Θεωρία Υλικών
Εξέταση Προόδου της 13/11/2013

Θέμα 1 (2.0)

Υπολογίστε τα στοιχεία $\langle 20|l_z|20\rangle$, $\langle 21|l_+|20\rangle$, $\langle 20|l_+l_-|20\rangle$, $\langle 20|l_-^2 l_z l_+^2|20\rangle$. Οι $|lm\rangle$ ειναι οι κοινές ιδιοκαταστάσεις των l^2 και l_z.

Θέμα 2 (2.0)

Μια προσέγγιση της περιστροφικής κίνησης του μορίου HI είναι να θεωρήσουμε ότι το H περιστρέφεται ελεύθερα στον χώρο γύρω από το ακίνητο I σε απόσταση d_0 =1.61Å. Η Χαμιλτωνιανή του προβλήματος ειναι

$$\mathcal{H} = \frac{l^2}{2m_p d_0^2}.$$

(α) Βρείτε τις τρεις χαμηλότερες ιδιοτιμές της σε eV.

(β) Δώστε την κυματοσυνάρτηση της θεμελιώδους και της πρώτης διεγερμένης κατάστασης.

(γ) Υπολογίστε την μέση τιμή και την αβεβαιότητα του $\cos\theta = z/r$ στην θεμελιώδη στάθμη.

(δ) Αν το μόριο είναι στην θεμελιώδη κατάσταση, ποιο ειναι το μέγιστο μήκος κύματος φωτονίου που απαιτειται για να διεγερθεί;

Θέμα 3 (3.0)

Οι ταλαντωτικές κινήσεις του HI μπορούν να προσεγγιστούν ως ταλάντωση του H με συχνότητα $\omega = 6.9 \times 10^{13}$ Hz και απόσταση ισορροπίας d_0 =1.61Å, ενώ το πολύ βαρυτερο I είναι ακίνητο. Η κίνηση γίνεται σε μια διάσταση με Χαμιλτωνιανή

$$\mathcal{H} = \frac{p^2}{2m_p} + \frac{1}{2}m_p\omega^2(d-d_0)^2.$$

(α) Βρείτε τις τρεις χαμηλότερες ιδιοτιμές της σε eV.

(β) Δώστε την κυματοσυνάρτηση της θεμελιώδους και της πρώτης διεγερμένης κατάστασης (βάλτε αριθμητικές τιμές για μήκη μετρημένα σε Å).

(γ) Υπολογίστε την μέση τιμή και την αβεβαιότητα του d στην θεμελιώδη στάθμη.

(δ) Αν το μόριο είναι στην θεμελιώδη κατάσταση, ποιο ειναι το μέγιστο μήκος κύματος φωτονίου που απαιτειται για να διεγερθεί;

(ε) Σε ένα δειγμα 10^{23} μοριων τα οποία είναι όλα στην θεμελιώδη στάθμη, πόσα έχουν απόσταση H-I μεταξύ 1.60Å και 1.62Å; Θεωρήστε ότι η κυματοσυνάρτηση είναι σταθερή στο διάστημα [1.60Å,1.62Å] και ίση με την τιμή της για d_0 =1.61Å.

Θέμα 4 (3.0)

(α) Δείξτε ότι στον αρμονικό ταλαντωτή με $\hbar = m = \omega = 1$, οι πίνακες που δινουν τους τελεστές x και p στην βάση των ιδιοκαταστάσεων της Χαμιλτωνιανής και αποτελούνται από στοιχεια $\langle n|x|m\rangle$ και $\langle n|p|m\rangle$, $n, m = 0, 1, 2, 3, \ldots$ είναι :

$$x = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & \ldots \\ 1 & 0 & \sqrt{2} & 0 & \ldots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \sqrt{3} & \ldots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \ldots \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \end{pmatrix} \qquad p = \frac{1}{i\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & \ldots \\ -1 & 0 & \sqrt{2} & 0 & \ldots \\ 0 & -\sqrt{2} & 0 & \sqrt{3} & \ldots \\ 0 & 0 & -\sqrt{3} & 0 & \ldots \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \end{pmatrix}$$

Υπόδειξη: χρησιμοποιήστε τους τελεστές δημιουργιας και καταστροφής.

Στα επόμενα ερωτήματα, κρατήστε από τους παραπάνω άπειρους πίνακες μόνο τις πάνω αριστερά κομμάτι 3×3, δηλαδή περιοριστείτε σε $m, n \leq 2$.

(β) Υπολογίστε τους πίνακες $x^2 = xx, p^2 = pp, x^4 = x^2x^2, \mathcal{H}_0 = \frac{1}{2}x^2 + \frac{1}{2}p^2$ και $\mathcal{H} = \frac{1}{2}x^4 + \frac{1}{2}p^2$.

(γ) Βρειτε τις ιδιοτιμές του $\mathcal{H}$.

Θέμα 5 (μπόνους +1.5)

Τα παρακάτω ερωτήματα αφορούν το θέμα 4. Μπορούν να απαντηθούν χωρίς καθόλου πράξεις.

(α) Ποια θα ήταν η μορφή του $\mathcal{H}_0$ αν δεν έιχαμε περιοριστει σε $m, n \leq 2$;

(β) Αν δεν είχατε περιοριστεί σε $m, n \leq 2$, θα είχατε βρει την θεμελιώδη και την πρώτη διεγερμένη στάθμη του $\mathcal{H}$ να έχουν ενέργειες $E_0 = 0.53$ και $E_1 = 1.90$. Γιατί το σφάλμα του υπολογισμού σας ειναι πολύ μεγαλύτερο για το E_1 από ό,τι είναι για το E_0;

(γ) Έστω ότι $|0\rangle = \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix}$ είναι η κανονικοποιημένη η ιδιοκατάσταση της $\mathcal{H}$ που αντιστοιχεί στην E_0. Δειξτε οτι 1) $b = 0$ και 2) $|a| >> |c|$.

Ατομικές μονάδες:

$\alpha_B = \dfrac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{me^2}$ =0.529 Å,	$E_0 = \dfrac{\hbar^2}{ma_B^2} = 27.211$ eV,	$u_0 = \sqrt{\frac{E_0}{m}}$=2187.77 km/s,
$\omega_0 = \frac{2\pi u_0}{\alpha_B} = 2.60 \times 10^{17}$ Hz,	$P_0 = \frac{E_0}{a_B^3} = 29421$ GPa,	$T_0 = \frac{E_0}{k_B} = 315773$ K,

Σταθερές:

1 bar = 10^5 N m^{-2},	$m_e = 9.1 \times 10^{-31}$ kgr,	$e = 1.6 \times 10^{-19}$ C,
$\hbar = 1.05 \times 10^{-34}$ J s,	$c = 3.00 \times 10^8$ m/s,	$N_A = 6.022 \times 10^{23}$mol^{-1},
1 cal = 4.18 J,	$\epsilon_0 = 8.85 \times 10^{-12}$ F/m,	$k_B = 1.381 \times 10^{-23}$J K^{-1},
$m_p = 1836.2m_e$,	$hc = 12398$ eV Å,	$k_B^{-1} = 11605$ K/eV.

Ολοκληρωματα:

$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ax^2}\,\mathrm{d}x = \sqrt{\frac{\pi}{a}} \quad (a > 0)$ $\qquad \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ax^2}e^{-2bx}\,\mathrm{d}x = \sqrt{\frac{\pi}{a}}e^{\frac{b^2}{a}} \quad (a > 0)$

$\int_{-\infty}^{\infty} xe^{-a(x-b)^2}\,\mathrm{d}x = b\sqrt{\frac{\pi}{a}} \quad (\mathrm{Re}(a) > 0)$ $\qquad \int_{-\infty}^{\infty} x^2e^{-ax^2}\,\mathrm{d}x = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\pi}{a^3}} \quad (a > 0)$

$$\int_0^{\infty} x^n e^{-ax^2}\,\mathrm{d}x = \begin{cases} \frac{1\cdot3\cdot\ldots\cdot(2k-1)}{2^{k+1}a^k}\sqrt{\frac{\pi}{a}} & (n = 2k, k \text{ integer}, a > 0) \\ \frac{k!}{2a^{k+1}} & (n = 2k+1, k \text{ integer}, a > 0) \end{cases}$$