

# Θεωρητική Επιστήμη Υλικών

21 Νοεμβρίου 2011

**Λύστε οποιαδήποτε 4 θέματα.**

**Θέμα 1.** (α) Δείξτε ότι η παρακάτω συνάρτηση αντιστοιχεί σε ιδιοκατάσταση του αρμονικού ταλαντωτή ( $m = \hbar = \omega = 1$ ) και βρείτε την αντίστοιχη ιδιοτιμή της Χαμιλτωνιανής:

$$\psi = (2x^3 - 3x)e^{-x^2/2}$$

(β) Βρείτε τις ιδιοκαταστάσεις που έχουν την αμέσως μικρότερη και αμέσως μεγαλύτερη ιδιοτιμή (μην κάνετε κανονικοποίηση).

**Θέμα 2.** Η Χαμιλτωνιανή  $\mathcal{H}_0$ , σε κάποιο κβαντικό σύστημα έχει δυο ιδιοκαταστάσεις, την  $|1\rangle$  και την  $|2\rangle$  με αντίστοιχες ιδιοτιμές  $\epsilon_1 = 0$  και  $\epsilon_2 = \hbar\omega_0$ . Για  $t = 0$  το σύστημα είναι στην  $|1\rangle$ , και αρχίζει να αλληλεπιδρά με εξωτερικό πεδίο  $\mathcal{V}$  για το οποίο δίνεται ότι  $\langle 1|\mathcal{V}|1\rangle = \langle 2|\mathcal{V}|2\rangle = 0$  και  $\langle 1|\mathcal{V}|2\rangle = \hbar\omega_1$ . Η χαμιλτωνιανή είναι δηλαδή  $\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{V}$ .

(α) Γράψτε τους  $2 \times 2$  πίνακες που αναπαριστούν τους  $\mathcal{H}$ ,  $\mathcal{H}_0$ ,  $\mathcal{V}$ . Βρείτε τις ιδιοτιμές και ιδιοκαταστάσεις της  $\mathcal{H}$ .

(β) Να υπολογιστεί η πιθανότητα ο σύστημα να βρεθεί πάλι στην  $|1\rangle$  μετά από χρόνο  $t$ .

**Θέμα 3.** Δυο ηλεκτρόνια βρίσκονται στην ίδια κατάσταση,  $\psi_a(\mathbf{r})$  με αντιπαράλληλα σπιν και ολική κυματοσυνάρτηση  $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ . Η πυκνότητα ορίζεται ως

$$n(\mathbf{r}) = \int |\psi(\mathbf{r}, \mathbf{r}_2)|^2 d^3r_2 = \int |\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r})|^2 d^3r_1.$$

(α) Εξηγήστε την δευτερη ισότητα στην παραπάνω σχέση. Αποδειξτε ότι

$$n(\mathbf{r}) = 2|\psi_a(\mathbf{r})|^2$$

(β) Έστω ότι τα δυο ηλεκτρονια έλκονται από πυρήνα με δυναμικό  $V(\mathbf{r})$ . Αποδειξτε ότι η μέση δυναμική ενέργεια του συστήματος είναι

$$\langle V \rangle = \int n(\mathbf{r})V(\mathbf{r})d^3r.$$

(γ) Υπολογίστε την μέση δυναμική ενέργεια  $\langle V \rangle$  στο He στην θεμελιώδη στάθμη,  $1s^2$ .

**Θέμα 4.** (α) Υπολογίστε το  $\langle l_z \rangle$  στο Υδρογόνο όταν

$$\psi = N(\psi_{100} + i\sqrt{2}\psi_{211} + \psi_{332}).$$

(β) Σωματίο με σπιν 1/2 βρίσκεται στην κατάσταση  $|\psi\rangle = \alpha|+\rangle + \beta|-\rangle$ . Υπολογίστε την μέση τιμή του διανύσματος του σπιν,  $\langle \mathbf{s} \rangle$ , και του μέτρου του,  $\langle s^2 \rangle$ .

**Θέμα 5.** Η κατάσταση σωματιδίου σε απειρόβαθο πηγάδι περιγράφεται από την

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

(α) Μετράμε την ενέργεια του σωματιδίου. Ποια είναι τα δυνατά αποτελέσματα και με ποιες πιθανότητες; Ποια η μέση τιμή και η αβεβαιότητα των μετρήσεων σε eV για  $L = 1 \text{ nm}$ ; Δίνεται ότι  $a_B = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{me^2} = 0.5 \text{ \AA}$ , και  $E_0 = \frac{\hbar^2}{2ma_B^2} = 27 \text{ eV}$ .

(β) Έστω ότι η μέτρηση έδωσε την χαμηλότερη δυνατή τιμή. Αμέσως μετά, μετράμε την θέση του σωματιδίου. Ποια η πιθανότητα να βρούμε το σωματίδιο σε θέσεις από  $\frac{2L}{5}$  έως  $\frac{3L}{5}$ ;

*Υπόδειξη:* χρησιμοποιήστε την ταυτότητα  $e^{ia} = \cos a + i \sin a$  για να εκφράσετε την  $\psi(x)$  σαν γραμμικό συνδυασμό ιδιοσυναρτήσεων.

**Λύστε οποιαδήποτε 4 θέματα.**