



ΕΛΛΗΝΙΚΗ ΔΗΜΟΚΡΑΤΙΑ  
ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΚΡΗΤΗΣ

---

## Κβαντομηχανική Ι

Η. Κυρίτσης

Τμήμα Φυσικής

---

# Κβαντική Μηχανική Ι.

## Διδάσκων: Η. Κυρίτσης

### Σύνολο Προβλημάτων 12

19 Δεκεμβρίου 2014

**Πρόβλημα 12.1:** (α) Θεωρείστε μια χαμιλτονιανή  $H(\lambda)$  που εξαρτάται από μια συνεχή παράμετρο  $\lambda$ . Θεωρείστε μια τυχαία ιδιοτιμή της  $E(\lambda)$ , και την αντίστοιχη ιδιοκατάσταση  $|\psi(\lambda)\rangle$ . Δείξτε ότι ισχύει η σχέση

$$\left\langle \psi(\lambda) \left| \frac{\partial H}{\partial \lambda} \right| \psi(\lambda) \right\rangle = \frac{dE(\lambda)}{d\lambda}$$

που είναι γνωστή σαν το θεώρημα Feynman-Hellman.

(β) Εφαρμόστε την στην ειδική περίπτωση  $H(\lambda) = H_0 + \lambda A$ , με  $H_0, A$  ανεξάρτητο του  $\lambda$  για να δείξετε ότι

$$\langle A \rangle = \frac{dE}{d\lambda}$$

(γ) Η χαμιλτονιανή  $H = H_0 + \lambda A$  με  $H_0$  την συνηθισμένη χαμιλτονιανή του ατόμου του υδρογόνου και  $A = \frac{1}{r}$  η  $A = \frac{1}{r^2}$ , λύνεται ακριβώς. Βρείτε την και χρησιμοποιήστε αυτή την λύση και το θεώρημα Feynman-Hellman για να υπολογίσετε τις μέσες τιμές  $\left\langle \frac{1}{r} \right\rangle$  και  $\left\langle \frac{1}{r^2} \right\rangle$  σε μια τυχαία κατάσταση του ατόμου του υδρογόνου.

**Πρόβλημα 12.2:** Η σχετικότητα υποδεικνύει την ύπαρξη όρων στην χαμιλτονιανή του ατόμου του υδρογόνου που δεν έχουμε λάβει υπ'οψιν μας στην μη σχετικιστική αντιμετώπιση του προβλήματος. Ένας τέτοιος όρος είναι ο

$$V_{LS} = \frac{e^2}{2m^2c^2} \frac{\vec{\ell} \cdot \vec{s}}{r^3}$$

που συζεύγει την τροχιακή στροφορμή  $\vec{\ell}$  και το σπίν  $\vec{s}$  του ηλεκτρονίου. Χρησιμοποιήσατε θεωρία διαταραχών (υποθέτοντας ότι αυτός ο όρος είναι 'μικρός') για να υπολογίσετε την διόρθωση στις ιδιοενέργειες του ατόμου του υδρογόνου.

Για να υπολογίσετε την μέση τιμή  $\left\langle \frac{1}{r^2} \right\rangle$  σε μια τυχαία κατάσταση του ατόμου του υδρογόνου θα χρειαστεί να χρησιμοποιήσετε πρώτα το θεώρημα Feynman-Hellman για να δείξετε ότι σε κάθε ενεργειακή ιδιοκατάσταση ισχύει

$$\langle V'(x) \rangle = 0$$

και εφαρμόστε την στο ακτινικό δυναμικό του ατόμου του υδρογόνου.

Από το αποτέλεσμα σας συμπεράνατε τότε η θεωρία διαταραχών είναι μια καλή προσέγγιση σε αυτό το πρόβλημα.

**Πρόβλημα 12.3:** Εφαρμόστε το θεώρημα Feynman-Hellman για την Χαμιλτονιανή  $H = \frac{p^2}{2m} + g|x|^\nu$  με παράμετρο την σταθερά σύζευξης  $g$  για να δείξετε ότι

$$\langle V \rangle = \frac{2}{\nu+2} E, \quad \langle K \rangle = \frac{\nu}{\nu+2} E \quad \Rightarrow \quad \langle K \rangle = \frac{\nu}{2} \langle V \rangle$$

όπου  $V = g|x|^\nu$  η δυναμική ενέργεια του συστήματος,  $K = \frac{p^2}{2m}$  η κινητική ενέργεια του συστήματος και  $E$  μια τυχούσα ενεργειακή ιδιοτιμή. Χρησιμοποιήστε διαστατική ανάλυση για να βρείτε πώς εξαρτάται το  $E$  από το  $g$ . Επιβεβαιώστε τα αποτελέσματα εφαρμόζοντας τα στο άτομο του υδρογόνου και στον αρμονικό ταλαντωτή.

**Πρόβλημα 12.4 :** Εφαρμόστε το θεώρημα Feynman-Hellman για να αποδείξετε την σχέση

$$\delta E = -\frac{1}{2} \alpha \mathcal{E}^2$$

πού δίνει την πρόσθετη ενέργεια  $\delta E \equiv E - E_0$  πού αποκτά το άτομο του υδρογόνου όταν τοποθετείται μέσα σε ένα ηλεκτρικό πεδίο εντάσεως  $\mathcal{E}$  κατά τον άξονα των  $z$ . Η παράμετρος  $\alpha$ , γνωστή σαν ηλεκτρική πολωσιμότητα, ορίζεται μέσω της σχέσης

$$\langle d \rangle = \alpha \mathcal{E}$$

όπου  $\langle d \rangle$  η μέση διπολική ροπή που αποκτάει το άτομο λόγω της παρουσίας του ηλεκτρικού πεδίου. Υπενθυμίζουμε ακόμα ότι η Χαμιλτονιανή του ατόμου, παρουσία του ηλεκτρικού πεδίου, θα έχει την μορφή  $H = H_0 - d\mathcal{E}$  όπου  $d = -ez$  ο τελεστής της ατομικής διπολικής ροπής και  $U = -d \cdot \mathcal{E}$  η ενέργεια αλληλεπίδρασης με το ηλεκτρικό πεδίο.

**Πρόβλημα 12.5 :** Στην μελέτη των φασμάτων ταλάντωσης μορίων το δυναμικό μπορεί να προσεγγιστεί με το δυναμικό του Morse

$$V(x) = V_0(1 - e^{-ax})^2$$

Βρείτε τις ενεργειακές ιδιοτιμές των μοριακών ταλαντωτών.

**Πρόβλημα 12.6 :** Στην μελέτη διατομικών μορίων, τα φάσματα των στροφικών και ταλαντωτικών βαθμών ελευθερίας δίνονται από δυναμικό της μορφής

$$V(x) = V_0 \left( \frac{1}{\rho^2} - \frac{2}{\rho} \right), \quad V_0 > 0$$

όπου  $\rho = \frac{r}{a}$  είναι η απόσταση μεταξύ των δύο πυρήνων. Βρείτε τις ενεργειακές στάθμες.

# Σημειώματα

## Σημείωμα αναφοράς

Copyright Πανεπιστήμιο Κρήτης, Η. Κυρίτσης 2014. «Κβαντομηχανική Ι». Έκδοση: 1.0. Ηράκλειο 2014. Διαθέσιμο από τη δικτυακή διεύθυνση: <https://opencourses.uoc.gr>.

## Σημείωμα Αδειοδότησης

Το παρόν υλικό διατίθεται με τους όρους της άδειας χρήσης Creative Commons Αναφορά, Μη Εμπορική Χρήση, Όχι Παράγωγο Έργο 4.0 [1] ή μεταγενέστερη, Διεθνής Έκδοση. Εξαιρούνται τα αυτοτελή έργα τρίτων π.χ. φωτογραφίες, διαγράμματα κ.λ.π., τα οποία εμπεριέχονται σε αυτό και τα οποία αναφέρονται μαζί με τους όρους χρήσης τους στο «Σημείωμα Χρήσης Έργων Τρίτων».



[1] <http://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/4.0/>

Ως **Μη Εμπορική** ορίζεται η χρήση:

- που δεν περιλαμβάνει άμεσο ή έμμεσο οικονομικό όφελος από την χρήση του έργου, για το διανομέα του έργου και αδειοδόχο
- που δεν περιλαμβάνει οικονομική συναλλαγή ως προϋπόθεση για τη χρήση ή πρόσβαση στο έργο
- που δεν προσπορίζει στο διανομέα του έργου και αδειοδόχο έμμεσο οικονομικό όφελος (π.χ. διαφημίσεις) από την προβολή του έργου σε διαδικτυακό τόπο

Ο δικαιούχος μπορεί να παρέχει στον αδειοδόχο ξεχωριστή άδεια να χρησιμοποιεί το έργο για εμπορική χρήση, εφόσον αυτό του ζητηθεί.

## Διατήρηση Σημειωμάτων

Οποιαδήποτε αναπαραγωγή ή διασκευή του υλικού θα πρέπει να συμπεριλαμβάνει:

- το Σημείωμα Αναφοράς
- το Σημείωμα Αδειοδότησης
- τη δήλωση Διατήρησης Σημειωμάτων
- το Σημείωμα Χρήσης Έργων Τρίτων (εφόσον υπάρχει)

μαζί με τους συνοδευόμενους υπερσυνδέσμους.

## Χρηματοδότηση

- Το παρόν εκπαιδευτικό υλικό έχει αναπτυχθεί στα πλαίσια του εκπαιδευτικού έργου του διδάσκοντα.
- Το έργο «Ανοικτά Ακαδημαϊκά Μαθήματα στο Πανεπιστήμιο Κρήτης» έχει χρηματοδοτήσει μόνο τη αναδιαμόρφωση του εκπαιδευτικού υλικού.
- Το έργο υλοποιείται στο πλαίσιο του Επιχειρησιακού Προγράμματος «Εκπαίδευση και Δια Βίου Μάθηση» και συγχρηματοδοτείται από την Ευρωπαϊκή Ένωση (Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο) και από εθνικούς πόρους.

