Πανεπιστήμιο Αθηνών
Τμήμα Φυσικής

Κβαντομηχανική Ι *Χειμερινό Εξάμηνο 2004*

Ασκήσεις ΙΙ: Απειρόβαθο πηγάδι, βασική κβαντομηχανική.

__Άσκηση 1.__ Σωμάτιο βρίσκεται περιορισμένο από δυναμικό της μορφής

$$V(x) = \begin{cases} \infty & , x \notin [0, L] \\ 0 & , x \in (0, L) \end{cases}$$

(α) Να βρείτε τις ιδιοκαταστάσεις και τις ιδιοτιμές της Hamiltonian.

(Απ. : $\varphi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi}{L} x\right)$, $E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} n^2$, $n = 1, 2, 3, ...$)

(β) Δείξτε ότι οι παραπάνω συναρτήσεις συγκροτούν ένα **πλήρες** και **ορθοκανονικό** σύνολο συναρτήσεων.
(Δείξτε, δηλαδή, ότι

$$\int_o^L dx \varphi_n^*(x) \varphi_m(x) = \begin{cases} 1 & \text{οταν } m = n \\ 0 & \text{αλλιως} \end{cases} \equiv \delta_{mn} \quad : \quad \textbf{ορθοκανονικότητα}$$

$$\sum_{n=1}^{\infty} \varphi_n^*(x') \varphi_n(x) = \delta(x - x') \quad : \quad \textbf{πληρότητα}$$

Την πληρότητα μπορείτε να την δείξετε θεωρώντας δεδομένο το ανάπτυγμα Fourier

$$f(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sum_{n=1}^{\infty} a_n \sin(\frac{n\pi}{L} x) \ , \ a_n = \sqrt{\frac{2}{L}} \int_o^L dx f(x) \sin(\frac{n\pi}{L} x)$$

το οποίο ισχύει για κάθε συνεχή (και σχετικά ομαλή) συνάρτηση η οποία μηδενίζεται στα σημεία $x = 0, L$)

(γ) Τη χρονική στιγμή $t = 0$ το σωματίδιό σας περιγράφεται από τη συνάρτηση $\psi(x)$. Δείξτε ότι μπορείτε να γράψετε

$$\psi(x) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n \varphi_n(x) \ , \ a_n = \int_o^L dx \psi(x) \varphi_n^*(x)$$

και βρείτε τη χρονική της εξέλιξη.

[Απ. Για το πρώτο σκέλος μπορείτε να ξεκινήσετε από τη σχέση πληρότητας :

$$\psi(x)=\int_0^L dx'\delta(x-x')\psi(x')=\sum_{n=1}^{\infty}\varphi_n(x)\int_0^L dx'\varphi_n^*(x')\psi(x')\equiv\sum_{n=1}^{\infty}a_n\varphi_n(x)\,.$$

Για το δεύτερο μπορείτε να παρατηρήσετε (και πάλι λογω της πληρότητας) ότι:

$$\psi(x,t)=\sum_{n=0}^{\infty}a_n(t)\varphi_n(x)\ \text{ με }\ a_n=\int_o^L dx\psi(x,t)\varphi_n^*(x)\ .$$

Στη συνέχεια :

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t)=\hat{H}\psi(x,t)\Rightarrow\sum_{n=0}^{\infty}i\hbar\frac{\partial}{\partial t}a_n(t)\varphi_n(x)=\sum_{n=0}^{\infty}a_n(t)E_n\varphi_n(x)\Rightarrow$$

$$\Rightarrow i\hbar\frac{\partial}{\partial t}a_n(t)=E_n a_n(t)\Rightarrow a_n(t)=e^{-\frac{i}{\hbar}tE_n}a_n(0)$$

και επομένως $\quad \psi(x,t)=\sum_{n=0}^{\infty}a_n e^{-\frac{i}{\hbar}tE_n}\varphi_n(x)$]

(δ) Δείξτε ότι

$$\int_{-\infty}^{\infty}dx\left|\psi(x,t)\right|^2=\sum_{n=1}^{\infty}\left|a_n\right|^2=1$$

$$\left\langle\hat{H}\right\rangle_t=\int_{-\infty}^{\infty}dx\psi^*(x,t)\hat{H}\psi(x,t)=\sum_{n=1}^{\infty}\left|a_n\right|^2E_n=\left\langle\hat{H}\right\rangle_0$$

<u>Άσκηση 2.</u>

Σωμάτιο βρίσκεται περιορισμένο από δυναμικό της μορφής

$$V(x)=\begin{cases}\infty & ,\ x\notin[-L/2,L/2]\\ 0 & ,\ x\in[-L/2,L/2]\end{cases}$$

Βρείτε τις ιδιοκαταστάσεις και τις ιδιοτιμές της Hamiltonian.

[Την απάντηση μπορείτε να τη βρείτε εύκολα αν χρησιμοποιείσετε τα αποτελέσματα της άσκησης (7) κάνοντας την αλλαγή $x\to x'=x-\dfrac{L}{2}$:

$$\varphi_n(x)=\begin{cases}\sqrt{\dfrac{2}{L}}\sin(\dfrac{n\pi x}{L}) & \text{οταν }\ n=\text{αρτιος}\\ \sqrt{\dfrac{2}{L}}\cos(\dfrac{n\pi x}{L}) & \text{οταν }\ n=\text{περιττος}\end{cases}\quad ,\qquad E_n=\frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}n^2\ ,\ n=1,2,...\quad .$$

Είναι όμως καλό να λύσετε το πρόβλημα από την αρχή.]

Άσκηση 3. Σωμάτιο βρίσκεται υπό την επίδραση του δυναμικού του προβλήματος (1) και έχει καθορισμένη ενέργεια (βρίσκεται, δηλαδή, σε ιδιοκατάσταση της Hamiltonian).

(α) Δείξτε ότι :

$$\langle x\rangle_0 = \langle x\rangle_t = \frac{L}{2} \ , \ \langle x^2\rangle_0 = \langle x^2\rangle_t = \frac{L^2}{3}(1-\frac{3}{2\pi^2 n^2}) \ , \ (\Delta x)_0^2 = (\Delta x)_t^2 = \frac{L^2}{12}(1-\frac{6}{\pi^2 n^2})$$

και ότι η πιθανότερη θέση του είναι στη γειτονιά του σημείου

$$x_{\max} = \frac{L}{2n}k \ , \ k = 1,3,5,...,2n-1 .$$

(β) Δείξτε ότι η πιθανότητα να βρείτε το σωμάτιο στη γειτονιά ενός σημείου x_0 είναι

$$P(x_0,\delta x) = \frac{2}{L}\int_{x_0-\delta x/2}^{x_0+\delta x/2} dx \sin^2\left(\frac{n\pi x}{L}\right) = \frac{\delta x}{L} - \frac{1}{\pi n}\cos\left(\frac{2\pi n x_0}{L}\right)\sin\left(\frac{\pi n}{L}\delta x\right)$$

(γ) Με βάση τα προηγούμενα αποτελέσματα εξηγείστε γιατί μόνο στο όριο $n\to\infty$ τα αποτελέσματά σας συμπίπτουν με αυτά της άσκησης (6) στις ασκήσεις I .

Άσκηση 4. Η κατάσταση ενός σωματιδίου σε ένα απειρόβαθο πηγάδι δυναμικού (σαν κι αυτό της άσκησης 7) περιγράφεται, τη χρονική στιγμή $t=0$, από τη κυματοσυνάρτηση

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2}}\psi_1(x) + \frac{1-i}{2}\psi_2(x) .$$

(α) Ποιά είναι η πιθανότητα να το βρείτε στην πρώτη,στη δεύτερη ή στην τρίτη ενεργειακή στάθμη;
(β) Βρείτε την κατάσταση του σωματιδίου μετά από χρόνο t.
(γ) Βρείτε τη μέση θέση του σωματιδίου τη χρονική στιγμή t.

[Απ.:

(α) $P_1 = \left|\frac{1}{\sqrt{2}}\right|^2 = \frac{1}{2} \ , \ P_2 = \left|\frac{1-1}{2}\right|^2 = \frac{1}{2} \ , \ P_3 = 0$

(β) $\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-i\frac{E_1}{\hbar}t}\psi_1(x) + \frac{1-i}{2} e^{-i\frac{E_2}{\hbar}t}\psi_2(x)$

(γ) $$\langle x\rangle_t = \int_0^L dx\psi^*(x,t)x\psi(x,t) = \frac{1}{2}\int_0^L dx\psi_1^*(x)x\psi_1(x) + \frac{1}{2}\int_0^L dx\psi_2^*(x)x\psi_2(x) +$$

$$+\frac{1-i}{2\sqrt{2}}e^{-i\omega t}\int_0^L dx\psi_1^*(x)x\psi_2(x) + \frac{1+i}{2\sqrt{2}}e^{i\omega t}\int_0^L dx\psi_1(x)x\psi_2^*(x) =$$

$$= \frac{L}{2} + \frac{\sqrt{2}}{L}(\cos\omega t - \sin\omega t)\int_0^L dx x \sin(\frac{\pi x}{L})\sin(\frac{2\pi x}{L}) =$$

$$= \frac{L}{2} - (\cos\omega t - \sin\omega t)\sqrt{2}\frac{8L}{9\pi^2} \ , \ \omega \equiv E_2 - E_1 \ ]$$

Άσκηση 5. Η κατάσταση ενός σωματιδίου σε ένα απειρόβαθο πηγάδι δυναμικού (σαν κι αυτό της άσκησης 1) περιγράφεται, τη χρονική στιγμή $t=0$, από τη κυματοσυνάρτηση

$$\psi(x) = N\sin^3(\frac{\pi x}{L})$$

(α) Ποιές είναι οι δυνατές τιμές της ενέργειας του σωματιδίου και ποιά είναι η πιθανότητα πραγματοποίησης κάθε μιας από αυτές;
(β) Βρείτε τη μέση θέση του σωματιδίου για $t \geq 0$.

[Απ.: **(α)** Η γενική συνταγή είναι η εύρεση του αναπτύγματος

$$\psi(x) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n \varphi_n(x)\ ,\ \ a_n = \int_o^L dx\psi(x)\varphi_n^*(x)$$

Εντούτοις μπορείτε να δώσετε εύκολα την απάντηση αν θυμηθείτε την ταυτότητα

$$\sin^3 a = \frac{1}{4}(3\sin a - \sin 3a)$$

και επομένως

$$\psi(x) = \frac{3N}{4}\sqrt{\frac{L}{2}}\varphi_1(x) - \frac{N}{4}\sqrt{\frac{L}{2}}\varphi_3(x)$$

και

$$P_1 = \frac{9N^2L}{32}\ \ ,\ \ P_2 = \frac{N^2L}{32}$$

Για την πλήρη απάντηση θα πρέπει να βρείτε τον συντελεστή N. Αυτό μπορεί να γίνει είτε με την κανονικοποίηση της κυματοσυνάρτησης είτε, πολύ πιο εύκολα, με την παρατήρηση ότι θα πρέπει $P_1 + P_2 = 1$. Σε κάθε περίπτωση $N = \frac{4}{\sqrt{5L}}$ και επομένως $P_1 = 9/10$ και $P_2 = 1/10$.
(β) Και εδώ η γενική απάντηση ξεκινάει από τον ορισμό

$$\langle x \rangle_t = \int_0^L dx\psi^*(x,t)x\psi(x,t)$$

αλλά το αποτέλεσμα μπορεί να βρεθεί εύκολα αν παρατηρείσετε ότι η πυκνότητα πιθανότητας είναι συμμετρική γύρω από το σημείο $\frac{\pi x_0}{L} = \frac{\pi}{2} \ \Rightarrow\ x_0 = \frac{L}{2}$ και επομένως $\langle x \rangle_t = \frac{L}{2}\ \ ,\ \forall t \geq 0$.]

Άσκηση 6. Τη χρονική στιγμή $t=0$ ένα σωμάτιο το οποίο βρίσκεται υπό την επήρεια των δυνάμεων του προβλήματος 1, περιγράφεται από την κυματοσυνάρτηση

$$\psi(x) = \begin{cases} N\dfrac{x}{L} & 0 < x \leq L/2 \\ N(1-\dfrac{x}{L}) & L/2 \leq x < L \end{cases}$$

(α) Δείξτε ότι

$$\psi(x) = \sqrt{\frac{2}{L}}\sum_{n=1}^{\infty} a_n \sin(\frac{n\pi}{L}x)$$

$$A_n = \begin{cases} 0 & \text{οταν } n = \text{αρτιος} \\ (-1)^{\frac{n-1}{2}} \dfrac{4\sqrt{6}}{\pi^2 n^2} & \text{οταν } n = \text{περιττός} \end{cases}$$

(Για να απαντήσετε θα πρέπει πρώτα να κανονικοποιήσετε τη συνάρτησή σας :

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx\,|\psi(x)|^2 = \frac{|N|^2}{L^2}\int_0^{L/2} dx x^2 + \frac{|N|^2}{L^2}\int_{L/2}^{L} dx (L-x)^2 = 1 \;\rightarrow \ldots \rightarrow N = \sqrt{\frac{12}{L}}$$

Στη συνέχεια πρέπει να υπολογίσετε τους συντελεστές στο ανάπτυγμα

$$a_n = \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi(x)\varphi_n^*(x) = \sqrt{\frac{2}{L}}\frac{N}{L}\left[\int_0^{L/2} dx x \sin(\frac{n\pi x}{L}) + \int_{L/2}^{L} dx (L-x)\sin(\frac{n\pi x}{L})\right] =$$

$$= \ldots = \sqrt{24}[1-(-1)^n][\frac{\sin(\frac{n\pi}{2})}{n^2\pi^2} - \frac{\cos(\frac{n\pi}{2})}{2n\pi}].$$

Τα ολοκληρώματα του τύπου $\int dx x^m \sin(ax)$, $m = 1,2,\ldots$ που εμφανίζονται μπορείτε να τα υπολογίσετε με τη χρήση της ταυτότητας :

$$\int dx x^m \sin(ax) = -\frac{\partial}{\partial a}\int dx x^{m-1}\cos(ax) = -\frac{\partial^2}{\partial a^2}\int dx x^{m-2}\sin(ax) = \ldots\ )$$

(β) Ποια είναι η πιθανότητα να βρεθεί το σωμάτιο στη βασική ενεργειακή στάθμη και ποια στην πρώτη διεγερμένη ;