S})$$

όπου e το φορτίο και m η μάζα του ηλεκτρονίου. $\vec{L}$ και $\vec{S}$ είναι η τροχιακή στροφορμή και το spin αντίστοιχα του ηλεκτρονίου.

Για δεδομένη τροχιακή στροφορμή "l" ποία είναι η τιμή του μέτρου της μαγνητικής ροπής για την κατάσταση με την μεγαλύτερη και την μικρότερη τιμή της συνολικής στροφορμής ως συνάρτηση του "l";

ΘΕΜΑ 4)

Το ακτινικό μέρος της κυματικής συνάρτησης της ενεργειακής στάθμης E_2, ($n=2$), με $l=1$ του ατόμου του υδρογόνου είναι:

$$R(r) = N r e^{-r/2a_0}\ , \qquad N = \frac{1}{\sqrt{3}}\frac{a_0^{-5/2}}{2^{3/2}}\ ,$$

όπου a_0 είναι η ακτίνα του Bohr και N σταθερά κανονικοποίησης έτσι ώστε $\int_0^\infty r^2R^2dr = 1$.

Η ιδιοκατάσταση του ηλεκτρονίου ενέργειας E_2 συνολικής στροφορμής J ειναι

$$|\psi\rangle = R(r)\,|JM;lS\rangle$$

όπου $|JM;lS\rangle$ είναι κανονικοποιημένη στην μονάδα ιδιοκατάσταση των $\vec{J}^2$, J_z , $\vec{L}^2$, $\vec{S}^2$ με ιδιοτιμές $\hbar^2J(J+1)$, $\hbar M$, $\hbar^2l(l+1)$, $\hbar^2S(S+1)$, αντίστοιχα (S το spin του ηλεκτρονίου).

Υποθέστε ότι το e^- αλληλεπιδρά μα τον πυρήνα (πρωτόνιο) και με επί πλέον δυναμικό $V(r) = gf(r)\vec{L}\cdot\vec{S}$ όπου $f(r) = 1/r^4$ και g μικρή αριθμητική σταθερά. Να ευρεθεί η πρώτης τάξης, ως προς την σταθερά g , διόρθωση στην ενέργεια για τις δυνατές τιμές του J .

Λύσεις Θεμάτων

ΘΕΜΑ 1

α) Εχει διδαχθεί στο μάθημα. Με την βοήθεια των τελεστών και ακολουθώντας την υπόδειξη βρίσκεται τελικά ότι

$$J_x = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad , J_y = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix} \quad , J_z = \hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

β) Η νορμαλισμένη στην μονάδα ιδιοκατάσταση $|\psi\rangle$ του πίνακα J_y με ιδιοτιμή $\hbar$ είναι

$$|\psi\rangle = \frac{a}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ i\sqrt{2} \\ -1 \end{pmatrix}$$

όπου a σταθερά μέτρου 1. Αρα η $|\psi\rangle$ γράφεται $|\psi\rangle = c_1 \,|\, 1\rangle + c_0 \,|\, 0\rangle + c_{-1} \,|\, -1\rangle$ όπου $c_1 = a/2,\ c_0 = ia/\sqrt{2},\ c_{-1} = -a/2$ και $|1\rangle\,, |0\rangle\,, |-1\rangle$ είναι οι ιδιοκαταστάσεις της z -συνιστώσας με ιδιοτιμές $\hbar, 0, -\hbar$ αντίστοιχα. Οι πιθανότητες να μετρήσω τιμές $\hbar, 0, -\hbar$ για την z-συνιστώσα είναι επομένως

$$P_1 = |c_1|^2 = \frac{1}{4}\ ,\ P_0 = |c_0|^2 = \frac{1}{2}\ ,\ P_{-1} = |c_{-1}|^2 = \frac{1}{4}\ .$$

ΘΕΜΑ 2

Το συνολικό δυναμικό μέσα στο οποίο κινείται το ηλεκτρόνιο είναι το αθροισμα του ηλεκτρικού και βαρυτικού δυναμικού

$$V(r) = -\frac{e^2}{r} - \frac{G_N m_e m_p}{r} = -\frac{\tilde{e}^2}{r}$$

όπου $\tilde{e}^2$ είναι

$$\tilde{e}^2 = e^2\ (\ 1 + \frac{G_N m_e m_p}{e^2}\ ) = e^2\ (\ 1 + 0.45 \times 10^{-39}\ )\ .$$

Η ενέργεια είναι ακριβώς ίδια σε μορφή με αυτήν του ατόμου του H_2 με την αντικατάσταση της e^2 με την $\tilde{e}^2$. Επομένως οι διορθωμένες στάθμες E'_n είναι

$$E'_n = E_n\ (\ 1 + 0.45 \times 10^{-39}\ )^2 \approx E_n\ (\ 1 + 0.9 \times 10^{-39})\ .$$

ΘΕΜΑ 3

Το τετράγωνο του μέτρου της μαγνητικής είναι

$$\begin{aligned} \mu^2 &= \frac{e^2}{4m^2c^2}\ (\ \vec{L}^2 + 4\vec{S}^2 + 4\ \vec{L}\cdot\vec{S}\ ) \\ &= \frac{e^2}{4m^2c^2}\ (\ \vec{L}^2 + 4\vec{S}^2 + 2\ (\vec{J}^2 - \vec{L}^2 - \vec{S}^2\ )\ ) \\ &= \frac{e^2\hbar^2}{4m^2c^2}\ (\ 2j(j+1) + 2s(s+1) - l(l+1)\ ) \end{aligned} \qquad (1)$$

όπου οι δυνατές τιμές της συνολικής στροφορμής είναι $j = |l - 1/2|,\ l + 1/2$ εφ όσον $s = 1/2$. Για την μεγαλύτερη τιμή του j βρίσκει κανείς πολύ εύκολα ότι

$$\mu^2 = \frac{e^2\hbar^2}{4m^2c^2}\ (\ l^2 + 3\,l + 3\ )\ , \qquad (2)$$

ενώ για την ελαχίστη (όταν $l \neq 0$)

$$\mu^2 = \frac{e^2\hbar^2}{4m^2c^2} \left(l^2 - \ l + 1 \right) \ . \tag{3}$$

Οταν $l = 0$ τότε $j = 1/2$ και το αποτέλεσμα βρίσκεται ότι είναι αυτό της (;;) για $l = 0$.

ΘΕΜΑ 4

Η πρώτης τάξης διόρθωση στην ενέργεια θα είναι

$$\Delta E \ = \ \langle\psi| \ g f(r) \vec{L}\cdot\vec{S} \ |\psi\rangle \ = \ \frac{g}{2} \langle\psi| \ f(r)(\ \vec{J}^2 - \vec{L}^2 - \vec{S}^2 \ ) \ |\psi\rangle$$

και λόγω της μορφής της $|\psi\rangle$, που είναι ιδιοκατάσταση των στροφορμών, θα έχουμε

$$\Delta E \ = \ \frac{g\hbar^2}{2} \ (\ j(j+1) - l(l+1) - s(s+1) \ ) \ \int f(r) R^2 dV \ .$$

Η ολική στροφορμή μπορεί να πάρει τις τιμές $j = l + 1/2, \ |l - 1/2|$, ενώ η ολοκλήρωση με την συγκεκριμένη μορφή του $f(r)$ και αφού ολοκληρώσουμε στις γωνίες δίνει

$$\int f(r) R^2 dV \ = \ N^2 \ (4\pi) \ \int_0^\infty e^{-r/a_0} dr \ = \ \frac{\pi}{6 \ a_0^4} \ .$$

Αντικαθιστώντας στην πιο πάνω σχέση έχουμε τελικά

$$\Delta E \ = \ \frac{g\hbar^2\pi}{12 \ a_0^4} \ (\ j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4} \ ) \ . \tag{4}$$

Για $j = l + \frac{1}{2}$ η (;;) δίνει

$$\Delta E \ = \ \frac{g\hbar^2\pi}{12 \ a_0^4} \ l$$

Για $j = |l - \frac{1}{2}|$ και για τιμές τροχιακής στροφορμής $l \geq 1$ έχουμε από την (;;)

$$\Delta E \ = \ \frac{g\hbar^2\pi}{12 \ a_0^4} \ (\ -l - 1 \ ) \quad .$$

Για την τιμή $l = 0$ έχουμε $j = 1/2$ και $\Delta E = 0$.

Θέματα εξετάσεων - Κβαντομηχανική ΙΙ

Εξετάσεις - 11ης Σεπτεμβρίου 2009 , (Τμήμα Α. Λαχανά)

ΘΕΜΑ 1)

Για κίνηση σε κεντρικό δυναμικό οι καταστάσεις συγκεκριμένης ενέργειας και τροχιακής στροφορμής μπορούν να γραφούν με την μορφή

$$\Psi(r,\theta,\phi) \;=\; \frac{\chi(r)}{r}\, Y_{lm}(\theta,\phi)$$

όπου $Y_{lm}(\theta,\phi)$ είναι σφαιρική αρμονική. Απαντήστε στα πιο κάτω ερωτήματα

ι) Ποιά διαφορική εξίσωση ικανοποιεί η $\chi(r)$ και ποιά η φυσική της σημασία (της $\chi(r)$). Για μηδενική τροχιακή στροφορμή και για κίνηση σε δυναμικό που μηδενίζεται όταν $r \longrightarrow \infty$ δίνεται ότι

$$\chi(r) \;=\; r\, e^{-\lambda\, r}$$

Να βρεθεί η ενέργεια και το δυναμικό συναρτήσει της σταθεράς λ.

ιι) Ο τελεστής της ακτινικής ορμής είναι Ερμιτιανός και η μορφή του είναι

$$\hat{p}_r \;=\; -i\,\hbar\,\left(\frac{\partial}{\partial\, r} \,+\, \frac{1}{r}\right)$$

Τι συνεπάγεται αυτό για την τιμή της $\chi(r)$ στην θέση $r \,=\, 0$;

ιιι) Αν το δυναμικό μέσα στο οποίο κινείται το σωματίδιο έχει την ιδιότητα

$$r^2\, V(r) \;\longrightarrow\; 0$$

όταν $r \longrightarrow 0$ να βρεθεί η $\chi(r)$ σε περιοχή κοντά στην αρχή του ελκτικού κέντρου, $r \,=\, 0$.

ΘΕΜΑ 2)

Σωματίδιο με σπιν $s = 1/2$ και μαγνητική ροπή $\vec{\mu} = g\,\vec{s}$ βρίσκεται σε σταθερό μαγνητικό πεδίο κατά την κατεύθυνση του άξονα x , $\vec{B} \,=\, \hat{x}\, B_0$. Την στιγμή $t \,=\, 0$ το σωματίδιο βρίσκεται σε κατάσταση με σπιν $s_z \,=\, \hbar/2$ στην κατεύθυνση z . Να βρεθεί η κατάστασή του κάθε χρονική στιγμή $t > 0$ και να βρεθεί ο ελάχιστος χρόνος για τον οποίον το σπιν του σωματιδίου είναι εξ ολοκλήρου προσανατολισμένο προς τα κάτω, $s_z = -\hbar/2$.

ΘΕΜΑ 3)

Δύο σωματίδια με σπιν $J_1 = 1/2$ και $J_2 = 1$, αντίστοιχα, αλληλεπιδρούν με Χαμιλτωνιανή

$$\hat{H} \;=\; \frac{2\,\epsilon_0}{\hbar^2}\,\vec{J}_1\cdot\vec{J}_2$$

με την σταθερά ϵ_0 να είναι θετική. Τα δύο σωματίδια έχουν μαγνητικές ροπές $\vec{\mu}_1 \,=\, g\,\vec{J}_1$ και $\vec{\mu}_2 \,=\, g\,\vec{J}_2$, με τον γυρομαγνητικό λόγο g να είναι ίδιος και για τα δύο σωματίδια. Το σύστημα τοποθετείται σε σταθερό μαγνητικό πεδίο. Μεταβάλλοντας την ενταση του παρατηρούμε ότι υπάρχει τιμή του μέτρου της έντασής του, B_0, για την οποίαν η χαμηλώτερη ενέργεια με την υψηλότερη τιμή της ολικής στροφορμής $J_{o\lambda\iota\kappa o}$ είναι ίδια με την μεγαλύτερη ενέργεια των καταστάσεων που έχουν την μικρότερη τιμή της ολικής στροφορμής. Από αυτό να προσδιορισθεί ο γυρομαγνητικός λόγος g συναρτήσει των ϵ_0 και B_0.

$\Longrightarrow$ **Λύσεις**

Λύσεις

ΘΕΜΑ 1

(ι) Η $\chi(r)$ ικανοποιεί την εξίσωση

$$-\frac{\hbar^2}{2\,m}\,\chi''(r)+U(r)\,\chi(r) \;=\; E\,\chi(r)$$

όπου $U(r)$ είναι το ενεργό δυναμικό που περιέχει εκτός από τον όρο του πραγματικού δυναμικού μέσα στο οποίο κινείται το σωματίδιο, $V(r)$, και τον όρο του φυγοκεντρικού δυναμικού

$$U(r) \;=\; \frac{\hbar^2\,l(l+1)}{2\,m\,r^2} \;+\; V(r) \quad .$$

Η $\chi(r)$ έχει την φυσική σημασία του πλάτους της ακτινικής πιθανότητας, δηλαδή το $|\chi(r)|^2\,dr$ είναι η πιθανότητα το σωματίδιο να βρεθεί μέσα σε σφαιρικό φλοιό με ακτίνες r και $r+dr$, όταν η $\chi(r)$ είναι κανονικοποιημένη στην μονάδα, $\int_0^\infty |\chi(r)|^2\,dr = 1$.

Αν $\chi(r) \;=\; r\,e^{-\lambda\,r}$ και η τροχιακή στροφορμή είναι μηδενική, η ανωτέρω εξίσωση δίνει

$$\frac{\hbar^2}{2\,m}\,(\,2\,\lambda-\lambda^2\,r)+V(r)\,r \;=\; E\,r \quad \textit{και διαιρώντας με } r \;\Longrightarrow\; \frac{\hbar^2}{2\,m}\,(\,2\,\frac{\lambda}{r}-\lambda^2\,)+V(r) \;=\; E\,.$$

Από αυτήν στο όριο $r\longrightarrow\infty$ παίρνουμε $E \;=\; -\,\hbar^2\,\lambda^2/2\,m$ και χρησιμοποιώντας αυτό στην ίδια εξίσωση προκύπτει οτι το δυναμικό είναι $V(r) \;=\; -\,\hbar^2\,\lambda/m\,r$.

(ιι) Η ερμιτιανότητα του τελεστή της ακτινικής ορμής συνεπάγεται

$$(\,\Psi,\hat{p}_r\,\Psi\,) \;=\; (\,\hat{p}_r\,\Psi,\,\Psi\,) \;=\; (\,\Psi,\hat{p}_r\,\Psi\,)^*$$

Γράφωντας $\Psi(r,\theta,\phi) \;=\; R(r)\,Y_{lm}(\theta,\phi)$ η σχέση αυτή δίνει

$$-i\,\hbar\int R^* Y_{lm}^*\left(\frac{\partial}{\partial\,r}+\frac{1}{r}\right)R\,Y_{lm}\,dV \;=\; i\,\hbar\int R\,Y_{lm}\left(\frac{\partial}{\partial\,r}+\frac{1}{r}\right)R^*\,Y_{lm}^*\,dV$$

Το στοιχείο όγκου είναι $dV \;=\; r^2 dr d\Omega$ και από την κανονικοποίηση των σφαιρικών αρμονικών $\int |Y_{lm}|^2\,d\Omega \;=\; 1$ παίρνουμε

$$\int_0^\infty (\,r^2\,R^*\,R'+r^2\,R\,R^{*\prime}+2\,r\,R^*\,R\,)\,dr \;=\; 0 \tag{1}$$

όπου οι τόνοι δηλώνουν παραγωγίσεις ως προς r. Η ολοκληρωτέα συνάρτηση στην **(;;)** είναι η παράγωγος του $r^2\,|R|^2$ οπότε η **(;;)** δίνει

$$\int_0^\infty \frac{d}{dr}\,r^2\,|R|^2\,dr \;=\; 0 \quad\Longrightarrow\quad \int_0^\infty \frac{d}{dr}\,|\chi(r)|^2\,dr \;=\; 0 \quad\Longrightarrow\quad |\chi(\infty)|^2-|\chi(0)|^2 \;=\; 0$$

Για να είναι η $\chi(r)$ κανονικοποιήσιμη θα πρέπει $\chi(\infty)=0$ και επομένως η τελευταία εξίσωση δίνει $\chi(0)=0$.

(ιιι) Η εξίσωση για την $\chi(r)$ μπορεί να τεθεί και στην πιο κάτω μορφή, αν πολλαπλασιασθεί με την μεταβλητή r^2,

$$-\frac{\hbar^2}{2\,m}\,r^2\,\chi''(r)+(\,r^2\,V(r)\,-E\,r^2+\frac{\hbar^2\,l(l+1)}{2\,m}\,)\chi(r) \;=\; 0$$

Για μικρές τιμές του r οι όροι $r^2\,V(r)$ και $r^2\,E$ είναι αμελητέοι έναντι του τελευταίου όρου και η ανωτέρω εξίσωση παίρνει την μορφή

$$-\,\chi''(r) \;+\; \frac{l(l+1)}{r^2}\,\chi(r) \;=\; 0 \quad ,$$

η γενική λύση της οποίας είναι

$$\chi(r) \;=\; A\, r^{l+1} \,+\, B\, r^{-l}$$

με A, B σταθερές. Επειδή $\chi(0) = 0$ θα πρέπει $B = 0$. Αρα για μικρά r έχουμε $\chi(r) \;=\; A\, r^{l+1}$.

ΘΕΜΑ 2

Η κατάσταση σπιν του σωματιδίου ικανοποιεί την εξίσωση Scroendinger

$$i\,\hbar\,\frac{\partial}{\partial\, t}\,|\Psi(t)\rangle \;=\; \hat{H}\,|\Psi(t)\rangle$$

με την Χαμιλτωνιανή του συστήματος να είναι $\hat{H} \;=\; -\vec{\mu}\cdot\vec{B}\,.$ Η κατεύθυνση του μαγνητικού πεδίου είναι κατά τον άξονα $\hat{x}$, οπότε $\hat{H} \;=\; -g\,B_0\,\hat{s}_x\,.$ Στην βάση όπου χρησιμοποιούμε τους πίνακες Pauli για την περιγραφή του σπιν του σωματιδίου (σπιν = 1/2), η εξίσωση Scroendinger παίρνει την μορφή

$$i\,\hbar\,\frac{\partial}{\partial\, t}\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \;=\; -g\,B_0\,\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \;=\; -g\,B_0\,\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} b \\ a \end{pmatrix}$$

Από αυτήν έχουμε τις εξισώσεις

$$\dot{a} \;=\; i\omega_B\, b \qquad , \qquad \dot{b} \;=\; i\omega_B\, a \tag{2}$$

όπου $\omega_B \equiv gB_0/2\,.$ Διαφορίζοντας την πρώτη ακόμα μια φορά ως προς τον χρονο προκύπτει

$$\ddot{a} \,+\, {\omega_B}^2\, a \;=\; 0$$

με γενική λύση την $a = A\,cos(\omega_B\, t) + B\,sin(\omega_B\, t)\,.$ Από αυτήν και χρησιμοποιώντας την πρώτη των (;;) έχουμε ότι $b = i\,A\,sin(\omega_B\, t) \,-\, i\,B\,cos(\omega_B\, t)\,.$ Την χρονική στιγμή $t = 0$ το σωματίδιο έχει σπιν $\hbar/2$ στην κατεύθυνση - z και στην βάση που χρησιμοποιούμε αυτό σημαίνει $a(0) = 1,\, b(0) = 0\,.$ Αρα οι σταθερές $A,\, B$ είναι $A = 1,\, B = 0$ και η κατάσταση του συστήματος είναι

$$|\Psi(t)\rangle \;=\; \begin{pmatrix} cos(\omega_B\, t) \\ i\, sin(\omega_B\, t) \end{pmatrix}$$

Η ποσότητα $|i\,sin(\omega_B\, t)|^2 \;=\; sin^2(\omega_B\, t)$ είναι η πιθανότητα να μετρηθεί σπιν ίσο με $-\hbar/2$ στην κατεύθυνση - z. Επομένως ο ελάχιστος χρόνος για να είναι πλήρως προσανατολισμένο προς τα κάτω το σπίν του σωματιδίου, η ισοδύναμα ο ελάχιστος χρόνος για να μετρηθεί τιμή $-\hbar/2$ για την z - συνιστώσα με πιθανότητα 100 % , είναι όταν $t_{min} \;=\; \dfrac{\pi}{2\,\omega_B}\,.$

ΘΕΜΑ 3

Η Χαμιλτωνιανή του συστήματος των δύο σωματιδίων όταν αυτά τοποθετηθούν σε σταθερό μαγνητικό πεδίο είναι

$$\hat{H}' \;=\; \frac{2\,\epsilon_0}{\hbar^2}\,\vec{J}_1\cdot\vec{J}_2 \,-\, g\vec{B}\cdot(\,\vec{J}_1 + \vec{J}_2\,)$$

Επιλέγοντας το σύστημα μας με τον άξονα z κατά την κατεύθυνση του μαγνητικού πεδίου, χωρίς βλαβη της γενικότητας, και χρησιμοποιώντας το ολικό σπιν $\vec{J} \equiv \vec{J}_1 + \vec{J}_2$, παίρνουμε

$$\hat{H}' \;=\; \frac{\epsilon_0}{\hbar^2}\,(\,\vec{J}^2 - \vec{J}_1^2 - \vec{J}_2^2\,) \,-\, gB\,J_z$$

όπου J_z είναι η z - συνιστώσα του ολικού σπιν. Η Χαμιλτωνιανή $\hat{H}'$ και τα μεγέθη $\vec{J}^2,\, J_z,\, \vec{J}_1^2,\, \vec{J}_2^2$ μετατίθενται μεταξύ τους άρα υπάρχει κοινό σύστημα ιδιοκαταστάσεων και αυτα είναι οι ιδιοκαταστάσεις $|JMJ_1J_2\rangle$ συνολικής στροφορμής με κβαντικό αριθμό J και κβαντικό αριθμό της z - συνιστώσας ίσο με $M = -J,\, -J+1,\, ...J-1,\, J\,.$ Επειδή

$J_1 = 1/2,\ J_2 = 1/2$ ο κβαντικός αριθμός J παίρνει μόνο τις τιμές $J = 1/2,\ 3/2$. Δρώντας με την $\hat{H}'$ στις $|JMJ_1J_2\rangle$ βρίσκουμε ότι

$$\hat{H}'\ |JMJ_1J_2\rangle \ = \ E_{JM}\ |JMJ_1J_2\rangle$$

όπου E_{JM} είναι οι ιδιοτιμές της ενέργειας που εξαρτώνται από τους κβαντικούς αριθμούς $J,\ M$,

$$E_{JM} \ = \ \epsilon_0\,(J(J+1) - J_1(J_1+1) - J_2(J_2+1)) \ - \ g\,\hbar\,B\,M$$

όπου για $J = 1/2$ έχουμε $M = -1/2,\ 1/2$ και για $J = 3/2$ έχουμε $M = -3/2,\ -1/2,\ 1/2,\ 3/2$. Η ελάχιστη ενέργεια E_{min} για την μεγαλύτερη τιμή του $J = 3/2$ είναι για $M = 3/2$, όταν $g > 0$, η $M = -3/2$ όταν $g < 0$, αρα

$$E_{min} \ = \ \epsilon_0 \ - \ \frac{3}{2}\,|g|\,\hbar\,B \quad .$$

Αντίστοιχα η μεγαλύτερη ενέργεια E_{max} για την μικρότερη τιμή του $J = 1/2$ είναι για $M = 1/2$, όταν $g > 0$, η $M = -1/2$ όταν $g < 0$, αρα

$$E_{max} \ = \ -2\,\epsilon_0 \ - \ \frac{1}{2}\,|g|\,\hbar\,B \quad .$$

Αν υπάρχει τιμή του μαγνητικού πεδίου B_0 για τις οποιές αυτές είναι ίσες τότε

$$\epsilon_0 \ - \ \frac{3}{2}\,|g|\,\hbar\,B_0 \ = \ -2\,\epsilon_0 \ - \ \frac{1}{2}\,|g|\,\hbar\,B_0$$

και επομένως

$$|g| \ = \ \frac{3\,\epsilon_0}{2\,\hbar\,B_0} \quad .$$

Θέματα εξετάσεων - Κβαντομηχανική ΙΙ
Εξετάσεις - 1ης Ιουλίου 2010 , (Τμήμα Α. Λαχανά)

ΘΕΜΑ 1:

Α) Αν $R(r)$ το ακτινικό μέρος κυματικής συνάρτησης αποδείξτε ότι η συνάρτηση $u(r) \equiv r\,R(r)$ μηδενίζεται όταν $r = 0$. Ποιά είναι η φυσική σημασία της $u(r)$;

Β) Δίνεται ότι η συνάρτηση $X_{1,0}$ είναι γραμμικός συνδιασμός των σφαιρικών αρμονικών Y_{1m} όπου $m = \pm 1, 0$. Η μορφή της $X_{1,0}$ είναι

$$X_{1,0} \;\equiv\; N\,\frac{x}{r} \quad , \quad r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$$

Αποδείξτε ότι έχει στροφορμή $l = 1$ και είναι ιδιοσυνάρτηση της $x-$ συνιστώσας της τροχιακής στροφορμής με ιδιοτιμή μηδεν. Για ποιά τιμή της σταθεράς N είναι κανονικοποιημένη στην μονάδα ;

ΘΕΜΑ 2:

Η Χαμιλτωνιανή δύο διακρισίμων σωματιδίων με σπιν $J_1 = J_2 = 1/2$ είναι

$$\hat{H} \;=\; \frac{2\epsilon}{\hbar^2}\,\vec{J}_1 \cdot \vec{J}_2$$

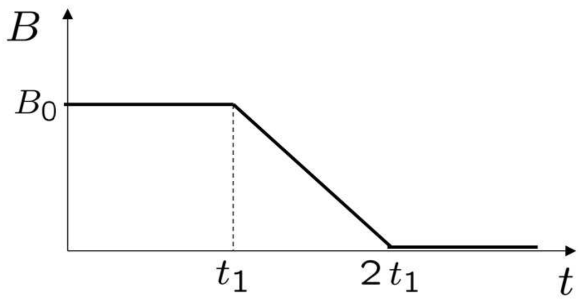
Τα σωματίδια έχουν μαγνητικές ροπές $\vec{\mu}_1 \;=\; g_1\,\vec{J}_1$, $\vec{\mu}_2 \;=\; g_2\,\vec{J}_2$.

Α) Να βρεθεί το ενεργειακό φάσμα και ο εκφυλισμός αυτού. Ακολούθως το σύστημα τοποθετείται σε σταθερό μαγνητικό πεδίο έντασης B_0 . Να βρεθει το ενεργειακό φάσμα στην περίπτωση αυτή όταν $g_1 \;= g_2$. Ποιός είναι ο εκφύλισμός του ;

Β) Με την παρουσία του μαγνητικού πεδίου B_0 να βρεθεί το ενεργειακό φάσμα όταν $g_1 \;= g_2 \;+\; \delta$, με δ μικρό σε σχέση με τα $g_{1,2}$, σε πρώτη τάξη στην παράμετρο δ .

ΘΕΜΑ 3:

Σωματίδιο με σπιν $S = 1/2$ και μαγνητική ροπή $\vec{\mu} = g\,\vec{S}$ βρίσκεται σε μαγνητικό πεδίο με προσανατολισμό κατά την κατεύθυνση του $x-$ άξονα. Η ένταση του μαγνητικού πεδίου μεταβάλλεται χρονικά όπως δείχνεται στο σχήμα, όπου t_1 δεδομένος χρόνος. Την χρονική στιγμή $t = 0$ το



σωματίδιο έχει προσανατολισμό με σπίν $+\hbar/2$ κατά την $z-$κατεύθυνση. Να βρεθεί η κατάσταση του συστήματος για $t > 0$. Για ποιά τιμή του B_0 το σωματίδιο υφίσταται πλήρη αναστροφή του σπιν του για χρόνους $t > 2\,t_1$;

Υπόδειξη: Ο μοναδιαίος πίνακας

$$U \;=\; \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}$$

διαγωνιοποιεί τον πίνακα s_x της $x-$συνιστώσας του σπιν.

$\Longrightarrow$ **Λύσεις**

Λύσεις

ΘΕΜΑ 1

1Α) Με την χρήση του τελεστή $\hat{p}_r = -i\hbar\,(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r})$ (Εχει αναπτυχθεί εκτενώς στο μάθημα.)

1Β) Επειδή η $X_{1,0}$ είναι γραμμικός συνδιασμός σφαιρικών αρμονικών με $l = 1$ είναι και αυτή ιδιοσυνάρτηση της τροχιακής στροφορμής με κβαντικό αριθμό $l = 1$. Η δράση της $x-$ συνιστώσας της τροχιακής στροφορμής στην $X_{1,0}$ δίνει

$$
\begin{aligned}
\hat{L}_x\, X_{1,0} &= -i\,\hbar\,\left(y\,\frac{\partial}{\partial z} - z\,\frac{\partial}{\partial y}\right)\, N\,xr^{-1} \;=\; -i\,\hbar\,N\,\left(y\,x\,\frac{\partial}{\partial z} - z\,x\,\frac{\partial}{\partial y}\right)\, r^{-1} \\
&= -i\,\hbar\,N\,\left(y\,x\,(-\frac{z}{r^2}) - z\,x\,(-\frac{y}{r^2})\right) \;=\; 0 \quad !
\end{aligned}
$$

Επομένως η $X_{1,0}$ είναι ιδισοσυνάρτηση της $\hat{L}_x$ με ιδιοτιμή μηδέν !

Για την κανονικοποίηση, η συνάρτηση $X_{1,0}$ γράφεται ως

$$X_{1,0} \;=\; N\; sin\theta\; cos\phi$$

και το ολοκλήρωμα της $|X_{1,0}|^2$ σε όλη την στερεά γωνία πρέπει να είναι μονάδα.

$$
\begin{aligned}
\int |X_{1,0}|^2\,d\Omega &= |N|^2 \int (\,sin\theta\;cos\phi\,)^2\,sin\theta d\theta\,d\phi \;=\; |N|^2 \int_0^{\pi} sin^3\theta\,d\theta \int_0^{2\pi} cos^2\phi\,d\phi \\
&= -\,|N|^2 \int_0^{\pi} (1-\cos^2\theta)\,d\cos\theta \int_0^{2\pi} \frac{1+\cos 2\phi}{2}\,d\phi \;=\; |N|^2\,\frac{4}{3}\,\pi
\end{aligned}
$$

Για να είναι το ολοκλήρωμα μονάδα θα πρέπει

$$|N|^2\,\frac{4}{3}\,\pi \;=\; 1 \quad\Longrightarrow\quad |N| \;=\; \sqrt{\frac{3}{4\,\pi}}$$

ΘΕΜΑ 2

2Α) Αν $\vec{J} \;=\; \vec{J}_1 + \vec{J}_2$ η Χαμιλτωνιανή του συστήματος γράφεται ως

$$\hat{H} \;=\; \frac{2\epsilon}{\hbar^2}\,\vec{J}_1\cdot\vec{J}_2 \;=\; \frac{\epsilon}{\hbar^2}\,\left(\vec{J}^2 \,-\, \vec{J}_1^2 \,-\, \vec{J}_2^2\right)$$

και τα ιδιοανύσματα της Χαμιλτωνιανής είναι οι καταστάσεις συνολικού σπιν $|J, M, J_1, J_2\rangle$ με ιδιοτιμές ενέργειας $E_J \;=\; \epsilon(J(J+1) - J_1(J_1+1) - J_2(J_2+1))$. Επειδή $J_1 = J_2 = 1/2$ οι δυνατές τιμές J για το ολικό σπιν είναι $J = 0\,,\, J = 1$ και οι αντίστοιχες ενέργειες είναι

$$E_J \;=\; \epsilon\,\left(J(J+1) - \frac{3}{2}\right) \qquad ,\quad J = 0\,,\,1$$

Τα σωματίδια είναι διακρίσιμα και επομένως όλες οι καταστάσεις (συμμετρικές και αντισυμμετρικές) είναι αποδεκτές. Για $J = 0$ υπάρχει μόνο μία κατάσταση, αυτή με την τρίτη συνιστώσα M του συνολικού σπιν να είναι ίση με μηδέν $M = 0$, άρα δεν υπάρχει εκφυλισμός. Για $J = 1$ υπάρχουν τρείς καταστάσεις, αυτές με $M = -1, 0+1$, που έχουν ίδια ενέργεια άρα υπάρχει τριπλός εκφυλισμός.

Οταν το σύστημα τοποθετηθεί σε σταθερό μαγνητικό πεδίο η Χαμιλτωνιανή γίνεται

$$\hat{H}' \;=\; \frac{\epsilon}{\hbar^2}\,\left(\vec{J}^2 \,-\, \vec{J}_1^2 \,-\, \vec{J}_2^2\right) \,-\, g_1\,\vec{J}_1\cdot\vec{B} \,-\, g_2\,\vec{J}_2\cdot\vec{B}$$

Μπορούμε να πάρουμε το σύστημα έτσι ώστε ο άξονας z να είναι στην κατεύθυνση του πεδίου $\vec{B}$. Τότε για $g_1 = g_2 \equiv g$ η Χαμιλτωνιανή είναι,

$$\hat{H}_B \;=\; \frac{\epsilon}{\hbar^2}\,\left(\vec{J}^2 \,-\, \vec{J}_1^2 \,-\, \vec{J}_2^2\right) \,-\, g\,B_0\,\hat{J}^z$$

και τα ιδιοανύσματα της είναι τα $|J, M, J_1, J_2\rangle$ με ιδιοτιμές ενέργειας

$$E_{J,M} \;=\; \epsilon\,\left(J(J+1) - \frac{3}{2}\right) \,-\, g\,B_0\,\hbar\,M$$

Παρατηρούμε ότι υπάρχει άρση του εκφυλισμού (φαινόμενο Zeemann).

2B) Οταν οι γυρομαγνητικοί λόγοι g_1 , g_2 διαφέρουν η Χαμιλτωνιανή του συστήματος είναι

$$\hat{H}'_B \;=\; \hat{H}_B \;-\; \delta\, B_0\, \hat{J}_1^z$$

Λόγω της παρουσίας του μικρού (διαταρακτικού) όρου $\hat{V} \equiv -\,\delta\, B_0\, \hat{J}_1^z$ οι καταστάσεις $|J, M, J_1, J_2\rangle$ δεν είναι ιδιοανύσματα της Χαμιλτωνιανής $\hat{H}'_B$. Αν για συντομία συμβολίσουμε με $|J, M\rangle \equiv |J, M, J_1, J_2\rangle$ τότε οι διορθώσεις στην ενέργεια, σε πρώτη τάξη στην δ είναι

$$\Delta\, E_{J,M} \;=\; \langle J, M|\; \hat{V}\; |J, M\rangle \;=\; -\delta\, B_0\; \langle J, M|\, \hat{J}_1^z\, |J, M\rangle$$

Οι καταστάσεις $|J, M\rangle$ ΔΕΝ είναι για όλα τα M ιδιοκαταστάσεις του $\hat{J}_1^z$ και ο υπολογισμός γίνεται όπως ακολουθεί : Η ιδιοκατάσταση της αδιατάρακτης ενέργειας $E_{0,0}$ είναι

$$|0, 0\rangle \;=\; \frac{1}{\sqrt{2}}\,(\,|+,-\rangle \;-\; |-,+\rangle\,)$$

με τον πρώτο δείκτη (+ η -) να αναφέρεται σε $z-$ συνιστώσα του σπίν $+\hbar/2, -\hbar/2$ για το σωματίδιο ¨1¨. Ο δεύτερος δείκτης με όμοιο τρόπο αναφέρεται στο σωματίδιο ¨2¨. Αρα έχουμε

$$\hat{J}_1^z\; |0, 0\rangle \;=\; \frac{1}{\sqrt{2}}\,(\,\frac{\hbar}{2}\; |+,-\rangle + \frac{\hbar}{2}\; |-,+\rangle\,)$$

και επομένως

$$\begin{aligned}
\langle 0, 0|\, \hat{J}_1^z\; |0, 0\rangle \;&=\; \frac{1}{\sqrt{2}}\,(\,\langle +,-| \,-\, \langle -,+|\,)\,\frac{1}{\sqrt{2}}\,(\,\frac{\hbar}{2}\; |+,-\rangle + \frac{\hbar}{2}\; |-,+\rangle\,) \\
&=\; \frac{1}{2}\,\frac{\hbar}{2}\,(\,\langle +,-| \,-\, \langle -,+|\,)\;\;(\,|+,-\rangle + |-,+\rangle\,) \\
&=\; \frac{\hbar}{4}\,(\,\langle +,-|+,-\rangle \,-\, \langle -,+|-,+\rangle\,) \;=\; \frac{\hbar}{4}\,(1-1) \;=\; 0
\end{aligned}$$

• Αρα η διόρθωση στην ενέργεια $E_{0,0}$ είναι μηδενική, $\Delta\, E_{0,0} = 0$.

Οι ιδιοκαταστάσεις για τις αδιατάρακτες ενέργειες $E_{1,1}$ και $E_{1,-1}$ είναι

$$|1, 1\rangle \;=\; |+,+\rangle \quad , \quad |1, -1\rangle \;=\; |-,-\rangle$$

Σε αυτή την περίπτωση

$$\hat{J}_1^z\; |1, 1\rangle \;=\; \hat{J}_1^z\; |+,+\rangle \;=\; +\frac{\hbar}{2}\; |+,+\rangle \quad , \quad \hat{J}_1^z\; |1, -1\rangle \;=\; \hat{J}_1^z\; |-,-\rangle \;=\; -\frac{\hbar}{2}\; |-,-\rangle$$

οπότε

$$\langle 1, 1|\, \hat{J}_1^z\; |1, 1\rangle \;=\; \langle +,+|\, \hat{J}_1^z\; |+,+\rangle \;=\; \frac{\hbar}{2} \quad , \quad \langle 1, -1|\, \hat{J}_1^z\; |1, -1\rangle \;=\; \langle -,-|\, \hat{J}_1^z\; |-,-\rangle \;=\; -\frac{\hbar}{2}$$

• Αρα οι διόρθωσεις στις ενέργειες $E_{1,\pm 1}$ είναι, $\Delta\, E_{1,1} = -\delta\, B_0\; \hbar/2$, $\Delta\, E_{1,-1} = +\delta\, B_0\; \hbar/2$.

Τέλος για την διόρθωση στην ενέργεια $E_{1,0}$, η ιδιοκατάσταση της είναι

$$|1, 0\rangle \;=\; \frac{1}{\sqrt{2}}\,(\,|+,-\rangle \;+\; |-,+\rangle\,)$$

Αρα, σε αναλογία για το τι κάναμε για την $E_{0,0}$, έχουμε

$$\hat{J}_1^z\; |1, 0\rangle \;=\; \frac{1}{\sqrt{2}}\,(\,\frac{\hbar}{2}\; |+,-\rangle - \frac{\hbar}{2}\; |-,+\rangle\,)$$

και επομένως

$$\begin{aligned}
\langle 1, 0|\, \hat{J}_1^z\; |1, 0\rangle \;&=\; \frac{1}{\sqrt{2}}\,(\,\langle +,-| \,+\, \langle -,+|\,)\,\frac{1}{\sqrt{2}}\,(\,\frac{\hbar}{2}\; |+,-\rangle - \frac{\hbar}{2}\; |-,+\rangle\,) \\
&=\; \frac{1}{2}\,\frac{\hbar}{2}\,(\,\langle +,-| \,+\, \langle -,+|\,)\;\;(\,|+,-\rangle - |-,+\rangle\,) \\
&=\; \frac{\hbar}{4}\,(\,\langle +,-|+,-\rangle \,-\, \langle -,+|-,+\rangle\,) \;=\; \frac{\hbar}{4}\,(1-1) \;=\; 0
\end{aligned}$$

• Αρα η διόρθωση στην ενέργεια $E_{1,0}$ είναι μηδενική, $\Delta\, E_{1,0} = 0$.

ΘΕΜΑ 3 : Η κατάσταση σπιν του σωματιδίου ικανοποιεί την εξίσωση Scroendinger

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(t)\rangle \; = \; \hat{H} \; |\Psi(t)\rangle$$

με την Χαμιλτωνιανή του συστήματος να είναι $\hat{H} \; = \; -\vec{\mu} \cdot \vec{B}$. Η κατεύθυνση του μαγνητικού πεδίου είναι κατά τον άξονα $\hat{x}$, οπότε στην βάση όπου χρησιμοποιούμε τους πίνακες Pauli για την περιγραφή του σπιν του σωματιδίου (σπιν = 1/2), η εξίσωση Scroendinger παίρνει την μορφή

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \; = \; -g\, B(t)\, \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$$

Δρώντας σε αυτήν με τον πίνακα U και χρησιμοποιώντας ότι είναι μοναδιαίος $U^\dagger U = 1$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \; = \; -g\, B(t)\, \frac{\hbar}{2}\, U \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} U^\dagger U \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \; = \; -g\, B(t)\, \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} U \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$$

Από αυτήν προκύπτουν εύκολα οι ασύζευκτες εξισώσεις

$$\dot{\xi}_1 \; = \; i\, \frac{g}{2}\, B(t)\, \xi_1 \qquad , \qquad \dot{\xi}_2 \; = \; -\, i\, \frac{g}{2}\, B(t)\, \xi_2 \tag{1}$$

με τα ξ_1 , ξ_2 να ορίζονται από την σχέση

$$\begin{pmatrix} \xi_1 \\ \xi_2 \end{pmatrix} \; = \; U \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$$

η οποία είναι ισοδύναμη με τις

$$\xi_1 \; = \; \frac{a+b}{\sqrt{2}} \qquad , \qquad \xi_2 \; = \; \frac{a-b}{\sqrt{2}}$$

Επειδή την στιγμή $t = 0$ το σωματίδιο είναι σε κατάσταση με σπιν $\hbar/2$ στον άξονα z έχουμε ότι $a(0) = 1$, $b(0) = 0$ και επομένως $\xi_1(0) = 1/\sqrt{2}$, $\xi_2(0) = 1/\sqrt{2}$. Με αυτές τις αρχικές συνθήκες οι εξισώσεις (;;) ολοκληρώνονται εύκολα από $t = 0$ έως οποιοδήποτε χρόνο και δίνουν

$$\xi_1(t) \; = \; \frac{1}{\sqrt{2}}\, \exp\, (\, i\, \phi(t)\,) \qquad , \qquad \xi_2(t) \; = \; \frac{1}{\sqrt{2}}\, \exp\, (\, -\, i\, \phi(t)\,) \tag{2}$$

όπου $\phi(t) \equiv \frac{g}{2} \int_0^t B(t)\, dt$. Επειδή $a \; = \; (\, \xi_1 + \xi_2\,)/\sqrt{2}$ και $b \; = \; (\, \xi_1 - \xi_2\,)/\sqrt{2}$ από τις (;;) προκύπτει άμεσα ότι

$$a(t) \; = \; \cos\, \phi(t) \qquad , \qquad b(t) \; = \; i\, \sin\, \phi(t)$$

οπότε η κατάσταση κάθε χρονική στιγμή είναι

$$|\Psi(t)\rangle \; = \; \begin{pmatrix} \cos\, \phi(t) \\ i\, \sin\, \phi(t) \end{pmatrix}$$

Από την γραφική απεικόνιση του μαγνητικού πεδίου μπορούμε να έχουμε την $\phi(t)$,

$$\phi(t) \; = \; \left\{ \begin{array}{ccc} g\, B_0\, t/\, 2 & , & 0 < \; t \; < \; t_1 \\ g\, B_0\, (\, -\, t_1/4 + \, t - t^2/4\, t_1\,) & , & 0 \leq x \; \leq \; L \\ 3\, g\, B_0\, t_1\, /4 & , & t_1 < \; t \; < \; 2\, t_1 \end{array} \right.$$

Πλήρης αναστροφή του σπιν για χρόνους $t \; > \; 2\, t_1$ γίνεται όταν $\cos\phi(t) \; = \; 0$, η το ίδιο όταν $\phi(t) = (2n+1)\, \frac{\pi}{2}$ όπου $n =$ ακέραιος . Από την μορφή της $\phi(t)$ έχουμε επομένως ότι

$$B_0 \; = \; (2n+1)\, \frac{2\, \pi}{3\, |g|}$$

Θέματα εξετάσεων - Κβαντομηχανική ΙΙ
Εξετάσεις - 22ας Μαρτίου 2011 , (Τμήμα Α. Λαχανά)

ΘΕΜΑ 1:

Για κίνηση σε κεντρικό δυναμικό να αποδείξετε ότι για καθορισμένη τροχιακή στροφορμή l ισχύουν τα ακόλουθα.

α1) Για μικρές τιμές του r το ακτινικό μέρος $R(r)$ της κυματικής συνάρτησης συμπεριφέρεται ως $R(r) \approx r^{\,l}$ όταν το σωματίδιο κινείται σε δυναμικό με την ιδιότητα $r^2 V(r) \to 0$ για $r \to 0$.

α2) Η Ερμιτιανότητα της ακτινικής ορμής $\hat{p}_r = -i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \right)$ οδηγεί σε μηδενισμό της ακτινικής πυκνότητας πιθανότητας στο σημείο $r = 0$.

ΘΕΜΑ 2:

Σφαιρικό εισερχόμενο κύμα

$$A\,\frac{e^{-i\,k\,r}}{r}$$

πλάτους A, στροφορμής μηδέν, και ενέργειας $E = \hbar^2 k^2 / 2\,m > 0$, σκεδάζεται από δυναμικό

$$V(r) \;=\; \left\{ \begin{array}{ccc} 0 & , & r_0 \;< r < \; +\infty \\ -\,V_0 & , & 0 \;< r \;\leq \; r_0 \end{array} \right.$$

με $V_0 > 0$. Αν B είναι το πλάτος του εξερχομένου μετά την σκέδαση σφαιρικού κύματος, στην περιοχή $r > r_0$, να τεθεί ο λόγος B/A στην μορφή

$$\frac{B}{A} \;=\; F\,e^{\,i\,\phi} \quad , \;\; \mu\epsilon \;\; F > 0$$

και να βρεθεί η F και η φάση ϕ ως συναρτήσεις της ενέργειας. Τι παρατηρείτε ; Για πολύ μεγάλες τιμές του λόγου E/V_0 να βρεθούν τιμές της ενέργειας για τις οποίες η φάση ϕ είναι πολλαπλάσιο του π.

ΘΕΜΑ 3:

Δύο διακρίσιμα σωματίδια με σπιν $s_1 = s_2 = 1/2$, με το δεύτερο εξ αυτών να έχει γυρομαγνητικό λόγο μηδέν, βρίσκονται σε μαγνητικό πεδίο σταθερής έντασης B με την Χαμιλτωνιανή τους να δίνεται από

$$\hat{H} \;=\; \frac{A}{\hbar^2}\,\vec{s}_1 \cdot \vec{s}_2 \;+\; g\,B\,s_{1z}$$

με A , g δοσμένες σταθερές. Να τεθεί η $\hat{H}$ σε μορφή πίνακα στην βάση των ορθοκανονικών ιδιοανυσμάτων $|\phi_i\rangle \;\; i = 1, 2, 3, 4$

$$|\phi_1\rangle = |0,0\rangle \quad , \quad |\phi_2\rangle = |1,1\rangle \quad , \quad |\phi_3\rangle = |1,0\rangle \quad , \quad |\phi_4\rangle = |1,-1\rangle$$

όπου $|S, M\rangle$ τα ιδιοανύσματα του συνολικού σπιν, και από αυτήν να βρεθούν οι δυνατές τιμές της ενέργειας χωρίς την χρήση διαταρακτικής προσέγγισης. Αν $A > 0$ να βρεθεί η μικρότερη ενέργεια και η πιθανότητα να μετρηθεί συνολικό σπιν $S = 0$ στην κατάσταση με αυτή την ενέργεια.

Υπόδειξη: Οι καταστάσεις συνολικού σπιν $S = 1, M = 1, 0, -1$ και $S = 0, M = 0$ είναι

$$|1,1\rangle \;=\; |+,+\rangle \quad , \quad |1,0\rangle \;=\; \frac{1}{\sqrt{2}}\,(\,|+,-\rangle + |-,+\rangle\,) \quad , \quad |1,-1\rangle \;=\; |-,-\rangle \quad , \quad |0,0\rangle \;=\; \frac{1}{\sqrt{2}}\,(\,|+,-\rangle - |-,+\rangle\,)$$

Λύσεις

ΘΕΜΑ 1:

(Εχει διδαχθεί στο μάθημα και είναι μέρος της θεωρίας)

ΘΕΜΑ 2:

Το ακτινικό μέρος γράφεται ως $R(r) = \chi(r)/r$ και η συνάρτηση $\chi(r)$, επειδή το κύμα έχει τροχιακή στροφορμή μηδέν, ικανοποιεί την εξίσωση

$$- \frac{\hbar^2}{2m} \chi'' + V(r)\, \chi \;=\; E\, \chi$$

Για $r_0 \ < r < \ +\infty$ το δυναμικό είναι μηδέν και η γενική λύση είναι $\chi = A\, e^{-i\,k\,r} + B\, e^{+i\,k\,r}$ η το ίδιο

$$R(r) \;=\; A\, \frac{e^{-i\,k\,r}}{r} + B\, \frac{e^{+i\,k\,r}}{r}$$

όπου $k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$. Ο πρώτος όρος είναι το εισερχόμενο σφαιρικό κύμα και ο δεύτερος το εξερχόμενο μετά την σκέδαση ! Για την περιοχή $0 \ \le r < \ r_0$ το δυναμικό είναι $V(r) = -V_0$ και η γενική λύση είναι $\chi = c\, e^{-i\,k_0\,r} + d\, e^{+i\,k_0\,r}$ όπου $k_0 = \sqrt{\frac{2m(E+V_0)}{\hbar^2}}$. Επειδή $\chi(0) = 0$ αυτή γίνεται $\chi(r) = a\, sin(k_0\, r)$ όπου $a =$ σταθερά. Αρα η λύση είναι

$$\chi(r) \;=\; \begin{cases} A\, e^{-i\,k\,r} + B\, e^{+i\,k\,r} & , \quad r_0 \ < r < \ +\infty \\ a\, sin(k_0\, r) & , \quad 0 \ < r \ \le \ r_0 \end{cases}$$

Οι συνθήκες συνέχειας της χ και της παραγώγου της χ' στο σημείο r_0 δίνουν

$$\begin{aligned} a\, sin(k_0\, r_0) &= A\, e^{-i\,k\,r_0} + B\, e^{+i\,k\,r_0} \\ a\, k_0\, cos(k_0\, r_0) &= i\, k\, (-A\, e^{-i\,k\,r_0} + B\, e^{+i\,k\,r_0}) \end{aligned}$$

Διαιρώντας κατά μέλη απαλλοίφεται η σταθερά a και προκύπτει

$$i\, \frac{k}{k_0}\, tan(k_0\, r_0) \;=\; \frac{1 + e^{2ikr_0}\, G}{-1 + e^{2ikr_0}\, G}$$

όπου G είναι ο λόγος $G \equiv B/A$. Λύνωντας ως προς G έχουμε τον ζητούμενο λόγο

$$\frac{B}{A} \;=\; -\, e^{-2ikr_0}\, \frac{1 + i\, \frac{k}{k_0}\, tan(k_0\, r_0)}{1 - i\, \frac{k}{k_0}\, tan(k_0\, r_0)}$$

που εκτός από τον παράγοντα $-\, e^{2ikr_0}$ είναι ο λόγος του μιγαδικού $z = 1 + i\, \frac{k}{k_0}\, tan(k_0\, r_0)$ με τον συζυγή του. Γράφωντας $z = |z|\, e^{i\alpha}$, όπου α η φάση του z, έχουμε

$$\frac{B}{A} \;=\; -\, e^{-2ikr_0}\, e^{2i\alpha} \;=\; e^{i\,\phi}$$

Αρα το μέτρο F του λόγου B/A είναι $F = 1$ και η φάση $\phi = \pi + 2(-k\, r_0 + \alpha)$. Το $F = |B/A|$ είναι μονάδα όπως θα έπρεπε λόγω της εξίσωσης της συνέχειας (διατήρηση πιθανότητας). Για την ακρίβεια το $|B/A|^2$, είναι ο λόγος του μέτρου του ρεύματος του εξερχομένου σφαιρικού κύματος ως προς αυτό το εισερχομένου και θα πρέπει να είναι $|B|^2 = |A|^2$, από την διατήρηση της πιθανότητας. Η φάση ϕ, επειδή $\tan\alpha = Im(z)/Re(z) \;=\; \frac{k}{k_0}\, tan(k_0\, r_0)$, δίνεται από την σχέση

$$\phi \;=\; \pi + 2 \left[tan^{-1} \left(\frac{k}{k_0}\, tan(k_0\, r_0) \right) - k\, r_0 \right]$$

Για πολύ μεγάλες τιμές του λόγου της ενέργειας ως προς το βάθος του δυναμικού, $E/V_0 >> 1$, ο λόγος $\frac{k}{k_0}$ είναι πολύ κοντά στην μονάδα και η φάση ϕ γίνεται

$$\phi \;\simeq\; \pi + 2\left[tan^{-1}\left(\,tan(k\,r_0)\right) - k\,r_0\right] = \;\pi + 2\left[\,k\,r_0 - k\,r_0\right] = \pi$$

άρα για πολύ μεγάλες ενέργειες $E >> V_0$ η φάση είναι $\phi = \pi$, που είναι το ίδιο αποτέλεσμα που παίρνει κανείς αν δεν υπάρχει καθόλου το δυναμικό V_0 !

ΘΕΜΑ 3:

Οι καταστάσεις $|\phi_i\rangle$ $i = 1, 2, 3, 4$ ΔΕΝ είναι ιδιοκαταστάσεις της ολικής Χαμιλτωνιανής λόγω του τελευταίου όρου, που δεν είναι η συνολική τρίτη συνιστώσα του σπιν αλλά μόνο αυτή του ενός σωματιδίου ! Η Χαμιλτωνιανή μπορεί να γραφεί ως

$$\hat{H} \;=\; \frac{A}{2\hbar^2}\,(\vec{s}^{\,2} - \vec{s_1}^{\,2} - \vec{s_2}^{\,2}) + g\,B\;s_{1z} \;\equiv\; \hat{H}_0 + \hat{H}_1$$

Για ευκολία θα θέσουμε τους επι μέρους όρους $\hat{H}_{0,1}$ σε μορφή πίνακα και μετά θα αθροίσουμε τους πίνακες. Για την $\hat{H}_0$ η απάντηση είναι πολύ εύκολη

$$H_0 \;=\; \begin{pmatrix} -3A/4 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & A/4 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & A/4 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & A/4 \end{pmatrix} \tag{1}$$

Για την $\hat{H}_1$ θα χρειασθούμε τα στοιχεία πίνακα του s_{1z}. Θα βρούμε πρώτα τις δράσεις αυτού στα $|\phi_i\rangle$

$$\begin{aligned}
s_{1z}\;|\phi_1\rangle &= s_{1z}\;\frac{|+,-\rangle - |-,+\rangle}{\sqrt{2}} \;= +\frac{\hbar}{2}\;\frac{|+,-\rangle + |-,+\rangle}{\sqrt{2}} \;\equiv\; \frac{\hbar}{2}\;|\phi_3\rangle \\
s_{1z}\;|\phi_2\rangle &= s_{1z}\;|+,+\rangle \;= +\frac{\hbar}{2}\;|+,+\rangle \;\equiv\; \frac{\hbar}{2}\;|\phi_2\rangle \\
s_{1z}\;|\phi_3\rangle &= s_{1z}\;\frac{|+,-\rangle + |-,+\rangle}{\sqrt{2}} \;= +\frac{\hbar}{2}\;\frac{|+,-\rangle - |-,+\rangle}{\sqrt{2}} \;\equiv\; \frac{\hbar}{2}\;|\phi_1\rangle \\
s_{1z}\;|\phi_4\rangle &= s_{1z}\;|-,-\rangle \;= -\frac{\hbar}{2}\;|-,-\rangle \;\equiv -\frac{\hbar}{2}\;|\phi_4\rangle
\end{aligned}$$

Αρα τα μόνα μη μηδενικά στοιχεία του πίνακα είναι

$$\langle\phi_3|\,s_{1z}\;|\phi_1\rangle = \frac{\hbar}{2}\quad,\quad \langle\phi_2|\,s_{1z}\;|\phi_2\rangle = \frac{\hbar}{2}\quad,\quad \langle\phi_1|\,s_{1z}\;|\phi_3\rangle = \frac{\hbar}{2}\quad,\quad \langle\phi_4|\,s_{1z}\;|\phi_4\rangle = -\frac{\hbar}{2}$$

Επομένως εύκολα έχουμε

$$H_1 \;=\; \frac{gB\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{2}$$

Προσθέτωντας τους πίνακες H_0 και H_1 έχουμε για την ολική Χαμιλτωνιανή

$$H \;=\; \begin{pmatrix} -3a & 0 & b & 0 \\ 0 & a+b & 0 & 0 \\ b & 0 & a & 0 \\ 0 & 0 & 0 & a-b \end{pmatrix}$$

όπου $a \equiv A/4$ και $a \equiv gB\hbar/2$.

Για την εύρεση των ιδιοτιμών της ενέργειας θα πρέπει να επιλυθεί η εξίσωση $det(H - \lambda) = 0$. Η ορίζουσα

$det(H-\lambda)$ βρίσκεται πολυ εύκολα αν αναπτύξουμε ως προς την τρίτη γραμμή (που έχει τρία μηδενικά) και η εξίσωση ιδιοτιμών δίνει

$$(a-b-\lambda)(a+b-\lambda)(\lambda^2+2a\,\lambda-3a^2-b^2)=0$$

Αρα οι ιδιοτιμές της ενέργειας είναι

$$\begin{aligned}
E_1 &= a-b \;=\; \frac{A}{4}-\frac{gB\hbar}{2} \\
E_2 &= a+b \;=\; \frac{A}{4}+\frac{gB\hbar}{2} \\
E_3 &= -a+\sqrt{4a^2+b^2} \;=\; -\frac{A}{4}+\sqrt{\frac{A^2}{4}+\frac{(gB\hbar)^2}{4}} \\
E_4 &= -a-\sqrt{4a^2+b^2} \;=\; -\frac{A}{4}-\sqrt{\frac{A^2}{4}+\frac{(gB\hbar)^2}{4}}
\end{aligned}$$

Οταν $A>0$ η μικρότερη ενέργεια είναι η E_4. Το ιδιοάνυσμα $|\xi\rangle$ που αντιστοιχεί σε αυτή είναι μονόστηλος πίνακας με στοιχεία ξ_1,ξ_2,ξ_3,ξ_4 που ικανοποιεί την εξίσωση $H\;|\xi\rangle=E_4\;|\xi\rangle$. Από αυτήν βρίσκεται αμέσως ότι $\xi_2=\xi_4=0$ και $\xi_1=\frac{b}{3a+E_4}\,\xi_3$. Αρα

$$|\xi\rangle \;=\; N\begin{pmatrix} b \\ 0 \\ 3a+E_4 \\ 0 \end{pmatrix}$$

με την N να είναι σταθερά νορμαλισμού. Ο νορμαλισμός $\langle\xi|\xi\rangle=1$ δίνει $|N|^2\,(b^2+(3a+E_4)^2)=1$. Το πλάτος πιθανότητα να μετρήσουμε συνολικό σπιν $S=0$ είναι $\langle\phi_1|\xi\rangle \;=\; N\,b$ και η αντίστοιχη πιθανότητα

$$\Pi \;=\; |\,\langle\phi_1|\xi\rangle\,|^2 \;=\; |N|^2\,b^2 \;=\; \frac{b^2}{b^2+(3a+E_4)^2}$$

Θέματα εξετάσεων - Κβαντομηχανική ΙΙ

Εξετάσεις - 24ης Ιουνίου 2011 , (Τμήμα Α. Λαχανά)

<u>ΘΕΜΑ 1:</u> **(3 μονάδες)**

1Α : Στο άτομο του Υδρογόνου χρησιμοποιήστε το θεώρημα virial για να βρείτε την μέση τιμή του $\frac{1}{r}$ στην κατάσταση με ενέργεια E_n , $n = 1, 2, 3...$. Να επιβεβαιώσετε αυτό που βρήκατε για την περίπτωση της θεμελειώδους ενεργειακής κατάστασης ενέργειας E_1 με αναλυτικό υπολογισμό της μέσης τιμής του $\frac{1}{r}$.
Δίνεται ότι η ιδιοσυνάρτηση της θεμελειώδους ενέργειας είναι $\psi_1(r) = (\pi a_0^3)^{-1/2} e^{-r/a_0}$ όπου $a_0 = \hbar^2/\mu e^2$ η ακτίνα Bohr και $\alpha = e^2/\hbar c$ η σταθερά της λεπτής υφής σε κατάλληλες μονάδες όπου το δυναμικό αλληλεπίδρασης πρωτονίου-ηλεκτρονίου είναι $V(r) = -\frac{e^2}{r}$ με μ την ανηγμένη μάζα του συστήματος.

1Β : Για το άτομο του υδρογόνου το πλάτος μετάβασης για την ηλεκτρομαγνητική αποδιέγερση, στην προσέγγιση διπόλου, από την κατάσταση με ενέργεια E_n σε αυτήν με ενέργεια E_m είναι ανάλογο του

$$A_{mn} = \vec{\epsilon} \cdot \langle m | \vec{x} \, | n \rangle$$

όπου $\vec{\epsilon}$ το άνυσμα πόλωσης της ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας. Αν $\vec{\epsilon}$ είναι στην κατεύθυνση z χρησιμοποιείστε το A_{mn} για να βρείτε ποιές μεταβάσεις είναι επιτρεπτές για αποδιέγερση από την στάθμη $n \geq 2$ στην θεμελειώδη ;
Δίνεται ότι $Y_{00} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$ και $Y_{10} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} cos\theta$

<u>ΘΕΜΑ 2:</u> **(3 μονάδες)**

Για μονοδιάστατο γραμμικό αρμονικό ταλαντωτή κυκλικής συχνότητας ω και μάζας m οι κανονικοποιημένες ιδιοκαταστάσεις ενέργειας $E_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})$ είναι $|n\rangle$ όπου $n = 0, 1, 2...$.

2Α : Δίνεται η κατάσταση

$$|a\rangle = c \sum_{n=0}^{\infty} \frac{a^n}{\sqrt{n\,!}} \, |n\rangle$$

όπου η σταθερά c είναι επιλεγμένη έτσι ώστε η $|a\rangle$ να είναι κανονικοποιημένη στην μονάδα και η σταθερά a είναι εν γένει μιγαδική. Την στιγμή $t = 0$ ο ταλαντωτής βρίσκεται στην κατάσταση $|a\rangle$. Να βρεθεί η πιθανότητα ο ταλαντωτής να βρεθεί στην ίδια κατάσταση $|a\rangle$ την χρονική στιγμή $t > 0$. Ποιά χρονική στιγμή αυτή γίνεται μεγαλύτερη και μικρότερη αντίστοιχα ;

2Β : να βρεθεί η διασπορά της κινητικής και της δυναμικής ενέργειας του ταλαντωτή. Δίνεται ότι $\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \, (\hat{a} + \hat{a}^\dagger)$, $\hat{p_x} = -i \sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}} \, (\hat{a} - \hat{a}^\dagger)$ με $\hat{a} \, |n\rangle = \sqrt{n} \, |n-1\rangle$, $\hat{a}^\dagger \, |n\rangle = \sqrt{n+1} \, |n+1\rangle$.

<u>ΘΕΜΑ 3:</u> **(4 μονάδες)**

3Α : Σύστημα με κβαντικό αριθμό ιδιοστροφορμής (σπιν) $s = 1/2$ περιγράφεται από την Χαμιλτωνιανή

$$\hat{H}_0 = \frac{2\,\epsilon_0}{\hbar^2} \, \vec{L} \cdot \vec{S}$$

όπου $\vec{S}$ η ιδιοστροφορμή και $\vec{L}$ η τροχιακή στροφορμή του. Να βρεθούν οι ιδιοτιμές και οι ιδιοκαταστάσεις της ενέργειας του και ο αντίστοιχος ενεργειακός εκφυλισμός.

3Β : Αν στην Χαμιλτωνιανή $\hat{H}_0$ του ερωτήματος 3Α προστεθεί μικρός διαταρακτικός όρος της μορφής

$$\hat{V} = g\,(\,\hat{L}_z + 2\,\hat{S}_z)$$

να βρεθούν οι διορθώσεις στο ενεργειακό του φάσμα. Να βρεθούν επίσης πόσο απέχουν οι διορθωμένες ενεργειακές στάθμες μεταξύ τους ως συναρτήσεις του κβαντικού αριθμού της τροχιακής στροφορμής l .

Δίνεται ότι οι καταστάσεις συνολικής στροφορμής $|JM;ls\rangle$, όπου J,l,s οι κβαντικοί αριθμοί που χαρακτηρίζουν τα μεγέθη $\vec{J}^2,\vec{L}^2,\vec{s}^2$ και M ο κβαντικός αριθμός που χαρακτηρίζει την J_z συνιστώσα της συνολικής στροφορμής $\vec{J}$, είναι οι ακόλουθοι γραμμικοί συνδιασμοί των καταστάσεων $|l\,m_l;sm_s\rangle$

$$|JM;ls\rangle \;=\; C_+^J\;|l\,m_l=M-1/2;s\,m_s=1/2\rangle + C_-^J\;|l\,m_l=M+1/2;s\,m_s=-1/2\rangle$$

Οι συντελεστές Clebsch - Gordan C_+^J, C_-^J δίνονται από

$$C_+^J \;=\; \left(\frac{l+M+1/2}{2\,l+1}\right)^{1/2} \quad , \quad C_-^J \;=\; \left(\frac{l-M+1/2}{2\,l+1}\right)^{1/2}$$

όταν $J=l+1/2$ και

$$C_+^J \;=\; -\left(\frac{l-M+1/2}{2\,l+1}\right)^{1/2} \quad , \quad C_-^J \;=\; \left(\frac{l+M+1/2}{2\,l+1}\right)^{1/2}$$

όταν $J=l-1/2$

ΛΥΣΕΙΣ

ΘΕΜΑ 1:

1Α : Από το θεώρημα virial έχουμε $2\,\langle T\rangle \;=\; \left\langle \vec{r}\cdot\vec{\nabla}V\right\rangle$. Για δυναμικά που εξαρτώνται μόνο από την απόσταση r έχουμε $\vec{r}\cdot\vec{\nabla}V \;=\; r\frac{dV}{dr}$ οπότε αν το δυναμικό είναι της μορφής Coulomb $V \;=\; g/r$ τότε $\vec{r}\cdot\vec{\nabla}V=-g/r$ η το ίδιο $\vec{r}\cdot\vec{\nabla}V=-V$. Επομένως το θεώρημα virial δίνει $2\,\langle T\rangle=-\langle V\rangle$. Σε κατάσταση με ενέργεια E_n η μέση τιμή της ενέργειας είναι E_n και αυτή βέβαια το άθροισμα της μέσης τιμής της δυναμικής και κινητικής ενέργειας οπότε $E_n=\langle T\rangle+\langle V\rangle$. Από την σχέση μεταξύ δυναμικής και κινητικής ενέργειας όπως προέκυψε από το θεώρημα virial έχουμε επομένως

$$E_n=\langle T\rangle+\langle V\rangle \;=\; -\frac{\langle V\rangle}{2}+\langle V\rangle \;=\; \frac{\langle V\rangle}{2}$$

Αρα προκύπτει ότι

$$\langle V\rangle \;=\; 2\,E_n \quad\Longrightarrow\quad \left\langle -\frac{e^2}{r}\right\rangle \;=\; 2\,E_n$$

και από αυτήν, χρησιμοποιώντας την έκφραση για την ενέργεια του ατόμου του Υδρογόνου

$$\left\langle\frac{1}{r}\right\rangle \;=\; -\frac{2\,E_n}{e^2} \;=\; \frac{1}{a_0\,n^2}$$

(**Σημείωση :** Η εφαρμογή αυτή του θεωρήματος virial διδάσκεται στο μάθημα)

Ο αναλυτικός υπολογισμός της μέσης τιμής $\left\langle\frac{1}{r}\right\rangle$ στην θεμελειώδη ενεργειακή κατάσταση δίνεται από

$$\left\langle\frac{1}{r}\right\rangle \;=\; \int \psi^*\,\frac{1}{r}\,\psi\;dV$$

Το στοιχείο όγκου dV είναι $dV \;=\; r^2\,dr\,d\Omega$, όπου $d\Omega$ η στερεά γωνία. Επειδή η κυματική συνάρτηση δεν εξαρτάται από τις γωνίες η ολοκλήρωση στην στερεά γωνία δίνει $4\,\pi$ οπότε έχουμε,

$$\begin{aligned}\left\langle\frac{1}{r}\right\rangle \;&=\; 4\pi\,\frac{1}{\pi\,a_0^3}\int_0^{+\infty} r\,e^{-2\,r/a_0}\,dr \;=\; -\frac{4}{a_0^3}\,\left(\frac{a_0}{2}\right)\int_0^{+\infty} r\,de^{-2\,r/a_0} \;=\\ &\frac{2}{a_0^2}\left[-r\,de^{-2\,r/a_0}\,|_0^{+\infty}+\int_0^{+\infty} e^{-2\,r/a_0}\,dr\right] \;=\; \frac{2}{a_0^2}\left[0-\frac{a_0}{2}\,e^{-2\,r/a_0}\,|_0^{+\infty}\right]=\frac{1}{a_0}\end{aligned}$$

Αυτό συμπίπτει με το αποτέλεσμα που βρίσκουμε από το θεώρημα virial για την θεμελειώδη ενεργειακή στάθμη, $n=1$.

1Β : Αν $\vec{\epsilon}$ είναι στην κατεύθυνση z το πλάτος A_{mn} γίνεται

$$A_{mn} \;=\; \langle m|\; z\; |n\rangle \;=\; \int \psi^*_{ml_2m_2}\, z\, \psi_{nl_1m_1}\, dV \;=\; \int \psi^*_{ml_2m_2}\, r\, cos\theta\, \psi_{nl_1m_1}\, dV$$

όπου l_2, m_2 και l_1, m_1 είναι οι τιμές των κβαντικών αριθμών της τροχιακής στροφορμής για τις καταστάσεις με ενέργειες E_m και E_n αντίστοιχα. Από την πιο πάνω σχέση άμεσα προκύπτει, γράφωντας τις κυματικές συναρτήσεις ως γινόμενα του ακτινικού τους μέρους και των σφαιρικών αρμονικών,

$$A_{mn} \;=\; \int_0^{+\infty} r^3\, R^*_{m\,l_2}(r)\, R_{n\,l_1}(r) \int Y^*_{l_2m_2}\, cos\theta\, Y_{l_1m_1}\, d\Omega \tag{1}$$

Για αποδιέγερση στην θεμελειώδη κατάσταση οι κβαντικοί αριθμοί της στροφορμής είναι $l_2=0, m_2=0$ οπότε το πλάτος (1) είναι

$$\begin{aligned} A_{mn} \;&=\; I \int Y^*_{00}\; cos\theta\, Y_{l_1m_1}\, d\Omega \;=\; I\, \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \int cos\theta\; Y_{l_1m_1}\, d\Omega \\ &=\; I\, \frac{1}{\sqrt{4\pi}}\, \frac{\sqrt{4\pi}}{\sqrt{3}} \int Y^*_{10}\; Y_{l_1m_1}\, d\Omega \;=\; \frac{I}{\sqrt{3}}\, \delta_{l_11}\delta_{m_10} \end{aligned} \tag{2}$$

όπου I είναι το πρώτο ολοκλήρωμα που περιέχει τα ακτινικά μέρη. Από την (2) προκύπτει ότι οι επιτρεπόμενες μεταβάσεις στην θεμελειώδη κατάσταση, όταν η πόλωση $\vec{\epsilon}$ είναι στην κατεύθυνση z, είναι αυτές που χαρακτηρίζονται από μεταβάσεις με $l_1=1$ και $m_1=0$.

<u>ΘΕΜΑ 2:</u>

2Α : Από την κανονικοποίηση της $|a\rangle$ έχουμε

$$\begin{aligned} 1 \;&=\; \langle a|a\rangle \;=\; c^*c \sum_{m=0}\sum_{n=0} \frac{(a^*)^m}{\sqrt{m\,!}}\, \frac{(a)^n}{\sqrt{n\,!}}\, \langle m|n\rangle \;=\; |c|^2 \sum_{m=0}\sum_{n=0} \frac{(a^*)^m}{\sqrt{m\,!}}\, \frac{(a)^n}{\sqrt{n\,!}}\, \delta_{mn} \\ &=\; |c|^2 \sum_{n=0} \frac{a^n\,(a^*)^n}{n\,!} \;=\; |c|^2 \sum_{n=0} \frac{|a|^{2\,n}}{n\,!} \;=\; |c|^2\, e^{|a|^2} \end{aligned}$$

Από αυτήν προκύπτει ότι $|c|^2 = e^{-|a|^2}$. Η κατάσταση την χρονική στιγμή t είναι

$$|\Psi(t)\rangle \;=\; c \sum_{n=0} e^{-i\,E_n\,t/\hbar}\, \frac{a^n}{\sqrt{n\,!}}$$

και το πλάτος να βρεθεί ο ταλαντωτής ξανά στην κατάσταση $|a\rangle$ είναι $A \;=\; \langle a|\Psi(t)\rangle$. Χρησιμοποιώντας το γεγονός ότι $E_n \;=\; \hbar\,\omega\,\left(n+\frac{1}{2}\right)$, το πλάτος βρίσκεται ότι είναι

$$A \;=\; |c|^2\, e^{-i\,\omega\,t/2} \sum_{n=0} \frac{a^n\,(a^*)^n e^{-i\,n\,\omega\,t}}{n\,!} \;=\; |c|^2\, e^{-i\;\omega\,t/2}\; e^{\,|a|^2\, e^{-i\;\omega\;t}} \;=\; |c|^2\, e^{-i\;\omega\,t/2}\; e^{\,|a|^2\,(cos\omega t - isin\omega t)}$$

Αρα η πιθανότητα είναι

$$P \;=\; |A|^2 \;=\; |c|^4\; e^{\,2\,|a|^2\,cos\omega t} \;=\; e^{-2\,|a|^2}\; e^{\,2\,|a|^2\,cos\omega t} \;=\; e^{-2\,|a|^2\,(1-cos\omega t)} \;=\; e^{-4\,|a|^2\,sin^2\omega t/2}$$

Για τιμές του χρόνου για τους οποίους $sin\omega t/2 = 0$ αυτή είναι μεγίστη, $P=1$, για χρόνους για τους οποίους $sin\omega t/2 = 1$ λαμβάνει την ελαχίστη τιμή της $P = e^{-4\,|a|^2}$.

(**<u>Σημείωση</u> :** Διδάχθηκε στο μάθημα της 29/3/2011)

2B : Ζητούνται οι διασπορές της κινητικής και δυναμικής ενέργειας στις ιδιοκαταστάσεις της ενέργειας $|n\rangle$. Το τετράγωνο της διασποράς της δυναμικής ενέργειας είναι $\Delta V^2 = \langle V^2 \rangle - \langle V \rangle^2$. Για το $\langle V^2 \rangle = \left(\frac{m\,\omega^2}{2}\right)^2 \langle x^4 \rangle$ χρειάζεται να υπολογίσουμε την μέση τιμή του $\langle x^4 \rangle$. Αυτό υπολογίζετε ακριβώς με τον τρόπο που υπολογίζονται οι πρώτης τάξης διορθώσεις στην ενέργεια του γραμμικού αρμονικού ταλαντωτή οταν προστεθεί διαταρακτικός όρος $\lambda\,x^4$ (έχει διδαχθεί στο μάθημα). Για την ακρίβεια είναι το εσωτερικό γινόμενο του $|\Phi\rangle \equiv \hat{x}^4\,|n\rangle$ με τον εαυτό του Το αποτέλεσμα είναι

$$\langle V^2 \rangle \;=\; \left(\frac{m\,\omega^2}{2}\right)^2 \langle \Phi|\Phi \rangle \;=\; \left(\frac{m\,\omega^2}{2}\right)^2 \left(\frac{\hbar}{2\,m\,\omega}\right)^2 3\,(2n^2+2n+1) \;=\; 3\,\left(\frac{\hbar\,\omega}{4}\right)^2 (2n^2+2n+1)$$

Για τον ταλαντωτή γνωρίζουμε ότι οι μέσες τιμές της δυναμικής και κινητικής ενέργειας είναι ίσες (από το θεώρημα virial). Αρά $\langle V \rangle = \langle T \rangle \;=\; E_n/2$. Εύκολα λοιπόν προκύπτει ότι

$$\Delta V^2 = \langle V^2 \rangle - \langle V \rangle^2 \;=\; 3\,\left(\frac{\hbar\,\omega}{4}\right)^2 (2n^2+2n+1) - \left(\frac{\hbar\,\omega}{2}\right)^2 (n+\frac{1}{2})^2 \;=\; \frac{\hbar^2\,\omega^2}{8}\,(n^2+n+1)$$

Το τετράγωνο της διασποράς της κινητικής ενέργειας είναι $\Delta T^2 = \langle T^2 \rangle - \langle T \rangle^2$. Για το $\langle T^2 \rangle = \left(\frac{1}{2\,m}\right)^2 \langle p^4 \rangle$ χρειαζεται να υπολογίσουμε την μέση τιμή του $\langle p^4 \rangle$. Αυτό υπολογίζετε ακριβώς με τον τρόπο που υπολογίζονται οι πρωτης τάξης σχετικιστικές διορθώσεις στην ενέργεια του γραμμικού αρμονικού ταλαντωτή (έχει διδαχθεί στο μάθημα). Για την ακρίβεια αυτό είναι το εσωτερικό γινόμενο του $|\Phi\rangle \equiv \hat{p}^4\,|n\rangle$ με τον εαυτό του. Το αποτέλεσμα είναι

$$\langle T^2 \rangle \;=\; \left(\frac{1}{2\,m}\right)^2 \langle \Phi|\Phi \rangle \;=\; \left(\frac{1}{2\,m}\right)^2 \left(\frac{m\,\omega\,\hbar}{2}\right)^2 3\,(2n^2+2n+1) \;=\; 3\,\left(\frac{\hbar\,\omega}{4}\right)^2 (2n^2+2n+1)$$

Αρα το τερτάγωνο της διασποράς της κινητικής ενέργειας είναι

$$\Delta T^2 = \langle T^2 \rangle - \langle T \rangle^2 \;=\; 3\,\left(\frac{\hbar\,\omega}{4}\right)^2 (2n^2+2n+1) - \left(\frac{\hbar\,\omega}{2}\right)^2 (n+\frac{1}{2})^2 \;=\; \frac{\hbar^2\,\omega^2}{8}\,(n^2+n+1)$$

Παρατηρούμε ότι οι διασπορές ΔV , ΔT είναι ίδιες.

<u>ΘΕΜΑ 3:</u>

3A : Η Χαμιλτωνιανή μπορεί να τεθεί στην μορφή

$$\hat{H}_0 \;=\; \frac{\epsilon_0}{\hbar^2}\;(\;\vec{J}^2 - \vec{L}^2 - \vec{S}^2\;)$$

όπου $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$ η ολική στροφορμή του συστήματος (τροχιακή + σπιν). Οι τελεστές $\vec{J}^2, \vec{L}^2, \vec{S}^2$ και η Χαμιλτωνιανη μετατίθενται μεταξύ τους και οι καταστάσεις συνολικής στροφορμής $|JM;ls\rangle$ είναι ιδιοκαταστάσεις της Χαμιλτωνιανης, διότι

$$\hat{H}_0\;|JM;ls\rangle \;=\; \epsilon_0\;[\;J(J+1) - l(l+1) - s(s+1)\;]\;|JM;ls\rangle$$

Οι ιδιοτιμές της ενέργειας είναι επομένως

$$E_J \;=\; \epsilon_0\;[\;J(J+1) - l(l+1) - s(s+1)\;]$$

και έχουν εκφυλισμό $2J+1$ γιατί οι καταστάσεις $|JM;ls\rangle$, για $M = -J, -J+1, ..., J$, έχουν ίδια ενέργεια. Επειδή $s = 1/2$ ο κβαντικός αριθμός J παίρνει τιμές από $|l-1/2|$ έως $|l+1/2|$ ανά ένα. Αρα για $l = 0$

$J=1/2$ και για $l \geq 1$ ο παίρνει J τις τιμές $J=l-1/2\,,\, l+1/2$. Οι ιδιοτιμές της ενέργειας για $l \geq 1$ είναι επομένως (με αντικατάσταση της τιμής του J)

$$\begin{aligned} E_{J=l+1/2} &= \epsilon_0 \; l \\ E_{J=l-1/2} &= \epsilon_0 \; (-l-1) \end{aligned}$$

Η πρώτη έχει εκφυλισμό $2J+1=2\,l\,+2$ και η δεύτερη έχει εκφυλισμό $2J+1=2\,l$.

Για $l=0$, επειδή $J=1/2$, η ενέργεια είναι $E_{J=1/2}=0$ με εκφυλισμό 2.

3B : Οι διορθώσεις στο ενεργειακό φάσμα δίνονται (σε πρώτη τάξη) από

$$\Delta E_{J,M} \;=\; \langle JM; ls|\, V\, |JM; ls\rangle$$

Επειδή ο διαταρακτικός όρος γράφεται και ως $V=g(\hat{J}_z+\,\hat{S}_z)$ έχουμε

$$\Delta E_{J,M} \;=\; g\; \langle JM; ls|\, \hat{J}_z+\,\hat{S}_z\, |JM; ls\rangle \;=\; g\;(\,\hbar\, M+\langle S_z\rangle)$$

Αρα πρέπει να υπολογισθεί η μέση τιμή $\langle S_z\rangle$ στη κατάσταση $|JM; ls\rangle$. Από την μορφή των $|JM; ls\rangle$ βρίσκεται πολύ εύκολα ότι,

$$\langle S_z\rangle \;=\; \frac{\hbar}{2}\,|C_+^J|^2 \;-\; \frac{\hbar}{2}\,|C_-^J|^2$$

Αντικαθιστώντας τις τιμές των συντελεστών Clebsch - Gordan έχει κανείς

$$\begin{aligned} \langle S_z\rangle &= +\hbar\,\frac{M}{2\,l+1} \qquad , \qquad \gamma\iota\alpha \qquad J=l+1/2 \\ \langle S_z\rangle &= -\hbar\,\frac{M}{2\,l+1} \qquad , \qquad \gamma\iota\alpha \qquad J=l+1/2 \end{aligned}$$

οπότε οι διορθώσεις στην ενέργεια $\Delta E_{J,M} \;=\; g\;(\,\hbar\, M+\langle S_z\rangle)$ είναι

$$\begin{aligned} \Delta E_{J=l+1/2,M} &= g\,\hbar\,(M+\frac{M}{2\,l+1}) \;=\; g\,\hbar\,M\,\left(\frac{2l+2}{2l+1}\right) \qquad , \qquad \gamma\iota\alpha \qquad J=l+1/2 \\ \Delta E_{J=l-1/2,M} &= g\,\hbar\,(M-\frac{M}{2\,l+1}) \;=\; g\,\hbar\,M\,\left(\frac{2l}{2l+1}\right) \qquad , \qquad \gamma\iota\alpha \qquad J=l-1/2 \end{aligned}$$

Οι διορθωμένες ενεργειακές στάθμες, όταν $J=l+1/2$, απέχουν ενεργειακά, η κάθε μία από την προηγουμένη και την επομένη, απόσταση $g\,\hbar\,\left(\frac{2l+2}{2l+1}\right)$ ενώ αυτές με $J=l-1/2$ απέχουν $g\,\hbar\,\left(\frac{2l}{2l+1}\right)$.

Θέματα εξετάσεων - Κβαντομηχανική ΙΙ

Εξετάσεις - 31ης Οκτωβρίου 2011 , (Τμήμα Α. Λαχανά)

ΘΕΜΑ 1:

Α : Αν $R(r)$ το ακτινικό μέρος κυματικής συνάρτησης αποδείξτε ότι η συνάρτηση $u(r) \equiv r\,R(r)$ μηδενίζεται όταν $r = 0$. Ποιά είναι η φυσική σημασία της $u(r)$;

Β : Στο άτομο του Υδρογόνου χρησιμοποιήστε το θεώρημα virial για να βρείτε την μέση τιμή του $\frac{1}{r}$ στην κατάσταση με ενέργεια $E_n = -\mu c^2 \alpha^2/(2n^2)$, $n = 1, 2, 3...$. Να επιβεβαιώσετε αυτό που βρήκατε για την περίπτωση της θεμελειώδους ενεργειακής κατάστασης ενέργειας E_1 με αναλυτικό υπολογισμό της μέσης τιμής του $\frac{1}{r}$. Δίνεται ότι η ιδιοσυνάρτηση της θεμελειώδους ενέργειας είναι $\psi_1(r) \;=\; (\pi\, a_0^3)^{-1/2}\, e^{-r/a_0}$ όπου $a_0 = \hbar^2/\mu e^2$ η ακτίνα Bohr και $\alpha = e^2/\hbar c$ η σταθερά της λεπτής υφής σε κατάλληλες μονάδες όπου το δυναμικό αλληλεπίδρασης πρωτονίου-ηλεκτρονίου είναι $V(r) = -\frac{e^2}{r}$ με μ την ανηγμένη μάζα του συστήματος.

ΘΕΜΑ 2:

Δύο σωματίδια με σπιν $S_1 = S_2 = 1/2$ βρίσκονται σε δυναμικό γραμμικού αρμονικού ταλαντωτή και συγχρόνως αλληλεπιδρούν μέ δυναμικό

$$\hat{V} \;=\; \frac{2\epsilon}{\hbar^2}\,\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2$$

Να βρεθεί η θεμελειώδης ενέργεια του συστήματος όταν ι) τα σωματίδια είναι ταυτοτικά, ιι) τα σωματίδια είναι διακρίσιμα.

(Δικαιολογήστε πλήρως την απάντησή σας).

ΘΕΜΑ 3:

Σωματίδιο με σπιν $S = 1/2$ και μαγνητική ροπή $\vec{\mu} = g\,\vec{S}$ βρίσκεται σε χρονικά μεταβαλλόμενο μαγνητικό πεδίο μέτρου $B(t)$ με προσανατολισμό κατά την κατεύθυνση του άξονα x . Την χρονική στιγμή $t = 0$ το σωματίδιο έχει προσανατολισμό με σπίν $-\hbar/2$ κατά την $z-$κατεύθυνση. Να βρεθεί η κατάσταση του συστήματος για $t > 0$ ως συνάρτηση της ποσότητας

$$\phi(t) \;=\; \int_0^t B(t')\,dt'$$

Να βρεθούν οι μέσες τιμές για κάθε συνιστώσα του σπιν και οι αντίστοιχες διασπορές αυτών την χρονική στιγμή t.

$\Longrightarrow$ **Λύσεις**

Λύσεις

ΘΕΜΑ 1

1A) Ο μηδενισμός $u(0) = 0$ αποδεικνύεται με την χρήση της αυτοσυζυγίας του τελεστή $\hat{p}_r = -i\hbar\,(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r})$. (Εχει αναπτυχθεί εκτενώς στο μάθημα όπου δόθηκε και η φυσική σημασία του $u(r)$ και υπάρχει και στις σημειώσεις. Επίσης ηταν και θέμα σε προηγούμενες εξετάσεις.)

1B) Το θεώρημα virial $2\,\langle T\rangle = \left\langle \vec{r}\cdot\vec{\nabla}V\right\rangle$ εφαρμοζόμενο για δυναμικά τύπου Coulomb δίνει $\langle T\rangle = -\,\langle V\rangle\,/2$. Επομένως για ιδιοκατάσταση της ενέργειας έχουμε $E_n = \langle T\rangle + \langle V\rangle = \langle V\rangle/2$. Από αυτην επομενως προκύπτει ότι $-e^2\,\left\langle \frac{1}{r}\right\rangle = E_n$ και με δεδομένη την ενέργεια και τους ορισμούς των σταθερών έχουμε $\left\langle \frac{1}{r}\right\rangle = \frac{1}{a_0\,n^2}$ (Αυτό διδάσκεται στα μαθήματα και υπάρχει και στις σημιώσεις των παραδόσεων). Ο αναλυτικός υπολογισμός του $\left\langle \frac{1}{r}\right\rangle$ γίνεται όπως ακολουθεί

$$
\begin{aligned}
\left\langle \frac{1}{r}\right\rangle &= \int |\psi_1(r)|^2\,\frac{1}{r}\,dV = (\,\pi\,a_0^3\,)^{-1}\int \frac{e^{-2r/a_0}}{r}\,r^2 dr d\Omega = \frac{4\pi}{\pi\,a_0^3}\int_0^\infty e^{-2r/a_0}\,r\,dr \\
&= -\,\frac{4}{a_0^3}\,\frac{a_0}{2}\int_0^\infty r\,de^{-2r/a_0} \;=\; -\,\frac{2}{a_0^2}\left\{ r\,e^{-2r/a_0}\Big|_0^\infty - \int_0^\infty e^{-2r/a_0}dr \right\} \\
&= -\,\frac{2}{a_0^2}\left\{ 0 + \frac{a_0}{2}\,e^{-2r/a_0}\Big|_0^\infty \right\} \;=\; -\,\frac{2}{a_0^2}\left\{ 0 - \frac{a_0}{2}\right\} \;=\; \frac{1}{a_0}
\end{aligned}
$$

Αυτό πράγματι συμπίπτει με το αποτέλεσμα που προκύπτει από το θεώρημα virial για $n = 1$.

ΘΕΜΑ 2

Η Χαμιλτωνιανή του συστήματος των δύο σωματιδίων είναι

$$\hat{H} \;=\; \hat{H}_1 \;+\; \hat{H}_2 \;+\; \hat{V}$$

όπου $\hat{H}_k \;=\; \frac{p_k^2}{2\,m_k} \;+\; \frac{m_k\,\omega_k^2}{2}\,x_k^2$, για $k = 1, 2$. Αν $\vec{S} \;=\; \vec{S}_1 + \vec{S}_2$ τότε η Χαμιλτωνιανή του συστήματος γράφεται ως

$$\hat{H} \;=\; \hat{H}_1 \;+\; \hat{H}_2 \;+\; \frac{\epsilon}{\hbar^2}\,\left(\vec{S}^{\,2} \,-\, \vec{S}_1^2 \,-\, \vec{S}_2^2\right)$$

Γενικά αν δεν υπάρχει κανείς περιορισμός τα ιδιοανύσματα της Χαμιλτωνιανής είναι της μορφής

$$|\Psi_{n_1 n_2 S M}\rangle \;=\; \phi_{n_1}(x_1)\,\phi_{n_2}(x_2)\;|S, M, S_1, S_2\rangle$$

όπου $|S, M, S_1, S_2\rangle$ είναι οι καταστάσεις συνολικού σπιν και $\phi_{n_1}(x_1)\,,\,\phi_{n_2}(x_2)$ οι ιδιοσυναρτήσεις των $\hat{H}_1$ και $\hat{H}_2$ αντίστοιχα με ιδιοτιμές $E_{n_1} = \hbar\omega_1\left(n_1 + \frac{1}{2}\right)$ και $E_{n_2} = \hbar\omega_2\left(n_2 + \frac{1}{2}\right)$ όπου $n_1, n_2 \,=\, 0, 1, 2, ...$ Η δράση της Χαμιλτωνιανής $\hat{H}$ επάνω στα $|\Psi_{n_1 n_2 S M}\rangle$ δίνει

$$\hat{H}\;|\Psi_{n_1 n_2 S M}\rangle \;=\; E_{n_1 n_2 S M}\;|\Psi_{n_1 n_2 S M}\rangle$$

με τις ιδιοτιμές της ενέργειας $E_{n_1 n_2 S M}$ να δίνονται από

$$E_{n_1 n_2 S M} \;=\; E_{n_1} \;+\; E_{n_2} \;+\; \epsilon\;\left(S(S+1) - S_1(S_1+1) - S_2(S_2+1)\,\right)$$

η ισοδύναμα από

$$E_{n_1 n_2 S M} \;=\; \hbar\omega_1\left(n_1 + \frac{1}{2}\right) \;+\; \hbar\omega_2\left(n_2 + \frac{1}{2}\right) \;+\; \epsilon\;\left(S(S+1) - \frac{3}{2}\right)$$

Οι ιδιοτιμές του συνολικού σπιν είναι $S = 0, 1$.

Διακρίσιμα σωματίδια :

Στην περίπτωση αυτή δεν υπάρχει κανείς περιορισμός στην μορφή των καταστάσεων $|\Psi_{n_1 n_2 S M}\rangle$

και η ελάχιστη (= θεμελειώδης) ενέργεια δίνεται για την ελάχιστη ενέργεια των ταλαντωτών, δηλαδή για $n_1 = n_2 = 0$, και την ελάχιστη τιμή της ενέργειας αλληλεπίδρασης λόγω σπιν που συμβαίνει όταν $S = 0$ για $\epsilon > 0$, και $S = 1$ όταν $\epsilon < 0$. Εχουμε δηλαδή

$$\begin{aligned} E_{\epsilon\lambda\alpha\chi.} &= \frac{\hbar}{2}(\omega_1+\omega_2) - \frac{3\epsilon}{2} \qquad \gamma\iota\alpha \qquad \epsilon > 0 \quad (\,\mu\epsilon \quad S=0) \\ E_{\epsilon\lambda\alpha\chi.} &= \frac{\hbar}{2}(\omega_1+\omega_2) + \frac{\epsilon}{2} \qquad \gamma\iota\alpha \qquad \epsilon < 0 \quad (\,\mu\epsilon \quad S=1) \end{aligned}$$

Ταυτοτικά σωματίδια :

Επειδή τα σωματίδια έχουν σπιν=1/2 είναι φερμιόνια. Αρα οφείλουν να υπακούουν την απαγορευτική αρχή του Pauli και η κατάσταση $|\Psi_{n_1 n_2 SM}\rangle$ πρέπει να είναι πλήρως αντισυμμετρική στην εναλλαγή των θέσεων $x_1 \leftrightarrow x_2$ και των αντιστοίχων σπιν $s_1 \leftrightarrow s_2$. Επειδή η κατάσταση συνολικού σπιν $S = 1$ είναι συμμετρική σε $s_1 \leftrightarrow s_2$ το χωρικό μέρος της κατάστασης θα πρέπει να είναι αντισυμμετρικό σε $x_1 \leftrightarrow x_2$. Αντίστοιχα η κατάσταση συνολικού σπιν $S = 0$ είναι αντισυμμετρική σε $s_1 \leftrightarrow s_2$ και επομένως το χωρικό μέρος θα πρέπει να είναι συμμετρικό σε $x_1 \leftrightarrow x_2$. Οι αντισυμμετρικές καταστάσεις επομένως που μπορούν να κατασκευασθούν από τις $|S, M, S_1, S_2\rangle$ και είναι ιδιοκαταστάσεις της συνολικής Χαμιλτωνιανής είναι της μορφής

$$\begin{aligned} |\Psi_1\rangle &= (\phi_{n_1}(x_1)\,\phi_{n_2}(x_2) - \phi_{n_1}(x_2)\,\phi_{n_2}(x_1))\,|S=1, M, S_1, S_2\rangle \;\; o\tau\alpha\nu \;\; S=1, M=-1,0,+1 \\ |\Psi_0\rangle &= (\phi_{n_1}(x_1)\,\phi_{n_2}(x_2) + \phi_{n_1}(x_2)\,\phi_{n_2}(x_1))\,|S=0, M=0, S_1, S_2\rangle \;\; o\tau\alpha\nu \;\; S=0, M=0 \end{aligned}$$

Οι καταστάσεις $|\Psi_1\rangle$ μηδενίζονται για $n_1 = n_2$ και επομένως μόνον οι καταστάσεις με $n_1 \neq n_2$ είναι αποδεκτές. Επομένως

Για $S = 1$ η μικρότερη τιμή της ενέργειας επιτυγχάνεται για $n_1 = 1, n_2 = 0$ η $n_1 = 0, n_2 = 1$ και είναι :

$$E_1 = 2\hbar\omega + \frac{\epsilon}{2} \tag{1}$$

Για $S = 0$ οι κβαντικοί αριθμοί n_1, n_2 μπορεί να είναι ίδιοι και η μικρότερη τιμή της ενέργειας επιτυγχάνεται για $n_1 = n_2 = 0$. Αυτή έχει τιμή

$$E_0 = \hbar\omega - \frac{3\,\epsilon}{2} \tag{2}$$

Να παρατηρηθεί ότι στην περίπτωση των ταυτοτικών σωματιδίων οι συχνότητες είναι ίδιες, $\omega_1 = \omega_2 \equiv \omega$, γιατί τα σωματίδια ως ταυτοτικά έχουν ίδιες μάζες, Οταν $\epsilon > 0$ η μικρότερη των E_1 και E_0 είναι η E_0. Οταν $\epsilon < 0$ θα πρέπει να συγκριθούν οι τιμές των E_1 και E_0. Παρατηρούμε ότι $E_1 < E_0$ όταν $\hbar\,\omega < 2|\epsilon|$ ενώ $E_0 < E_1$ όταν $\hbar\,\omega > 2|\epsilon|$. Συγκεντρωτικά έχουμε λοιπόν ότι η θεμελειώδης ενέργεια είναι

$$\begin{aligned} E_{\epsilon\lambda\alpha\chi.} &= \hbar\omega - \frac{3\,\epsilon}{2} \qquad o\tau\alpha\nu \quad \epsilon > 0 \qquad (\,\mu\epsilon \quad S=0) \\ E_{\epsilon\lambda\alpha\chi.} &= \hbar\omega - \frac{3\,\epsilon}{2} \qquad o\tau\alpha\nu \quad \epsilon < 0 \;\; \kappa\alpha\iota \quad \hbar\omega > 2|\epsilon| \quad (\,\mu\epsilon \quad S=0) \\ E_{\epsilon\lambda\alpha\chi.} &= 2\,\hbar\omega + \frac{\epsilon}{2} \qquad o\tau\alpha\nu \quad \epsilon < 0 \;\; \kappa\alpha\iota \quad \hbar\omega < 2|\epsilon| \quad (\,\mu\epsilon \quad S=1) \end{aligned}$$

<u>ΘΕΜΑ 3</u> : Η κατάσταση σπιν του σωματιδίου ικανοποιεί την εξίσωση Scroendinger

$$i\,\hbar\,\frac{\partial}{\partial\,t}\,|\Psi(t)\rangle \;=\; \hat{H}\;|\Psi(t)\rangle$$

με την Χαμιλτωνιανή του συστήματος να είναι $\hat{H} \;=\; -\vec{\mu}\cdot\vec{B}$. Η κατεύθυνση του μαγνητικού πεδίου είναι κατά τον άξονα $\hat{x}$, οπότε στην βάση όπου χρησιμοποιούμε τους πίνακες Pauli για την περιγραφή του σπιν του σωματιδίου (σπιν = 1/2), η εξίσωση Scroendinger παίρνει την μορφή

$$i\,\hbar\,\frac{\partial}{\partial\, t}\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \;=\; -g\,B(t)\,\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$$

από την οποίαν έχουμε τις εξισώσεις

$$\dot{a} \;=\; i\,\frac{g}{2}\,B(t)\,b \qquad , \qquad \dot{b} \;=\; i\,\frac{g}{2}\,B(t)\,a \tag{3}$$

Από αυτήν προκύπτουν εύκολα με πρόσθεση και αφαίρεση κατά μέλη οι ασύζευκτες εξισώσεις για το άθροισμα $S = a + b$ και την διαφορά $D = a - b$

$$\dot{S} \;=\; +i\,\frac{g}{2}\,B(t)\,S \qquad , \qquad \dot{D} \;=\; -i\,\frac{g}{2}\,B(t)\,D \tag{4}$$

Επειδή την στιγμή $t = 0$ το σωματίδιο είναι σε κατάσταση με σπιν $-\hbar/2$ στον άξονα z έχουμε ότι $a(0) = 0$, $b(0) = 1$ και επομένως $S(0) = 1$, $D(0) = -1$. Με αυτές τις αρχικές συνθήκες οι εξισώσεις (4) ολοκληρώνονται εύκολα από $t = 0$ έως οποιοδήποτε χρόνο και δίνουν

$$S(t) \;=\; \exp\,(\,i\,g\,\phi(t)/2\,) \qquad , \qquad D(t) \;=\; -\,\exp\,(\,-\,i\,g\,\phi(t)/2\,) \tag{5}$$

όπου $\phi(t) \equiv \int_0^t B(t)\,dt$. Επειδή $a \;=\; (\,S + D\,)/2$ και $b \;=\; (\,S - D\,)/2$ από τις (5) προκύπτει ότι

$$a(t) \;=\; i\,\sin\,(\,g\,\phi(t)/2\,) \qquad , \qquad b(t) \;=\; \cos\,(\,g\,\phi(t)/2\,)$$

οπότε η κατάσταση κάθε χρονική στιγμή είναι

$$|\Psi(t)\rangle \;=\; \begin{pmatrix} i\,\sin\,(\,g\,\phi(t)/2\,) \\ \cos\,(\,g\,\phi(t)/2\,) \end{pmatrix}$$

Για τις μέσες τιμές των συνιστωσών του σπίν $\hat{s}_i$ έχουμε γενικά

$$\langle s_i\rangle \;=\; \langle\psi|\,\hat{s}_i\,|\psi\rangle \;=\; (a^*, b^*)\,\hat{s}_i\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$$

από τις οποίες προκύπτει εύκολα ότι

$$\langle s_x\rangle = 0 \quad , \quad \langle s_y\rangle = -\frac{\hbar}{2}\,\sin\,(\,g\,\phi(t)\,) \quad , \quad \langle s_z\rangle = -\frac{\hbar}{2}\,\cos\,(\,g\,\phi(t)\,)$$

Επειδή τα τετράγωνα των τελεστων του σπίν είναι $\hat{s}_i^2 \;=\; \frac{\hbar^2}{4}\,\mathbf{1}$, όπου $\mathbf{1}$ είναι ο ταυτοτικός πίνακας διαστάσεων 2×2, έχουμε

$$\left\langle s_x^2\right\rangle = \left\langle s_y^2\right\rangle = \left\langle s_z^2\right\rangle = \frac{\hbar^2}{4}$$

οπότε οι διασπορές $\Delta\,s_i$, των οποίων τα τετράγωνα είναι $(\Delta\,s_i)^2 = \left\langle s_i^2\right\rangle - \langle s_i\rangle^2$, δίνονται από

$$\Delta s_x = \frac{\hbar}{2} \quad , \quad \Delta s_y = \frac{\hbar}{2}\,\cos\,(\,g\,\phi(t)\,) \quad , \quad \Delta s_z = \frac{\hbar}{2}\,\sin\,(\,g\,\phi(t)\,)$$

Θέματα εξετάσεων - Κβαντομηχανική ΙΙ
Εξετάσεις - 27ης Φεβρουαρίου 2012 , (Τμήμα Α. Λαχανά)

ΘΕΜΑ 1:

Την χρονική στιγμή $t=0$ η κυματική συνάρτηση κάποιου σωματιδίου είναι

$$\psi(x,y,z) \;=\; f(r)\,(x^2+\lambda\,y^2)$$

όπου $r=\sqrt{(x^2+y^2+z^2)}$, $f(r)$ κάποια μιγαδική εν γένει συνάρτηση του r και λ πραγματική σταθερά. Να βρεθούν οι πιθανότητες να μετρηθούν τιμές για την $z-$συνιστώσα της τροχιακής στροφορμής ίσες με $0,\ \pm\hbar,\ \pm 2\ \hbar, \pm 3\ \hbar$ .... Ποιά η μέση τιμή της $z-$συνιστώσας της τροχιακής στροφορμής και ποιά η διασπορά αυτής στην κατάσταση αυτή; Ποιά η μέση τιμή της $y-$συνιστώσας της τροχιακής στροφορμής ;

ΘΕΜΑ 2:

Δύο ταυτοτικά σωματίδια με σπιν $S_1=S_2=1/2$ κινούνται σε μία διάσταση σε δυναμικό γραμμικού αρμονικού ταλαντωτή συχνότητας ω και επιπροσθέτως αλληλεπιδρούν μεταξύ τους μέ δυναμικό

$$\hat{V} \;=\; g\,\frac{m\,\omega^2}{\hbar^2}\,\vec{S}_1\cdot\vec{S}_2\,(x_1-x_2)^2$$

το οποίο θεωρείται ως μικρή διαταραχή. Να βρεθεί η χαμηλώτερη ενέργεια του συστήματος σε πρώτη τάξη ως προς την πολύ μικρή αδιάστατη σταθερά $g>0$ όταν τα σωματίδια έχουν συνολικό σπιν $S=0$ και $S=1$ αντίστοιχα.

Βοήθημα : Για τις κανονικοποιημένες ιδιοσυναρτήσεις $\phi_0(x)$ και $\phi_1(x)$ του ταλαντωτή που αντιστοιχούν σε ενέργειες $\hbar\omega/2$ και $3\hbar\omega/2$ δίνεται ότι $\int_{-\infty}^{+\infty}\phi_0(x)\phi_1(x)x\,dx=\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}$

ΘΕΜΑ 3:

Σωματίδιο με σπιν $S=1$ και μαγνητική ροπή $\vec{\mu}=g\,\vec{S}$ τοποθετείται σε χρονικά μεταβαλλόμενο μαγνητικό πεδίο μέτρου $B(t)$ με προσανατολισμό κατά την κατεύθυνση του άξονα x. Την χρονική στιγμή $t=0$ το σωματίδιο έχει προσανατολισμό με σπίν $+\hbar$ κατά την $z-$κατεύθυνση. Να βρεθεί η κατάσταση του συστήματος για $t>0$ ως συνάρτηση της ποσότητας

$$\phi(t) \;=\; \int_0^t B(t')\,dt'$$

στην βάση των ιδιοανυσμάτων της $z-$συνιστώσας του σπιν, $\hat{S}_z$. Από αυτήν να βρεθεί η πιθανότητα να μετρηθεί τιμή για την $z-$συνιστώσα ίση με $+\hbar,\ -\hbar$ και 0 αντίστοιχα. Ποιά η μέση τιμή και ποιά η διασπορά της $z-$συνιστώσας του σπίν την χρονική στιγμή $t>0$;

Βοήθημα : Μία αναπαράσταση των $\hat{S}_x$, $\hat{S}_z$ σε μορφή πίνακα είναι

$$\hat{S}_x \;=\; \frac{\hbar}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}0&1&0\\1&0&1\\0&1&0\end{pmatrix} \qquad \hat{S}_z \;=\; \hbar\begin{pmatrix}1&0&0\\0&0&0\\0&0&-1\end{pmatrix}$$

$\Longrightarrow$ **Λύσεις**

Λύσεις

ΘΕΜΑ 1

Σε σφαιρικές συντεταγμένες η κυματική συνάρτηση γράφεται ως

$$\psi \;=\; r^2 f(r)\, sin^2\theta\, (\, cos^2\phi + \lambda\, sin^2\phi\,)$$

και εκφράζοντας τα $sin\phi, \cos\phi$ συναρτήσει των $e^{\pm\, i\phi}$

$$\psi \;=\; \frac{1}{4}\, r^2 f(r)\, sin^2\theta\, [\, (1-\lambda)\, e^{2\, i\phi} + (1-\lambda)\, e^{-2\, i\phi} + 2\,(1+\lambda)\,]$$

Αρα η κυματοσυνάρτηση εκφράζεται συναρτήσει μόνο των $e^{i\, m\phi}$, με $m = 2, -2, 0$, που είναι ιδιοσυναρτήσεις της z- συνιστώσας της τροχιακής στροφορμής με ιδιοτιμές $2\hbar, -2\hbar, 0$ αντίστοιχα. Οι συντελεστές τους δίνουν και τα πλάτη των σχετικών πιθανοτήτων (λεπτομέρεις στις παραδόσεις των μαθημάτων). Στην προκειμένη περίπτωση οι πιθανότητες $P_m, m = 0, 2, -2$ να μετρηθούν τιμές ίσες με $0,\, 2\hbar, -2\hbar,$ είναι, επειδή το λ είναι πραγματικός αριθμός,

$$\begin{aligned} P_{\pm 2} &= \frac{(1-\lambda)^2}{2\,(1-\lambda)^2 + 4\,(1+\lambda)^2} = \frac{(1-\lambda)^2}{6\,\lambda^2 + 4\,\lambda + 6} \\ P_0 \;\; &= \frac{4\,(1+\lambda)^2}{2\,(1-\lambda)^2 + 4\,(1+\lambda)^2} = \frac{4\,(1+\lambda)^2}{6\,\lambda^2 + 4\,\lambda + 6} \end{aligned}$$

Η πιθανότητα να μετρηθούν τιμές διαφορετικές των $0,\, 2\hbar, -2\hbar,$ είναι μηδενικές. Η μέση τιμή της z- συνιστώσας της τροχιακής στροφορμής και η μέση τιμή του τετραγώνου αυτής είναι

$$\begin{aligned} \langle L_z \rangle \;&=\; P_2\,(2\,\hbar) + P_{-2}\,(-2\,\hbar) + P_0\,(0\,\hbar) \quad = \quad 0 \\ \left\langle L_z^2 \right\rangle \;&=\; P_2\,(2\,\hbar)^2 + P_{-2}\,(-2\,\hbar)^2 + P_0\,(0\,\hbar)^2 = (2\,\hbar)^2\; \frac{2(1-\lambda)^2}{6\,\lambda^2 + 4\,\lambda + 6} \end{aligned}$$

Επειδή η μέση τιμή είναι μηδέν η διασπορά είναι $\Delta L_z = \sqrt{\langle L_z^2 \rangle}$.

Για την μέση τιμή της y- συνιστώσας $\langle L_y \rangle$, δουλέυοντας σε Καρτεσιανές συντεταγμένες εχει κανείς μετα από εύκολες παραγωγίσιες

$$\hat{L}_y \psi = -i\hbar\, (z\, \frac{\partial}{\partial x} - x\, \frac{\partial}{\partial z})\, \psi(x,y,z) = -i\hbar\; 2 f(r)\, xz$$

και επομένως για την μέση τιμή έχουμε άμεσα

$$\langle L_y \rangle = -i\hbar\; 2 \int_V |f|^2\, (x^2 + \lambda y^2)\, xz\; dV$$

Το αριστερό μέλος είναι πραγματικός αριθμός, ως μέση τιμή φυσικής ποσότητας, αλλα το δεξί μέλος φανταστικός άρα και τα δύο μέλη πρέπει να είναι μηδενικά για να συμβαίνει αυτό. Αρα η μέση τιμή $\langle L_y \rangle$ είναι μηδέν.

Ενας άλλος τρόπος να δείξει κανείς ότι $\langle L_y \rangle = 0$ είναι να χρησιμοποιήσει το γεγονός ότι η y- συνιστώσα είναι ανάλογη της διαφοράς $\hat{L}_+ - \hat{L}_-$, όπου $\hat{L}_+$, $\hat{L}_-$ είναι οι τελεστές αναβίβασης και καταβίβασης της τρίτης συνιστώσας της τροχιακής στροφιορμής. Ο $\hat{L}_+$, από την ιδιότητα, του δρώντας επάνω στην ψ δίνει γραμμικό συνδιασμό ιδιοκαταστάσεων της z- συνιστώσας με ιδιοτιμές $3\,\hbar, -\hbar, \hbar$ άρα ορθογώνιο στην ψ. Ως εκ τούτου $\langle L_+ \rangle = 0$. Ο $\hat{L}_-$ δρώντας επάνω στην ψ δίνει γραμμικό συνδιασμό ιδιοκαταστάσεων της z- συνιστώσας με ιδιοτιμές $\hbar, -3\,\hbar$ άρα πάλι ορθογώνιο στην ψ. Ως εκ τούτου $\langle L_- \rangle = 0$. Αρα $\langle L_+ - L_- \rangle = 0$ το οποίο συνεπάγεται $\langle L_y \rangle = 0$.

ΘΕΜΑ 2

Αν αγνοηθεί η αλληλεπίδραση $\hat{V}$ μεταξύ των σωματιδίων η Χαμιλτωνιανή του προβλήματος είναι

$$\hat{H}_0 = \hat{H}_1 + \hat{H}_2 = \left(\frac{\hat{p}_1^{\,2}}{2\,m} + \frac{m\omega^2}{2}\,x_1^{\,2}\right) + \left(\frac{\hat{p}_2^{\,2}}{2\,m} + \frac{m\omega^2}{2}\,x_2^{\,2}\right)$$

όταν προστεθεί και όρος $\hat{V}$ η Χαμιλτωνιανή του προβλήματος είναι

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$$

Ο όρος $\hat{V}$ γράφεται ως

$$\hat{V} = g\,\frac{m\,\omega^2}{2\,\hbar^2}\,(\vec{S}^{\,2} - \vec{S}_1^{2} - \vec{S}_2^{2})\,(x_1 - x_2)^2$$

όπου $\vec{S}$ το συνολικό σπιν των σωματιδίων. Οι καταστάσεις συνολικού σπιν των δύο σωματιδίων είναι γενικά της μορφής

$$|\Psi\rangle = \Phi(x_1, x_2)\ |S, M; s_1, s_2\rangle \tag{1}$$

όπου $\Phi(x_1, x_2)$ είναι το χωρικό μέρος και $|S, M\rangle$ το μέρος που περιγράφει το συνολικό σπίν με κβαντικούς αριθμούς $S = 0, 1$. Στην περίπτωση ταυτοτικών φερμιονίων, όπως αυτή του προβλήματος, η κατάσταση $|\Psi\rangle$ πρέπει να είναι ολικά αντισυμμετρική.
Επειδή η g είναι πολύ μικρή η κάθε ενεργειακή στάθμη E του συστήματος σε πρώτη τάξη στην g δίνεται, σύμφωνα με την θεωρία διαταραχών, από την έκφραση

$$E' = E + \langle\Psi|\,\hat{V}\,|\Psi\rangle$$

όπου E είναι η αντίστοιχη ενέργεια με την απουσία της διαταραχής και $|\Psi\rangle$ η αντίστοιχη ιδιοκατάσταση της ενέργειας της Χαμιλτωνιανής $\hat{H}_0$. Για κάθε κατάσταση (**;;**) έχουμε

$$\begin{aligned}&\Delta E \equiv \langle\Psi|\,\hat{V}\,|\Psi\rangle = \\ &\frac{g\,m\,\omega^2}{2}[S(S+1) - s_1(s_1+1) - s_2(s_2+1)]\int\!\!\int |\Phi(x_1, x_2)|^2\,(x_1 - x_2)^2\,dx_1 dx_2\end{aligned} \tag{2}$$

όπου οι ολοκληρώσεις πραγματοποιούνται από $-\infty$ έως $+\infty$.

<u>Για καταστάσεις με $S = 0$:</u>

Σε αυτή την περίπτωση το το μέρος που περιγράφει το συνολικό σπίν είναι αντισυμμετρικό στην εναλλαγή των κβαντικών αριθμών σπιν άρα το χωρικό μέρος πρέπει να είναι συμμετρικό στην εναλλαγή $x_1 \leftrightarrow x_2$. Η χαμηλώτερη αδιατάρακτη ενεργειακή στάθμη του συστήματος των δύο σωματιδίων $E = \hbar\omega$ έχει ιδιοσυνάρτηση $\Phi(x_1, x_2) = \phi_0(x_1)\,\phi_0(x_2)$ που είναι πράγματι συμμετρική. Οι $\phi_0(x_1)$, $\phi_0(x_2)$ είναι οι κανονικοποιμένες ιδιοκαταστάσεις των $\hat{H}_1$, $\hat{H}_2$ με ιδιοτιμές ενέργειας $E_1 = E_2 = \hbar\omega/2$. Οπως φαίνεται από την (**;;**) αρκεί επομένως να υπολογίσουμε το ολοκλήρωμα

$$\begin{aligned}I &= \int\!\!\int |\Phi(x_1, x_2)|^2\,(x_1 - x_2)^2\,dx_1\,dx_2 = \int\!\!\int |\Phi(x_1, x_2)|^2\,(x_1^2 + x_2^2 - 2x_1x_2)\,dx_1\,dx_2 \\ &= \int\!\!\int \phi_0^2(x_1)\,\phi_0^2(x_2)\,(x_1^2 + x_2^2 - 2x_1x_2)\,dx_1\,dx_2 \\ &= \int \phi_0^2(x_1)x_1^2\,dx_1 \int \phi_0^2(x_2)\,dx_2 + \int \phi_0^2(x_1)\,dx_1 \int \phi_0^2(x_2)\,x_2^2 dx_2 \\ &\quad -2\int \phi_0^2(x_1)\,x_1\,dx_1 \int \phi_0^2(x_2)\,x_2 dx_2 \\ &= 2\,\left\langle x^2 \right\rangle_0\end{aligned}$$

Στο τελευταίο βήμα χρησιμοποιήσαμε το γεγονός ότι οι ολοκληρώσεις με τα x_1^2 , x_2^2 δίνουν την μέση τιμή $\langle x^2 \rangle_0$ του τετραγώνου της θέσης στην θεμελειώδη ενέργεια του ταλαντωτή, ότι οι καταστάσεις είναι πραγματικές και κανονικοποιοημένες στην μονάδα και το γεγονός ότι οι δύο τελευταίες ολοκληρώσεις με τα x_1 , x_2 δίνουν κάθε μία μηδέν γιατί είναι οι μέσες τιμές της θέσης που μηδενίζονται σε κάθε ιδιοκατάσταση της ενέργειας του γραμμικού αρμονικού ταλαντωτή ! Για τον ταλαντωτή η μέση τιμή της κινητικής και δυναμικής ενέργειας είναι ίδιες (απο το θεώρημα virial) οπότε σε κάθε ενεργειακή στάθμη E_n κάθε μία από αυτές ισούται με την μισή ενέργεια. Για την δυναμική ενέργεια επομένως έχουμε $\langle m\omega^2 x^2/2 \rangle = E_n/2$ η οποία για την θεμελειώδη στάθμη δίνει $\langle x^2 \rangle_0 = \hbar/2m\omega$. Οπότε το ολοκλήρωμα I προσδιορίζεται χωρίς καμία ολοκλήρωση και επομένως και η διόρθωση ΔE. Χρησιμοποιώντας το γεγονός ότι $S = 0$ βρίσκουμε επομένως ότι η θεμελειώδης ενέργεια για την $S = 0$ κατάσταση σε πρώτη τάξη στην g είναι

$$E_{S=0} = \hbar\omega - \frac{3}{4}\, g\hbar\omega$$

<u>Για καταστάσεις με $S = 1$ </u>:

Σε αυτή την περίπτωση το το μέρος που περιγράφει το συνολικό σπίν είναι συμμετρικό στην εναλλαγή των κβαντικών αριθμών σπιν άρα το χωρικό μέρος πρέπει να είναι αντισυμμετρικό στην εναλλαγή $x_1 \leftrightarrow x_2$. Η χαμηλώτερη αδιατάρακτη ενεργειακή στάθμη του συστήματος των δύο σωματιδίων δεν μπορεί να είναι $\hbar\omega$ δηλαδή αυτή που αντιστοιχεί στην μικρότερη δυνατή ενέργεια για κάθε σωματίδιο, όπως στην περίπτωση με $S = 0$. Ο λόγος είναι ότι η ιδιοσυνάρτηση $\phi_0(x_1)\,\phi_0(x_2)$ που αντιστοιχεί στην ενέργεια αυτή είναι συμμετρική ! Η αμέσως επόμενη ενέργεια το για το σύστημα των δύο σωματιδίων είναι το ένα σωματίδιο να είναι στην κατάσταση με ενέργεια $\hbar\omega/2$ και το άλλο στην $3\hbar\omega/2$, δηλαδή όταν το σύστημα έχει ενέργεια $2\,\hbar\omega$. Υπάρχουν δύο ιδιοκαταστάσεις της αδιατάρακτης Χαμιλτωνιανής με αυτήν την ενέργεια, η $\phi_0(x_1)\,\phi_1(x_2)$ και η $\phi_1(x_1)\,\phi_0(x_2)$ όπου ϕ_0 , ϕ_1 είναι οι κανονικοποιημένες ιδιοκαταστάσεις του ταλαντωτή με ιδιοτιμές ενέργειας $\hbar\omega/2$ και $3\,\hbar\omega/2$ αντίστοιχα. Από αυτές μπορούμε να φτιάξουμε μιά αντισυμμετρική ιδιοσυνάρτηση με ενέργεια $2\,\hbar\omega$ που έχει την μορφή

$$\Phi_A(x_1,x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}\,\left(\phi_0(x_1)\,\phi_1(x_2) - \phi_1(x_1)\,\phi_0(x_2)\right)$$

Αυτή αποτελεί το χωρικό μέρος για την περίπτωση με $S = 1$. Ο παράγοντας $\frac{1}{\sqrt{2}}$ είναι παράγοντας κανονικοποίησης για την $\Phi_A(x_1,x_2)$. Σε αυτήν την περίπτωση για τον υπολογισμό της ΔE της εξίσωσης (**;;**) χρειάζεται να υπολογίσουμε το ολοκλήρωμα

$$\begin{aligned} I &= \int\!\!\int |\Phi_A(x_1,x_2)|^2\,(x_1-x_2)^2\,dx_1\,dx_2 = \int\!\!\int |\Phi_A(x_1,x_2)|^2\,(x_1^2+x_2^2-2x_1x_2)\,dx_1\,dx_2 \\ &= \int\!\!\int |\Phi_A(x_1,x_2)|^2\,(2x_1^2-2x_1x_2)\,dx_1\,dx_2 \end{aligned}$$

όπου η τελευταία ισότητα προκύπτει γιατι η $|\Phi_A(x_1,x_2)|^2$ είναι συμμετρική συνάρτηση στην εναλλαγή του x_1 με το x_2 . Γράφοντας την $|\Phi_A(x_1,x_2)|^2$ αναλυτικά και χρησιμοποιώντας το γεγονός ότι οι $\phi_{0,1}$ είναι πραγματικές προκύπτει

$$\begin{aligned} I &= \int\!\!\int \left(\phi_0^2(x_1)\,\phi_1^2(x_2) + \phi_1^2(x_1)\,\phi_0^2(x_2) - 2\phi_0(x_1)\phi_0(x_2)\phi_1(x_1)\phi_1(x_2)\right)(x_1^2-x_1x_2)\,dx_1\,dx_2 \\ &= \int \phi_0^2(x_1)x_1^2\,dx_1 \int \phi_1^2(x_2)\,dx_2 + \int \phi_1^2(x_1)x_1^2\,dx_1 \int \phi_0^2(x_2)\,dx_2 \end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
- &\quad 2\int \phi_0(x_1)\phi_1(x_1)x_1^2\,dx_1 \int \phi_0(x_2)\phi_1(x_2)\,dx_2 \\
- &\quad \int \phi_0^2(x_1)x_1 dx_1 \int \phi_1^2(x_2)x_2 dx_2 - \int \phi_1^2(x_1)x_1 dx_1 \int \phi_0^2(x_2)x_2 dx_2 \\
+ &\quad 2\int \phi_0(x_1)\phi_1(x_1)x_1 dx_1 \int \phi_0(x_2)\phi_1(x_2)x_2 dx_2 \\
= &\quad \left\langle x^2\right\rangle_0 + \left\langle x^2\right\rangle_1 + 2J^2
\end{aligned}
$$

Στην δεύτερη ισότητα ο τρίτος όρος μηδενίζεται γιατί οι $\phi_{0,1}$ είναι κάθετες μεταξύ τους όπως και ο τεταρτος και πέμπτος όρος γιατι ειναι ανάλογοι των μέσων τιμών της θέσης στις καταστάσεις ϕ_0 και ϕ_1 οι οποιες είναι μηδέν. Εχει χρησιμοποιηθεί επίσης το γεγονός ότι οι $\phi_{0,1}$ είναι κανονικοποιημένες στην μονάδα. Στο αποτέλεσμα αυτό τα $\langle x^2\rangle_0$, $\langle x^2\rangle_1$ είναι οι μέσες τιμές του τετραγώνου της θέσης στις καταστάσεις του αρμονικού ταλαντωτή με ενέργειες $\hbar\omega/2$ και $3\,\hbar\omega/2$ αντίστοιχα και J είναι το ολοκλήρωμα $J = \int \phi_0(x)\phi_1(x)x dx$. Οι μέσες τιμές των τετραγώνων των ορμών όπως προκύπτουν άμεσα από το θεώρημα virial είναι $\langle x^2\rangle_0 = \hbar/2m\omega$ και $\langle x^2\rangle_1 = 3\,\hbar/2m\omega$. Χρησιμοποιώντας αυτές, και την τιμή του ολοκληρώματος J που δίνεται έχουμε

$$
I = \left\langle x^2\right\rangle_0 + \left\langle x^2\right\rangle_1 + 2J^2 = \frac{\hbar}{2m\omega} + \frac{3\,\hbar}{2m\omega} + 2\,\frac{\hbar}{2m\omega} = 3\,\frac{\hbar}{m\omega}
$$

Οπότε το ολοκλήρωμα I προσδιορίζεται πλήρως και επομένως και η διόρθωση $\Delta E = 3g\hbar\omega/4$ χρησιμοποιώντας το γεγονός ότι $S = 1$ για την συγκεκριμένη περίπτωση. Η θεμελειώδης ενέργεια για την $S = 1$ κατάσταση, η οποία μάλιστα έχει και τριπλό εκφυλισμό, σε πρώτη τάξη στην g είναι επομένως

$$
E_{S=1} = 2\,\hbar\omega + \frac{3}{4}\,g\hbar\omega \quad .
$$

ΘΕΜΑ 3

Η εξίσωση Schroedinger είναι

$$
i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\,|\Psi(t)\rangle = -\vec{\mu}\cdot\vec{B}\;|\Psi(t)\rangle = -gB(t)\hat{S}_x\;|\Psi(t)\rangle
$$

Για την επίλυση της μπορούμε να αναλύσουμε την κατάσταση $|\Psi(t)\rangle$ στις ιδιοκαταστάσεις $|+\rangle\,,|0\rangle\,,|-\rangle$ του $\hat{S}_x$ με ιδιοτιμές $+\hbar, 0, -\hbar$,

$$
|\Psi(t)\rangle = a(t)\;|+\rangle + b(t)\;|0\rangle + c(t)\;|-\rangle
$$

Αντικαθιστώντας στην Schroedinger προκύπτει το σύστημα

$$
\dot{a}(t) = igB(t)\;a(t) \quad , \quad \dot{b}(t) = 0 \quad , \quad \dot{c}(t) = -igB(t)\;c(t)
$$

από το οποίο έχουμε

$$
a(t) = a(0)\;\exp(ig\Phi) \quad , \quad b(t) = b(0) \quad , \quad c(t) = c(0)\;\exp(-ig\Phi)
$$

όπου $\phi(t) = \int_0^t B(t')\,dt'$. Οι κανονικοποιημένες ιδιοκαταστάσεις $|+\rangle\,,|0\rangle\,,|-\rangle$ στην βάση όπου ο $\hat{S}_z$ είναι διαγώνιος, όπως δίνεται στην εκφώνηση, είναι (να γίνουν οι κατάλληλες πράξεις !)

$$
|+\rangle \;=\; \begin{pmatrix} 1/2 \\ 1/\sqrt{2} \\ 1/2 \end{pmatrix} \qquad |0\rangle \;=\; \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ 0 \\ -1/\sqrt{2} \end{pmatrix} \qquad |-\rangle \;=\; \begin{pmatrix} 1/2 \\ -1/\sqrt{2} \\ 1/2 \end{pmatrix}
$$

οπότε η κατάσταση $|\Psi(t)\rangle$ γράφεται

$$|\Psi(t)\rangle \;=\; \begin{pmatrix} \frac{a(0)}{2}\, e^{ig\Phi} + \frac{c(0)}{2}\, e^{-ig\Phi} + \frac{b(0)}{\sqrt{2}} \\ \frac{a(0)}{\sqrt{2}}\, e^{ig\Phi} - \frac{c(0)}{\sqrt{2}}\, e^{-ig\Phi} \\ \frac{a(0)}{2}\, e^{ig\Phi} + \frac{c(0)}{2}\, e^{-ig\Phi} - \frac{b(0)}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}$$

Την χρονική στιγμή $t=0$ η κατάσταση είναι

$$|\Psi(0)\rangle \;=\; \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

οπότε οι συντελεστές $a(0), b(0), c(0)$ προσδιορίζονται από το σύστημα

$$\frac{a(0)}{2} + \frac{c(0)}{2} + \frac{b(0)}{\sqrt{2}} = 1 \quad , \quad \frac{a(0)}{\sqrt{2}} - \frac{c(0)}{\sqrt{2}} = 0 \quad , \quad \frac{a(0)}{2} + \frac{c(0)}{2} - \frac{b(0)}{\sqrt{2}} = 0$$

που λύνεται πολύ εύκολα με λύσεις

$$a(0) = c(0) = \frac{1}{2} \quad , \quad b(0) = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

και η κατάσταση τελικά βρίσκεται να είναι

$$|\Psi(t)\rangle \;=\; \begin{pmatrix} (\cos\, g\Phi(t)\, + 1\,)/2 \\ i\, \sin\, g\Phi(t)\, /\sqrt{2} \\ (\cos\, g\Phi(t)\, - 1\,)/2 \end{pmatrix}$$

Οι πιθανότητες να μετρηθούν τιμές $+\hbar, 0, -\hbar$ για την z-συνιστώσα είναι

$$P_+ = \frac{(\cos\, g\Phi(t)\, + 1\,)^2}{4} \quad , \quad P_0 = \frac{\sin^2\, g\Phi(t)}{2} \quad , \quad P_- = \frac{(\cos\, g\Phi(t)\, - 1\,)^2}{4}$$

Η μέση τιμή της z-συνιστώσας είναι

$$\langle S_z \rangle = P_+\, \hbar + P_0\, 0 + P_-\, (-\hbar) = \hbar\, \cos\, g\Phi(t)$$

Η μέση τιμή του τετραγώνου της z-συνιστώσας είναι

$$\left\langle S_z^2 \right\rangle = P_+\, (\hbar)^2 + P_0\, 0 + P_-\, (-\hbar)^2 = \hbar^2\, \frac{\cos^2\, g\Phi(t)\, + 1}{2}$$

Αρα η ζητουμένη διασπορά είναι

$$\Delta S_z = \hbar\, \sqrt{\frac{1 - \cos^2\, g\Phi(t)}{2}} \quad .$$

Θέματα εξετάσεων - Κβαντομηχανική ΙΙ
Εξετάσεις - 3ης Ιουλίου 2012 , (Τμήμα Α. Λαχανά)

ΘΕΜΑ 1: **(10/3 μονάδες)**

Σωματίδιο κινείται σε κεντρικό δυναμικό. Να απαντήσετε στα ακόλουθα ερωτήματα.

α1) Τι συνεπάγεται για την ακτινική πυκνότητα πιθανότητας στο σημείο $r = 0$, δέσμιας κυματοσυνάρτησης καθορισμένης τροχιακής στροφορμής, η Ερμιτιανότητα της ακτινικής ορμής $\hat{p}_r = -i\hbar \, (\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r})$;

α2) Η κυματική συνάρτηση που περιγράφει την κίνηση του σωματιδίου είναι της μορφής

$$\psi(r, \theta, \phi) \; = \; N \, r \, e^{-\lambda r} \, sin\theta$$

όπου N είναι κάποια σταθερά κανονικοποίησης και λ δεδομένη θετική σταθερά. Ποιά είναι η πιό πιθανή απόσταση για το σωματίδιο από το σημείο $r = 0$; Ποιά είναι η πιθανότητα για το σωματίδιο να βρεθεί μέσα στον κώνο που ορίζεται από τις γωνίες $\phi = 0$ έως $\phi = 2\,\pi$ και $\theta = 0$ έως $\theta = \pi/3$.

ΘΕΜΑ 2: **(10/3 μονάδες)**

Δύο διακρίσιμα σωματίδια με μάζες $m_1\,,\, m_2$ και σπιν με κβαντικούς αριθμούς $s_1\,,\, s_2$ αναγκάζονται να κινούνται σε μονοδιάστατο σωλήνα αλληλεπιδρώντας μεταξύ τους με δυναμικό

$$V(x_1, x_2) \; = \; \frac{k}{2} \, (x_1 - x_2)^2 + g \, \vec{s_1} \cdot \vec{s_2} \, (x_1 - x_2)$$

όπου x_1, x_2 οι θέσεις των σωματιδίων μέσα στον σωλήνα και $k > 0$, g δεδομένες σταθερές. Να βρεθούν οι ενέργειες για τις οποίες τα δύο σωματίδια σχηματίζουν δέσμιες καταστάσεις. Υπάρχει εκφυλισμός του ενεργειακού φάσματος και ποιός είναι αυτός ; Σε κάθε μία από αυτές τις ενεργειακές καταστάσεις να βρεθεί η μέση τιμή της σχετικής τους θέσης.

ΘΕΜΑ 3: **(10/3 μονάδες)**

Την χρονική στιγμή $t = 0$ η κατάσταση σωματιδίου που κινείται σε δυναμικό μονοδιάστατου γραμμικού αρμονικού ταλαντωτή είναι $|\Psi(0)\rangle = |\lambda\rangle$ όπου $|\lambda\rangle$ ιδιοκατάσταση του τελεστή καταστροφής $\hat{a}$ με ιδιοτιμή λ έναν εν γένει μιγαδικό αριθμό, $\hat{a}\; |\lambda\rangle = \lambda \; |\lambda\rangle$.

α1) Να βρεθεί η κυματική συνάρτηση την χρονική στιγμή $t = 0$

$$\Psi(x, t = 0) \; = \; \langle \, x \, | \Psi(0) \rangle$$

α2) Να δειχθεί ότι για $t > 0$ η κατάσταση $|\Psi(t)\rangle$ είναι ιδιοσυνάρτηση του $\hat{a}$ με ιδιοτιμή $\lambda' = \lambda \, e^{-i\omega t}$ και να βρεθεί η κυματική συνάρτηση $\Psi(x, t)$ και από αυτήν η πυκνότητα πιθανότητας $|\Psi(x, t)|^2$.

(Θεωρούνται γνωστά ότι για μονοδιάστατο ταλαντωτή συχνότητας ω ο τελεστής καταστροφής είναι $\hat{a} \; = \; \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \, \left(\hat{x} + \frac{i}{m\omega} \, \hat{p}_x \right)$ και επίσης ότι $\hat{a} \, |n\rangle \; = \; \sqrt{n} \; |n - 1\rangle$, $\hat{a}^\dagger \, |n\rangle \; = \; \sqrt{n + 1} \; |n + 1\rangle$.)

$\Longrightarrow$ **Λύσεις**

Λύσεις

ΘΕΜΑ 1

α1) Είναι θέμα από την θεωρία, διδάσκεται στα μαθήματα και έχει διατυπωθεί πολλές φορές ως ερώτημα σε εξετάσεις !

α2) Η πιθανότητα να βρεθεί το σωματίδιο σε όγκο $dV = r^2\, sin\theta\, drd\theta d\phi$ είναι $|\psi|^2\, dV$. Αν ολοκληρώσουμε σε όλες τις γωνίες έχουμε την πιθανότητα να βρεθεί μέσα σε σφαιρικό φλοιό με ακτίνες r και $r + dr$, η οποία είναι $N' r^2 |R(r)|^2\, dr$ (έχει διδαχθεί στα μαθήματα και υπάρχει και στα συγγράματα). N' είναι μιά άλλη σταθερά που δεν χρειάζεται όμως να υπολογισθεί για να απαντηθούν τα ερωτήματα . Η ακτινική πυκνότητα πιθανότητας είναι $P(r) = N'\, r^2 |R(r)|^2 = N'\, r^4 e^{-2\lambda r}$ και η πιό πιθανή απόσταση είναι εκεί που αυτή γίνεται μεγίστη. Με μία τετριμμένη και σύντομη παραγώγιση προκύπτει

$$r_{max} = \frac{2}{\lambda}$$

(Για σύγκριση, με ακριβώς την ίδια μεθοδολογία βρίσκεται και η πιό πιθανή απόσταση του ηλεκτρονίου από τον πυρήνα στο άτομο του Υδρογόνου).

Για το δεύτερο υποερώτημα, η πιθανότητα να βρεθεί το σωματίδιο σε όλον τον χώρο είναι μονάδα από το οποίο προκύπτει

$$1 = I\, N^2 \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\pi} sin^3\theta d\theta = \frac{8\pi}{3} I\, N^2 \tag{1}$$

Στην έκφραση αυτή το I είναι το ολοκλήρωμα του τετραγώνου του ακτινικού μέρους, επί $r^2 dr$, από 0 έως ∞. Αυτό δεν χρειάζεται να υπολογισθεί. Διότι για να υπολογίσουμε την πιθανότητα $P_{\kappa\omega\nu o\varsigma}$ να βρεθεί το σωματίδιο στον συγκεκριμένο κώνο που αναφέρει το ερώτημα πρέπει να ολοκληρώσουμε ως προς στις γωνίες που καθορίζουν τον κώνο και ως προς την ακτίνα από από 0 έως ∞, αρα

$$P_{\kappa\omega\nu o\varsigma} = I\, N^2 \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\pi/3} sin^3\theta d\theta = I\, N^2\, (2\pi) \int_0^{\pi/3} sin^3\theta d\theta$$

Από την σχέση (1) έχουμε ότι $I\, N^2 = 3/8\pi$ οπότε η πιό πάνω σχέση γίνεται

$$P_{\kappa\omega\nu o\varsigma} = I\, N^2\, (2\pi) \int_0^{\pi/3} sin^3\theta d\theta = \frac{3}{4} \int_0^{\pi/3} sin^3\theta d\theta = \frac{5}{32}$$

Στην τελευταία ισότητα υπολογίσθηκε με στοιχειώδη τρόπο το $\int_0^{\pi/3} sin^3\theta d\theta = 5/24$.

ΘΕΜΑ 2

Το συνολικό δυναμικό είναι συνάρτηση της σχετικής θέσης των σωματιδίων άρα μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε συντεταγμένες της σχετικής θέσης $x = x_1 - x_2$ και του κέντρου μάζας $X = (m_1 x_1 + m_2 x_2)/M$. Οι δέσμιες ενέργειες θα υπολογισθουν από την Χαμιλτωνιανη που αφορά την κίνηση της ανηγμένης μάζας μ, που ορίζεται από την σχέση $\mu^{-1} = m_1^{-1} + m_2^{-1}$, στο δυναμικό $V(x) = kx^2/2 + g\, \vec{s}_1 \cdot \vec{s}_2\, x$ και επομένως η Χαμιλτωνιανή γράφεται ως

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\,\mu} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{k}{2} x^2 + \frac{g}{2} \left(\vec{s}^{\,2} - \vec{s}_1^{\,2} - \vec{s}_2^{\,2} \right) x$$

Η σταθερά k μπορεί να εκφρασθεί συναρτήσει της συχνότητας $\omega \equiv \sqrt{k/\mu}$. Η Χαμιλτωνιανή αυτή και οι τελεστές $\vec{s}^{\,2}, s_z, \vec{s}_1^{\,2}, \vec{s}_2^{\,2}$ μετατίθενται μεταξύ τους άρα μπορούμε να αναζητήσουμε κοινά ιδιοανύσματα της ενέργειας, του συνολικού σπίν $\vec{s}^2$ της τρίτης συνιστώσας του συνολικού σπίν s_z και των τελεστών $\vec{s_1}^2, \vec{s_2}^2$. Οι καταστάσεις αυτές συγκεκριμένης ενέργειας E, και συνολικού σπιν, είναι επομένως της μορφής

$$\phi(x)\,|SM; s_1\, s_2\rangle$$

και ικανοποιούν την $\hat{H}\,|\psi\rangle = E\,|\psi\rangle$ οπότε από την παραπάνω Χαμιλτωνιανή έχουμε άμεσα

$$-\frac{\hbar^2}{2\,\mu}\frac{\partial^2\phi}{\partial x^2} + \left[\frac{k}{2}x^2 + \frac{g\hbar^2}{2}\,\left(S(S+1) - s_1(s_1+1) + s_2(s_2+1)\right)\,x\right]\,\phi \,=\, E\,\phi$$

Ο κβαντικός αριθμός S του συνολικού σπιν παίρνει τιμές $S = |s_1 - s_2|, ...(s_1 + s_2)$. Αυτό είναι ένα πρόβλημα μετατοπισμένου μονοδιάστατου γραμμικού ταλαντωτή που είναι γνωστό πρόβλημα. Για την ακρίβεια το δυναμικό είναι της μορφής

$$V(x) \,=\, \frac{k}{2}\,x^2 + g_s\,x$$

όπου $g_s = g\hbar^2\left(S(S+1) - s_1(s_1+1) + s_2(s_2+1)\right)/\,2$ που μπορεί να γραφεί ώς

$$V(x) \,=\, \frac{k}{2}\,\left(x^2 + \frac{2\,g_s}{k}\,x\right) \,=\, \frac{k}{2}\,\left(x + \frac{g_s}{k}\right)^2 - \frac{g_s^2}{2\,k}$$

Ορίζοντας νέα ανεξάρτητη μεταβλητή $y = x + g_s/k$ η πιό πάνω εξίσωση ιδιοτιμών τηε ενέργειας παίρνει την μορφή

$$-\frac{\hbar^2}{2\,\mu}\frac{\partial^2\psi(y)}{\partial y^2} + \frac{k}{2}\,y^2\,\psi(y) \,=\, E'\,\psi(y)$$

όπου $\psi(y)$ είναι η $\phi(x)$ με το x να έχει αντικατασταθεί συναρτήσει του x, δηλαδή $x = y - g_s/k$, και $E' = E + g_s^2/2\,k$. Η εξίσωση αυτή είναι ενός αρμονικού ταλαντωτή (μη-μετατοπισμένου) ως προς την μεταβλητή y, και έχει δέσμιες ενέργειες (και μόνο) που δίνονται από $E'_n = \hbar\omega\,(n + 1/2)$. Αρα οι δέσμιες ενέργειες του προβλήματος των δύο σωματιδίων είναι

$$E_{n,S} \,=\, \hbar\omega\,\left(n + \frac{1}{2}\right) - \frac{g_s^2}{2k} \,=\, \hbar\omega\,\left(n + \frac{1}{2}\right) - \frac{g^2\,\hbar^2}{8\,\mu\,\omega^2}\left(S(S+1) - s_1(s_1+1) + s_2(s_2+1)\right)^2$$

και εξαρτώνται από τον κβαντικό αριθμό $n = 0, 1, 2...$ και τον κβαντικό αριθμό συνολικού σπιν S. Για δεδομένη ενέργεια επομένως, η ισοδύναμα δεδομένους κβαντικούς αριθμούς n, S έχουμε $2\,S + 1$ ανεξάρτητες καταστάσεις όσες και οι τιμές του κβαντικού αριθμού M της τρίτης συνιστώσας του συνολικού σπιν που παίρνει τιμές $-S,\, -S+1, ...S$.

Οι κανονικοποιημένες ιδιοακαταστάσεις της ενέργειας και του συνολικού σπίν είναι επομένως της μορφής

$$|\Psi\rangle = \psi_n(x + g_s/k)\;|SM; s_1\, s_2\rangle$$

όπου ψ_n είναι οι κανονικοποιημένες ιδιοκαταστάσεις του γραμμικού αρμονικού ταλαντωτού, αλλα με όρισμα $x + g_s/k$. Η μέση τιμή της σχετικής θέσης είναι

$$\langle x\rangle = \langle\Psi|\,\hat{x}\,|\Psi\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty}|\psi_n(x + g_s/k)|^2\,x\,dx$$

και το ολοκλήρωμα με αλλαγή της μεταβλητής $x = y - g_s/k$ γίνεται

$$\langle x\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty}|\psi_n(y)|^2\,(y - g_s/k)\,dy = 0 - \frac{g_s}{k} \,=\, -\frac{g_s}{k}$$

Χρησιμοποιήθηκε το γεγονός ότι η $|\psi_n(y)|^2$ είναι άρτια συνάρτηση του y , αρα η $|\psi_n(y)|^2\, y$ περιττή, και το γεγονός ότι το ολοκλήρωμα της $|\psi_n(y)|^2$ είναι μονάδα λόγω κανονικοποίησης της $\psi_n(y)$.

ΘΕΜΑ 3

α1) Η ιδιοκατάσταση $|\lambda\rangle$ του τελεστή $\hat{a}$ με ιδιοτιμή λ είναι της μορφής

$$|\lambda\rangle \,=\, c\sum_{n=0} \frac{(\lambda)^n}{\sqrt{n\,!}}\;|n\rangle \tag{2}$$

με το μέτρο της σταθεράς c να είναι λόγω κανονικοποίησης $|c| = e^{-|\lambda|^2/2}$. (έχει διδαχθεί στα μαθήματα και είναι και η **άσκηση 1Α** της **Σειράς 2** των ασκήσεων της Κβαντικής Μηχανικής ΙΙ)

Η κυματική συνάρτηση αυτής της κατάστασης την μηδενική χρονική στιγμή μπορεί να βρεθεί, σε κλειστή μορφή, από την $\hat{a}\;|\lambda\rangle = \lambda\;|\lambda\rangle$ αν παρουμε το εσωτερικό γινόμενο με το $|x\rangle$ και στα δύο μέλη οπότε

$$\langle\, x\,|\hat{a}|\lambda\rangle \,=\, \lambda\;\langle\, x\,|\lambda\rangle$$

Από αυτήν έχουμε αντικαθιστώντας τον τελεστή $\hat{a}$

$$\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\;<\; x\,|\hat{x} + \frac{i}{m\omega}\,\hat{p}_x|\lambda> =\; \lambda\;\langle\, x\,|\lambda\rangle$$

από την οποία προκύπτει για το αριστερό μέλος, (ακριβώς όπως και στον υπολογισμό αντίστοιχου προβλήματος εύρεσης της κυματικής συνάρτησης της θεμελειώδους κατάστασης του γραμμικού ταλαντωτή)

$$\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\,\left(x\;\langle\, x|\lambda\rangle + \frac{\hbar}{m\omega}\,\frac{\partial}{\partial x}\;\langle\, x|\lambda\rangle\right) \,=\, \lambda\;\langle\, x|\lambda\rangle$$

Η κυματική συνάρτησης την στιγμή $t = 0$ είναι $\Psi(x, t = 0) \,=\, \langle\, x\,|\lambda\rangle$, οπότε η πιό πάνω η εξίσωση γίνεται

$$\frac{\hbar}{m\omega}\,\frac{\partial\, ln\,\Psi}{\partial x} = -x + \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}}\,\lambda$$

ολοκληρώνοντας και μετά παίρνωντας το εκθετικό έχουμε

$$\Psi(x, t = 0) = N\, exp\left[-\,\frac{m\omega}{2\hbar}\,\left(x^2 - 2\,\sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}}\,\lambda\, x\right)\right] \tag{3}$$

όπου N είναι σταθερά κανονικοποίησης. Μάλιστα προσθαφαιρώντας μιά σταθερά στο εκθετικό , ώστε το δεξί μέλος να είναι ένα τέλειο τετράγωνο, μπορούμε να δούμε ότι αυτή έχει την μορφή μιας μετατοπισμένης συνάρτησης Γκάους.

α2) Η κατάσταση την χρονική στιγμή $t > 0$ είναι

$$|\Psi(t)\rangle \,=\, c\sum_{n=0}\; e^{-iE_n t/\hbar}\,\frac{(\lambda)^n}{\sqrt{n\,!}}\;|n\rangle$$

και χρησιμοποιώντας το γεγονός ότι $E_n = \hbar\omega(n + 1/2)$ έχουμε

$$|\Psi(t)\rangle \,=\, c\, e^{-i\omega/2}\sum_{n=0}\; e^{-i\omega\, t\, n}\,\frac{(\lambda)^n}{\sqrt{n\,!}}\;|n\rangle \,=\, c\, e^{-i\omega/2}\sum_{n=0}\;\frac{(\lambda\, e^{-i\omega\, t})^n}{\sqrt{n\,!}}\;|n\rangle$$

που εκτός από μία φάση έχει ακριβώς την μορφή της συνοχικής κατάστασης της εξίσωσης (2) αλλά με τιμή $\lambda' = e^{-i\omega t}\lambda$, αντί λ, άρα είναι ιδιοσυνάρτηση του $\hat{a}$ με ιδιοτιμή λ' ! Είναι προφανές επομένως ότι η κυματική συνάρτηση θα είναι της ίδιας μορφής με αυτήν της εξ. (3) αλλά με την λ να έχει αντικατασταθεί από την λ', οπότε

$$\Psi(x,t) = N\, exp\left[-\frac{m\omega}{2\hbar}\left(x^2 - 2\sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}}\,\lambda'\, x\right)\right]$$

Για την πυκνότητα πιθανότητας

$$|\Psi(x,t)|^2 = |N|^2\, exp\left[-\frac{m\omega}{\hbar}\left(x^2 - 2\sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}}\, Re\,(\lambda')\, x\right)\right]$$

της οποίας το εκθετικό μπορεί να γίνει τέλειο τετράγωνο με προσθαφαίρεση του $2\,(Re\,\lambda')^2$ και η πυκνότητα πιθανότητας παίρνει την μορφή μιάς μετατο[ισμένης Γκαουσιανής

$$|\Psi(x,t)|^2 = |N'|^2\, exp\left[-\frac{m\omega}{\hbar}\left(x - \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}}\, Re\,(\lambda')\right)^2\right]$$

με την N' να είναι $N' = N\, e^{(Re\,\lambda')^2}$. Η ολοκλήρωση αυτής πρέπει να ειναι μονάδα οπότε έχει κανείς εκτελώντας το Γκαουσιανό ολοκλήρωμα ότι $|N'|^2 = \sqrt{m\omega/\pi\hbar}$. Αν η λ γραφεί στην μορφή $\lambda = |\lambda|\, e^{i\phi}$ τότε $\lambda' = |\lambda|\, e^{i(\phi-\omega t)}$ οπότε $Re\,\lambda' = |\lambda|\, cos(\omega t - \phi)$ και παίρνουμε

$$|\Psi(x,t)|^2 = \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi\hbar}}\, exp\left[-\frac{m\omega}{\hbar}\left(x - \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}}\, |\lambda|\, cos(\omega t - \phi)\right)^2\right]$$

Θέματα εξετάσεων - Κβαντομηχανική ΙΙ
Εξετάσεις - 27ης Σεπτεμβρίου 2012 , (Τμήμα Α. Λαχανά)

ΘΕΜΑ 1:

α. Να ορισθεί ο τελεστής της ακτινικής ορμής, κατ΄ αναλογία με την Κλασική Μηχανική, και ακολούθως να βρεθεί πως ενεργεί επάνω στις κυματικές συναρτήσεις. Για κίνηση σε δυναμικό να γραφεί η Χαμιλτωνιανή συναρτήσει του τελεστή της ακτινικής ορμής και από αυτό να δειχθεί ότι για κίνηση σε κεντρικό δυναμικό κάθε συνιστώσα της τροχιακής στροφορμής μετατίθεται με την Χαμιλτωνιανή (θεωρείται γνωστό ότι η τροχιακή στροφορμή εξαρτάται μόνο από τις γωνίες θ, ϕ και όχι από την μεταβλητή r.)

β. Να βρεθούν οι ιδιοσυναρτήσεις του τελεστή της ακτινικής ορμής $\hat{p}_r$ που έχουν δεδομένη τροχιακή στροφορμή με κβαντικούς αριθμούς l και m. Ποιές είναι οι αντίστοιχες ιδιοτιμές τους; Για ελεύθερο σωματίδιο να δειχθεί ότι οι ιδιοσυναρτήσεις αυτές είναι και ιδιοσυναρήσεις της ενέργειας όταν η τροχιακή στροφορμή είναι μηδενική.

ΘΕΜΑ 2:

α. Για στροφορμή $J = 1$ να βρεθούν οι πίνακες της στροφορμής J_x , J_y , J_z στην βάση όπου ο J_z είναι διαγώνιος. Δίνεται ότι $J_\pm\ |j,m\rangle\ =\ \hbar\sqrt{j(j+1)-m(m\pm1)}\ |j,m\pm1\rangle$

β. Η Χαμιλτωνιανή ελεύθερου κβαντικού περιστροφέα στροφορμής $J = 1$ με ροπές αδρανείας κατά τους άξονες x, y, z ίσες με Θ_x, Θ_y, Θ_z αντίστοιχα δίνεται από την

$$\hat{H}_0\ =\ \frac{\hat{J}_x^2}{2\,\Theta_x}+\frac{\hat{J}_y^2}{2\,\Theta_y}+\frac{\hat{J}_z^2}{2\,\Theta_z}$$

Ο περιστροφέας είναι πλήρως συμμετρικός με αποτέλεσμα οι ροπές αδρανείας του να είναι όλες ίσες, δηλαδή $\Theta_x = \Theta_y = \Theta_z \equiv \Theta$. Ο περιστροφέας έχει μαγνητική ροπή $\vec{\mu} = g\,\vec{J}$, όπου g είναι δεδομένη σταθερά, και κατά την διεύθυνση του $z-$ άξονα εφαρμόζεται σταθερό μαγνητικό πεδίο έντασης B. Συγχρόνως ο περιστροφέας παραμορφώνεται ελαφρώς με συνέπεια την αλλαγή της ροπής αδρανείας Θ_y έτσι ώστε $\Theta_y = \Theta + \Delta$ όπου Δ είναι σταθερά πολύ μικρότερη από την Θ. Να βρεθούν οι δυνατές ενέργειες του συστήματος ως συναρτήσεις των κβαντικών αριθμών της ιδιοστροφορμής του, του Θ, του μαγνητικού πεδίου B και της Δ σε πρώτη τάξη ως προς την αδιάστατη σταθερά $\dfrac{\Delta}{\Theta}$.

ΘΕΜΑ 3)

Δύο ταυτοτικά σωματίδια με μάζες m και ιδιοστροφορμές (σπίν) που χαρακτηρίζονται από κβαντικό αριθμό $J_1 = J_2 = \frac{1}{2}$ αναγκάζονται να κινούνται σε σωλήνα απείρου μήκους και αμελητέας διατομής αλληλεπιδρώντας με δυναμικό της μορφής

$$V(x_1,x_2)\ =\ g\ \vec{J}_1\cdot\vec{J}_2\ (x_1-x_2)^2$$

όπου $x_{1,2}$ οι θέσεις των σωματιδίων κατά μήκος του σωλήνα και $\vec{J}_{1,2}$ οι ιδιοστροφορμές τους. Να βρεθούν οι ενέργειες δέσμευσης του συστήματος των δύο σωματιδίων και ο εκφυλισμός των αντιστοίχων ενεργειακών επιπέδων στις περιπτώσεις όπου η σταθερά g είναι θετική η αρνητική.

$\Longrightarrow$ **Λύσεις**

Λύσεις Θεμάτων

ΘΕΜΑ 1

α. Το ερώτημα αυτό αποτελεί μέρος της θεωρίας και αναπτύσσεται πλήρως και λεπτομερώς στα μαθήματα. Ως υπενθύμιση αναφέρουμε ότι, στην Κλασική Μηχανική η ακτινική ορμή είναι η προβολή της ορμής $\vec{p}$ στο άνυσμα της θέσης $\vec{r}$, δηλαδή $p_r = \dfrac{\vec{r}\cdot\vec{p}}{r}$. Στην Κβαντική Μηχανική το αντίστοιχο μέγεθος αντιπροσωπεύεται από αυτοσυζυγή τελεστή που έχει παρόμοια έκφραση μόνο που η θέση και η ορμή είναι τελεστές. Ενας τέτοιος τελεστής δίνεται από την έκφραση

$$\hat{p}_r \,=\, \frac{1}{2}\left(\hat{\mathbf{p}}\cdot\frac{\hat{\mathbf{r}}}{r}+\frac{\hat{\mathbf{r}}}{r}\cdot\hat{\mathbf{p}}\right)$$

Στην αναπαράσταση θέσης αυτός παίρνει την μορφή

$$\hat{p}_r \,=\, -\frac{i\,\hbar}{2}\left(\nabla\cdot\frac{\vec{r}}{r}+\frac{\vec{r}}{r}\cdot\nabla\right)$$

Οπως έχει αναπτυχθεί στις παραδόσεις αναλυτικά χρησιμοποιώντας γνωστές ταυτότητες του διανυσματικού λογισμού καταλήγει κανείς με τετριμένα βήματα (για την ορθότητα της απάντησης απαιτείται να γραφούν αυτά αναλυτικά) στο αποτέλεσμα ότι η δράση αυτού σε τυχαία συνάρτηση δίνει

$$\hat{p}_r\,\psi \,=\, -\frac{i\,\hbar}{2}\left(\nabla\cdot\frac{\vec{r}}{r}\psi+\frac{\vec{r}}{r}\cdot\nabla\,\psi\right) \,=\, -i\,\hbar\left(\frac{\partial\psi}{\partial r}+\frac{1}{r}\psi\right)$$

και επειδή αυτή ισχύει για κάθε ψ ο $\hat{p}_r$ ενεργεί ως

$$\hat{p}_r \,=\, -i\,\hbar\left(\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r}\right)$$

Η Χαμιλτωνιανή για κίνηση σωματιδίου σε δυναμικό δίνεται από την έκφραση

$$\hat{H} \,=\, \frac{1}{2\,m}\left(\hat{p}_r^2+\frac{\hat{\mathbf{L}}^2}{r^2}\right) \,+\, V(\vec{r})$$

όπου $\hat{\mathbf{L}}^2$ ο τελεστής που δίνει το τετράγωνο του μέτρου της τροχιακής στροφορμής. Κάθε συνιστώσα της τροχιακής στροφορμής $\hat{L}_i$ μετατίθεται με τον $\hat{\mathbf{L}}^2$. Επίσης μετατίθεται με τον τελεστή $\hat{p}_r$, και γενικά με κάθε συνάρτηση του r, γιατι οι συνιστώσες της τροχιακής στροφορμής δεν εξαρτώνται από την r ούτε από παραγώγους ως προς αυτήν. Επόμένως ο μεταθέτης κάθε συνιστώσας της στροφορμής μετατίθεται με τον πρώτο όρο της Χαμιλτωνιανής με αποτέλεσμα

$$\left[\hat{H}\,,\,\hat{L}_i\right] \,=\, \left[V(\vec{r}),\,\hat{L}_i\right]$$

Αρα γενικά ο τελεστής $\hat{L}_i$ δεν μετατίθεται με την $\hat{H}$ λόγω της ύπαρξης του δυναμικού. Όταν όμως το δυναμικό είναι συνάρτηση του μέτρου του $\vec{r}$, δηλαδή $V(\vec{r}) = V(r)$ (κεντρικό δυναμικό), τότε επειδή, όπως αναφέραμε, η στροφορμή δεν εξαρτάται από παραγωγίσεις ως προς r ο μεταθέτης στο δεξί μέλος της παραπανω σχέσης μηδενίζεται και έχουμε

$$\left[\hat{H}\,,\,\hat{L}_i\right] \,=\, 0$$

Αυτή η μετάθεση είναι και ο λόγος που η στροφορμή και η Χαμιλτωνιανή μπορούν να έχουν κοινές ιδιοσυναρήσεις για κίνηση σε κεντρικά δυναμικά.

β. Για να βρούμε τις ιδιοσυναρτήσεις και τις ιδιοτιμές του τελεστή $\hat{p}_r$ πρέπει να επιλύσουμε το πρόβλημα $\hat{p}_r\,\psi(r,\theta,\phi) = p_0\,\psi(r,\theta,\phi)$ όπου p_0 ειναι η ιδιοτιμή και ψ η αντίστοιχη ιδιοσυνάρτηση. Από την αναλυτική μορφή του $\hat{p}_r$ έχουμε λοιπόν

$$\frac{\partial\psi}{\partial r} + \frac{\psi}{r} = \frac{i\,p_0}{\hbar}\,\psi$$

η το ίδιο

$$\frac{\partial \ln\,\psi}{\partial r} = \frac{i\,p_0}{\hbar} - \frac{1}{r}$$

η οποία με ολοκλήρωση στην μεταβλητή r δίνει άμεσα

$$\ln\,\psi = \frac{i\,p_0}{\hbar}\,r - \ln\,r + C$$

όπου C είναι σταθερά ως προς r άρα είναι εν γένει συνάρτηση των θ και ϕ, δηλαδή $C = C(\theta,\phi)$. Εκθετοποιώντας την προηγούμενη έκφραση έχουμε λοιπόν

$$\psi(r,\theta,\phi) = \frac{P(\theta,\phi)}{r}\;e^{\,i\,\dfrac{p_0\,r}{\hbar}}$$

Αρα οποιοσδήποτε πραγματικός αριθμός p_0 είναι ιδιοτιμή του $\hat{p}_r$ (συνεχές φάσμα) και για κάθε μία τέτοια ιδιοτιμή υπάρχει απειρία ιδιασυναρτήσεων που έχουν την ανωτέρω μορφή με $P(\theta,\phi)$ αυθαίρετη συνάρτηση των θ και ϕ. Αν θέλαμε οι ιδιοσυναρτήσεις αυτές να έχουν καθορισμένη τροχιακή στροφορμή $l,\,m$ θα έπρεπε η συνάρτηση P να είναι ανάλογη της σφαιρικής αρμονικής $Y_{l\,m}(\theta,\phi)$

$$\psi_{p_0,l,m}(r,\theta,\phi) = \frac{Y_{l\,m}(\theta,\phi)}{r}\;e^{\,i\,\dfrac{p_0\,r}{\hbar}}$$

Για μηδενική τροχιακή στροφορμή, $l = 0,\, m = 0$, και για ελεύθερο σωματίδιο η δράση της Χαμιλτωνιανής επάνω στην αντίστοιχη ιδιοσυνάρτηση δίνει

$$\hat{H}\,\psi_{p_0,0,0} = \frac{p_0^2}{2m}\;\psi_{p_0,0,0}$$

γιατί η δράση του όρου με την στροφορμή μέσα στην $\hat{H}$ δίνει μηδέν, ο όρος δυναμικού δεν υπάρχει, και η δράση του $\hat{p}_r^2$ επάνω στην $\psi_{p_0,0,0}$ δίνει p_0^2. Αρα για μηδενική στροφορμή οι ιδιοσυναρτήσεις του $\hat{p}_r^2$ είναι και ιδιοσυναρτήσεις της $\hat{H}$, όταν το δυναμικό είναι μηδέν, με ιδιοτιμή $E_0 = \dfrac{p_0^2}{2m}$.

ΘΕΜΑ 2

α. Εχει διδαχθεί στο μάθημα. Με την βοήθεια των τελεστών και ακολουθώντας την υπόδειξη βρίσκεται τελικά ότι

$$J_x = \frac{\hbar}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad , J_y = \frac{\hbar}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix} \quad , J_z = \hbar\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Τα ιδιοανύσματα $|j = 1, m\rangle$, $m = +1,\, 0, -1$ των $\vec{J}^2$, J_z σε αυτήν την βάση είναι

$$|1,1\rangle\; = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad , \quad |1,0\rangle\; = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad , \quad |1,-1\rangle\; = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

β. Με την παρουσία του μαγνητικού πεδίου αλλά και με την παραμόρφωση που επιφέρεται σύμφωνα με την εκφώνηση η Χαμιλτωνιανή του συστήματος είναι

$$\hat{H} \;=\; \frac{\hat{J}_x^2}{2\,\Theta} + \frac{\hat{J}_y^2}{2\,(\Theta+\Delta)} + \frac{\hat{J}_z^2}{2\,\Theta} - gBJ_z$$

Για μικρές τιμές του λόγου Δ/Θ και σε πρώτη τάξη στην Δ αναπτύσσοντας κατά Taylor έχουμε $(\Theta+\Delta)^{-1} = \Theta^{-1}\,(1-\Delta\,/\Theta)$ οπότε η ανωτέρω Χαμιλτωνιανή γράφεται ως

$$\hat{H} \;=\; \frac{\vec{J}^2}{2\,\Theta} - gB\,J_z - \frac{\Delta}{2\,\Theta^2}\,J_y^2$$

Αυτή μπορεί να γραφεί ως άθροισμα $\hat{H} = \hat{h}_0 + \hat{h}_1$

$$\hat{h}_0 = \frac{\vec{J}^2}{2\,\Theta} - gB\,J_z \quad , \quad \hat{h}_1 = -\frac{\Delta}{2\,\Theta^2}\,J_y^2$$

με την $\hat{h}_1$ να αποτελεί μικρή διαταραχή. Το αδιατάρακτο μέρος $\hat{h}_0$ έχει ως ιδιοανύσματα τις καταστάσεις $|1,+1\rangle$, $|1,0\rangle$, $|1,-1\rangle$ με αδιατάρακτες ιδιοτιμές της ενέργειας

$$E_1^{(0)} = \frac{\hbar^2 j(j+1)}{2\Theta} - g\hbar B \quad , \quad E_0^{(0)} = \frac{\hbar^2 j(j+1)}{2\Theta} \quad , \quad E_{-1}^{(0)} = \frac{\hbar^2 j(j+1)}{2\Theta} + g\hbar B$$

αντίστοιχα. Στις πιό επάνω εκφράσεις $j=1$. Σε πρώτη τάξη στην σταθερά Δ (η ακριβέστερα στην αδιάστατη σταθερά Δ/Θ) οι ιδοτιμές της ενέργειας υφίστανται διορθώσεις $\Delta E_m = \langle 1,m|\,\hat{h}_1\,|1,m\rangle$, όπου $m=-1,0,+1$ αντίστοιχα. Οι διορθωμένες ενέργειες , για $m=-1,0,+1$, είναι επομένως

$$E_m = E_m^{(0)} \;-\; \frac{\Delta}{2\,\Theta^2}\;\langle j,m|\,J_y^2\,|j,m\rangle \;,$$

Για τον υπολογισμό των διορθώσεων χρειάζεται ουσιαστικά να υπολογισθεί το J_y^2

$$J_y^2 = \frac{\hbar^2}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 & -1 \\ 0 & 2 & 0 \\ -1 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

οπότε με τετριμμένο τρόπο υπολογίζει κανείς

$$E_1 = \frac{\hbar^2}{\Theta} - g\hbar B - \frac{\Delta\,\hbar^2}{4\,\Theta^2} \quad , \quad E_0 = \frac{\hbar^2}{\Theta} - \frac{\Delta\,\hbar^2}{2\,\Theta^2} \quad , \quad E_{-1} = \frac{\hbar^2}{\Theta} + g\hbar B - \frac{\Delta\,\hbar^2}{4\,\Theta^2}$$

ΘΕΜΑ 3

Οι καταστάσεις που περιγράφουν το σύστημα των 2 σωματιδίων πρέπει να είναι πλήρως αντισυμμετρικές στην εναλλαγή $J_1, m_1 \Leftrightarrow J_2, m_2$ και $x_1 \Leftrightarrow x_2$ όπου J_i, m_i είναι ο κύριος κβαντικός αριθμός του σπιν και αυτός της τρίτης συνιστώσας για το σωματίδιο $i=1,2$. Για την σχετική κίνηση των 2 σωματιδίων η ανηγμένη μάζα είναι $M=m/2$ και τα σωματίδια αλληλεπιδρούν με δυναμικό $g\;\vec{J}_1\cdot\vec{J}_2\;x^2$ όπου $x=x_1-x_2$ η σχετική τους θέση. Ο όρος αλληλεπίδρασης σπιν-σπιν $\vec{J}_1\cdot\vec{J}_2$ γράφεται ως $\vec{J}_1\cdot\vec{J}_2 \;=\; \frac{1}{2}(\vec{J}^{\,2}-\vec{J}_1^{2}-\vec{J}_2^{2})$, όπου $\vec{J}$ το συνολικό σπιν. Αυτός έχει ιδιοτιμές $\frac{\hbar^2}{2}\,[J(J+1)-J_1(J_1+1)-J_2(J_2+1)]$, όπου $J_1 = J_2 = 1/2$ οι κβαντικοί αριθμοί των σπιν των σωματιδίων και J ο κβαντικός αριθμός του συνολικού σπιν που μπορεί να πάρει τις τιμές $J = 0, 1$. Στην βάση λοιπόν των ιδιοκαταστάσεων του συνολικού σπιν το δυναμικό γράφεται ως

$$V(x) \;=\; \frac{g\hbar^2}{2}\;\left(J(J+1) - \frac{3}{2}\right)\; x^2$$

Περίπτωση όπου $g > 0$:
Για δέσμια κατάσταση πρέπει $J(J+1) - \frac{3}{2} > 0$, για να έχουμε ελκτικό και όχι απωστικό δυναμικό, και αυτό συμβαίνει για $J = 1$ και μόνο. Σε αυτήν την περίπτωση έχουμε λοιπόν ένα δυναμικό της μορφής του γραμμικού αρμονικού ταλαντωτή $\dfrac{k_1}{2}\, x^2$ με $k_1 = g\hbar^2/2$ για το οποίο γνωρίζουμε τις ιδιοκαταστασεις και ιδιοτιμές της ενέργειας. Ομως οι καταστάσεις σπιν για $J = 1$ είναι συμμετρικές στην εναλλαγη των σπιν και για να έχουμε ολικά αντισυμμετρική κατάσταση θα πρέπει το χωρικό μέρος να είναι αντισυμμετρικό στην εναλλαγή $x_1 \Leftrightarrow x_2$ η ισοδύναμα στην εναλλαγη $x \Leftrightarrow -x$. Αρα μόνον οι περιττές ιδιοκαταστάσεις της ενέργειας του ταλαντωτή είναι αποδεκτές για το πρόβλημα των δύο σωματιδίων όταν $g > 0$. Αυτές χαρακτηρίζονται από ενέργειες

$$E_{2n+1} = \hbar\omega\;(\;2n + \frac{3}{2}\;) \quad , \quad n = 0, 1, 2...$$

όπου $M\omega^2 \equiv k_1$ με $M = m/2$, και θα είναι τριπλά εκφυλισμένες αφού για $J = 1$ η τρίτη συνιστώσα μπορεί να πάρει τιμές $M_J = 1, 0, -1$.

Περίπτωση όπου $g < 0$:
Τώρα για δέσμια κατάσταση πρέπει $S(S+1) - \frac{3}{2} < 0$, για να έχουμε ελκτικό και όχι απωστικό δυναμικό, και αυτό συμβαίνει για $S = 0$. Σε αυτήν την περίπτωση έχουμε ένα δυναμικό της μορφής του γραμμικού αρμονικού ταλαντωτή $\dfrac{k_2}{2}\, x^2$ με $k_2 = -3g\hbar^2/2 > 0$. Ομως οι καταστάσεις σπιν για $S = 0$ είναι αντισυμμετρικές στην εναλλαγη των σπιν και για να έχουμε ολικά αντισυμμετρική κατάσταση θα πρέπει το χωρικό μέρος να είναι συμμετρικό στην εναλλαγη $x_1 \Leftrightarrow x_2$ η ισοδύναμα στην εναλλαγή $x \Leftrightarrow -x$. Αρα μόνον οι άρτιες ιδιοκαταστάσεις της ενέργειας του ταλαντωτή είναι αποδεκτές για το πρόβλημα των δύο σωματιδίων όταν $g < 0$. Αυτές χαρακτηρίζονται από ενέργειες

$$E_{2n} = \hbar\omega\;(\;2n + \frac{1}{2}\;) \quad , \quad n = 0, 1, 2...$$

όπου $M\omega^2 \equiv k_2$, με $M = m/2$, και θα είναι απλά εκφυλισμένες αφού για $S = 0$ η τρίτη συνιστώσα μπορεί να πάρει μόνο την τιμή $M_J = 0$.

Θέματα εξετάσεων - Κβαντομηχανική ΙΙ
Εξετάσεις - 11ης Μαρτίου 2013 , (Τμήμα Α. Λαχανά)

<u>ΘΕΜΑ 1:</u> **(3 μονάδες)**

Ηλεκτρόνιο κινείται επάνω από μία αδιαπέραστη και αγώγιμη γειωμένη επιφάνεια που μπορεί να θεωρηθεί το επίπεδο των αξόνων $x-y$. Να βρεθεί το ενεργειακό φάσμα του ηλεκτρονίου αν έχει καθορισμένες ορμές p_x , p_y στις κατευθύνσεις x και y αντίστοιχα οπότε η κυματική του συνάρτηση μπορεί να γραφεί ως

$$\psi(x,y,z) \,=\, e^{\,i\,(\,p_x x + p_y y\,)\,/\,\hbar}\;\Phi(z)$$

Το ηλεκτρόνιο θεωρείται δέσμιο στην κατεύθυνση z οπότε η κυματική του συνάρτηση μηδενίζεται όταν $z \to +\infty$. Ποιά είναι η πιό πιθανή απόσταση από το επίπεδο $x-y$; Αν και δεν είναι υποχρεωτικό ενδεχόμενα να διευκολύνει την επίλυση του προβλήματος σας η σύγκριση με άτομο Υδρογονοειδούς ατομικού αριθμού Z με μηδενική τροχιακή στροφορμή του οποίου η κυματική συνάρτηση είναι $R(r) = N\,exp\,(\,-Zr/a_0\,)$, όπου N σταθερά κανονικοποίησης και $a_0 = \hbar^2/\mu e^2$ η ακτίνα Bohr .

<u>ΘΕΜΑ 2:</u> **(3 μονάδες)**

Ενα κβαντικό σύστημα περιγράφεται από την Χαμιλτωνιανή

$$\hat{H} \,=\, \epsilon_0\,\hat{1} + \lambda\,(\,\hat{A} + \hat{A}^\dagger\,)$$

όπου ϵ_0 , λ δεδομένες πραγματικές σταθερές με μονάδες ενέργειας και τον τελεστή $\hat{A}$ να ορίζεται ως

$$\hat{A} \,=\, |1\rangle\,\langle 2| \,+\, |2\rangle\,\langle 3| \,+\, |3\rangle\,\langle 1|$$

όπου οι καταστάσεις $|1\rangle$, $|2\rangle$, $|3\rangle$ αποτελούν ένα πλήρες και ορθοκανονικό σύστημα. Να βρεθούν οι ενεργειακές στάθμες του συστήματος και οι αντίστοιχες ιδιοκαταστάσεις.

<u>Υπόδειξη :</u> Χωρίς να είναι υποχρεωτικό, ενδεχόμενα να διευκολύνει αν αποδείξετε πρώτα ότι ο τελεστής $\hat{A}$ είναι μοναδιαίος $\hat{A}\,\hat{A}^\dagger = \hat{A}^\dagger\,\hat{A} = 1$ και λόγω αυτού ότι οι τελεστές $\hat{H}$, $\hat{A}$, $\hat{A}^\dagger$ μετατίθενται μεταξύ τους.

<u>ΘΕΜΑ 3:</u> **(4 μονάδες)**

Α) Ενα σωματίδιο έχει σπίν $s = 1/2$. Στην αναπαράσταση του σπιν με τους πίνακες του Pauli να βρεθεί η ιδιοκατάσταση με προβολή του σπίν ίση με $+\hbar/2$ στην κατεύθυνση που χαρακτηρίζεται από μοναδιαίο άνυσμα $\hat{\xi}$ που βρίσκεται στο επίπεδο $x-z$ και σχηματίζει δεδομένη γωνία θ με τον αξονα z. Αν κάποια χρονική στιγμή το σωματίδιο βρίσκεται στην κατάσταση με προβολή του σπίν ίση με $+\hbar/2$ στον άξονα z ποιά είναι η πιθανότητα την στιγμή αυτή να μετρηθεί σπίν ίσο με $+\hbar/2$ κατά μήκος του άξονα $\hat{\xi}$;

Β) Δύο διακρίσιμα σωματίδια έχουν σπιν $s_1 = s_2 = 1$. Εκκινώντας από την κατάσταση με την μεγαλύτερη τιμή του συνολικού τους σπιν και την μεγαλύτερη δυνατή τιμή της τρίτης συνιστώσας να βρείτε, με διαδοχική χρήση των τελεστών αναβίβασης και καταβίβασης της τρίτης συνιστώσας του σπιν, την κατάσταση η οποία χαρακτηρίζεται από συνολικό σπιν $S = 2$ και τρίτη συνιστώσα αυτού ίση με μηδεν, ως άθροισμα των καταστάσεων $|s_1, s_2, m_1, m_2\rangle$ που περιγράφουν τα επί μέρους σπιν. Σε αυτή την κατάσταση να βρεθούν οι πιθανότητες να μετρηθούν τιμές για τις συνιστώσες $(\,m_1, m_2\,)$ των σωματιδίων ίσες με $(\,1,-1\,)$, $(\,-1,1\,)$, $(\,0,0\,)$, $(\,1,0\,)$ και $(\,-1,-1\,)$ αντίστοιχα.

$\Longrightarrow$ **Λύσεις**

Λύσεις Θεμάτων

ΘΕΜΑ 1

Η δύναμη που αισθάνεται το ηλεκτρόνιο όταν βρεθεί σε ύψος z πάνω από την αγώγιμη γειωμένη πλάκα, από τα φορτία αυτής, είναι αυτή ενός αντίθετου φορτίου που τοποθετείται σε ίδια απόσταση αλλά κάτω από την γειωμένη επιφάνεια (δες τα μαθήματα στοιχειώδους ηλεκτρομαγνητικής θεωρίας ! Αυτή είναι η μέθοδος των ειδώλων) Αρα η δύναμη είναι $\vec{F} = -\hat{z}\, e^2/(\,2\,z)^2$, με $\hat{z}$ το μοναδιαίο άνυσμα στον άξονα των z. Αυτή η δύναμη απορρέει από το δυναμικό $V(z) = -\,e^2/4\,z$. Με την δεδομένη μορφή της κυματικής συνάρτησης η εξίσωση Schrödinger των ιδιοτιμών της ενέργειας γράφεται

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\,\Phi''(z) + \frac{p_x^2+p_y^2}{2\,m}\,\Phi(z) - \frac{e^2}{4\,z}\,\Phi(z) \;=\; E\,\Phi(z)$$

η το ίδιο

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\,\Phi''(z) - \frac{e^2}{4\,z}\,\Phi(z) \;=\; \mathcal{E}\,\Phi(z)$$

όπου $\mathcal{E} = E - (p_x^2 + p_y^2)\,/\,2m$. Η ενέργεια $\mathcal{E}$ προσδιορίζεται από την επίλυση αυτής με τις συνοριακές συνθήκες $\Phi(0) = 0$, επειδή η κυματική συνάρτηση είναι συνεχής και για $z \le 0$ η $\Phi(z)$ μηδενίζεται διότι η επιφάνεια είναι αδιαπέραστη για το ηλεκτρόνιο, και $\Phi(\infty) = 0$ επειδή το ηλεκτρόνιο θεωρείται δέσμιο. Για το δέσμιο ηλεκτρόνιο Υδρογονοειδούς μηδενικής τροχιακής στροφορμής, αν $R(r)$ είναι η κυματική του συνάρτηση τότε η $u(r)$, που ορίζεται ως $u(r) = r\,R(r)$ (δες παραδόσεις) ικανοποιεί την εξίσωση

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\,u''(r) - \frac{Z\,e^2}{r^2}\,u(r) \;=\; \epsilon\,u(r)$$

με τις συνοριακές συνθήκες $u(0) = u(\infty) = 0$. Η αντιστοιχία με το πρόβλημα που έχουμε να λύσουμε είναι προφανής. Αν η μεταβλητή r γίνει z και συγχρόνως η $u(r)$ γίνει $\Phi(z)$, ενώ αντίστοιχα η μάζα m γίνει μ, η ενέργεια ϵ γίνει $\mathcal{E}$ και το Z ληφθεί ίσο με $Z = 1/4$ η πιο πάνω εξίσωση του ατόμου του Υδρογονοειδούς γίνεται ακριβώς αυτή που έχουμε να επιλύσουμε συμπεριλαμβανομένων των συνοριακών συνθηκών ! Αρα ουσιαστικά δεν έχουμε να επιλύσουμε τίποτα. Η κυματική συνάρτηση $\Phi(z)$ για το πρόβλημα μας προκύπτει απλά αν στην $u(r) = r\,R(r)$ αντικαταστήσουμε την μεταβλητή r με την z και προβούμε στις αντικαταστάσεις των παραμέτρων του προβλήματος όπως προαναφέρθηκε. Εχουμε λοιπόν

$$\Phi(z) \;=\; N\,z\,exp\,(-z/4\,a_0)$$

όπου N σταθερά κανονικοποίησης και $a_0 = \hbar^2/m\,e^2$. Η εκφραση του $a_0 = \hbar^2/m\,e^2$ είναι ακριβώς αυτή που υπεισέρχεται στο ατόμου του Υδρογονοειδούς με την ανηγμένη μάζα του συστήματος μ να έχει αντικατασταθεί ακριβώς από την μάζα m του ηλεκτρονίου . Η ενέργεια για το άτομο του Υδρογονοειδούς στην συγκεκριμμένη κατάσταση είναι $\epsilon = -Z^2\,\mu e^4/2\hbar^2$. Επομένως στην περίπτωση του προβλήματος μας, θέτωντας $Z = 1/4$ και $\mu = m$ έχουμε $\mathcal{E} = -\,m\,e^4/32\,\hbar^2$ που σημαίνει

$$E \;=\; \frac{p_x^2+p_y^2}{2\,m} - \frac{m\,e^4}{32\,\hbar^2}$$

Η πιό πιθανή απόσταση είναι εκεί που η πυκνότητα πιθανότητας $|\Phi(z)|^2$ έχει μέγιστο και αυτό συμβαίνει ακριβώς στην θέση $z = 4\,a_0$! (Συγκρίνετε με το άτομο του Υδρογονοειδούς που η πιο πιθανή απόσταση από τον πυρήνα είναι a_0/Z)

ΘΕΜΑ 2

Ακολουθώντας την υπόδειξη έχουμε από τον ορισμό του $\hat{A}$ και τους γνωστους κανόνες του συμβολισμού bra , ket ότι

$$\hat{A}^\dagger \;=\; |2\rangle\,\langle 1| + |3\rangle\,\langle 2| + |1\rangle\,\langle 3|$$

οπότε

$$\begin{aligned} \hat{A}\,\hat{A}^{\dagger} &= (\,|1\rangle\,\langle 2| \,+\, |2\rangle\,\langle 3| \,+\, |3\rangle\,\langle 1|\,)\,(\,|2\rangle\,\langle 1| \,+\, |3\rangle\,\langle 2| \,+\, |1\rangle\,\langle 3|) \\ &= |1\rangle\,\langle\, 2\,|\,2\,\rangle\,\langle 1| \,+\, |2\rangle\,\langle\, 3\,|\,3\,\rangle\,\langle 2| \,+\, |3\rangle\,\langle\, 1\,|\,1\,\rangle\,\langle 3| + \cdots \end{aligned}$$

Οι όροι ... σ' αυτήν την έκφραση μηδενίζονται γιατι περιλαμβάνουν εσωτερικά γινόμενα $\langle\, 1\,|\,2\,\rangle$, $\langle\, 2\,|\,3\,\rangle$ κλπ που μηδενίζονται γιατί τα $|1\rangle$, $|2\rangle$, $|3\rangle$ είναι ορθοκανονικά. Επίσης $\langle\, 1\,|\,1\,\rangle \,=\, \langle\, 2\,|\,2\,\rangle \,=\, \langle\, 3\,|\,3\,\rangle \,=\, 1$ οπότε η πιο πάνω σχέση δίνει

$$\hat{A}\,\hat{A}^{\dagger} \;\;=\;\; |1\rangle\,\langle 1| \,+\, |2\rangle\,\langle 2| \,+\, |3\rangle\,\langle 3| \;\;=\; \hat{1}$$

Η τελευταία ισότητα προκύπτει γιατί τα $|1\rangle$, $|2\rangle$, $|3\rangle$ αποτελούν ένα πλήρες ορθοκανονικό σύνολο σύμφωνα με την εκφώνηση (ιδιότητα πληρότητας). Αρα $\hat{A}\,\hat{A}^{\dagger} = 1$. Ομοια αποδεικνύει κανείς ότι $\hat{A}^{\dagger}\,\hat{A} = 1$ και επομένως ο τελεστής $\hat{A}$ είναι πράγματι μοναδιαίος. Από αυτό προκύπτει ότι ο μεταθέτης $\left[\hat{A}\,,\,\hat{A}^{\dagger}\right]$ είναι μηδέν Επίσης λόγω αυτού οι μεταθέτες της Χαμιλτωνιανής με τους $\hat{A}$ και $\hat{A}^{\dagger}$ είναι μηδενικοί. Δηλαδή οι τρείς τελεστές $\hat{H}$, $\hat{A}$, $\hat{A}^{\dagger}$ μεταθετίθενται ανά δύο

$$\left[\hat{H}\,,\,\hat{A}\right] = \left[\hat{H}\,,\,\hat{A}^{\dagger}\right] = \left[\hat{A}\,,\,\hat{A}^{\dagger}\right] = 0$$

Αρα υπάρχει κοινό σύστημα ιδιοανυσμάτων των τριών τελεστών. Αν $|\Psi\rangle$ είναι ένα ιδιοάνυσμα του $\hat{A}$ με ιδιοτιμή σ τότε αυτό είναι και ιδιοάνυσμα του $\hat{A}^{\dagger}$ με ιδιοτιμή σ^{-1} λόγω του ότι ο $\hat{A}$ είναι μοναδιαίος, όταν βέβαια $\sigma \neq 0$. Ο συλλογισμός είναι ο ακόλουθος

$$\hat{A}\;|\Psi\rangle = \sigma\;|\Psi\rangle \quad\Rightarrow\quad \hat{A}^{\dagger}\,\hat{A}\;|\Psi\rangle = \sigma\,\hat{A}^{\dagger}\;|\Psi\rangle \quad\Rightarrow\quad \hat{1}\;|\Psi\rangle = \sigma\,\hat{A}^{\dagger}\;|\Psi\rangle \quad\Rightarrow\quad \hat{A}^{\dagger}\;|\Psi\rangle = \sigma^{-1}\;|\Psi\rangle$$

Αυτό είναι τότε και ιδιοάνυσμα της Χαμιλτωνιανής διότι

$$\hat{H}\;|\Psi\rangle \;=\; \left(\,\epsilon_0\,\hat{1} + \lambda\,(\,\hat{A} + \hat{A}^{\dagger}\,)\right)\;|\Psi\rangle \;=\; \left(\,\epsilon_0 \,+ \lambda\,(\,\sigma + \sigma^{-1}\,)\right)\;|\Psi\rangle$$

και μάλιστα με ιδιοτιμή

$$E \;=\; \epsilon_0 \,+ \lambda\,(\,\sigma + \sigma^{-1}\,) \tag{1}$$

Αρα το πρόβλημα ανάγεται στο να βρούμε μόνο τις ιδιοτιμές (και τα ιδιοανύσματα) του τελεστή $\hat{A}$. Μπορούμε να αναπαραστήσουμε τον $\hat{A}$ ως πίνακα στην ορθοκανονική βάση $|1,2,3\rangle$ με τα στοιχεία του πίνακα να είναι $A_{i\,j} \;=\; \langle i|\,\hat{A}\,|j\rangle$. Από τον ορισμό του $\hat{A}$ άμεσα προκύπτει

$$\hat{A}\,|1\rangle = |3\rangle \quad , \quad \hat{A}\,|2\rangle = |1\rangle \quad , \quad \hat{A}\,|3\rangle = |2\rangle$$

οπότε

$$\hat{A} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Οι ιδιοτιμές του προκύπτουν επιλύοντας την $det\,(\hat{A} - \sigma\,\hat{1}\,) \,=\, 0$ πού πολύ εύκολα δινει ότι $\sigma^3 = 1$. Οι λύσεις μπορούν να τεθούν στην μιγαδική μορφή $\sigma = |\sigma|\,\exp\,i\,\theta$. Από την $\sigma^3 = 1$ προκύπτουν τρείς λύσεις όλες με $|\sigma| = 1$ και $\theta_1 \,=\, 0\,, \theta_2 \,=\, 2\,\pi/3, \theta_3 \,=\, 4\,\pi/3$ αντίστοιχα Αρα οι τρείς ιδιοτιμές είναι

$$\sigma_i \;=\; e^{i\,\theta\,i} \;\;,\;\;\; i = 1,2,3 \qquad\Longrightarrow\qquad \sigma_1 \;=\; 1 \quad , \quad \sigma_2 \;=\; e^{2\pi\,i/3} \quad , \quad \sigma_3 \;=\; e^{4\pi\,i/3}$$

Από την (1) εύκολα προκύπτουν οι ενέργειες

$$E_i \;=\; \epsilon_0 \,+ \lambda\,(\,\sigma_i + \sigma_i^{-1}\,) \;=\; \epsilon_0 \,+ \lambda\,(\,e^{i\theta_i} + e^{-i\theta_i}\,) \;=\; \epsilon_0 \,+ 2\,\lambda\,\cos\,\theta_i$$

με τιμές

$$E_1 \;=\; \epsilon_0 \,+ 2\,\lambda \quad , \quad E_2 \;=\; \epsilon_0 \,-\, \lambda \quad , \quad E_2 \;=\; \epsilon_0 \,-\, \lambda$$

Παρατηρούμε ότι $E_2 = E_3$ (υπάρχει διπλός εκφυλισμός αυτών των ενεργειακών επιπέδων). Αν θέλουμε να βρούμε τα αντίστοιχα ιδιοανύσματα του $\hat{A}$, και επομένως και της Χαμιλτωνιανής όπως αποδείξαμε, από την αναπαράσταση του $\hat{A}$ σε μορφή πίνακα προκύπτει εύκολα ότι τα ιδιονύσματα που αντιστοιχούν στις ιδιοτιμές σ_i είναι

$$\sigma_i = e^{i\theta i} \quad , \quad i = 1,2,3 \qquad \Longrightarrow \qquad |\Psi_i\rangle = N \begin{pmatrix} 1 \\ e^{i\theta i} \\ e^{2i\theta i} \end{pmatrix}$$

Αν θέλουμε κανονικοποιημένα στην μονάδα ιδιοανύσματα μιά επιλογή για τις σταθερές N είναι $N = 1/\sqrt{3}$. Ολες οι άλλες επιλογές διαφέρουν από αυτή κατά μία φάση.

ΘΕΜΑ 3

Α : Από τα δεδομένα του προβλήματος το άνυσμα $\hat{\xi}$ είναι $\hat{\xi} = \hat{x}\sin\theta + \hat{z}\cos\theta$ οπότε η προβολή του σπιν, στην αναπαράσταση των πινάκων Pauli , σε αυτό το άνυσμα είναι

$$\hat{s}_\xi = \vec{s}\cdot\hat{\xi} = \hat{s}_x \sin\theta + \hat{s}_z \cos\theta = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta \\ \sin\theta & -\cos\theta \end{pmatrix}$$

Οι ιδιοτιμές του είναι $\pm\hbar/2$ και ένα κανονικοποιημένο στην μονάδα ιδιοάνυσμα που αντιστοιχεί στην ιδιοτιμή $+\hbar/2$ βρίσκεται εύκολα ότι είναι το

$$|\Psi_+\rangle = \begin{pmatrix} \cos\theta/2 \\ \sin\theta/2 \end{pmatrix}$$

(Αυτό είναι μιά ειδική και εύκολη περίπτωση του 2ου ερωτήματος της άσκησης 3 της Σειράς 5). Το ζητούμενο πλάτος πιθανότητας είναι

$$A = \langle z,+|\Psi_+\rangle = (\,1 \quad , \quad 0\,) \begin{pmatrix} \cos\theta/2 \\ \sin\theta/2 \end{pmatrix} = \cos\theta/2$$

και η ζητουμένη πιθανότητα

$$P = |A|^2 = \cos^2\theta/2$$

Β : Στα μαθήματα έχει αναπτυχθεί ο τρόπος που κατασκευάζει κανείς αυτές τις καταστάσεις (διδάχθηκε αναλυτικά για τις περιπτώσεις με σπιν ισα με 1/2). Για συντομία την κατάσταση με τιμή συνολικού σπιν S και τιμή της συνολικής τρίτης συνιστώσας ίσης με M ας την συμβολίσουμε με $|S,M\rangle$. Η κατάσταση με την μεγαλύτερη τιμή του συνολικού σπιν $S = 2$ και την μεγαλυτερη τιμή της συνολικής τρίτης συνιστώσας $M = 2$ είναι η κατάσταση $|s_1, s_2, m_1, m_2\rangle$ με $m_1 = 1, m_2 = 1$, επειδή όπως γνωρίζουμε πρέπει $M = m_1 + m_2$. Αρα

$$|2,2\rangle = |1,1;1,1\rangle \tag{2}$$

Αν δράσουμε με τον τελεστή της καταβίβασης και στα δύο μέλη της (2), που είναι ίσος με τα αθροίσματα των επί μέρους τελεστών καταβίβασης $\hat{S}_- = \hat{S}_-^1 + \hat{S}_-^2$, λαμβάνουμε

$$2\hbar\,|2,1\rangle = \sqrt{2}\hbar\,(\,|1,1;0,1\rangle + |1,1;1,0\rangle\,)$$

και επομένως

$$|2,1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\,(\,|1,1;0,1\rangle + |1,1;1,0\rangle\,) \tag{3}$$

Αν δράσουμε πάλι με τον τελεστή της καταβίβασης και στα δύο μέλη της (3) παίρνουμε (να κανετε τις πράξεις αναλυτικά !)

$$\sqrt{6}\hbar\,|2,0\rangle = \hbar\,(\,|1,1;-1,1\rangle + 2\,|1,1;0,0\rangle + |1,1;1,-1\rangle\,)$$

η το ίδιο

$$\sqrt{6}\,|2,0\rangle \;=\; \frac{1}{\sqrt{6}}\;|1,1;-1,1\rangle \,+\, \frac{2}{\sqrt{6}}\;|1,1;0,0\rangle \,+\; \frac{1}{\sqrt{6}}\;|1,1;1,-1\rangle$$

Αυτή είναι η ζητουμένη κατάσταση. Για τις αντίστοιχες πιθανότητες : Η πιθανότητα να μετρήσουμε $m_1 = 1, m_2 = -1$ είναι $P = (1/\sqrt{6})^2 = 1/6$, η πιθανότητα να μετρήσουμε $m_1 = -1, m_2 = 1$ είναι $P = (1/\sqrt{6})^2 = 1/6$ και η η πιθανότητα να μετρήσουμε $m_1 = 0, m_2 = 0$ είναι $P = (2/\sqrt{6})^2 = 2/3$. Οι πιθανότητες για όλους τους άλλους συνδυασμούς είναι μηδενικές.

Θέματα εξετάσεων - Κβαντομηχανική ΙΙ
Εξετάσεις - 1ης Ιουλίου 2013 , (Τμήμα Α. Λαχανά)

ΘΕΜΑ 1:

A) Για την πρώτη διεγερμένη κατάσταση του ατόμου του Υδρογόνου με τροχιακή στροφορμή $\ell = 1$ να προσδιορισθουν οι αποστάσεις r_1 , r_2 , σε μονάδες της ακτίνας Bohr a_0, που καθορίζουν τα όρια της κλασικά επιτρεπόμενης κίνησης. Δικαιολογήστε πλήρως την απάντηση σας.

B) Για κίνηση σε κεντρικό δυναμικό $V(r)$ να δείξετε ότι το γινόμενο αβεβαιότητας της ακτινικής ορμής επί την αβεβαιότητα Δr της απόστασης από την αρχή ($r = 0$), είναι φραγμένο προς τα κάτω. Ποιός είναι ο κάτω φραγμός ; (Θεωρείται γνωστό το συμπέρασμα $\Delta A \, \Delta B \geq | \langle C \rangle | / 2$ όταν οι αυτοσυζυγείς τελεστές $\hat{A} , \hat{B} , \hat{C}$ ικανοποιούν την σχέση μετάθεσης $[\hat{A} , \hat{B}] = i \, \hat{C}$).

Γ) Για την βασική κατάσταση του ατόμου του Υδρογόνου της οποίας η κανονικοποιημένη στην μονάδα κυματική συνάρτηση είναι

$$\psi_{100}(r) \; = \; (\pi \, a_0^3)^{-1/2} \, exp \, (-r/a_0)$$

όπου a_0 είναι η ακτίνα Bohr του ατόμου του Υδρογόνου, να βρεθούν αναλυτικά οι διασπορές της ακτινικής ορμής και της απόστασης r και να επιβεβαιωθεί ότι το γινόμενο τους ικανοποιεί τον φραγμό του ερωτήματος Β. Δίνονται τα ολοκληρώματα $\int_0^\infty y^n \, e^{-y} \, dy = \; 6 \, , 24$ για $n = 3, 4$ αντίστοιχα.
(Και για τα τρία ερωτήματα δίνεται ότι η ακτίνα Bohr του άτομου του Υδρογόνου είναι $a_0 = \hbar^2 / \mu e^2$, όπου μ η ανηγμένη μάζα του συστήματος και η σταθερά της λεπτής υφής, αν χρειασθεί, είναι $\alpha = e^2 / \hbar c$)

ΘΕΜΑ 2:

Ενα κβαντικό σύστημα περιγράφεται από την Χαμιλτωνιανή

$$\hat{H} \; = \; \epsilon \, \hat{1} + g \, \hat{V}$$

όπου ϵ , g δεδομένες πραγματικές σταθερές με μονάδες ενέργειας και τον τελεστή $\hat{V}$ να ορίζεται ως $\hat{V} = \hat{B} + \hat{B}^\dagger$ όπου

$$\hat{B} \; = \; |1\rangle \, \langle 2| \; + \; |2\rangle \, \langle 3| \; + \; |3\rangle \, \langle 4| + \; |4\rangle \, \langle 1|$$

Οι καταστάσεις $|1\rangle$, $|2\rangle$, $|3\rangle$, $|4\rangle$ υποτίθεται ότι αποτελούν ένα πλήρες και ορθοκανονικό σύστημα. Αφού αποδείξετε ότι ο $\hat{B}$ είναι μοναδιαίος να βρείτε τις ενεργειακές στάθμες του συστήματος και τις αντίστοιχες ιδιακαταστάσεις. Υπάρχει εκφυλισμός στο ενεργειακό φάσμα ;

ΘΕΜΑ 3:

Ενα κβαντικό σύστημα με κβαντικό αριθμό ιδιοστροφορμής (σπιν) $s = 1/2$ περιγράφεται από την Χαμιλτωνιανή

$$\hat{H}_0 \; = \; a \, \vec{L} \cdot \vec{S}$$

όπου a σταθερά, $\vec{S}$ η ιδιοστροφορμή και $\vec{L}$ η τροχιακή στροφορμή του. Το σύστημα έχει μαγνητική ροπή

$$\vec{\mu} = g \, (\vec{L} + \lambda \, \vec{S} \,)$$

με g , λ δεδομένες σταθερές. Αν το σύστημα τοποθετηθεί σε ασθενές σταθερό μαγνητικό πεδίο έντασης B να βρεθεί το ενεργειακό του φάσμα σε προσέγγιση πρώτης τάξης ως προς την ένταση του μαγνητικού πεδίου εκπεφρασμένη συναρτήσει του κβαντικού αριθμού ℓ της τροχιακής στροφορμής και του κβαντικού αριθμού M της συνιστώσας της ολικής στροφορμής του συστήματος κατά την κατεύθυνση του μαγνητικού πεδίου.

Υπόδειξη

Δίνεται ότι οι καταστάσεις συνολικής στροφορμής $|JM;\ell s\rangle$, όπου J,ℓ,s οι κβαντικοί αριθμοί που χαρακτηρίζουν τα μεγέθη $\vec{J}^2, \vec{L}^2, \vec{s}^2$ και M ο κβαντικός αριθμός που χαρακτηρίζει την συνιστώσα της συνολικής στροφορμής $\vec{J}$ σε κάποια κατεύθυνση $\hat{\xi}$, δίνονται από

$$|JM;\ell s\rangle \;=\; C_+\;|+\rangle + C_-\;|-\rangle$$

για την μεγαλύτερη τιμή του J και

$$|JM;\ell s\rangle \;=\; -C_-\;|+\rangle + C_+\;|-\rangle$$

για την μικρότερη τιμή του J. Με $|+\rangle$ και $|-\rangle$ συμβολίζονται οι καταστάσεις $|\ell\, s; m_\ell\, m_s\rangle$ για κβαντικούς αριθμούς της συνιστώσας του σπιν στην κατεύθυνση $\hat{\xi}$ ίσες με $m_s = +1/2$ και $m_s = -1/2$ αντίστοιχα. m_ℓ είναι ο κβαντικός αριθμός της τροχιακής στροφορμής στην ίδια κατεύθυνση $\hat{\xi}$. Οι συντελεστές $C_\pm$ δίνονται από τις εκφράσεις

$$C_\pm \;=\; \left(\frac{\ell + 1/2 \pm M}{2\ell + 1}\right)^{1/2}$$

ΑΠΑΝΤΗΣΕΙΣ (με μιά ματιά)

1Α)

$$r_2 \;=\; 2\,(\,2 \,+\, \sqrt{2}\,)\,a_0 \;=\; 6,8286\; a_0$$

$$r_1 \;=\; 2\,(\,2 \,-\, \sqrt{2}\,)\,a_0 \;=\; 1,1716\; a_0$$

1Β)

$$\Delta p_r\,\Delta r \;\geq\; \frac{\hbar}{2}$$

1Γ)

$$(\,\Delta r\,) \;=\; \frac{\sqrt{3}}{2}\,a_0$$

$$(\,\Delta p_r\,) \;=\; \frac{\hbar}{a_0}$$

$$(\,\Delta p_r\,)\,(\,\Delta r\,) \;=\; \frac{\sqrt{3}}{2}\,\hbar$$

2) Οι ενέργειες είναι

$$E_1 \;=\; \epsilon + 2\,g \quad , \quad E_2 \;=\; \epsilon - 2\,g \quad , \quad E_3 \;= E_4 \;=\; \epsilon$$

Υπάρχει διπλός εκφυλισμός της στάθμης με ενέργεια ϵ

3) Το ενεργειακό φάσμα σε πρώτη τάξη στο μαγνητικό πεδίο,

$$E_{J=\ell+1/2,M} \;=\; \frac{a\,\hbar^2}{2}\;\ell\; -\, g\,\hbar M\left(1 + \frac{\lambda - 1}{2\,\ell + 1}\right) B \qquad , \qquad \gamma\iota\alpha \qquad J = \ell + 1/2$$

$$E_{J=\ell-1/2,M} \;=\; \frac{a\,\hbar^2}{2}\,(\,-\,\ell - 1\,)\; -\, g\,\hbar M\left(1 - \frac{\lambda - 1}{2\,\ell + 1}\right) B \qquad , \qquad \gamma\iota\alpha \qquad J = \ell - 1/2$$

$\Longrightarrow$ **Αναλυτικές λύσεις**

<u>Λύσεις Θεμάτων</u>

<u>ΘΕΜΑ 1</u>

Α) Για δεδομένη τροχιακή στροφορμή το ηλεκτρόνιο κινείται σε κεντρικό δυναμικό και υφίσταται την επίδραση του δυναμικού Coulomb αλλά και του φυγοκεντρικού όρου. Το ενεργό δυναμικό είναι

$$U(r) = -\frac{e^2}{r} + \frac{\hbar^2 \,\ell(\ell+1)}{2\,\mu\, r^2} = -\frac{e^2}{r} + \frac{\hbar^2}{\mu\, r^2}$$

όπου στην δεύτερη ισότητα χρησιμοποιήσαμε το γεγονός ότι η στροφορμή δίνεται να έχει την τιμή $\ell = 1$. Η ενέργεια της πρώτης διεγερμένης στάθμης ($n = 2$) είναι $E_2 = -\mu\, c^2\, \alpha^2/8$. Αν το σωματίδιο ήταν κλασικό και είχε αυτήν την ενέργεια η κίνηση του θα περιοριζόταν σε εκείνα τα r για τα οποία $E_2 \geq U(r)$. Ο λόγος είναι απλός, το τετράγωνο της κλασικής ακτινικής ορμής είναι $p_r^2 = 2\,\mu\,(\,E_2 - U(r)\,)$ και αυτό πρέπει να είναι θετικό στην κλασική φυσική. Μάλιστα στα σημεία όπου ισχύει το σημείο της ισότητας η ακτινική ορμή μηδενίζεται και αυτά τα σημεία θέτουν και τα όρια της κλασικής κίνησης για δεδομένη ενέργεια. Τα όρια λοιπόν καθορίζονται από την εξίσωση $E_2 = U(r)$ η οποία με τετριμμένο τρόπο (οι σταθερές της λεπτής υφής και η ακτίνα Bohr δίνονται) παίρνει την μορφή (επιβεβαιώστε το αναλυτικά !)

$$\frac{1}{8}\left(\frac{r}{a_0}\right)^2 - \left(\frac{r}{a_0}\right) + 1 = 0$$

που είναι τριώνυμο ως προς τον λόγο $\frac{r}{a_0}$. Οι δύο λύσεις είναι

$$r_2 = 2\,(\,2 + \sqrt{2}\,)\, a_0 = 6,8286\; a_0$$

$$r_1 = 2\,(\,2 - \sqrt{2}\,)\, a_0 = 1,1716\; a_0$$

Αρα η επιτρεπόμενη κλασική κίνηση γίνεται στο διάστημα $r_1 \leq r \leq r_2$.

Β) Ο τελεστής της ακτινικής ορμής είναι ο αυτοσυζυγής τελεστής $\hat{p}_r = -i\,\hbar\,\left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r}\right)$ και επομένως η μετάθεση του με το r δίνει

$$[\,\hat{p}_r\,,\, r\,] = \left[-i\,\hbar\,\left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r}\right)\,,\, r\right] = \left[-i\,\hbar\,\frac{\partial}{\partial r}\,,\, r\right] = -i\,\hbar$$

Η τελευταία ισότητα προκύπτει άμεσα αν βάλουμε π.χ. τον τελευταίο μεταθέτη να δράσει σε μία κυματική συνάρτηση, η απλά πατρατηρώντας ότι αν αντικαταστήσουμε το r με το x είναι σαν τον μεταθέτη της μονοδιάστατης κίνησης $[\,\hat{p}_x\,,\, x\,] = \left[\,-i\,\hbar\,\frac{\partial}{\partial x}\,,\, x\right]$ που είναι $-i\,\hbar$. Επομένως χρησιμοποιώντας την ανισότητα που δίνεται στην εκφώνηση βρίσκουμε ότι το ζητούμενο γινόμενο αβεβαιότητας φρασεται προς τα κάτω ως

$$\Delta\, p_r\, \Delta\, r \geq \frac{\hbar}{2}$$

Γ) Για τις διασπορές χρειαζόμαστε τις μέσες τιμές των αντιστοίχων μεγεθών και τις μέσες τιμές των τετραγώνων αυτών. Για την μέση τιμή της απόστασης

$$\langle r \rangle = \int \psi^*\, r\, \psi\, dV = 4\,\pi\,\frac{1}{\pi\, a_0^3}\int_0^\infty r^3\, exp\left(-\frac{2\,r}{a_0}\right) dr$$

Το $4\,\pi$ έχει προκύψει από την ολοκλήρωση στην στερεά γωνία ! Θέτωντας ως μεταβλητή ολοκλήρωσης το $y = \frac{2\,r}{a_0}$ πρόκύπτει άμεσα

$$\langle r \rangle = \frac{4}{a_0^3}\left(\frac{a_0}{2}\right)^4 \int_0^\infty y^3\, exp(-y)\; dy = \frac{3}{2}\, a_0$$

όπου χρησιμοποιήσαμε το ένα από τα ολοκληρώματα που δίνονται. Η μέση τιμή του τετραγώνου της απόστασης γίνεται με παρόμοιο τρόπο

$$\begin{aligned} \langle r^2 \rangle &= \int \psi^* \, r^2 \, \psi \, dV \, = \, 4\pi \, \frac{1}{\pi \, a_0^3} \int_0^\infty r^4 \, exp\left(-\frac{2\,r}{a_0} \right) \, dr \\ &= \frac{4}{a_0^3} \left(\frac{a_0}{2} \right)^5 \int_0^\infty y^4 \, exp\,(-\,y\,) \, dy \, = \, 3\,a_0^2 \end{aligned}$$

όπου χρησιμοποιήσαμε το άλλο ολοκλήρωμα.

Για την ακτινική ορμή η μέση τιμή της είναι μηδενική αν επικαλεσθούμε την αντιστοιχία με την δέσμια κατάσταση μονοδιάστατης κίνηση. Ενας άλλος εύκολος τρόπος είναι να γράψουμε αναλυτικά την μέση τιμή αυτής

$$\langle p_r \rangle \, = \, \int \psi^* \, \hat{p}_r \, \psi \, dV \, = \, -i\,\hbar \int_0^\infty \psi_{100}^* \left(\frac{\partial \psi_{100}}{\partial\, r} \, + \, \frac{\psi_{100}}{r} \right) r^2 \, dr \, = \, -i\,\hbar \int_0^\infty \psi_{100} \left(\frac{\partial \psi_{100}}{\partial\, r} \, + \, \frac{\psi_{100}}{r} \right) r^2 \, dr$$

Στην τελευταία ισότητα χρησιμοποιήσαμε το γεγονός ότι η κυματική συνάρτηση είναι πραγματική. Το ολοκλήρωμα επομένως είναι πραγματικός αριθμός και αν ήταν διάφορο από το μηδέν το δεξί μέλος θα ήταν φανταστικός αριθμός και επομένως και η μέση τιμή θα ήταν επίσης φανταστικός αριθμός που δεν μπορεί να συμβαίνει αφού γνωρίζουμε ότι είναι πραγματική ! Αρα το ολοκλήρωμα είναι υποχρεωτικά μηδέν και επομένως και η μέση τιμή της ακτινικής ορμής μηδενική. Αυτό μπορεί επίσης να επιβεβαιωθεί με αναλυτική ολοκλήρωση που δεν είναι δύσκολο να γίνει. Για την μέση τιμή του τετραγώνου της ορμής θα επικαλεσθούμε το θεώρημα virial που για κίνηση σε δυναμικό Coulomb δίνει $\langle T \rangle = -\, \langle V \rangle /2$. Για οποιαδήποτε ενεργειακή στάθμη όμως $\langle T \rangle + \langle V \rangle = E_n$ οπότε ως $\langle T \rangle = -\,E_n$. Η μέση τιμή της κινητικής ενέργειας στην θεμελειώδη στάθμη είναι επομένως $\langle T \rangle = -\,E_1$ η το ίδιο

$$\left\langle \hat{p}_r^2 + \frac{\hat{L}^2}{r^2} \right\rangle \, = \, -\,2\,\mu\,E_1 = \mu^2\,c^2\,\alpha^2 \tag{1}$$

Για οποιαδήποτε κυματική συνάρτηση με καθορισμένη τροχιακή στροφορμή ℓ η μέση τιμή $\left\langle \frac{\hat{L}^2}{r^2} \right\rangle$ είναι ίση με $\left\langle \frac{\hbar^2\,\ell(\ell+1)}{r^2} \right\rangle$. Η θεμελειώδης στάθμη έχει $\ell = 0$ άρα $\left\langle \frac{\hat{L}^2}{r^2} \right\rangle = 0$ και η (;;) δίνει

$$\langle\, \hat{p}_r^2 \,\rangle \, = \, \mu^2\,c^2\,\alpha^2 \, = \, \frac{\hbar^2}{a_0^2}$$

Στην τελευταία ισότητα εκφράσαμε την μέση τιμή συναρτήσει της ακτίνας Bohr και της σταθεράς Planck.

Για τις διασπορές έχουμε επομενως

$$\begin{aligned} (\,\Delta\, r\,)^2 \, &\equiv \, \langle r^2 \rangle \, - \, \langle r \rangle^2 \, = \, 3\,a_0^2 \, - \, \frac{9}{4}\,a_0^2 \, = \, \frac{3}{4}\,a_0^2 \\ (\,\Delta\, p_r\,)^2 \, &\equiv \, \langle p_r^2 \rangle \, - \, \langle p_r \rangle^2 \, = \frac{\hbar^2}{a_0^2} \, - \, 0 \, = \, \frac{\hbar^2}{a_0^2} \end{aligned}$$

οπότε

$$(\,\Delta\, p_r\,)\,(\,\Delta\, r\,) \, = \, \frac{\sqrt{3}}{2}\,\hbar$$

που είναι πράγματι μεγαλύτερο του κατώ φραγμού $\frac{\hbar}{2}$ του ερωτήματος Β.

ΘΕΜΑ 2

Το θέμα αυτό αποτελεί τετριμένη γενίκευση του 2ου θέματος των εξετάσεων της 11ης Μαρτίου 2013 που οι λύσεις τους είναι αναρτημένες στην ιστοσελίδα http://users.uoa.gr/~alahanas από τον Μάρτιο του 2013. Οποιος είχε διαβάσει, και καταλάβει, το θέμα αυτό θα έφτανε στις απαντήσεις με σχετικά απλές πράξεις. Αλλοι τρόποι οδηγούν στα ίδια συμπεράσματα αλλά είναι ενδεχόμενα περισσότερο χρονοβόροι. Η γενίκευση είναι ότι οι καταστάσεις είναι 4, αντί για 3, και αλλάχθηκαν τα σύμβολα (σταθερές κλπ).

Επαναλαμβανοντας τα ιδια ακριβώς βήματα (λύσεις 11/3/2013) έχουμε από τον ορισμό του $\hat{B}$ και τους γνωστους κανόνες του συμβολισμού bra , ket ότι

$$\hat{B}^{\dagger} \;=\; |2\rangle\langle 1| + |3\rangle\langle 2| + |4\rangle\langle 3| + |1\rangle\langle 4|$$

οπότε

$$\begin{aligned}
\hat{B}\,\hat{B}^{\dagger} \;&=\; (\,|1\rangle\langle 2| + |2\rangle\langle 3| + |3\rangle\langle 4| + |4\rangle\langle 1|)\,(\,|2\rangle\langle 1| + |3\rangle\langle 2| + |4\rangle\langle 3| + |1\rangle\langle 4|) \\
&=\; |1\rangle\langle 2\,|\,2\rangle\langle 1| + |2\rangle\langle 3\,|\,3\rangle\langle 2| + |3\rangle\langle 4\,|\,4\rangle\langle 3| + |4\rangle\langle 1\,|\,1\rangle\langle 4| + \cdots
\end{aligned}$$

Οι όροι ... σ' αυτήν την έκφραση μηδενίζονται γιατι περιλαμβάνουν εσωτερικά γινόμενα $\langle 1\,|\,2\rangle$, $\langle 2\,|\,3\rangle$ κλπ που μηδενίζονται γιατί τα $|1\rangle$, $|2\rangle$, $|3\rangle$ είναι ορθοκανονικά. Επίσης $\langle 1\,|\,1\rangle = \langle 2\,|\,2\rangle = \langle 3\,|\,3\rangle = 1$ οπότε η πιο πάνω σχέση δίνει

$$\hat{B}\,\hat{B}^{\dagger} \;=\; |1\rangle\langle 1| + |2\rangle\langle 2| + |3\rangle\langle 3| + |4\rangle\langle 4| \;=\; \hat{1}$$

Η τελευταία ισότητα προκύπτει γιατί τα $|1\rangle$, $|2\rangle$, $|3\rangle$ $|4\rangle$ αποτελούν ένα πλήρες ορθοκανονικό σύνολο σύμφωνα με την εκφώνηση (ιδιότητα πληρότητας). Αρα $\hat{B}\,\hat{B}^{\dagger} = 1$. Ομοια αποδεικνύει κανείς ότι $\hat{B}^{\dagger}\,\hat{B} = 1$ και επομένως ο $\hat{B}$ είναι πράγματι μοναδιαίος. Από αυτό προκύπτει άμεσα ότι ο μεταθέτης $\left[\hat{B}\,,\,\hat{B}^{\dagger}\right]$ είναι μηδέν. Επίσης λόγω αυτού οι μεταθέτες του $\hat{V}$, και επομένως και της Χαμιλτωνιανής $\hat{H}$, με τους $\hat{B}$ και $\hat{B}^{\dagger}$ είναι μηδενικοί και άρα υπάρχει κοινό σύστημα ιδιοανυσμάτων αυτών. Ποιά είναι όμως αυτά ;

Αν $|\Psi\rangle$ είναι ένα ιδιοάνυσμα του $\hat{B}$ με ιδιοτιμή σ τότε αυτό είναι και ιδιοάνυσμα του $\hat{B}^{\dagger}$ με ιδιοτιμή σ^{-1} λόγω του ότι ο $\hat{B}$ είναι μοναδιαίος, όταν βέβαια $\sigma \neq 0$. Ο συλλογισμός είναι ο ακόλουθος

$$\hat{B}\,|\Psi\rangle = \sigma\,|\Psi\rangle \quad\Rightarrow\quad \hat{B}^{\dagger}\,\hat{B}\,|\Psi\rangle = \sigma\,\hat{B}^{\dagger}\,|\Psi\rangle \quad\Rightarrow\quad \hat{1}\,|\Psi\rangle = \sigma\,\hat{B}^{\dagger}\,|\Psi\rangle \quad\Rightarrow\quad \hat{B}^{\dagger}\,|\Psi\rangle = \sigma^{-1}\,|\Psi\rangle$$

Τότε το $|\Psi\rangle$ αποδεικνύεται ότι είναι και ιδιοάνυσμα της Χαμιλτωνιανής διότι

$$\hat{H}\,|\Psi\rangle \;=\; \left(\epsilon\,\hat{1} + g\,(\hat{B} + \hat{B}^{\dagger})\right)\,|\Psi\rangle \;=\; \left(\,\epsilon + g\,(\,\sigma + \sigma^{-1}\,)\right)\,|\Psi\rangle$$

και μάλιστα με ιδιοτιμή

$$E \;=\; \epsilon + g\,(\,\sigma + \sigma^{-1}\,) \tag{2}$$

Αρα τα ιδιοανύσματα του $\hat{B}$ είναι ιδιοανύσματα και των άλλων δύο τελεστών $\hat{B}^{\dagger}$, $\hat{H}$. Το πρόβλημα επομένως ανάγεται στο να βρούμε **μόνο** τις ιδιοτιμές και τα ιδιοανύσματα του $\hat{B}$, που ειναι πολύ εύκολο οπως θα δούμε, και δεν χρειάζεται να βρεθούν αυτά της Χαμιλτωνιανής που είναι πιό επίπονη διαδικασία.

Μπορούμε να αναπαραστήσουμε τον $\hat{B}$ ως πίνακα στην ορθοκανονική βάση $|1,2,3,4\rangle$ με τα στοιχεία του πίνακα να είναι $B_{ij} \;=\; \langle i|\,\hat{B}\,|j\rangle$. Από τον ορισμό του $\hat{B}$ άμεσα προκύπτει

$$\hat{B}\,|1\rangle = |4\rangle \quad , \quad \hat{B}\,|2\rangle = |1\rangle \quad , \quad \hat{B}\,|3\rangle = |2\rangle \quad , \quad \hat{B}\,|4\rangle = |3\rangle$$

οπότε

$$\hat{B} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Οι ιδιοτιμές του προκύπτουν επιλύοντας την $det(\hat{B} - \sigma\,\hat{1}) = 0$ πού πολύ εύκολα δινει ότι $\sigma^4 = 1$. Η ορίζουσα υπολογίζεται εξαιρετικά εύκολα γιατί υπάρχουν πολλά μηδενικά. Δεν είναι το ίδιο εύκολο να υπολογισθούν οι ιδιοτιμές της Χαμιλτωνιανής αν επιλέξουμε να βρούμε τον πίνακα της Χαμιλτωνιανής και μέσω αυτού τις ιδιοτιμές της. Η εξίσωση ιδιοτιμών $\sigma^4 - 1 = 0$ γράφεται $(\sigma^2 - 1)(\sigma^2 + 1) = 0$ και επομένως θα πρέπει η $\sigma^2 - 1 = 0$ η $\sigma^2 + 1 = 0$. Η πρώτη δίνει ιδιοτιμές $\sigma_1 = 1, \sigma_2 = -1$ και η δεύτερη $\sigma_3 = i, \sigma_4 = -i$.

Για κάθε μία ιδιοτιμή σ_i έχουμε μέσω της (;;) και μία ιδιοτιμή E_i της Χαμιλτωνιανής,

$$E_1 = \epsilon + 2g \quad , \quad E_2 = \epsilon - 2g \quad , \quad E_3 = E_4 = \epsilon$$

Τα ιδιοανύσματα του $\hat{B}$ με ιδιοτιμή σ_i είναι και ιδιοανύσματα της Χαμιλτωνιανής με ιδιοτιμές E_i . Αυτά ας τα συμβολίσουμε με $|\Psi\rangle_i$. Παρατηρούμε ότι οι ενέργειες E_3 , E_4 είναι ίδιες και έχουν ιδιοανύσματα $|\Psi\rangle_3$, $|\Psi\rangle_4$ που είναι όμως ανεξάρτητα γιατί αντιστοιχούν στις ιδιοτιμές σ_3 , σ_4 που είναι διαφορετικές. Αρα υπάρχει διπλός εκφυλισμός αυτών των ενεργειακών επιπέδων (ίδια ενέργεια και δύο ανεξάρτητα ιδιοανύσματα !).

Αν θέλουμε να βρούμε τα ιδιοανύσματα $|\Psi\rangle_i$ του $\hat{B}$, και επομένως και της Χαμιλτωνιανής όπως αποδείξαμε, γράφουμε το κάθε ιδιοάνυσμα $|\Psi\rangle$ ως γραμμικό συνδυασμό

$$|\Psi\rangle = a\,|1\rangle + b\,|2\rangle + c\,|3\rangle + d\,|4\rangle$$

και από την εξίσωση ιδιοτιμών $\hat{B}\,|\Psi\rangle = \sigma\,|\Psi\rangle$, για κάθε μία ιδιοτιμή και επειδή γνωρίζουμε την δράση του τελεστή $\hat{B}$ σε κάθε ένα από τα $|1, 2, 3, 4\rangle$, προσδιορίζονται οι σχέσεις μεταξύ των σταθερών a, b, c, d . Τα ιδιοανύσματα που αντιστοιχούν στις ιδιοτιμές $\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3, \sigma_4$ αντίστοιχα βρίσκονται να είναι

$$\begin{aligned} |\Psi\rangle_1 &= N\,(\,|1\rangle + |2\rangle + |3\rangle + |4\rangle\,) \\ |\Psi\rangle_2 &= N\,(\,|1\rangle - |2\rangle + |3\rangle - |4\rangle\,) \\ |\Psi\rangle_3 &= N\,(\,|1\rangle + i\,|2\rangle - |3\rangle - i\,|4\rangle\,) \\ |\Psi\rangle_4 &= N\,(\,|1\rangle - i\,|2\rangle - |3\rangle + i\,|4\rangle\,) \end{aligned}$$

με N σταθερά κανονικοποίησης που μορεί να ληφθεί ίση με $1/2$. Τα 2 ανεξάρτητα ιδιοανύσματα $|\Psi\rangle_3$, $|\Psi\rangle_4$ αντιστοιχούν στην ίδια ενέργεια $E_3 = E_4$ (διπλός εκφυλισμός). Για την εύρεση των ιδιοανυσμάτων μπορεί κανείς, ισοδύναμα , να δουλέψει στην αναπαράσταση πίνακων αν το επιθυμεί.

ΘΕΜΑ 3:

Το θέμα αυτό αποτελεί τετριμένη γενίκευση του 3ου θέματος των εξετάσεων της 24ης Ιουνίου 2011 που οι λύσεις τους είναι αναρτημένες στην ιστοσελίδα http://users.uoa.gr/~alahanas . Για την ακρίβεια αν θέσει κανείς την σταθερά $\lambda = 2$ τότε έχει ακριβώς το 3ο θέμα εκείνης της περιόδου ! Οποιος είχε διαβάσει, και καταλάβει, το θέμα εκείνο θα έφτανε στις σωστές απαντήσεις με ευκολία. Πιό κάτω απλά επαναλαμβάνουμε τα ίδια που έχουν εκτεθεί στις λύσεις της 24/6/11.

Επαναλαμβανοντας τα ιδια ακριβώς βήματα (λύσεις 24/6/2011) έχουμε για την αδιατάρακτη Χαμιλτωνιανή, όταν δηλαδή δεν υπάρχει μαγνητικό πεδίο,

$$\hat{H}_0 \;=\; \frac{a}{2}\,(\,\vec{J}^2 - \vec{L}^2 - \vec{S}^2\,)$$

όπου $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$ η ολική στροφορμή του συστήματος (τροχιακή + σπιν). Οι τελεστές $\vec{J}^2, \vec{L}^2, \vec{S}^2$ και η Χαμιλτωνιανη μετατίθενται μεταξύ τους και οι καταστάσεις συνολικής στροφορμής $|JM;\ell s\rangle$ είναι ιδιοκαταστάσεις της Χαμιλτωνιανης, διότι

$$\hat{H}_0\;|JM;\ell s\rangle \;=\; \frac{a\hbar^2}{2}\;[\,J(J+1) - l(l+1) - s(s+1)\,]\;|JM;\ell s\rangle$$

Οι ιδιοτιμές της ενέργειας είναι επομένως

$$E_J \;=\; \frac{a\hbar^2}{2}\,[\,J(J+1) - l(l+1) - s(s+1)\,]$$

και έχουν εκφυλισμό $2J+1$ γιατί οι καταστάσεις $|JM;ls\rangle$, για $M = -J, -J+1, ..., J$, έχουν ίδια ενέργεια. Γενικά ο J παίρνει τιμές από $|\ell - s|$ έως $\ell + s$ ανά ένα. Στην περίπτωση μας επειδή $s = 1/2$ ο J παίρνει μόνο τις τιμές $\ell - 1/2$ και $\ell + 1/2$, όταν $\ell \geq 1$, και μόνο την τιμή $J = 1/2$ όταν $\ell = 0$. Οι ιδιοτιμές της ενέργειας για $\ell \geq 1$ είναι επομένως (με αντικατάσταση της τιμής του J)

$$\begin{aligned} E_{J=\ell+1/2} &= \frac{a\hbar^2}{2}\;\ell \\ E_{J=\ell-1/2} &= \frac{a\hbar^2}{2}\,(\,-\ell-1\,) \end{aligned}$$

Η πρώτη έχει εκφυλισμό $2J+1 = 2\ell + 2$ και η δεύτερη έχει εκφυλισμό $2J+1 = 2\ell$. Η πρώτη εκφραση μάλιστα καλύπτει και την περίπτωση $\ell = 0$ διότι για $\ell = 0$ έχουμε $J = 1/2$ και η ενέργεια είναι $E_{J=1/2} = 0$.

Οι διορθώσεις στο ενεργειακό φάσμα λόγω του μαγνητικού πεδίου δίνονται (σε πρώτη τάξη) από

$$\Delta E_{J,M} \;=\; \langle JM;\ell s|\,\hat{V}\,|JM;\ell s\rangle$$

όπου ο διαταρακτικός όρος είναι $\hat{V} = -\,g\,B\,(\hat{L}_z + \lambda\,\hat{S}_z)$. Χωρίς βλάβη της γενικότητας έχουμε επιλέξει τον άξονα $-z$ στην κατεύθυνση του μαγνητικού πεδίου, αλλά θα μπορούσε να είναι σε οποιοδήποτε τυχαίο άξονα οπότε και οι καταστάσεις θα αναφερόντουσαν σε αυτόν τον άξονα. Αυτός ο όρος μπορεί να γραφεί ως $\hat{V} = -\,g\,B\,(\hat{J}_z + (\lambda-1)\,\hat{S}_z)$ οπότε

$$\Delta E_{J,M} \;=\; -\,g\,B\;\langle JM;\ell s|\,\hat{J}_z + (\lambda-1)\,\hat{S}_z\,|JM;\ell s\rangle \;=\; -\,g\,(\,\hbar M + (\lambda-1)\,\langle S_z\rangle)\;B$$

Αρα χρειάζεται να υπολογισθεί μόνο η μέση τιμή $\langle S_z\rangle$ στη κατάσταση $|JM;\ell s\rangle$. Από την μορφή των $|JM;\ell s\rangle$ βρίσκεται πολύ εύκολα (επιβεβαιώστε το σε μιά σειρά μόνο !) ότι,

$$\langle S_z\rangle \;=\; \pm\frac{\hbar}{2}\,\left(|C_+|^2 \;-\; |C_-|^2\right)$$

όπου το $+$ αντιστοιχεί στην μεγαλύτερη τιμή του J , $J = \ell + 1/2$, και το $-$ στην μικρότερη $J = \ell - 1/2$. Με την χρήση των $C_{\pm}$ (συντελεστές Clebsch - Gordan) που δίνονται αναλυτικά έχει κανείς

$$\langle S_z \rangle \;=\; \pm\hbar\,\frac{M}{2\,\ell+1} \qquad , \qquad \gamma\iota\alpha \qquad J = \ell \pm 1/2$$

οπότε οι διορθώσεις στην ενέργεια είναι

$$\Delta E_{J,M} \;=\; -\,g\,\hbar\,\left(M \pm (\lambda - 1)\,\frac{M}{2\,\ell+1} \right)\,B \qquad , \qquad \gamma\iota\alpha \qquad J = \ell \pm 1/2$$

και το ενεργειακό φάσμα είναι επομένως σε πρώτη τάξη στο μαγνητικό πεδίο,

$$\begin{aligned}
E_{J=\ell+1/2,M} \quad &= \quad \frac{a\,\hbar^2}{2}\;\ell\; - \,g\,\hbar M\,\left(1 + \frac{\lambda-1}{2\,\ell+1}\right)\,B \qquad\qquad , \qquad \gamma\iota\alpha \qquad J = \ell + 1/2 \\
E_{J=\ell-1/2,M} \quad &= \quad \frac{a\,\hbar^2}{2}\,(\,-\,\ell - 1\,)\, - \,g\,\hbar M\,\left(1 - \frac{\lambda-1}{2\,\ell+1}\right)\,B \qquad , \qquad \gamma\iota\alpha \qquad J = \ell - 1/2
\end{aligned}$$

Οι ενέργειες εξαρτώνται μόνο από το ℓ και το M όπως ζητάει η εκφώνηση.

Θέματα εξετάσεων - Κβαντομηχανική ΙΙ

Εξετάσεις - 11ης Φεβρουαρίου 2014 , (Τμήμα Α. Λαχανά)

ΘΕΜΑ 1:

α. Η κυματική συνάρτηση σωματιδίου μάζας m την στιγμή $t = 0$ είναι

$$\Psi(r, \theta, \phi) = N\, r\, e^{\lambda\, r}\ Y_{\ell\, m}(\theta, \phi)$$

όπου N κάποια σταθερά. Δίνεται ότι το σωματίδιο κινείται σε δυναμικό $V(r) = g/r$, με g δεδομένη σταθερά, με καθορισμένη ενέργεια E και τροχιακή στροφορμή ℓ. Να βρεθούν αναλυτικά οι τιμές των E, λ συναρτήσει της παραμέτρου g και επίσης η τιμή της στροφορμής ℓ.

β. Να βρεθούν οι ιδιοσυναρτήσεις του τελεστή της ακτινικής ορμής $\hat{p}_r$, δεδομένης τροχιακής στροφορμής με κβαντικούς αριθμούς ℓ και m. Για δεδομένη τιμή του μέτρου της ακτινικής ορμής p_0 να βρεθεί γραμμικός συνδυασμός αυτών με πεπερασμένη τιμή στην αρχή του συστήματος των συντεταγμένων $r = 0$.

ΘΕΜΑ 2:

Στην βάση των ορθοκανονικών ανυσμάτων $|1\rangle$ και $|2\rangle$ ο τελεστής της ενέργειας είναι

$$\hat{H} = \epsilon\ (\ c\ |1\rangle\langle 1| - c\ |2\rangle\langle 2| + s\ |2\rangle\langle 1| + s\ |1\rangle\langle 2|\ )$$

όπου ϵ δεδομένη σταθερά με μονάδες ενέργειας και $c = cos\theta, s = sin\theta$, με θ δεδομένη γωνία. Να βρεθούν οι δυνατές ενέργειες του συστήματος και οι ιδιοκαταστάσεις αυτών ως γραμμικοί συνδυασμοί των $|1\rangle$ και $|2\rangle$. Την χρονική στιγμή $t = 0$ το σύστημα βρίσκεται στην κατάσταση $|1\rangle$. Ποιά η πιθανότητα να βρεθεί στην $|2\rangle$ την στιγμή $t > 0$; Για ποιά τιμή της θ η πιθανότητα αυτή μπορεί να είναι ίση με μονάδα και για ποιούς χρόνους γίνεται αυτό ; (Τα τελικά φυσικά μεγέθη να εκφρασθούν συναρτήσει πραγματικών και όχι μιγαδικών αριθμών.)

ΘΕΜΑ 3:

Η Χαμιλτωνιανή κβαντικού περιστροφέα, στροφορμής $J = 3/2$, τοποθετημένου εντός σταθερού μαγνητικού πεδίου έντασης $\vec{B}$ δίνεται από την έκφραση

$$\hat{H} = \frac{\hat{J}_x^2}{2\,(K + \delta)} + \frac{\hat{J}_y^2 + \hat{J}_z^2}{2\,K} - \vec{\mu}\cdot\vec{B}$$

όπου $\vec{\mu}$ είναι η μαγνητική ροπή του συστήματος $\vec{\mu} = g\,\vec{J}$. Τα μεγέθη K, δ και g είναι δεδομένα και η δ θεωρείται πολύ μικρότερη από την K . Αν το πεδίο $\vec{B}$ είναι στην κατεύθυνση z να βρεθούν οι ενέργειες του συστήματος σε πρώτη τάξη ως προς τον αδιάστατο λόγο δ/K.

Υπόδειξη : Δίνεται ότι στην βάση όπου η τρίτη συνιστώσα $\hat{J}_z$ είναι διαγώνιος πίνακας με στοιχεία $+3\,\hbar/2, +\hbar/2, -\hbar/2, -3\,\hbar/2$ η συνιστώσα $\hat{J}_x$ εινaι ο μη-διαγώνιος πίνακας

$$\hat{J}_x = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & \sqrt{3} & 0 & 0 \\ \sqrt{3} & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & \sqrt{3} \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 \end{pmatrix}$$

Λύσεις $\Longrightarrow$

ΛΥΣΕΙΣ

ΘΕΜΑ 1

Ερωτημα 1α : Είναι γνωστό από την θεωρία ότι αν το ακτίνικό μέρος είναι $R(r)$ και η κυματική συνάρτηση έχει καθορισμένη τροχιακή στροφορμή, τότε για κίνηση σε κεντρικό δυναμικό $V(r)$ η συνάρτηση $u(r) = r\,R(r)$ ικανοποιεί την εξίσωση

$$-\frac{\hbar^2}{2\,m}\,u^{''}(r) \;+\; \left(V(r) + \frac{\hbar^2\,\ell(\ell+1)}{2\,m}\right)\,u(r) \;=\; E\,u(r) \tag{1}$$

Με αντικατάσταση του δυναμικού και της συναρτησης $u(r) = r\,R(r) \;=\; N\,r^2\,e^{\lambda\,r}$ προκύπτει με τετριμμένες πράξεις ότι

$$\left(-E - \frac{\hbar^2}{2\,m}\,\lambda^2\right)\,r^2 \;+\; \left(g - \frac{2\,\hbar^2}{m}\,\lambda\right)\,r \;+\; \frac{\hbar^2}{2\,m}\,(\,\ell(\ell+1) - 2) \;=\; 0 \tag{2}$$

που ισχύει για κάθε r. Επομένως οι συντελεστές των r^2, r και του σταθερού όρου πρέπει να είναι καθ ένας ισος με το μηδέν. Από τον μηδενισμό του σταθερού όρου έχουμε $\ell(\ell+1) = 2$ που δίνει $\ell = 1$, γιατί το ℓ είναι ≥ 0. Από τον μηδενισμό του όρου r έχουμε άμεσα $\lambda = \dfrac{g\,m}{2\,\hbar^2}$, και από τον μηδενισμό του όρου r^2 παίρνουμε $E = -\dfrac{\hbar^2\,\lambda^2}{2\,m}$ που χρησιμοποιώντας το αποτέλεσμα για την g δίνει $E = -\dfrac{g^2\,m}{8\,\hbar^2}$.
Αρα οι σωστές απαντήσεις είναι

$$E = -\frac{g^2\,m}{8\,\hbar^2} \quad , \quad \ell = 1 \quad , \quad \lambda = \frac{g\,m}{2\,\hbar^2}$$

Ερωτημα 1β : ΤΟ ΚΥΡΙΩΣ ΕΡΩΤΗΜΑ ΕΧΕΙ ΔΙΑΤΥΠΩΘΕΙ ΚΑΙ ΩΣ ΘΕΜΑ ΤΟΝ ΣΕΠΤΕΜΒΡΙΟ ΤΟΥ 2012 !!! Με παραπομπή στις λύσεις του Σεπτεμβρίου 2013 έχουμε ότι οι ιδιοσυνάρτησεις της ακτινικής ορμής με ιδιοτιμή p_0 που έχουν καθορισμένη τροχιακή στροφορμή με κβαντικούς αριθμούς ℓ, m είναι

$$\psi_{p_0,\ell,m}(r,\theta,\phi) = N\,\frac{Y_{\ell\,m}(\theta,\phi)}{r}\;e^{\,i\,\frac{p_0\,r}{\hbar}}$$

N είναι αυθαίρετη σταθερά. Για το δεύτερο υποερώτημα, για δεδομένη τιμή του μέτρου της ακτινικής ορμής ο πιο γενικός γραμμικός συνδυασμός του ακτινικού μέρους της πιο πανω συνάρτησης είναι

$$\frac{a\,e^{\,i\,\frac{p_0\,r}{\hbar}} + b\,e^{-\,i\,\frac{p_0\,r}{\hbar}}}{r}$$

Αυτή απειρίζεται στο σημείο $r = 0$ εκτός αν $a = -b$ οπότε το πιο πάνω αθροισμα είναι ανάλογο του $\dfrac{sin(\,p_0\,r/\,\hbar)}{r}$. Επομένως οι ζητούμενες συναρτήσεις είναι της μορφής

$$C\;\;Y_{\ell m}(\theta,\phi)\,\frac{sin(\,p_0\,r/\,\hbar)}{r}$$

όπου C μιά σταθερά.

ΘΕΜΑ 2

ΤΟ ΕΡΩΤΗΜΑ ΕΧΕΙ ΔΙΑΤΥΠΩΘΕΙ ΣΤΗΝ ΘΕΩΡΙΑ ΩΣ ΠΑΡΑΔΕΙΓΜΑ ΜΕ ΝΕΤΡΙΝΑ (ΔΕΣ ΕΙΣΑΓΩΓΗ ΤΩΝ ΠΑΡΑΔΟΣΕΩΝ ΠΟΥ ΕΙΝΑΙ ΑΝΑΡΤΗΜΕΝΕΣ) !!!
Χωρίς να είναι απαραίτητο μπορεί κανείς να χρησιμοποιήσει αναπαράσταση πινάκων και να βρεί τον πίνακα της Χαμιλτωνιανής με στοιχεία

$$H_{11} = \langle 1|\,\hat{H}\,|1\rangle \quad , \quad H_{12} = \langle 1|\,\hat{H}\,|2\rangle \quad , \quad H_{21} = \langle 2|\,\hat{H}\,|1\rangle \quad , \quad H_{22} = \langle 2|\,\hat{H}\,|2\rangle \quad ,$$

Εύκολα βρίσκει κανείς ότι ο πίνακας της Χαμιλτωνιανής είναι

$$H \;=\; \epsilon \begin{pmatrix} c & s \\ s & -c \end{pmatrix}$$

Οι ιδιοτιμές και τα ιδιοανύσματα βρίσκονται με τον γνωστό τρόπο από την στοιχειώδη θεωρία πινάκων. Οι ιδιοτιμές είναι

$$E_1 = +\epsilon \quad , \quad E_2 = -\epsilon$$

Τα αντίστοιχα κανονικοποιημένα στην μονάδα ιδιοανύσματα είναι

$$|\Psi_1\rangle = \begin{pmatrix} c_2 \\ s_2 \end{pmatrix} = c_2\,|1\rangle + s_2\,|2\rangle \quad , \quad |\Psi_2\rangle = \begin{pmatrix} s_2 \\ -c_2 \end{pmatrix} = s_2\,|1\rangle - c_2\,|2\rangle \tag{3}$$

Στις πιο πάνω εκφράσεις $c_2 \equiv cos\frac{\theta}{2}$ και $s_2 \equiv sin\frac{\theta}{2}$. Σημειώστε ότι επίσης τα $|\Psi_{1,2}\rangle$ εκφράσθηκαν συναρτήσει των $|1\rangle\,,|2\rangle$ που θα χρειαθεί για το δεύτερο ερώτημα.

Για το δεύτερο ερώτημα αν $|\Psi(t)\rangle$ η κατάσταση την στιγμή t χρειάζεται να υπολογίσει κανείς το πλάτος $\langle 2|\Psi(t)\rangle$ και μετά να βρεί το τετράγωνο του μέτρου του που δίνει την ζητούμενη πιθανότητα $P = |\langle 2|\Psi(t)\rangle|^2$. Μπορεί κανείς να λύσει την εξίσωση Schroedinger ως προς τον χρόνο και να βρεί την απάντηση, η ισοδύναμα μπορεί κανείς να χρησιμοποιήσει τον τελεστή της χρονικής εξέλιξης και να γράψει

$$|\Psi(t)\rangle = e^{-i\hat{H}\,t/\hbar}\,|\Psi(0)\rangle = e^{-i\hat{H}\,t/\hbar}\,|1\rangle \tag{4}$$

όπου στην τελευταία ισότητα χρησιμοποιήσαμε το γεγονός ότι την μηδενική χρονική στιγμή το σύστημα βρίσκεται στην κατάσταση $|1\rangle$. Η κατάσταση αυτή ΔΕΝ είναι ιδιοκατάσταση της Χαμιλτωνιανής (που απλα και μόνο η διατύπωση του είναι σοβαρό εννοιολογικό λάθος) και για αυτό γράφουμε την $|1\rangle$ ως συνδυασμο των $|\Psi_1\rangle$ και $|\Psi_2\rangle$ αντιστρέφοντας τις σχέσεις (;;). Αυτό πολύ απλά δίνει

$$|1\rangle = c_2\,|\Psi_1\rangle + s_2\,|\Psi_2\rangle$$

επομένως από την (;;) έχουμε

$$|\Psi(t)\rangle = e^{-i\hat{H}\,t/\hbar}\,(c_2\,|\Psi_1\rangle + s_2\,|\Psi_2\rangle) = e^{-iE_1\,t/\hbar}\,c_2\,|\Psi_1\rangle + e^{-iE_2\,t/\hbar}\,s_2\,|\Psi_2\rangle$$

και το πλάτος $\langle 2|\Psi(t)\rangle$ είναι

$$\begin{aligned}\langle 2|\Psi(t)\rangle &= e^{-iE_1\,t/\hbar}\,c_2\,\langle 2|\Psi_1\rangle + e^{-iE_2\,t/\hbar}\,s_2\,\langle 2|\Psi_2\rangle \\ &= e^{-iE_1\,t/\hbar}\,c_2 s_2 + e^{-iE_2\,t/\hbar}\,s_2(-c_2)\end{aligned}$$

όπου χρησιμοποιήθηκε ότι $\langle 2|\Psi_1\rangle = s_2$ και $\langle 2|\Psi_2\rangle = -c_2$. Χρησιμοποιώντας τις ιδιοτιμές E_1, E_2 έχουμε

$$\langle 2|\Psi(t)\rangle = s_2\,c_2\,\left(e^{-i\epsilon\,t/\hbar} - e^{i\epsilon\,t/\hbar}\right) = -2\,i\,s_2\,c_2\,sin\frac{\epsilon\,t}{\hbar} = -i\,sin\,\theta\,sin\frac{\epsilon\,t}{\hbar}$$

Επομένως η ζητουμένη πιθανότητα είναι

$$P = (sin\theta)^2\,(sin\frac{\epsilon t}{\hbar})^2 \tag{5}$$

Αυτή μπορεί να γίνει μονάδα μόνον όταν $sin\theta = \pm 1$ και αν ισχύει αυτό τότε αυτό συμβαίνει για τους χρόνους για τους οποίους $sin\frac{\epsilon\,t}{\hbar} = \pm 1$

ΘΕΜΑ 3

ΤΟ ΕΡΩΤΗΜΑ ΕΧΕΙ ΔΙΑΤΥΠΩΘΕΙ ΚΑΙ ΩΣ ΘΕΜΑ ΤΟΝ ΣΕΠΤΕΜΒΡΙΟ ΤΟΥ 2012 ΔΙΑΦΟΡΕΤΙΚΑ ΔΙΑΤΥΠΩΜΕΝΟ !!!

Με την παρουσία του μαγνητικού πεδίου στην κατεύθυνση z η Χαμιλτωνιανή του συστήματος είναι

$$\hat{H} = \frac{\hat{J}_x^2}{2\,(K+\delta)} + \frac{\hat{J}_y^2 + \hat{J}_z^2}{2\,K} - gBJ_z$$

Για μικρές τιμές του λόγου δ/k και σε πρώτη τάξη στην δ αναπτύσσοντας κατά Taylor έχουμε $(K+\delta)^{-1} = K^{-1}(1-\delta/K)$ οπότε η ανωτέρω Χαμιλτωνιανή γράφεται ως

$$\hat{H} \;=\; \frac{\vec{J}^2}{2\,K} - gB\,J_z - \frac{\delta}{2\,K^2}\,J_x^2$$

Αυτή μπορεί να γραφεί ως άθροισμα $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1$

$$\hat{H}_0 = \frac{\vec{J}^2}{2\,K} - gB\,J_z \quad , \quad \hat{H}_1 = -\frac{\delta}{2\,K^2}\,J_x^2$$

με την $\hat{H}_1$ να αποτελεί μικρή διαταραχή. Το αδιατάρακτο μέρος $\hat{H}_0$ έχει ως ιδιοανύσματα τις καταστάσεις $|J,M\rangle$ όπου $J=3/2$ και $M=-J,J+1,...J$. Οι αδιατάρακτες ιδιοτιμές της ενέργειας είναι

$$E^0_{JM} \;=\; \frac{\hbar^2}{2\,K}\,J(J+1) - g\,\hbar B\,M = \frac{15\,\hbar^2}{8\,K} \;-\, g\,\hbar B\,M$$

με το M να παίρνει τις τιμές $M = 3/2, 1/2, -1/2, -3/2$.

Σε πρώτη τάξη στην αδιάστατη σταθερά δ/K είναι γνωστό από την θεωρία διαταραχών ότι οι ιδοτιμές της ενέργειας υφίστανται διορθώσεις $\Delta E_M = \langle J,M|\,\hat{H}_1\,|J,M\rangle$. Επομένως οι διορθώσεις αυτές στο πρόβλημα μας είναι

$$\Delta E_M = -\frac{\delta}{2\,K^2}\;\langle J,M|\,J_x^2\,|J,M\rangle$$

Για τον υπολογισμό αυτών αρκεί να υπολογισθεί το J_x^2 που βρίσκεται να έχει την μορφή

$$\hat{J}_x^2 = \;\frac{\hbar^2}{4}\;\begin{pmatrix} 3 & 0 & 2\sqrt{3} & 0 \\ 0 & 7 & 0 & 2\sqrt{3} \\ 2\sqrt{3} & 0 & 7 & 0 \\ 0 & 2\sqrt{3} & 0 & 3 \end{pmatrix}$$

Τα ιδιοανύσματα $|J,M\rangle$ του J_z, στην βάση πινάκων που αναφέρει η εκφώνηση, για $M = 3/2, 1/2, -1/2, -3/2$ είναι αντίστοιχα

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad , \quad \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad , \quad \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad , \quad \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

οπότε βρίσκοντας με τετριμμένο τρόπο τα $\langle J,M|\,J_x^2\,|J,M\rangle$ έχουμε και το αποτέλεσμα

$$\Delta E_{\pm 3/2} = -\frac{3}{8}\cdot\frac{\delta^2}{K} \quad , \quad \Delta E_{\pm 1/2} = -\frac{7}{8}\cdot\frac{\delta^2}{K} \quad ,$$

Θέματα εξετάσεων - Κβαντομηχανική ΙΙ
Εξετάσεις - 31ης Μαρτίου 2014 , (Τμήμα Α. Λαχανά)

ΘΕΜΑ 1:

α. Η αβεβαιότητα θέσης - ορμής είναι το αίτιο της ευστάθειας των ατόμων. Με βάση αυτό μπορείτε να εκτιμήσετε, τουλάχιστον όσον αφορά την τάξη μεγέθους, την ελάχιστη ενέργεια του ατόμου του Υδρογόνου ;
β. Μπορείτε να κάνετε το ίδιο για ένα σωματίδιο που υφίσταται την επίδραση σφαιρικά συμμετρικού δυναμικού που είναι θετικό και ανάλογο της ακτινικής απόστασης ;

ΘΕΜΑ 2:

α. Σωματίδιο έχει σπιν = 1/2. Να βρεθούν αναλυτικά οι ιδιοτιμές της προβολής του σπιν του σωματιδίου σε τυχαία κατεύθυνση που χαρακτηρίζεται από μοναδιαίο άνυσμα $\hat{\xi}$.
β. Να βρεθεί η μέση τιμή της προβολής του σπιν του σωματιδίου στο μοναδιαίο άνυσμα $\hat{\xi}$ συναρτήσει των γωνιών προσανατολισμού του $\hat{\xi}$. Τι παρατηρείτε ;
γ. Κάποια χρονική στιγμή το σωματίδιο βρίσκεται σε κατάσταση με τιμή της z-συνιστώσας ίση με $+\hbar/2$. Χρησιμοποιήστε το αποτέλεσμα του ερωτήματος **(β)** για να βρείτε την πιθανότητα, την στιγμή αυτή, να πάρετε σε μέτρηση της προβολής του σπιν στην κατεύθυνση $\hat{\xi}$ κάθε μία από τις ιδιοτιμές που βρήκατε στο ερώτημα **(α)** .

ΘΕΜΑ 3:

N σωματίδια με ακέραιο σπιν βρίσκονται μέσα σε σφαιρική κοιλότητα δεδομένης ακτίνας R με απολύτως ανακλώντα τοιχώματα και δεν αλληλεπιδρούν μεταξύ τους. Ολα βρίσκονται στην θεμελειώδη κατάσταση που έχει μηδενική τροχιακή στροφορμή. Να βρεθεί η πίεση που ασκούν τα σωματίδια στα τοιχώματα της κοιλότητας ως συνάρτηση της ακτίνας R ; (Χρησιμοποιήστε το γεγονός ότι η μεταβολή της ενέργειας του συστήματος, όταν μεταβληθεί ο όγκος που κατέχει, είναι το αντίθετο του γινομένου της πίεσης επί την μεταβολή του όγκου).

ΘΕΜΑ 4:

Σωματίδιο με κβαντικό αριθμό σπιν ίσο με 1/2 βρίσκεται σε σταθερό μαγνητικό πεδίο. Το σωματίδιο έχει μαγνητική ροπή που είναι το γινόμενο μιάς θετικής σταθεράς, $g > 0$, επί το σπιν αυτού.
α. Να βρεθεί ο ρυθμός μεταβολής της μέσης τιμής του σπιν με τον χρόνο (χρονική παράγωγος), για τυχαίο προσανατολισμό του μαγνητικού πεδίου, συναρτήσει της μέσης τιμής του σπιν και του μαγνητικού πεδίου.
β. Υποθέστε ότι το μαγνητικό πεδίο είναι στην κατεύθυνση z και την μηδενική χρονική στιγμή το σωματίδιο βρίσκεται σε κατάσταση με σπίν $+\hbar/2$ αλλά στην κατεύθυνση x. Από το αποτέλεσμα του ερωτήματος **(α)** να βρεθούν οι μέσες τιμές για κάθε συνιστώσα του σπιν κάθε χρονική στιγμή και από αυτές να βρεθούν οι πιθανότητες σε διαδικασία μέτρησης κάθε συνιστώσας να πάρουμε ως αποτέλεσμα τις τιμές $+\hbar/2$ η $-\hbar/2$.

Επιλογή 3 θεμάτων

Λύσεις $\Longrightarrow$

ΘΕΜΑ 1:

α) (**Εχει διδαχθεί στο μάθημα**)

Για την εκτίμηση της ελάχιστης ενέργειας γράφουμε την ενέργεια ως άθροισμα της κινητικής και της δυναμικής ενέργειας, και χρησιμοποιούμε το γεγονός ότι στην θεμελειώδη κατάσταση η συνεισφορά από την τροχιακή στροφορμή είναι μηδενική (η τροχιακή στροφορμή αυξάνει την κινητική ενέργεια και επομένως η ελάχιστη ενέργεια θα αναζητηθεί όταν αυτή μηδενίζεται !). Οταν η στροφορμή είναι μηδενική η ενέργεια του ατόμου του Υδρογόνου ως κλασική έκφραση, που αρκεί για την εκτίμηση της τάξης μεγέθους της, είναι

$$E \,=\, \frac{p_r^2}{2m} - \frac{e^2}{r}$$

Από την σχέση αβεβαιότητας θέσης και ορμής έχουμε προσεγγιστικά ότι

$$p_r\, r \simeq \hbar$$

οπότε η ενέργεια, με αντικατάσταση του p_r, γίνεται

$$E \,=\, \frac{\hbar^2}{2m\, r^2} - \frac{e^2}{r}$$

Αυτή ως συνάρτηση του r παρουσιάζει ελάχιστο στην θέση $r_0 = \frac{\hbar^2}{m\, e^2}$, που είναι η ακτίνα Bohr. Η τιμή της ενέργειας για αυτήν την ακτίνα, που δίνει την ελάχιστη τιμή της ενέργειας, είναι

$$E \,=\, -\,\frac{m\, e^4}{2\,\hbar^2}$$

Αυτή είναι η εκτίμηση της τιμής της θεμελειώδους ενέργειας του ατόμου του Υδρογόνου όπως προέρχεται από την αβεβαιότητα θέσης - ορμής. Το γεγονός ότι είναι ακριβώς αυτή που προκύπτει από την επίλυση της εξίσωσης Schroedinger αποτελεί απλά σύμπτωση.

β) Από την εκφώνηση του προβλήματος το δυναμικό θα είναι $V(r) = k\, r$, όπου k θετική σταθερά, οπότε ακριβώς με πανομοιότυπο τρόπο, όπως στο προηγούμενο ερώτημα, γράφουμε

$$E \,=\, \frac{p_r^2}{2m} + k\, r = \frac{\hbar^2}{2m\, r^2} + k\, r$$

όπου πάλι χρησιμοποιήθηκε η αβεβαιότητα θέσης ορμής. Αυτή η ενέργεια ως συνάρτηση του r έχει ελάχιστο για $r_0 = (\frac{\hbar^2}{m\, k})^{1/3}$. Η ελάχιστη τιμή της ενέργειας βρίσκεται πολύ ευκολα να είναι

$$E \,=\, \frac{3}{2}\left(\frac{k^2\, \hbar^2}{m}\right)^{1/3}$$

ΘΕΜΑ 2:

α) Αυτή είναι η άσκηση 4 της 5ης σειράς των ασκήσεων και διδάσκεται και στο μάθημα

Θα χρησιμοποιήσουμε την αναπαράσταση του σπιν, με $s = 1/2$, από τους πίνακες του Pauli

$$\hat{S}_x \,=\, \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \qquad \hat{S}_y \,=\, \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \qquad \hat{S}_z \,=\, \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Αν το άνυσμα $\hat{\xi}$ έχει συνιστώσες ξ_x, ξ_y, ξ_z τότε η προβολή του σπίν στο $\hat{\xi}$ ορίζεται ως το εσωτερικό γινόμενο του σπιν με το άνυσμα $\hat{\xi}$ και επομένως είναι ο τελεστής $S_\xi \equiv \vec{S}\cdot\hat{\xi}$. Αρα στην αναπαράσταση του Pauli είναι ο πίνακας

$$\hat{S}_\xi \,=\, \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} \xi_z & \xi_x - i\,\xi_y \\ \xi_x + i\,\xi_y & -\xi_z \end{pmatrix}$$

Οι ιδιοτιμές λ του πίνακα που πολλαπλασιαζει το $\hbar/2$ βρίσκεται πολυ εύκολα ότι ικανοποιούν την εξίσωση

$$\lambda^2 - (\xi_x^2 + \xi_y^2 + \xi_z^2) = 0 \quad \Longrightarrow \quad \lambda^2 - 1 = 0 \quad \Longrightarrow \quad \lambda \,=\, \pm 1$$

όπου χρησιμοποιήσαμε ότι $\xi_x^2 + \xi_y^2 + \xi_z^2 = 1$ γιατί το άνυσμα είναι μοναδιαίο. Επειδή $\lambda = \pm 1$ οι ιδιοτιμές του S_ξ είναι $\pm\frac{\hbar}{2}$.

β) Οι συνιστώσες του ανύσματος συναρτήσει των γωνιών προσανατολισμού αυτού είναι

$$\xi_x = sin\theta\, cos\phi\,,\, \xi_y = sin\theta sin\phi\,,\, \xi_z = cos\theta \tag{1}$$

Μιά τυχαία κατάσταση που είναι γραμμικός συνδυασμός των ιδιοκαταστάσεων της συνιστώσας S_z γράφεται ως

$$|\Psi\rangle \;=\; \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$$

και για να είναι αυτή κανονικοποιημένη πρέπει $|a|^2+|b|^2 = 1$. Η μέση τιμή του S_ξ σε αυτήν την κατάσταση είναι επομένως

$$\langle S_\xi\rangle \;=\; \langle\Psi|\, S_\xi\, |\Psi\rangle \;=\; (a^*, b^*) \begin{pmatrix} \xi_z & \xi_x - i\,\xi_y \\ \xi_x + i\,\xi_y & -\xi_z \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \;=\; \frac{\hbar}{2}\,(|a|^2 - |b|^2)\xi_z + \frac{\hbar}{2}\,(a^* b\,(\xi_x - i\,\xi_y) + c.c)$$

Αντικαθιστώντας τις προβολές συναρτήσει των γωνιών όπως δίνεται από την εξίσωση **;;** παίρνουμε

$$\langle S_\xi\rangle \;=\; \frac{\hbar}{2}\,\Big(\,(|a|^2 - |b|^2)\,cos\theta + (a^* b\, e^{-i\phi} + ab^*\, e^{i\phi}\, sin\theta)\Big)$$

Παρατηρούμε ότι αν η κατάσταση $|\Psi\rangle$ χαρακτηρίζει κατάσταση με τιμή σπιν $+\hbar/2$ στον άξονα z τότε $a = 1, b = 0$ και η μέση τιμή είναι $+\frac{\hbar}{2}\, cos\theta$. Αν η κατάσταση $|\Psi\rangle$ χαρακτηρίζει κατάσταση με τιμή σπιν $-\hbar/2$ στον άξονα z τότε $a = 0, b = 1$ και η μέση τιμή είναι $-\frac{\hbar}{2}\, cos\theta$. Και στις δύο αυτές περιπτώσεις δεν υπάρχει εξάρτηση από την γωνία ϕ. Σε οποιαδήποτε άλλη περίπτωση έχουμε εξάρτηση από την ϕ.

γ) Αν η πιθανότητα να μετρήσω τιμή της προβολης του σπιν επάνω στην κατεύθυνση ξ είναι ίση με $+\hbar/2$ τότε η πιθανότητα να μετρήσω τιμή $-\hbar/2$ είναι $1 - P$ γιατί οι ιδιοτιμές του S_ξ είναι $+\hbar/2$ η $-\hbar/2$. Η μέση τιμή του S_ξ είναι επομένως

$$\langle S_\xi\rangle \;=\; \left(\frac{\hbar}{2}\right)\, P + \left(-\frac{\hbar}{2}\right)\,(1 - P) \implies P \;=\; \frac{1}{2} + \frac{1}{\hbar}\,\langle S_\xi\rangle$$

Το συμπέρασμα του ερωτήματος (β) λέει ότι για κατάσταση με τιμή της z-συνιστώσας ίση με $+\hbar/2$ η μέση τιμή είναι $\langle S_\xi\rangle = \frac{\hbar}{2}\, cos\theta$ οπότε

$$P \;=\; \frac{1 + cos\theta}{2} \;=\; cos^2\left(\frac{\theta}{2}\right)$$

<u>ΘΕΜΑ 3:</u>

Το πρόβλημα εύρεσης της ελάχιστης ενέργειας με μηδενική τροχιακή στροφορμή μέσα σε σφαιρική κοιλότητα διδάσκεται στο μάθημα και οι λεπτομέρειες δεν θα διατυπωθουν εδώ. Στα πλαίσια της εξέτασης θα έπρεπε να αναπτυχθούν. Υπενθυμίζεται όμως ότι το πρόβλημα είναι ισοδύναμο με μονοδιάστατο πηγάδι δυναμικού εύρους R με απολύτως ανακλώντα τοιχώματα. Η χαμηλώτερη ενεργειακή στάθμη με μηδενική τροχιακή στροφορμή βρίσκεται να έχει την τιμή

$$E \;=\; \frac{\pi^2\, \hbar^2}{2m\, R^2}$$

Επειδή τα σωματίδια έχουν ακέραιο σπιν είναι μποζόνια και μπορούν να βρεθούν με την ίδια θεμελειώδη ενέργεια και η ολική ενέργεια τους σύμφωνα με την εκφώνηση είναι

$$\mathcal{E} \;=\; N\, E \;=\; N\, \frac{\pi^2\, \hbar^2}{2m\, R^2}$$

Αν μεταβληθεί η ακτίνα της κοιλότητας κατά dR τότε η αλλαγη της ενέργειας είναι

$$d\mathcal{E} \;=\; d\left(N\, \frac{\pi^2\, \hbar^2}{2m\, R^2}\right) \;=\; -\,N\, \frac{\pi^2\, \hbar^2}{m\, R^3}\, dR$$

Η μεταβολή του όγκου της κοιλότητας είναι

$$dV \;=\; d\left(\frac{4\pi R^3}{3}\right) \;=\; 4\pi R^2\, dR$$

Σύμφωνα με την εκφώνηση $d\mathcal{E} \;=\; -p\, dV$ οπότε από τις επάνω σχέσεις έχουμε

$$-\,N\,\frac{\pi^2\,\hbar^2}{m\,R^3}\,dR \;=\; -p\,4\pi R^2\,dR \;\Longrightarrow\; p \;=\; N\frac{\pi\hbar^2}{4m\,R^5}$$

ΘΕΜΑ 4:

α) Αυτή είναι μερική περίπτωση της άσκησης 5 της 3ης σειράς των ασκήσεων και διδάσκεται στο μάθημα

Το σωματίδιο έχει μανητική ροπή $\vec{\mu}$ και η Χαμιλτωνιανή του όταν βρεθεί σε μαγνητικό πεδίο είναι $\hat{H} = -\vec{\mu}\cdot\vec{B} = -g\,\vec{S}\cdot\vec{B}$. Η μεταβολή της μέσης τιμής κάθε συνιστώσας του είναι

$$\frac{d\,\langle S_i\rangle}{dt} \;=\; \frac{i}{\hbar}\,\left\langle [\,\hat{H},\hat{S}_i\,]\right\rangle \;=\; -g\,\frac{i}{\hbar}\,\sum_a\,B_a\,\left\langle [\,\hat{S}_a,\hat{S}_i\,]\right\rangle \;=\; -g\,\sum_{a,j}\,\epsilon_{iaj}\,B_a\,\langle S_j\rangle$$

Στην τελευταία ισότητα χρησιμοποιήσαμε την άλγεβρα της στροφορμής και υπενθυμιζουμε ότι το σύμβολο ϵ_{iaj} είναι αντισυμμετρικό στους δείκτες και παίρνει τις τιμές μηδέν, αν τουλάχιστον δύο δείκτες συμπίπτουν, αλλοιώς έχει τιμή +1 η -1 με το $\epsilon_{123} \;=\; 1$. Η προηγούμενη σχέση μπορεί να γραφεί και σε ανυσματική κομψη μορφή αν ορίσουμε το $\vec{\Omega} \equiv \left\langle \vec{S}\right\rangle$ ως

$$\frac{d\vec{\Omega}}{dt} \;=\; g\,\vec{\Omega}\times\vec{B}$$

β) Αυτή είναι μερική περίπτωση της άσκησης 5 της 3ης σειράς των ασκήσεων και διδάσκεται στο μάθημα

Για προσανατολισμό του μαγνητικού πεδίου στην κατεύθυνση του z-άξονα $\vec{B} \;=\; \hat{z}\,B$ οι προηγούμενες εξισώσεις δίνουν

$$\frac{d\Omega_x}{dt} \;=\; g\,B\,\Omega_y \quad , \quad \frac{d\Omega_y}{dt} \;=\; -\,g\,B\,\Omega_x \quad , \quad \frac{d\Omega_z}{dt} \;=\; 0$$

Το σύστημα αυτό έχει πλήρως επιλυθεί στο μάθημα ακόμα και στην γενική περίπτωση τυχαίου προσανατολισμού του μαγνητικού πεδίου ! Για την περίπτωση του ερωτήματος από τις δύο πρώτες προκύπτει

$$\frac{d^2\,\Omega_x}{dt^2} + (gB)^2\,\Omega_x \;=\; 0 \;\Longrightarrow\; \Omega_x = a\,sin(gBt) + b\,cos(gBt)$$

Από την πρώτη μπορούμε να έχουμε την Ω_y συναρτήσει της παραγώγου της Ω_x οπότε προκύπτει

$$\Omega_y = a\,cos(gBt) - b\,sin(gBt)$$

Η τρίτη από τις εξισώσεις μας λέι οτι η Ω_z είναι χρονικά σταθερή. Από τα δεδομένα του προβλήματος έχουμε την μηδενική χρονική στιγμή $\langle S_x\rangle = \hbar/2$, $\langle S_y\rangle = \langle S_z\rangle = 0$, η το ίδιο $\Omega_x = \hbar/2$, $\Omega_y = \Omega_z = 0$. Οι σταθερές a, b προσδιορίζονται επομένως και έχουν τις τιμές $b = \hbar/2$, $a = 0$. Αρα

$$\langle S_x\rangle \;=\; \frac{\hbar}{2}\,cos(gBt) \quad , \quad \langle S_y\rangle \;=\; -\frac{\hbar}{2}\,sin(gBt)$$

Οσον αφορά στις πιθανότητες που ζητούνται, για κάθε συνιστώσα έχουμε ότι η μέση τιμή της είναι

$$\langle S_i\rangle \;=\; \left(\frac{\hbar}{2}\right)\,P_i + \left(-\frac{\hbar}{2}\right)\,(1-P_i) \;\Longrightarrow\; P_i \;=\; \frac{1}{2} + \frac{1}{\hbar}\,\langle S_i\rangle$$

όπου P_i είναι η πιθανότητα να μετρήσω τιμή της i συνιστώσας ίση με $+\hbar/2$. Από αυτή την σχέση και τις μέσες τιμές που βρήκαμε παίρνουμε για κάθε συνιστώσα

Για την x, η πιθανότητα να μετρήσω $+\frac{\hbar}{2}$ είναι $P_x = cos^2\left(\frac{gBt}{2}\right)$ και για να μετρήσω $-\frac{\hbar}{2}$ είναι $sin^2\left(\frac{gBt}{2}\right)$

Για την y, η πιθανότητα να μετρήσω $+\frac{\hbar}{2}$ είναι $P_y = \frac{1-sin(gBt)}{2}$ και για να μετρήσω $-\frac{\hbar}{2}$ είναι $\frac{1+sin(gBt)}{2}$

Για την z, η πιθανότητα να μετρήσω $+\frac{\hbar}{2}$ είναι $P_z = \frac{1}{2}$ και για να μετρήσω $-\frac{\hbar}{2}$ πάλι $\frac{1}{2}$

Χρηματοδότηση

- Το παρόν εκπαιδευτικό υλικό έχει αναπτυχθεί στο πλαίσιο του εκπαιδευτικού έργου του διδάσκοντα.
- Το έργο «**Ανοικτά Ακαδημαϊκά Μαθήματα στο Πανεπιστήμιο Αθηνών**» έχει χρηματοδοτήσει μόνο την αναδιαμόρφωση του εκπαιδευτικού υλικού.
- Το έργο υλοποιείται στο πλαίσιο του Επιχειρησιακού Προγράμματος «Εκπαίδευση και Δια Βίου Μάθηση» και συγχρηματοδοτείται από την Ευρωπαϊκή Ένωση (Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο) και από εθνικούς πόρους.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Σημειώματα

Σημείωμα Ιστορικού Εκδόσεων Έργου

Το παρόν έργο αποτελεί την έκδοση 1.1

Η έκδοση 1.0 είναι διαθέσιμη εδώ.

Σημείωμα Αναφοράς

Copyright Εθνικόν και Καποδιστριακόν Πανεπιστήμιον Αθηνών. Αθανάσιος Λαχανάς. «Κβαντική Μηχανική II. Ενότητα 8: Ερωτήσεις και Ασκήσεις». Έκδοση: 1.1. Αθήνα 2016. Διαθέσιμο από τη δικτυακή διεύθυνση: http://opencourses.uoa.gr/courses/PHYS9/.

Σημείωμα Αδειοδότησης

Διατήρηση Σημειωμάτων

Οποιαδήποτε αναπαραγωγή ή διασκευή του υλικού θα πρέπει να συμπεριλαμβάνει:

- το Σημείωμα Αναφοράς
- το Σημείωμα Αδειοδότησης
- τη δήλωση Διατήρησης Σημειωμάτων

μαζί με τους συνοδευόμενους υπερσυνδέσμους.