Πρόβλημα 1

Έχουμε κατά τα γνωστά

$$(\nabla^2 + k^2)\psi = 0, \qquad \text{όπου } k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

Με την αντικατάσταση $\psi = X(x)Y(y)$, έχουμε

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + k^2\right) XY = 0 \;\Rightarrow\; X''Y + XY'' + k^2 XY = 0 \;\Rightarrow\; \frac{X''}{X} + \frac{Y''}{Y} = -k^2$$

και εν συνεχεία

$$\begin{aligned} \frac{X''}{X} &= -k^2 - \frac{Y''}{Y} = -k_x^2 \\ \frac{Y''}{Y} &= -k^2 + k_x^2 = -k_y^2 \end{aligned}$$

δηλαδή $k^2 = k_x^2 + k_y^2$.

Για τις ιδιοσυναρτήσεις και τις ιδιοτιμές έχουμε

$$\begin{aligned} X'' + k_x^2 X = 0 \quad &\Rightarrow \quad X_n = \sin\frac{n\pi x}{L}, \qquad \text{και} \quad k_x = \frac{n\pi}{L}, \quad n = 1, 2, \ldots \\ Y'' + k_y^2 Y = 0 \quad &\Rightarrow \quad Y_n = \sin\frac{m\pi y}{L}, \qquad \text{και} \quad k_y = \frac{m\pi}{L}, \quad m = 1, 2, \ldots \end{aligned}$$

και τελικά

$$k^2 = k_x^2 + k_y^2 = \frac{(n^2+m^2)\pi^2}{L^2} = \frac{2mE}{\hbar^2} \;\Rightarrow\; E = \frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}(n^2+m^2)$$

ενώ οι (μη κανονικοποιημένες) ιδιοσυναρτήσεις είναι

$$\psi(x,y) = X(x)Y(y) = \sin\frac{n\pi x}{L}\sin\frac{m\pi y}{L}$$

Πρόβλημα 2

Αν θέσουμε $\psi = R(\rho)\Theta(\theta)$, η εξίσωση Schrödinger παίρνει τη μορφή

$$(\nabla^2 + k^2)R\Theta = 0 \;\Rightarrow\; \left(\rho^2\frac{\partial^2}{\partial\rho^2} + \rho\frac{\partial}{\partial\rho} + \frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + k^2\rho^2\right)R\Theta = 0$$

Εισάγοντας τους τελεστές

$$L_\rho = \rho^2\frac{\partial^2}{\partial\rho^2} + \rho\frac{\partial}{\partial\rho} + k^2\rho^2, \qquad \text{και} \quad L_\theta = \frac{\partial^2}{\partial\theta^2}$$

έχουμε

$$\begin{aligned}(L_\rho + L_\theta)R\Theta = 0 \quad &\Rightarrow \quad \Theta L_\rho R + RL_\theta\Theta = 0 \;\Rightarrow\; \frac{L_\rho R}{R} + \frac{L_\theta\Theta}{\Theta} = 0 \\ &\Rightarrow \quad \frac{L_\rho R}{R} = -\frac{L_\theta\Theta}{\Theta} = \lambda\end{aligned}$$

Η εξίσωση ως προς R είναι

$$L_\rho R = \lambda R \;\Rightarrow\; \rho^2 R'' + \rho R' + k^2\rho^2 R = \lambda R$$

Η εξίσωση ως προς θ λύνεται αμέσως:

$$L_\theta\Theta + \lambda\Theta = 0 \;\Rightarrow\; \Theta'' + \lambda\Theta = 0 \;\Rightarrow\; \Theta(\theta) = \sin n\theta,\ \cos n\theta, \quad n = 0, 1, 2, \ldots$$

όπου βέβαια $\lambda = n^2$. Έτσι η εξίσωση ως προς ρ γίνεται

$$\rho^2 R'' + \rho R' + (k^2\rho^2 - n^2)R = 0$$

που δεν είναι παρά η εξίσωση Bessel με λύσεις τα ομώνυμα πολυώνυμα, $R(\rho) = J_n(k\rho)$. Τελικά, η πλήρης λύση είναι

$$\psi(\rho,\theta) = \begin{cases} J_n(k\rho)\sin n\theta \\ J_n(k\rho)\cos n\theta \end{cases}$$

Η συνοριακή συνθήκη $\psi(a,\theta) = 0$ δίνει $J_n(ka) = 0$, δηλαδή $ka = x_{nm}$, όπου x_{nm} η m-οστή ρίζα του J_n. Τελικά, για τις επιτρεπόμενες τιμές της ενέργειας έχουμε

$$\frac{2mE}{\hbar^2} = k^2 = \frac{x_{nm}^2}{a^2} \;\Rightarrow\; E_{nm} = \frac{x_{nm}^2\hbar^2}{2ma^2}$$

Στο τετραγωνικό κουτί, η ενέργεια της θεμελιώδους στάθμης ($n = m = 1$) είναι

$$E_\tau = \frac{\pi^2\hbar^2}{mL^2}$$

ενώ στο κυκλικό ($n = 0, m = 1 \Rightarrow x_{nm} = x_{01} \simeq 2{,}4$) είναι

$$E_\varkappa = \frac{(2{,}4)^2\hbar^2}{2ma^2} \simeq 2{,}9\frac{\hbar^2}{ma^2}$$

Εάν τα δύο κουτιά έχουν το ίδιο εμβαδόν, δηλ. $L^2 = \pi a^2$, τότε

$$E_\tau = \frac{\pi^2\hbar^2}{m\pi a^2} = \pi\frac{\hbar^2}{ma^2} > E_\kappa$$

Το αποτέλεσμα είναι αναμενόμενο, αφού σε χωρίο μικρότερης συμμετρίας (τετράγωνο) η ενέργεια θα πρέπει να είναι αυξημένη.

Πρόβλημα 3

Το πρόβλημα επιλύεται ακριβώς όπως το Πρόβλημα 7.1, και τα αποτελέσματα είναι

$$E_{n,m,l} = \frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}(n^2+m^2+l^2), \qquad n,m,l = 1,2,\ldots$$

και

$$\psi_{nml} = \sin\frac{n\pi x}{L}\sin\frac{m\pi y}{L}\sin\frac{l\pi z}{L}$$

ενώ για το παραλληλεπίπεδο κουτί έχουμε αντίστοιχα

$$E_{n,m,l} = \frac{\hbar^2\pi^2}{2m}\left(\frac{n^2}{a^2}+\frac{m^2}{b^2}+\frac{l^2}{c^2}\right), \qquad n,m,l = 1,2,\ldots$$

και

$$\psi_{nml} = \sin\frac{n\pi x}{a}\sin\frac{m\pi y}{b}\sin\frac{l\pi z}{c}$$

Πρόβλημα 4

α) Αν στην εξίσωση Schrödinger

$$\left[\nabla^2 + \frac{2m}{\hbar^2}\big(E - V(r)\big)\right]\psi = 0$$

κρατήσουμε από τον τελεστή ∇^2 μόνο τον όρο $\dfrac{1}{r}\dfrac{\partial^2}{\partial r^2}r$ έχουμε

$$\frac{1}{r}(r\psi)'' + \frac{2m}{\hbar^2}\big(E - V(r)\big)\psi = 0 \overset{y=r\psi}{\Longrightarrow} y'' + \frac{2m}{\hbar^2}\big(E - V(r)\big)y = 0$$

β) Θέτοντας στην παραπάνω εξίσωση $V = 0$ έχουμε

$$y'' + \frac{2mE}{\hbar^2}y = 0 \quad \text{ή} \quad y'' + k^2 y = 0, \qquad \text{όπου} \quad k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

με λύση

$$y(r) = \alpha \sin kr + \beta \cos kr \;\Rightarrow\; \psi = \frac{y}{r} = \frac{\alpha \sin kr + \beta \cos kr}{r}$$

Από τις συνοριακές συνθήκες έχουμε

$$\begin{aligned}
\psi(0) &= \text{πεπερασμένο} \Rightarrow \beta = 0 \Rightarrow \psi = \frac{\alpha \sin kr}{r} \\
\psi(a) &= 0 \Rightarrow \sin ka = 0 \Rightarrow ka = np \Rightarrow k = \frac{n\pi}{a}, \qquad n = 1, 2, \ldots
\end{aligned}$$

και τελικά

$$E_n = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2m}, \qquad \psi_n = \frac{\alpha \sin \frac{n\pi r}{a}}{r}$$

γ) Οι $\psi_n(r)$ είναι οι καταστάσεις σφαιρικής συμμετρίας (δηλαδή οι καταστάσεις s).

Πρόβλημα 5

Η εξίσωση Schrödinger για τις σφαιρικά συμμετρικές λύσεις στο άτομο του υδρογόνου έχει τη μορφή

$$y'' + + \frac{2m}{\hbar^2}\left(E + \frac{e^2}{r}\right) y = 0 \qquad \text{ή} \qquad y'' + \left(2E + \frac{2}{r}\right) y = 0$$

εάν χρησιμοποιήσουμε το ατομικό σύστημα μονάδων ($m = e = \hbar = 1$). Για την ασυμπτωτική συμπεριφορά, έχουμε

$$y''_\infty + 2E y_\infty = 0 \Rightarrow y_\infty = e^{-\gamma r}, \qquad \text{όπου}\, \gamma^2 = -2E$$

όπου κρατήσαμε βέβαια μόνο το φθίνον εκθετικό, ώστε η λύση να μηδενίζεται στο άπειρο. Αναζητούμε λύση της μορφής $y(r) = e^{-\gamma r} F(r)$, όπου $F(r)$ ένα πολυώνυμο, οπότε αντικαθιστώντας στην εξίσωση Schrödinger έχουμε

$$\gamma^2 F - 2\gamma F' + F'' + 2EF + \frac{2F}{r} = 0 \Rightarrow F'' - 2\gamma F' + \frac{2F}{r} = 0$$

και για μεγάλα r, όπου κυριαρχεί η μέγιστη δύναμη, δηλ. $F \sim r^n$, έχουμε

$$n(n-1)r^{n-2} - 2\gamma n r^{n-1} + 2r^{n-1} = 0 \Rightarrow \gamma n = 1 \Rightarrow \gamma = \frac{1}{n}$$

όπου αγνοήσαμε τον όρο $n(n-1)r^{n-2}$, αφού στα μεγάλα r είναι αμελητέος σε σχέση με τη δύναμη r^{n-1}. Τελικά, για τις ιδιοτιμές της ενέργειας έχουμε

$$E = -\frac{\gamma^2}{2} = -\frac{1}{2n^2}, \qquad n = 1, 2, \ldots$$

Για $n = 1$ η μέγιστη δύναμη είναι r, και δεν μπορεί να υπάρχει σταθερός όρος r^0, διότι θα είχαμε $\psi = y/r = e^{-r}/r$, το οποίο απειρίζεται στην αρχή των αξόνων. Επομένως

$$F \propto r \,\Rightarrow\, y = re^{-r} \,\Rightarrow\, \psi = e^{-r}$$

Πρόβλημα 11

α) Από τη συνθήκη κανονικοποίησης, έχουμε

$$\int_0^L |\psi|^2\, dx = N^2 \int_0^L \sin^6 \frac{\pi x}{L}\, dx = N^2 \frac{5L}{16} = 1 \,\Rightarrow\, L = \sqrt{\frac{16}{5L}}$$

β) Αναπτύσσουμε την κυματοσυνάρτηση τη χρονική στιγμή $t = 0$ σε ιδιοκαταστάσεις ψ_n:

$$\psi(x,0) = \sqrt{\frac{16}{5L}} \left(\frac{3}{4} \sin \frac{\pi x}{L} - \frac{1}{4} \sin \frac{3\pi x}{L} \right) = \frac{1}{\sqrt{10}} (3\psi_1 - \psi_3)$$

και επομένως για την χρονικά εξελιγμένη μορφή, έχουμε

$$\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{10}} (3\psi_1 e^{-iE_1 t/\hbar} - \psi_3 e^{-iE_3 t/\hbar})$$

όπου

$$E_1 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2}, \qquad \text{και } E_3 = 9E_1.$$

Πρόβλημα 26

$$\begin{aligned} \langle H \rangle &= (\psi, H\psi) = \frac{1}{2m} (\psi, p^2 \psi) + (\psi, V\psi) \\ &= \frac{1}{2m} \|p\psi\|^2 + \int \psi^* (V - V_{\min}) \psi\, dx + V_{\min} \\ &\geq \int |\psi|^2 (V - V_{\min}) dx + V_{\min} \geq V_{\min} \end{aligned}$$

όπου η τελευταία ανισότητα έπεται από το γεγονός ότι η ολοκληρωτέα ποσότητα $|\psi|^2 (V - V_{\min})$ είναι πάντοτε θετική. Αν υπήρχε λύση ψ_0 της εξίσωσης Schrödinger $H\psi = E\psi$ με $E < V_{\min}$, τότε θα είχαμε

$$\langle H\rangle = (\psi_0, H\psi_0) = E < V_{\min}$$

το οποίο δείξαμε ότι είναι αδύνατο.

Πρόβλημα 27

Πρόβλημα 28

Για τυχούσες y και ϕ έχουμε από τον ορισμό του συζυγούς

$$(y, A\phi) = \big((A^\dagger y), \phi\big) \;\Rightarrow\; \int y^* A\phi \, dV = \int (A^\dagger y)^* \phi \, dV$$

Παίρνοντας τον μιγαδικό συζυγή των δύο μελών, έχουμε

$$\begin{aligned} \int y (A\phi)^* \, dV &= \int A^\dagger y \, \phi^* \, dV \;\Rightarrow\; (A\phi, y) = (\phi, A^\dagger y), = \big((A^\dagger)^\dagger \phi, y\big) \\ &\Rightarrow\; A = (A^\dagger)^\dagger \end{aligned}$$

Για τη δεύτερη σχέση, έχουμε

$$\begin{aligned} \big(y, (A+B)\phi\big) &= \int y^* A\phi \, dV + \int y^* B\phi \, dV = (y, A\phi) + (y, B\phi) \\ &= (A^\dagger y, \phi) + (B^\dagger y, \phi) = \big((A^\dagger + B^\dagger) y, \phi\big) \end{aligned}$$

και επίσης, εξ ορισμού

$$\big(y, (A+B)\phi\big) = \big((A+B)^\dagger y, \phi\big)$$

οπότε

$$(A+B)^\dagger = A^\dagger + B^\dagger$$

Για την τρίτη σχέση, έχουμε

$$(y, AB\phi) = \big(y, A(B\phi)\big) = (A^\dagger y, B\phi) = (B^\dagger A^\dagger y, \phi)$$

και επίσης, εξ ορισμού

$$(y, AB\phi) = \big((AB)^\dagger y, \phi\big)$$

και επομένως

$$(AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger$$