3η πρόοδος «Κβαντικής Φυσικής Ι» ακ. έτους 2020-2021.

Τα θέματα Θ3 και Θ5 είναι **εξατομικευμένα**, θα χρειαστούν λοιπόν οι αριθμοί

A= ο τελευταίος αριθμός του Α.Μ. σας,

B= ο προτελευταίος αριθμός του Α.Μ. σας.

Ξεκινώντας την επίλυση των εξατομικευμένων θεμάτων (θέματα Θ3 και Θ5) να ξαναγράψετε με ευδιάκριτο τρόπο τα δεδομένα της άσκησης για τα δικά σας στοιχεία, δηλαδή αντικαθιστώντας τα αντίστοιχα Α και Β. Απαντήσεις χωρίς εξατομικευμένα δεδομένα μηδενίζονται.

Θ1.[1+0.5+0.5+0.5+0.5+0.5:3.5]

Κβαντικός αρμονικός ταλαντωτής βρίσκεται στην κατάσταση, $|\psi(x,t=0)> = |c_0|\, e^{i\,\varphi_{01}}|0> + |c_1||1>$.

Αν γνωρίζουμε ότι η μέση ενέργεια και η μέση θέση είναι 1 και $-\frac{1}{\sqrt{2}}$, αντίστοιχα, να βρεθεί (**α**) η κυματοσυνάρτηση την τυχαία χρονική στιγμή, t.

Επίσης να βρεθούν (**β**) το x_{10} με τον υπολογισμό του ολοκληρώματος, (**γ**) το p_{10} με την αλγεβρική μέθοδο και (**δ**) η μέση χρονοεξαρτώμενη ορμή.

Τέλος να αποδείξετε ότι ισχύει το 2ο θεώρημα του Ehrenfest, εργαζόμενοι (**ε**) στο φυσικό σύστημα μονάδων και (**στ**) στο πραγματικό σύστημα μονάδων.

Θ2.[0.5+1+0.5:2] Για ηλεκτρόνιο μάζας m εγκλωβισμένο σε δισδιάστατη κβαντική τελεία με $L_y = 2L_x$ να βρεθούν (**α**) η ενέργεια της 1ης διεγερμένης ενεργειακής κατάστασης, (**β**) όλες οι κυματοσυναρτήσεις της 1ης *εκφυλισμένης* ενεργειακής κατάστασης. Αν η μικρότερη διάσταση είναι 10 Å (**γ**) να βρεθεί η ενέργεια της θεμελιώδους κατάστασης σε eV.

Θ3.[1.5] Ηλεκτρόνιο που κινείται πάνω στην επιφάνεια σφαίρας, βρίσκεται στην κατάσταση

$|N|\left[\sqrt{(A+1)}|10> + \sqrt{(B+1)}|11>\right]$. Να υπολογιστεί η μέση τιμή της *x*- συνιστώσα της στροφορμής.

Θ4.[1.5] Να υπολογιστεί η μέση κινητική ενέργεια (σε eV) ηλεκτρόνιου σε ένα άτομο υδρογόνου ενέργειας -13.6eV και μηδενικού $\langle l^2\rangle(t)$.

Θ5.[0.5+1:1.5] Η κυματοσυνάρτηση ατόμου υδρογόνου, είναι

$\Psi(\vec{r},t=0) = |N|\left[\sqrt{(A+1)}\psi_{210}(\vec{r}) + \sqrt{(B+1)}\psi_{211}(\vec{r})\right]$.

Να υπολογίστε **(5α)** την μέση ενέργεια και **(5β)** την $\langle l_x^2 + l_y^2\rangle(t)$ την τυχαία χρονική στιγμή t.

Ανδρέας Φ. Τερζής, Πάτρα, 19/1/2021

Ακολουθούν οι λύσεις

3η πρόοδος 19/1/21

Θ1. (α) $|c_0|^2+|c_1|^2=1$ & $\varepsilon_0|c_0|^2+\varepsilon_1|c_1|^2=1 \to \frac{1}{2}|c_0|^2+\frac{3}{2}|c_1|^2=1$ $\Big\}\Rightarrow |c_0|^2=|c_1|^2=\frac{1}{2} \to \boxed{|c_0|=|c_1|=\frac{1}{\sqrt{2}}}$

Ενώ $\langle x\rangle(t=0)=|c_0|^2x_{00}+|c_1|^2x_{11}+2|c_0||c_1||x_{10}|\cos(\omega\cdot 0+\phi_{01}+\delta^x_{10})=$

$=|x_{10}|\cos(\phi_{01}+\delta^x_{10})$, καθώς $x_{00}=x_{11}=0$.

Αφού $x_{10}=\frac{1}{\sqrt{2}}$, $|x_{10}|=\frac{1}{\sqrt{2}}$ και $\delta^x_{10}=0$, άρα $\langle x\rangle(t=0)=\frac{1}{\sqrt{2}}\cos(\phi_{01})$

Δίνεται $\langle x\rangle(t=0)=-\frac{1}{\sqrt{2}}=\frac{1}{\sqrt{2}}\cos(\phi_{01}) \to \cos(\phi_{01})=-1 \to \boxed{\phi_{01}=\pi.}$

οπότε $\boxed{\Psi(x,t)=|c_0|e^{i\phi_{01}}e^{-i\varepsilon_0 t}|0\rangle+|c_1|e^{-i\varepsilon_1 t}|1\rangle=-\frac{e^{-it/2}}{\sqrt{2}}|0\rangle+\frac{e^{-i3t/2}}{\sqrt{2}}|1\rangle}$ [1 μονάδα]

(β) $\boxed{x_{10}=(\psi_1,\hat{x}\psi_0)=\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_1 x\psi_0\,dx=\int_{-\infty}^{+\infty}\underbrace{\frac{\sqrt{2}}{\pi^{1/4}}xe^{-x^2/2}}_{\psi_1}\cdot x\underbrace{\frac{1}{\pi^{1/4}}e^{-x^2/2}}_{\psi_0}dx=\sqrt{\frac{2}{\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty}x^2e^{-x^2}dx=}$

$\boxed{=\sqrt{\frac{2}{\pi}}\,\frac{1}{2}\sqrt{\pi}=\frac{1}{\sqrt{2}}}$ [0,5 μονάδας]

(γ) $\boxed{p_{10}=\langle 1|\hat{p}|0\rangle=\langle 1|\left(\frac{\hat{a}-\hat{a}^+}{i\sqrt{2}}\right)|0\rangle=\langle 1|\left(\frac{\hat{a}|0\rangle-\hat{a}^+|0\rangle}{i\sqrt{2}}\right)=\langle 1|\left(\frac{0-|1\rangle}{i\sqrt{2}}\right)=\frac{i}{\sqrt{2}}\langle 1|1\rangle=\frac{i}{\sqrt{2}}}$ [0,5 μονάδας]

(δ) $\langle p\rangle(t)=|c_0|^2p_{00}+|c_1|^2p_{11}+2|c_0||c_1||p_{10}|\cos(\omega t+\phi_{01}+\delta^p_{10})$

$p_{00}=p_{11}=0$ $\quad p_{10}=\frac{i}{\sqrt{2}}=\frac{1}{\sqrt{2}}e^{i\frac{\pi}{2}} \to |p_{10}|=\frac{1}{\sqrt{2}}$ και $\delta^p_{10}=\frac{\pi}{2}$

Άρα $\boxed{\langle p\rangle(t)=\frac{1}{\sqrt{2}}\cos\left(\omega t+\pi+\frac{\pi}{2}\right)=\frac{\sin t}{\sqrt{2}}}$, αφού $\omega=\varepsilon_1-\varepsilon_0=\frac{3}{2}-\frac{1}{2}=1$ [0,5 μονάδας]

Για το 2ο θεώρημα του Ehrenfest, χρειαζόμαστε το $\langle -\frac{\partial V}{\partial x}\rangle=\langle -\frac{\partial}{\partial x}\frac{1}{2}m\omega^2x^2\rangle=$
$=-m\omega^2\langle x\rangle$, δηλαδή το $\langle x\rangle(t)=|x_{10}|\cos(t+\pi)=\frac{-\cos t}{\sqrt{2}}$

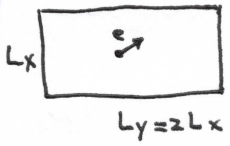
(ε) $\frac{d\langle p\rangle(t)}{dt}=-\langle x\rangle(t)$, που επαληθεύεται από τα αποτελέσματά μας καθώς $\frac{d}{dt}\langle p\rangle(t)=\frac{d}{dt}\left(\frac{\sin t}{\sqrt{2}}\right)=\frac{\cos t}{\sqrt{2}}$, ενώ $-\langle x\rangle(t)=-\frac{-\cos t}{\sqrt{2}}=\frac{\cos t}{\sqrt{2}}$ [0,5 μονάδας]

(στ) Έχουμε $\langle p\rangle(t)=p_0\frac{\sin(\omega t)}{\sqrt{2}}$, $\quad (\varepsilon_1-\varepsilon_0)/\hbar=\left(\frac{3}{2}\hbar\omega-\frac{1}{2}\hbar\omega\right)/\hbar=\omega$, $\quad p_0=\sqrt{\hbar m\omega}$ $\Rightarrow \langle p\rangle(t)=\frac{\sqrt{\hbar m\omega}\sin(\omega t)}{\sqrt{2}}$.

Ενώ $\langle x\rangle(t)=-x_0\frac{\cos(\omega t)}{\sqrt{2}}=-\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\frac{\cos(\omega t)}{\sqrt{2}}$ και $\langle -\frac{\partial V}{\partial x}\rangle=-m\omega^2\langle x\rangle(t)$

οπότε $\langle -\frac{\partial V}{\partial x}\rangle=+m\omega^2\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\frac{\cos(\omega t)}{\sqrt{2}}=\sqrt{\frac{\hbar m\omega^3}{2}}\cos(\omega t)$

Επίσης $\frac{d\langle p\rangle(t)}{dt}=\frac{d}{dt}\left(\sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}}\sin(\omega t)\right)=\omega\sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}}\cos(\omega t)=\sqrt{\frac{\hbar m\omega^3}{2}}\cos(\omega t)=\langle -\frac{\partial V}{\partial x}\rangle$ [0,5 μονάδες]

Θ2. 

Ενέργεια $E_{n_x,n_y} = \frac{\hbar^2\pi^2}{2m}\left(\frac{n_x^2}{L_x^2}+\frac{n_y^2}{L_y^2}\right) = \frac{\hbar^2\pi^2}{8mL_x^2}\left(4n_x^2+n_y^2\right)$, $n_x=1,2,\dots$ $n_y=1,2,\dots$

Ιδιοκαταστάσεις $\psi_{n_x,n_y}(x,y) = \frac{2}{\sqrt{L_xL_y}}\sin\left(\frac{n_x\pi x}{L_x}\right)\sin\left(\frac{n_y\pi y}{L_y}\right)$ για $0\le x\le L_x$, $0\le y\le L_y$

Φτιάχνουμε ένα πίνακα για την εκτίμηση των ιδιοτιμών της ενέργειας $\left(\varepsilon_0=\frac{\hbar^2\pi^2}{8mL_x^2}\right)$

n_x	n_y	$E_{n_x,n_y}/\varepsilon_0$	
1	1	5	ΘΕΜΕΛΙΩΔΗΣ
1	2	8	1η διεγερμένη
2	1	17	
2	2	20	1η εκφυλισμένη
1	3	13	
3	1	37	
2	3	25	
3	2	40	
1	4	20	1η εκφυλισμένη
4	1	65	
1	5	29	
5	1	101	

(α) $\boxed{E_{1,2} = \frac{\hbar^2\pi^2}{8mL_x^2}(4\cdot1^2+2^2) = \frac{\hbar^2\pi^2}{mL_x^2}}$ [0,5 μονάδας]

η ενέργεια της 1ης διεγερμένης

(β) Οι δύο εκφυλισμένες καταστάσεις με ενέργεια $20\varepsilon_0$ (βλέπε πίνακα) είναι οι

$\psi_{2,2} = \frac{\sqrt2}{L_x}\sin\left(\frac{2\pi x}{L_x}\right)\sin\left(\frac{\pi y}{L_x}\right)$

και $\psi_{1,4} = \frac{\sqrt2}{L_x}\sin\left(\frac{\pi x}{L_x}\right)\sin\left(\frac{2\pi y}{L_x}\right)$ [1 μονάδα]

(γ) Θεμελιώδης $\boxed{E_{1,1} = \frac{5\hbar^2\pi^2}{8mL_x^2} = \frac{5}{4}\left(\frac{\hbar^2\pi^2}{2mL_x^2}\right) = \frac54\,\frac13\,eV = \frac{5}{12}\,eV}$ [0,5 μονάδας]

για $L_x=10Å=1nm$ έχει υπολογιστεί πολλές φορές σε $\frac13 eV$

Θ3. $|N|^2\left(\sqrt{A+1}\langle10|+\sqrt{B+1}\langle11|\right)\left(\sqrt{A+1}|10\rangle+\sqrt{B+1}|11\rangle\right) = |N|^2(A+B+2)=1 \rightarrow |N|=(A+B+2)^{-1/2}$ [1,5 μονάδες]

$\hat\ell_x\left(=\frac{\hat\ell_++\hat\ell_-}{2}\right)\left(\sqrt{A+1}|10\rangle+\sqrt{B+1}|11\rangle\right) = \frac{\sqrt{A+1}}{2}\hat\ell_+|10\rangle + \frac{\sqrt{B+1}}{2}\hat\ell_+|11\rangle + \frac{\sqrt{A+1}}{2}\hat\ell_-|10\rangle + \frac{\sqrt{B+1}}{2}\hat\ell_-|11\rangle =$

$= \frac{\sqrt{A+1}}{2}\sqrt2|11\rangle + \frac{\sqrt{B+1}}{2}\cdot0 + \frac{\sqrt{A+1}}{2}\sqrt2|1-1\rangle + \frac{\sqrt{B+1}}{2}\sqrt2|10\rangle$. Οπότε στο $\langle\ell_x\rangle=\langle\psi|\hat\ell_x|\psi\rangle$ επιβιώνουν οι όροι $|N|^2\sqrt{B+1}\frac{\sqrt{A+1}}{\sqrt2}\langle11|11\rangle + |N|^2\sqrt{A+1}\frac{\sqrt{B+1}}{\sqrt2}\langle10|10\rangle = \frac{2}{\sqrt2}|N|^2\sqrt{(A+1)(B+1)} = \boxed{\sqrt{2(A+1)(B+1)}/(A+B+2)=\langle\ell_x\rangle}$

Θ4. Θεμελιώδης $\psi(\vec r)=\frac{1}{\sqrt\pi}e^{-r}$. $\langle V\rangle = \int\psi^*V\psi\,dV = -\int_0^\infty\frac1\pi e^{-2r}\frac1r r^2dr\underbrace{\int_0^\pi\int_0^{2\pi}\sin\theta\,d\theta\,d\phi}_{4\pi} = -4\int_0^\infty re^{-2r}dr = -4\frac{1!}{2^2}=-1$

Τώρα $\langle E\rangle=\langle T\rangle+\langle V\rangle \rightarrow \langle T\rangle=\langle E\rangle-\langle V\rangle = -13,6eV-(-1)\underbrace{\varepsilon_0}_{27,2eV} = +13,6eV$. [1,5 μονάδες]

Θ5. Από την κανονικοποίηση βρίσκω $|N|=(A+B+2)^{-1/2}$

Τώρα $\psi(\vec r,t) = \sqrt{\frac{A+1}{A+B+2}}\psi_{210}e^{-iE_2t} + \sqrt{\frac{B+1}{A+B+2}}\psi_{211}e^{-iE_2t} \sim \frac{\sqrt{A+1}\psi_{210}+\sqrt{B+1}\psi_{211}}{\sqrt{A+B+2}}$

μπορώ να βγάλω κοινό παράγοντα το e^{-iE_2t}

οπότε πρακτικά στάσιμη κατάσταση

(α) Άρα $\boxed{\langle E\rangle = E_2 = -\frac{1}{2\cdot2^2} = -\frac18}$ στο α.Σ.Μ ή $-\frac18\,27,2eV = -3,4eV$ [0,5 μονάδας]

(β) $\boxed{\langle\hat\ell_x+\hat\ell_y\rangle(t)} = \langle\hat\ell^2-\hat\ell_z^2\rangle = \langle\hat\ell^2\rangle-\langle\hat\ell_z^2\rangle = 2-\frac{B+1}{A+B+2} = \frac{2A+2B+4-B-1}{A+B+2} = \boxed{\frac{2A+B+3}{A+B+2}}$ [1 μονάδα]

καθώς $\langle\hat\ell^2\rangle = \frac{A+1}{A+B+2}1\cdot(1+1) + \frac{B+1}{A+B+2}1\cdot(1+1) = 1\cdot2=2$

& $\langle\hat\ell_z^2\rangle = \frac{A+1}{A+B+2}0^2 + \frac{B+1}{A+B+2}1^2 = \frac{B+1}{A+B+2}$