

az ω_0 frekvenciájú rezgés amplitúdója: $a(\omega_0) = \frac{\tau A}{\pi}$.

nagyságrendűek a $\Delta\omega = |\omega - \omega_0| \sim \frac{1}{\tau}$ tartományban levő rezgések amplitúdói is, ebben a frekvenciatartományban lehet fogni az adó jeleit.

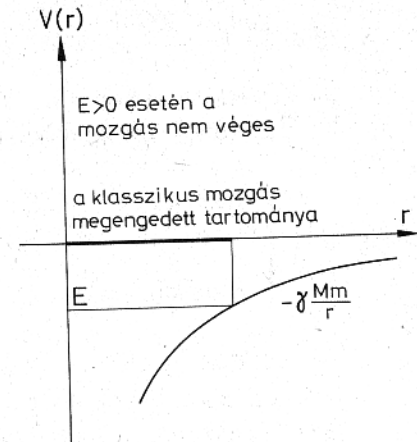
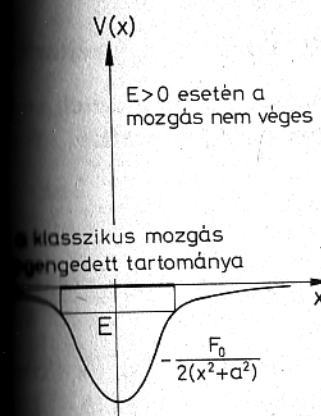
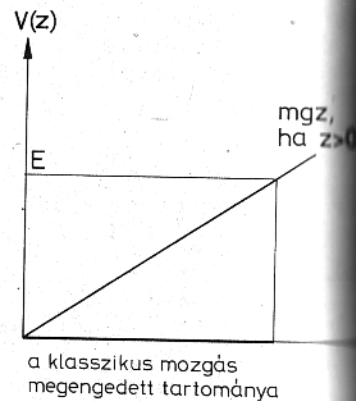
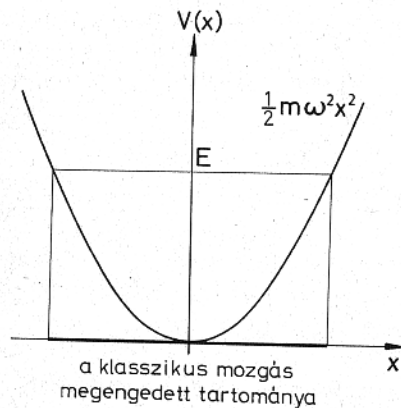
- 3.18. Tudjuk, hogy az elhajlási kép első minimumhelye olyan szög alatt van, amelyre $\Delta\vartheta = \frac{\lambda}{d}$. A réshez az elektronnyalók vízszintes p_0 impulzussal érkezett, a résen való áthaladás után az elektrónok koordinátáját d pontossággal ismerjük. Az elhajlási kép azt sugallja, hogy az áthaladás után az impulzus függőleges komponensének bizonytalansága $p_0 \Delta\vartheta$.

$$p_0 \Delta\vartheta \cdot d = p_0 \lambda = h.$$

4. Schrödinger-egyenlet.

Egyszerű kvantummechanikai rendszerek. Általános tételek

4.1.



Az energia-sajátérték egyenlet $\hat{H}\psi = E\psi$, ahol $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V$. Pl.

az a) esetben $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \psi = E\psi$. Átalakítjuk az egyenletet: $\psi''(x) = \frac{2m}{\hbar^2} (V - E)\psi$. Ha $E > V(x)$, akkor $\psi(x) \geq 0$ esetén $\psi''(x) \leq 0$, tehát a függvény az x tengely felé görbül; ilyenek pl. a $\sin x$, $\cos x$ függvények. Ha $E < V(x)$, akkor $\psi(x) \geq 0$ esetén $\psi''(x) \geq 0$, tehát a függvény az x tengelytől görbül; ilyenek pl. az $\exp(x)$, $\exp(-x)$ függvények.

$\psi''(x) = -\frac{2m}{\hbar^2} [E - V(x)]\psi(x)$. A hullámfüggvény görbülete ψ'' -vel, s így $[E - V(x)]$ és $\psi(x)$ szorzatával arányos. Adott $\psi(x)$ mellett tehát a legkisebb energiájú állapot görbülete a legkisebb, növekvő energia mellett a görbület is nő, a hullámhossz csökken.

Szomszédos tartományokban a hullámfüggvény maximuma általában ott nagyobb, ahol $E - V(x)$ kisebb. A megoldás ugyanis $\psi = A \sin(kx + \delta)$ alakban írható, és így $\psi' = Ak \cos(kx + \delta)$. Ezekből $A = \left(\psi^2 + \frac{\psi'^2}{k^2} \right)^{1/2}$, ahol

$k^2 = \frac{2m[E - V(x)]}{\hbar^2}$. Mivel ψ és ψ' folytonosan változik, ezért ha k csökken, akkor A nő, kivéve azt a ritka esetet, amikor a határpontban $\psi' = 0$, ekkor ugyanis A változatlan.

$$4.4. \psi = \begin{cases} A \sin kx, & \text{ha } 0 < x < a, \quad k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}, \\ B \sin k'(b-x), & \text{ha } a < x < b, \quad k'^2 = \frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2} \end{cases}$$

A határfeltételek: $A \sin ka = B \sin k'(b-a)$, $kA \cos ka = -k'B \cos k'(b-a)$, azaz $k \operatorname{ctg} ka = -k' \operatorname{ctg} k'(b-a)$. Mivel $k > k'$, ezért az utóbbi egyenlőség akkor állhat fenn, ha $\left| k'(b-a) - (2l+1)\frac{\pi}{2} \right| > \left| (2l+1)\frac{\pi}{2} - ka \right|$. Ekkor $\sin ka > \sin k'(b-a)$, és így $B > A$. Előfordulhat, hogy $\cos ka = \cos k'(b-a) = 0$, ekkor $A = B$.

$$4.5. E_n = \frac{\hbar^2 n^2}{8ma^2}, \quad \psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{\pi n x}{a}; \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

$$4.6. n = \frac{2mva}{\hbar} \approx 3 \cdot 10^{26} \cdot \Delta E_n \approx 3 \cdot 10^{-34} \text{ joule}.$$

A makroszkopikus állapotok nagyon magas gerjesztések, a megengedett energiaértékek közötti különbség nagyon kicsi.

$$4.7. \text{Az } n\text{-edik energia-sajátfüggvény: } \psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{\pi n x}{a}.$$

$$\langle x \rangle = \int_0^a x \sin^2 \frac{\pi n x}{a} dx = \frac{1}{2} a.$$

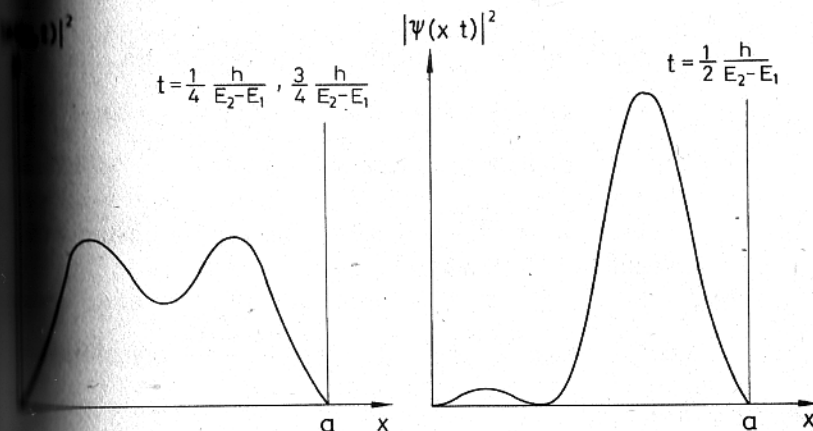
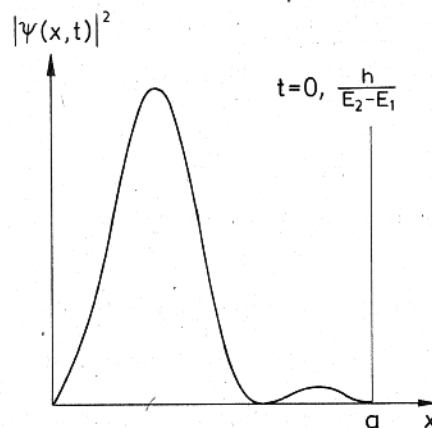
$$\begin{aligned} \langle (\Delta x)^2 \rangle &= \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 = \int_0^a x^2 \sin^2 \frac{\pi n x}{a} dx - \frac{a^2}{4} = \\ &= \frac{a^2}{12} \left(1 - \frac{6}{n^2 \pi^2} \right). \end{aligned}$$

$$4.8. \psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\psi_1(x) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_1 t\right) + \psi_2(x) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_2 t\right) \right];$$

$$|\psi(x, t)|^2 = \frac{1}{2} |\psi_1(x)|^2 + |\psi_2(x)|^2 + \psi_1(x) \psi_2(x) 2 \cos \frac{E_2 - E_1}{\hbar} t.$$

$$\langle x \rangle = \frac{a}{2} - \frac{16}{9\pi} a \cos \frac{E_2 - E_1}{\hbar} t.$$

$$\langle p_x \rangle = \frac{8}{3} \frac{\hbar}{a} \sin \frac{E_2 - E_1}{\hbar} t.$$



$$4.9. A = \left(\frac{30}{a^5}\right)^{1/2} \cdot \langle E \rangle = \frac{5\hbar^2}{ma^2}.$$

4.10. Mozdítsuk el gondolatban a völgy falát da -val adiabatikusan („összenyomjuk az elektront”). Az energia megváltozása ekkor $dE = -F da$. Innen $F = -\frac{dE}{da} = \frac{2E}{a}$, energia-sajátértékben. Ugyanezt az eredményt megkaphatjuk, ha az $\hat{F}$

operátor várható értékét kiszámítjuk. Klasszikusan $t = \frac{2a}{v}$ alatt $2mv$ impulzust ad át a részecske a falnak, így $F = \frac{mv^2}{a} = \frac{2E}{a}$.

4.11. A kötött állapotok energiája a $ka = n\pi - 2 \arcsin \frac{\hbar k}{\sqrt{2mV_0}}$

transzcendens egyenletből határozható meg: $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$,

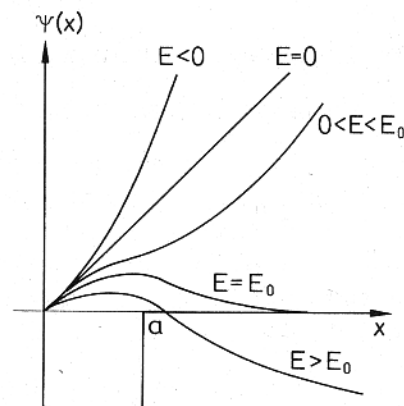
$n = 1, 2, \dots$. Mivel ka monoton nő, ezért $\zeta_n(k) = n\pi - 2 \arcsin \frac{\hbar k}{\sqrt{2mV_0}}$ monoton csökken a $0 \leq k \leq \frac{\sqrt{2mV_0}}{\hbar}$

intervallumban. Az egyenletnek van megoldása, ha $k = \frac{\sqrt{2mV_0}}{\hbar}$ esetén $ka - \zeta_n(k) > 0$ azaz $a\sqrt{2mV_0} > \pi\hbar(n-1)$.

$n=1$ -re biztosan igaz, tehát legalább egy kötött állapot létezik.
a) A kötött állapot hullámfüggvénye nem tűnik el a völgyből kívül sem; kis a érték nem jelenti azt, hogy a tömegpont lokalizáltsága kicsi, $\Delta x > a$.

b) Adott a és V_0 mellett a kötött állapotok n száma annyi, ahány n -re az $\frac{a\sqrt{2mV_0}}{\pi\hbar} + 1 > n \geq \frac{a\sqrt{2mV_0}}{\pi\hbar}$ egyenlőtlenség teljesül.

Rögzítsük $x=0$ -ban a $\psi(0)=0$, $\psi'(0)=1$ határfeltételeket, és rajzoljuk le a különböző E értékekhez tartozó megoldásokat! Legyen először $E < 0$, majd növeljük fokozatosan E értékét! A megoldások eleinte $x=\infty$ -ben végtelenhez tartanak, majd elérünk egy olyan megoldást, amely $x=\infty$ -ben zérushoz tart. Ez a $\psi(x)$ az első kötött állapot hullámfüggvénye, a hozzá tartozó $E=E_0$ az alapállapot energiája. E -t tovább növelve, a megoldás már a végesben metszi az x tengelyt és $x=\infty$ -ben $(-\infty)$ -hez tart.



Legyen $\psi_1(x)$ és $\psi_2(x)$ ugyanazon E energia-sajátértékhez tartozó sajátfüggvény:

$$\psi_1'' + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V)\psi_1 = 0, \quad \psi_2'' + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V)\psi_2 = 0.$$

Az egyenletekből következik, hogy

$$\psi_1''\psi_2 - \psi_2''\psi_1 = (\psi_1'\psi_2)' - (\psi_2'\psi_1)' = 0.$$

Integrálás után

$$\psi_1'\psi_2 - \psi_2'\psi_1 = \text{állandó}.$$

A kötött állapotok hullámfüggvényei a végtelenben eltűnnek,

ezért az állandó zérus, és

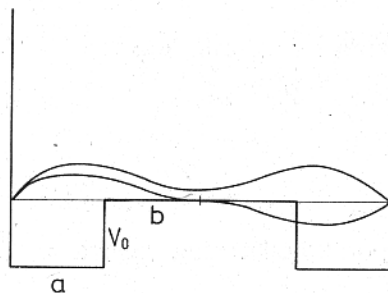
$$\frac{\psi'_1}{\psi_1} = \frac{\psi'_2}{\psi_2}, \quad \text{azaz} \quad \psi_1 = C\psi_2.$$

ψ_1 és ψ_2 tehát nem lineárisan független sajátfüggvények, ezért az energiaspektrum nem degenerált.

4.14. Az egyszerűség kedvéért csak az egydimenziós problémával foglalkozunk. $\hat{H}(x) = \hat{H}(-x)$, ezért $\hat{H}\psi(x) = E\psi(x)$ és $H\psi(-x) = E\psi(-x)$. A diszkrét energiaspektrum nem degenerált, így $\psi(x) = C\psi(-x)$. A sajátfüggvények párosak vagy páratlanok.

4.15. a) A potenciálfüggvény szimmetrikus a végtelen magas falaktól $a + \frac{b}{2}$ távolságra levő pontra nézve, így a keresett hullámfüggvények vagy párosak, vagy páratlanok erre a pontra nézve. Ismerve, hogy milyen alapállapotot alakít ki egy vonzócentrum önmagában, felrajzolhatunk egy szimmetrikus és egy antiszimmetrikus hullámfüggvényt.

b) $E < 0$ értékből indulva lerajzolhatjuk a sajátérték-egyenlet megoldásait, növekvő E mellett. Eleinte a megoldások gyorsan nőnek az $x > a + \frac{b}{2}$ tartományban, majd elérünk egy olyan E_0^+ értékhez, amelynél kialakul a szimmetrikus megoldás. $E_0^+ < E_0$, hiszen a második potenciálvölgy teszi végezzé az E_0^+ -hoz tartozó megoldást. E további növelésével eljutunk az antiszimmetrikus megoldáshoz, az ehhez tartozó E_0^- értékre $E_0^- > E_0$, mert ez a megoldás az x ten



gelyt a végesben metszi. Most is a második potenciálvölgy teszi végezzé a megoldást, egyébként az a $(-\infty)$ -hez tartana. $b \rightarrow \infty$ esetén a két vonzócentrum függetlenné válik és $E_0^+ \rightarrow E_0$, $E_0^- \rightarrow E_0$; az E_0 szint ekkor kétszeresen elfajult.

c) A szimmetrikus állapot energiája E_0 -nál kisebb, az antiszimmetrikusé E_0 -nál nagyobb, ezért előbbiben a részecske vonzó-, utóbbiban taszítóerőt közvetít a két vonzócentrum között.

d) Általában minden, egyetlen vonzócentrumban kialakuló energiaszint két, egymáshoz közeli szintre hasad fel. Az adott közelítésben

$$E_n^+ = E_n - 4 \frac{E_n^{(0)}}{a\kappa_0} e^{-\kappa_0 b}, \quad E_n^- = E_n + 4 \frac{E_n^{(0)}}{a\kappa_0} e^{-\kappa_0 b},$$

ahol

$$E_n = E_n^{(0)} \left(1 - \frac{2}{a\kappa_0} \right), \quad E_n^{(0)} = \frac{\hbar^2 n^2}{8ma^2}, \quad \kappa_0 = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E_n^{(0)})}}{\hbar}$$

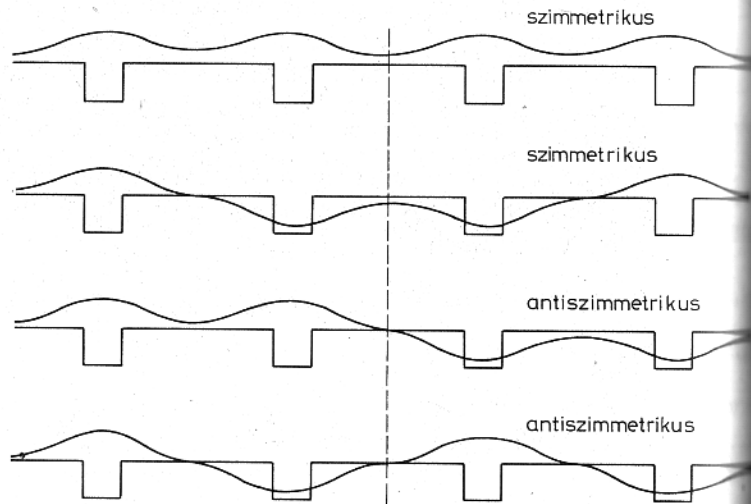
A hullámfüggvények:

(a)	intervallum	$\psi^-(x)$
$\sin kx$	$0 < x < a$	$\frac{1}{\sqrt{a}} \sin kx$
$\frac{1}{\sqrt{a}} \frac{k_0}{\kappa_0} (e^{-k_0(x-a)} + e^{-k_0(a+b-x)})$	$a < x < a+b$	$(-1)^{n-1} \frac{1}{\sqrt{a}} \frac{k_0}{\kappa_0} (e^{-\kappa_0(x-a)} - e^{-\kappa_0(a+b-x)})$
$\sin k(2a+b-x)$	$a+b < x < 2a+b$	$-\frac{1}{\sqrt{a}} \sin k(2a+b-x),$

$$\text{ahol} \quad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}, \quad k_0 = \frac{m\pi}{a}.$$

4.16. A potenciál szimmetrikus, ezért a diszkrét energia-sajátállapotok hullámfüggvényei párosak vagy páratlanok. Ha a vonzócentrumok elég távol vannak egymástól, akkor lényegében függetlenek, az egy vonzócentrumban kialakuló alapállapot

hullámfüggvényét ismerjük, ilyenekből kell szimmetrikus és antiszimmetrikus kombinációkat összeállítani. Az alábbi négy kombináció képezhető:



4.17. A $0 < x < a$ tartományban

$$\psi(x) = c_1 \exp(i\kappa_1 x) + c_2 \exp(-i\kappa_1 x), \quad \kappa_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}.$$

A $-b < x < 0$ tartományban

$$\psi(x) = c_3 \exp(i\kappa_2 x) + c_4 \exp(-i\kappa_2 x), \quad \kappa_2 = \frac{\sqrt{2m(E-V)}}{\hbar}.$$

Bizonyítható, hogy a periodicitás miatt $\psi(x) = e^{i\varphi} \psi(x+a+b)$ ezért az $a < x < a+b$ tartományban

$$\psi(x) = \exp(i\varphi) [c_3 \exp(i\kappa_2(x-a-b)) + c_4 \exp(-i\kappa_2(x-a-b))].$$

Az $x=0$ és $x=a$ helyen érvényes határfeltételek a c_1, c_2, c_3, c_4 együtthatókra nézve homogén lineáris egyenletrendszer alkotnak, melynek akkor van nemtriviális megoldása, ha

$$\cos \varphi = \cos \kappa_1 a \cos \kappa_2 b - \frac{\kappa_1^2 + \kappa_2^2}{2\kappa_1 \kappa_2} \sin \kappa_1 a \sin \kappa_2 b.$$

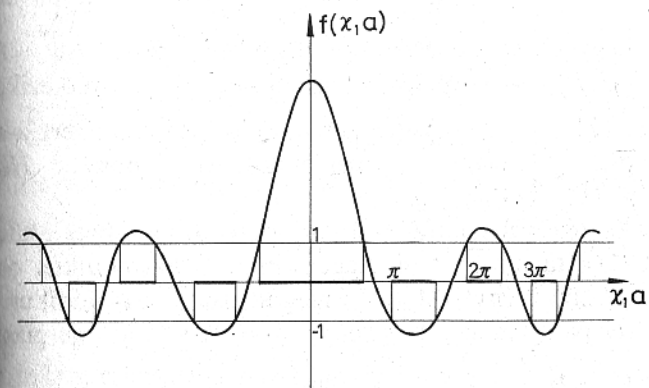
Legyen $E < V_0$ (kötött állapotok). Ekkor $\kappa_2 = i\kappa$, κ valós és

$$\cos \varphi = \cos \kappa_1 a \cosh \kappa b + \frac{\kappa^2 - \kappa_1^2}{2\kappa_1 \kappa} \sin \kappa_1 a \sinh \kappa b \equiv f(E).$$

Az energiaértéket az $|f(E)| \leq 1$ feltétel megszorítja. Az adott határesetben

$$\cos \varphi = \cos \kappa_1 a + \frac{mV_0}{\hbar^2} ab \frac{\sin \kappa_1 a}{\kappa_1 a} = f(\kappa_1 a).$$

Ábrázoljuk az $f(\kappa_1 a)$ függvényt! Látható, hogy $\kappa_1 a = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} a = n\pi$ -től jobbra tiltott sáv van, amelynek szélessége csökken, ha n nő.



18. Az alapállapot hullámfüggvénye:

$$\psi(x) = C \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2\right).$$

Alapállapotban a klasszikusan megengedett határ: $x_{kl}^2 = \frac{2E}{m\omega^2} = \frac{\hbar}{m\omega}$. A keresett valószínűség:

$$2 \int_{-\infty}^{\infty} \left(C \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2\right) \right)^2 dx =$$

$$= \left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^{\frac{1}{2}} \frac{\int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{m\omega}{\hbar} x^2\right) dx}{\int_0^{\infty} \exp(-y^2) dy} = \frac{1}{\int_0^{\infty} \exp(-y^2) dy} \sim 0,16.$$

4.19. a) A felcserélési törvények egyszerűen igazolhatók
 $[\hat{p}, \hat{x}^2] = 2\frac{\hbar}{i}\hat{x}$, $[\hat{p}^2, \hat{x}] = 2\frac{\hbar}{i}\hat{p}$ összefüggések felhasználásával.

b) Közvetlen számítással az is látható, hogy $\hat{a}^+ \hat{a} = \frac{\hat{p}^2}{2m\hbar\omega} + \frac{m\omega^2 x^2}{2\hbar\omega} - \frac{1}{2}$, tehát $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 = \hbar\omega\left(\hat{a}^+ \hat{a} + \frac{1}{2}\right)$.

c) Legyen ψ_n energia-sajátfüggvény, azaz $\hat{H}\psi_n = E_n\psi_n$. A $[\hat{H}, \hat{a}]\psi_n = -\hbar\omega\hat{a}\psi_n$ egyenlőségből következik, hogy $\hat{H}(\hat{a}\psi_n) = (E_n - \hbar\omega)(\hat{a}\psi_n)$, tehát $(\hat{a}\psi_n)$ szintén energia-sajátállapot. Ugyanígy megmutatható, hogy $\hat{H}(\hat{a}^+\psi_n) = (E_n + \hbar\omega)(\hat{a}^+\psi_n)$.

4.20. Az energia-sajátfüggvények az $x=0$ pontban eltűnnek, az $x>0$ tartományban megegyeznek a harmonikus oszcillátor sajátfüggvényeivel. Így a megoldások a harmonikus oszcillátor páratlan sajátfüggvényei ($n = 2k+1$), az energiaspektrum

$$E_k = \hbar\omega\left(2k+1 + \frac{1}{2}\right) = \hbar\omega\left(2k + \frac{3}{2}\right), k = 0, 1, 2, \dots$$

4.21. Az energia-sajátértékegyenlet:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\psi(x, y, z) + \frac{1}{2}kx^2\psi(x, y, z) =$$

$$= E\psi(x, y, z)$$

derékszögű koordinátákban szeparálható:

$$\psi(x, y, z) = f(x)g(y)h(z).$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}f''(x) = \frac{1}{2}kx^2f(x) + E_1f(x),$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}g''(y) = E_2g(y),$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}h''(z) = E_3h(z), \quad E = E_1 + E_2 + E_3.$$

A megoldásokat ismerjük (harmonikus oszcillátor, ill. végtelen mély derékszögű potenciálvölgy):

$$f_{n_1}(x) = H_{n_1}\left(\left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{1/2}x\right)\exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right),$$

$$E_{n_1} = \hbar\omega\left(n_1 + \frac{1}{2}\right) \quad n_1 = 0, 1, 2, \dots, \quad \omega = \left(\frac{k}{m}\right)^{1/2}.$$

$$g_{n_2}(y) = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n_2\pi y}{a}, \quad E_{n_2} = \frac{\hbar^2 n_2^2}{8ma^2}, \quad n_2 = 1, 2, 3, \dots$$

$$h_{n_3}(z) = \frac{2}{a}\sin\frac{n_3\pi z}{b}, \quad E_{n_3} = \frac{\hbar^2 n_3^2}{8mb^2}, \quad n_3 = 1, 2, 3, \dots$$

2. A két részecske tömege m_1 és m_2 . A tömegközéppont mozgását leíró hullámfüggvény:

$$\eta(x) = A \exp\left(\frac{i}{\hbar}p_x X\right), \quad X = \frac{m_1 x_1 + m_2 x_2}{m_1 + m_2}.$$

A relatív mozgást leíró hullámfüggvény:

$$\chi_n(x) = H_n\left(\left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{1/2}x\right)\exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right),$$

ahol $\omega = \left(\frac{k}{m}\right)^{1/2}$, $m = \frac{m_1}{1 + \frac{m_1}{m_2}}$ a redukált tömeg.

Az energiaszintek: $E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)$.

4.23. A sajátérték-egyenlet: $-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(z) + mgz\psi(z) = E\psi(z)$; a határ

feltételek $\psi(0) = \psi(\infty) = 0$. Az $x = \left(\frac{2m^2g}{\hbar^2}\right)^{1/3} \left(z - \frac{E}{mg}\right)$ helyettesítéssel a $\psi''(x) - x\psi(x) = 0$ egyenletre jutunk, amelynek minden x -re véges megoldása

$$\psi(x) = A\Phi(x) = A \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty \cos\left(ux + \frac{u^3}{3}\right) du,$$

ahol $\Phi(x)$ az ún. Airy-függvény, A pedig normálási tényező. Az energiaspektrum a határfeltételből határozható meg:

$$\Phi(z=0) = \Phi\left(x = -\left(\frac{2}{mg^2\hbar^2}\right)^{1/3} E\right) = 0.$$

Az Airy-függvény gyökhelyei $-\alpha_n$ ($n=1, 2, \dots$), $0 < \alpha_1 < \alpha_2 < \dots < \alpha_n < \dots$, $E_n = \left(\frac{mg^2\hbar^2}{2}\right)^{1/3} \alpha_n$. A stacionárius állapotok

hullámfüggvényei: $\psi_n(z) = A_n \Phi\left(\frac{z}{a} \alpha_n\right)$, ahol $a = \left(\frac{\hbar^2}{2m^2g}\right)^{1/3}$

A klasszikus fordulópont $z_n^{kl} = \frac{E_n}{mg} = a \cdot \alpha_n$.

1) A klasszikusan elérhetetlen tartományban, a fordulóponttól elég nagy távolságban $|z - z_n^{kl}| \gg a$, azaz $x \gg 1$ esetén

$$\Phi(x) \sim \frac{1}{2x^{1/4}} \exp\left(-\frac{2}{3}x^{3/2}\right),$$

tehát

$$\psi_n(z) \sim \frac{A_n}{2} \left(\frac{a}{z - z_n^{kl}}\right)^{1/4} \exp\left(-\frac{2}{3} \left(\frac{z - z_n^{kl}}{a}\right)^{3/2}\right),$$

a hullámfüggvény exponenciálisan csökken.

2) A klasszikus tartományban, nem túl közel a fordulóponthoz: $0 < z < z_n^{kl}$ és $|z - z_n^{kl}| \gg a$, azaz $-\alpha_n < x < 0$ és $|x| \gg 1$. Ez csak $\alpha_n \gg 1$ esetén teljesül, tehát magas gerjesztéseknél $n \gg 1$. Ilyenkor

$$\Phi(x) \sim \frac{1}{|x|^{1/4}} \sin\left(\frac{2}{3}|x|^{3/2} + \frac{\pi}{4}\right),$$

tehát

$$\psi_n(z) \approx A_n \left(\frac{a}{|z - z_n^{kl}|}\right)^{1/4} \sin\left[\frac{2}{3} \left(\frac{|z - z_n^{kl}|}{a}\right)^{3/2} + \frac{\pi}{4}\right].$$

Az Airy-függvény gyökhelyeire fennáll, hogy $\frac{2}{3} \alpha_n^{3/2} + \frac{\pi}{4} = (n+1)\pi$ ($n=1, 2, \dots$), innen

$$\alpha_n = \left[\frac{3}{2} \left(n\pi + \frac{3\pi}{4}\right)\right]^{2/3} \quad \text{és}$$

$$E_n = \frac{1}{2} (9\pi^2 mg^2 \hbar^2)^{1/3} \left(n + \frac{3}{4}\right)^{2/3}.$$

A BS-kvantumfeltétel alapján az $E_n = \frac{1}{2} (9\pi^2 mg^2 \hbar^2)^{1/3} n^{2/3}$

végeredményt kaptuk (1.11. feladat). Makroszkopikus tesztekre jellemző $m=1$ g, $E=10^{-2}$ joule adatokkal $n \sim 10^{3.2}$.

A Hamilton-operátor $\hat{H} = \frac{\hat{L}_z}{2\Theta}$, így az energia-sajátérték-egyenlet:

$$-\frac{1}{2\Theta} \hbar^2 \frac{d^2\psi}{d\varphi^2} = E\psi.$$

Ennek megoldása $\psi = A \exp\left(\pm i \sqrt{\frac{2\Theta E}{\hbar^2}} \varphi\right)$, A normálási állandó. Megköveteljük, hogy ψ egyértelmű függvénye legyen φ -nek; ez akkor teljesül, ha $\sqrt{\frac{2\Theta E}{\hbar^2}} = n$, azaz $E_n = \frac{\hbar^2}{2\Theta} n^2$ ($n=0, \pm 1, \dots$). Minden $E_n > 0$ energiaértékhez két, lineárisan független sajátfüggvény tartozik, az energiaszintek kétszeresen elfajultak.

- 4.25. $A = \frac{2}{\sqrt{3\pi}}$. A hullámfüggvényt energia-sajátfüggvények szerint kifejtve:

$$\psi(\varphi, t) = \frac{1}{\sqrt{3\pi}} (1 - \cos 2\varphi e^{-2i\hbar t/\Theta}).$$

- 4.26. Az energia-sajátértékegyenlet: $\frac{\hat{L}^2}{2\Theta} \psi = E\psi$. Mivel az impulzusmomentum négyzetének sajátértékei $\hbar^2 l(l+1)$, $l = 0, 1, 2, \dots$, sajátfüggvényei pedig $Y_l^m(\Theta, \varphi)$, ezért a térbeli rotátor energiaspektruma $E_l = l(l+1) \frac{\hbar^2}{2\Theta}$. Minden energiaszint $(2l+1)$ -szeresen elfajult.

- 4.27. A potenciál, $V(r) = 0$, ha $r < a$, míg $V(r) = \infty$, ha $r > a$. A hullámfüggvény radiális részére érvényes Schrödinger-egyenlet $r < a$ esetén a következő:

$$-\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \frac{l(l+1)}{r^2} R = \frac{2mE}{\hbar^2} R,$$

$r \geq a$ esetén $R = 0$. Vezessük be a $\chi(r) = \sqrt{r} R(r)$ függvényt! Ekkor a

$$\chi'' + \frac{1}{r} \chi' + \left[\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} - \frac{\left(l + \frac{1}{2}\right)^2}{r^2} \right] \chi = 0$$

egyenlet érvényes, amelynek megoldásai a $\chi(r) = c J_{l+1/2}(kr)$ Bessel-függvények, és $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$. A radiális hullámfüggvény

$R(r) = \frac{c}{\sqrt{r}} J_{l+1/2}(kr)$. Az energiát az $r = a$ esetben fennálló határfeltétel szabja meg:

$$J_{l+1/2}(ka) = 0.$$

$l = 0$ esetén

$$J_{1/2}(kr) = \sqrt{\frac{2}{\pi kr}} \sin kr, \quad \text{és} \quad E_{n0} = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{n^2 \pi^2}{a^2}.$$

- 4.28. Alapállapotban $E = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2}$. A 4.10. feladat gondolatmenetéhez hasonlóan

$$p = \frac{1}{4a^2 \pi} \left| \frac{\partial E}{\partial a} \right| = \frac{\hbar^2 \pi}{4ma^5}.$$

- 4.29. A radiális hullámfüggvényre a következő egyenletek érvényesek:

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \frac{2m}{\hbar^2} (E + V_0) R = 0, \quad \text{ha} \quad r < a,$$

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \frac{2m}{\hbar^2} E \cdot R = 0, \quad \text{ha} \quad r > a.$$

A kötött állapotokat vizsgáljuk, $E < 0$ esetén. Az $r = 0$ -ban és $r = \infty$ -ben korlátos megoldás:

$$R(r) = \begin{cases} A \sin \frac{\alpha r}{r}, & \text{ha} \quad r < a, \quad \alpha = \sqrt{\frac{2m(V_0 - |E|)}{\hbar^2}}, \\ B \frac{e^{-\beta r}}{r}, & \text{ha} \quad r > a, \quad \beta = \sqrt{\frac{2m|E|}{\hbar^2}}. \end{cases}$$

R és R' folytonos az $r = a$ pontban, ebből következik, hogy $\alpha \operatorname{ctg} \alpha a = -\beta$. Ezt az $\alpha^2 + \beta^2 = \frac{2mV_0}{\hbar^2}$ egyenlettel együtt grafikusán oldhatjuk meg. Kötött állapot akkor létezik, ha $\frac{2mV_0}{\hbar^2} > \frac{\pi^2}{4a^2}$.

- 4.30. A $V = \frac{1}{2} m \omega^2 r^2 = \frac{1}{2} m \omega^2 (x^2 + y^2 + z^2)$ potenciállal leírt oszcillátor Schrödinger-egyenlete a változók szétválasztásával három lineáris oszcillátort leíró egyenletre vezethető vissza. Ezért a lehetséges energiaértékek:

$$E_n = \hbar \omega \left(n_1 + \frac{1}{2} + n_2 + \frac{1}{2} + n_3 + \frac{1}{2} \right) = \hbar \omega \left(n + \frac{3}{2} \right),$$

a sajátfüggvények:

$$\psi_{n_1 n_2 n_3}(x, y, z) = \left(\frac{m^3 \omega^3}{\hbar^3 \pi^3} \right)^{1/4} \left(\frac{2^{-n}}{n_1! n_2! n_3!} \right)^{1/2} H_{n_1}(\alpha x) H_{n_2}(\alpha y) \times H_{n_3}(\alpha z) \exp\left(-\frac{\alpha^2 r^2}{2}\right),$$

ahol $\alpha = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$. Ezek a sajátfüggvények az impulzusmomentumnak nem sajátfüggvényei. Mivel $\hat{L}^2$ és $\hat{H}$ felcserélhető, közös sajátfüggvények is felírhatók. A potenciál gömbszimmetrikus, ezért a közös sajátfüggvények $R(r)Y_{lm}(\Theta, \varphi)$ alakban írhatók. A radiális hullámfüggvényre vonatkozó egyenlet megoldása során adódik, hogy $n = 2n_r + l$, n_r az ún. radiális kvantumszám (nemnegatív egész szám). Adott l mellett a degeneráltság $(2l+1)$ -szeres, l és n párossága megegyezik, ezért egy adott n -hez tartozó energiaszint $\sum_{0, 2, \dots}^n (2l+1)$ -szeresen, vagy $\sum_{1, 3, \dots}^n (2l+1)$ -szeresen degenerált. Az eredmény mindkét esetben $\frac{(n+1)(n+2)}{2}$.

4.31. A Hamilton-operátor: $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta - \frac{e^2}{r}$.

$$\hat{H}ae^{-\alpha r} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\alpha^2 - \frac{2\alpha}{r} \right) - \frac{e^2}{r} \right] ae^{-\alpha r}.$$

Így $\alpha = \frac{e^2 m}{\hbar^2}$ esetén a függvény energia-sajátfüggvény, a sajátérték: $E = -\frac{e^4 m}{2\hbar^2}$. Ez az alapállapot.

$$\hat{H}bxe^{-\beta r} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\beta^2 - \frac{4\beta}{r} \right) - \frac{e^2}{r} \right] bxe^{-\beta r},$$

így $\beta = \frac{e^2 m}{2\hbar^2}$, és $E = -\frac{e^4 m}{8\hbar^2}$, ez az első gerjesztett állapotok egyike. Ugyanígy az $E = -\frac{e^4 m}{8\hbar^2}$ energiához tartozó sajátfüggvények $b_1 ye^{-\beta r}$ és $b_2 ze^{-\beta r}$ is. Ezek tetszőleges lineáris kombinációja is sajátfüggvény,

$$\hat{L}_z ae^{-\alpha r} = 0, \quad \hat{L}_x bxe^{-\beta r} = 0, \quad \hat{L}_y bxe^{-\beta r} = \frac{\hbar}{i} bze^{-\beta r},$$

$$\hat{L}_z bxe^{-\beta r} = -\frac{\hbar}{i} b_1 ye^{-\beta r}, \quad \hat{L}_z c(x+iy)e^{-\beta r} = \pm c(x \pm iy)e^{-\beta r}.$$

32. Az $n, l = n-1$ állapotot leíró hullámfüggvény radiális része $\psi(r) = Ar^{n-1}e^{-r/na}$. A valószínűsűrsűrűség maximuma a

$$\begin{aligned} \frac{d}{dr}(r^2 \psi^2(r)) &= \frac{d}{dr}(A^2 r^{2n} e^{-2r/na}) = \\ &= 2A^2 r^{2n-1} e^{-2r/na} \left(n - \frac{r}{na} \right) = 0 \end{aligned}$$

egyenletből leolvashatóan az $r = na$ helyen van. A Bohr-modellben ez az n főkvantumszámú pálya sugara.

33. Az „elektronfelhő” által keltett φ_e potenciál a $\rho = -e|\psi|^2$ töltéssűrűséggel felírt Poisson-egyenlet gömbszimmetrikus megoldásaként határozható meg:

$$\frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2}(r\varphi_e) = \frac{4e}{a^3} e^{-2r/a}.$$

Innen

$$\varphi_e = e \left(\frac{1}{a} + \frac{1}{r} \right) e^{-2r/a} - \frac{e}{r}.$$

Az integrációs állandókat úgy választottuk, hogy $\varphi_e(\infty) = 0$, teljesüljön, és $\varphi_e(0)$ véges legyen. Ehhez a mag potenciálját hozzáadva azt kapjuk, hogy

$$\varphi = e \left(\frac{1}{a} + \frac{1}{r} \right) e^{-2r/a}.$$

Ha $r \ll a$, akkor $\varphi \approx \frac{e}{r}$ a mag potenciálja, ha $r \gg a$, akkor

$\varphi \sim \frac{e}{a} e^{-2r/a}$, a magot az elektron leárnyékolja.

$$4.34. \quad \langle r^2 \rangle = \frac{a^2}{2} [5n^2 + 1 - 3l(l+1)] n^2,$$

$$\langle r \rangle = \frac{a}{2} [3n^2 - l(l+1)],$$

$$\langle r^{-1} \rangle = \frac{1}{an^2},$$

$$\langle r^{-2} \rangle = \frac{2}{a^2 n^3 (2l+1)},$$

$$\langle r^{-3} \rangle = \left[a^3 n^3 l \left(l + \frac{1}{2} \right) (l+1) \right]^{-1}.$$

4.35. A mozgó töltés által keltett mágneses télerősség:

$$\mathbf{B} = -\frac{e}{\mu c} \frac{1}{r^3} (\mathbf{r} \times \mathbf{p}) = -\frac{e}{\mu c} \frac{1}{r^3} \mathbf{L},$$

μ az elektron tömege. Egy ψ_{nlm} állapotban

$$\langle \mathbf{B} \rangle = -\frac{e}{\mu c} \int \psi_{nlm}^* \hat{\mathbf{L}} \psi_{nlm} \frac{1}{r^3} dV.$$

Látható, hogy $\langle B_x \rangle = \langle B_y \rangle = 0$,

$$\langle B_z \rangle = -\frac{me\hbar}{\mu c} \left(\frac{\mu e^2}{\hbar^2} \right)^3 \frac{1}{n^3 l \left(l + \frac{1}{2} \right) (l+1)}.$$

4.36. Ha a potenciális energia V -ről $(V + \Delta V)$ -re változik (ΔV állandó), akkor a

$$\psi_n(x) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_n t\right)$$

hullámfüggvény a

$$\psi_n(x) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} (E_n + \Delta V) t\right)$$

függvényre módosul.

4.37. A $\psi(t) = \hat{S}(t)\psi(0)$ definícióból $\hat{S}(0) = 1$. t kifejezését az $i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H}\psi$ Schrödinger-egyenletbe helyettesítve azt kapjuk, hogy $i\hbar \frac{d\hat{S}}{dt} \psi(0) = \hat{H}\hat{S}\psi(0)$, s mivel $\psi(0)$ tetszőleges, ezért $i\hbar \frac{d\hat{S}}{dt} = \hat{H}\hat{S}$. Ennek komplex konjugáltja $-i\hbar \frac{d\hat{S}^*}{dt} = \hat{S}^* \hat{H}$. Az előző egyenletet balról $\hat{S}^*$ -gal, utóbbit jobbról $\hat{S}$ -sel szorozva és összeadva azt kapjuk, hogy

$$\hat{S}^* \frac{d\hat{S}}{dt} + \frac{d\hat{S}^*}{dt} \hat{S} = \frac{d}{dt} (\hat{S}^* \hat{S}) = 0.$$

Az $\hat{S}(0) = 1$ feltétellel ez azt jelenti, hogy $\hat{S}^* \hat{S} = 1$, azaz $\hat{S}$ unitér.

Az $\exp\left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t\right)$ operátort sorával értelmezve látható, hogy kielégíti az egyenletet, ha $\hat{H}$ időfüggetlen.

4.38. p_0 az impulzus várható értéke.

4.39. $[\hat{H}, \hat{x}] = -i\hbar \frac{\hat{p}}{m}$. Az impulzus várható értéke stacionárius állapotban:

$$\begin{aligned} (\psi, \hat{p}\psi) &= \left(\psi, i\frac{m}{\hbar} [\hat{H}, \hat{x}]\psi \right) = i\frac{m}{\hbar} [(\psi, \hat{H}\hat{x}\psi) - (\psi, \hat{x}\hat{H}\psi)] = \\ &= i\frac{m}{\hbar} [(\hat{H}\psi, \hat{x}\psi) - (\psi, \hat{x}\hat{H}\psi)] = i\frac{m}{\hbar} E [(\psi, \hat{x}\psi) - (\psi, \hat{x}\psi)] = 0. \end{aligned}$$

4.40. Mivel $\dot{x} = \frac{p_x}{m}$, így $\hat{x} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{x}]$ és $[\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar$, tehát $[\hat{x}, [\hat{H}, \hat{x}]] = \frac{\hbar^2}{m}$. A várható érték a ψ_0 állapotban:

$$\langle \psi_0 | 2\hat{x}\hat{H}\hat{x} - \hat{x}^2\hat{H} - \hat{H}\hat{x}^2 | \psi_0 \rangle = \frac{\hbar^2}{m}.$$

Felhasználjuk, hogy ψ_n teljes rendszer:

$$\begin{aligned} \langle \psi_0 | \hat{x}\hat{H}\hat{x} | \psi_0 \rangle &= \sum_n \langle \psi_0 | \hat{x} | \psi_n \rangle \langle \psi_n | \hat{x} | \psi_0 \rangle E_n = \\ &= \sum_n |x_{n0}|^2 E_n \langle \psi_0 | \hat{H}\hat{x}^2 | \psi_0 \rangle = \langle \psi_0 | \hat{x}^2 \hat{H} | \psi_0 \rangle = \\ &= \sum_n \langle \psi_0 | \hat{x} | \psi_n \rangle \langle \psi_n | \hat{x} | \psi_0 \rangle E_0 = \sum_n |x_{n0}|^2 E_0, \end{aligned}$$

és így

$$\sum_n |x_{n0}|^2 (E_n - E_0) = \frac{\hbar^2}{2m}.$$

4.41. A dipólmomentum operátora $\hat{d}_i = e\hat{x}_i$.

$$(\psi, \hat{d}_i \psi) = \frac{e}{2\hbar^2} (\psi, [\hat{L}^2, \hat{x}_i] \psi) = \frac{e}{2\hbar^2} ((\hat{L}^2 \psi, \hat{x}_i \psi) -$$

$$-(\psi, \hat{x}_i \hat{L}^2 \psi)) = \frac{e}{2} l(l+1) ((\psi, \hat{x}_i \psi) - (\psi, \hat{x}_i \psi)) = 0.$$

Általános gömbszimmetrikus potenciál esetén a diszkrét energiaspektrum E_n , az azonos l -hez, de különböző m -hez tartozó állapotok az energia szerint elfajultak. Az állapotok paritása határozott, $(-1)^l$, az elfajult állapotok paritása azonos. Így a dipólmomentum várható értéke zérus. Térbeli harmonikus oszcillátor esetében adott energiaszinthez azonos párosságú impulzusmomentum-sajátfüggvények tartoznak, tehát a dipólmomentum várható értéke itt is zérus. Coulomb-potenciál-nál ún. véletlen degeneráció lép fel, az azonos n -hez, de különböző l -hez tartozó állapotok energia szerint degeneráltak. Itt lehet zérustól különböző dipólmomentumú energia-sajátállapot, pl. $\psi_{210} \pm \psi_{200}$.

4.42. a) $E = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2$. Ha $\langle p \rangle = \langle x \rangle = 0$, akkor $\langle p^2 \rangle = (\Delta p)^2$, $\langle x^2 \rangle = (\Delta x)^2$, és

$$E_0 = \frac{1}{2m} (\Delta p)^2 + \frac{1}{2} m\omega^2 (\Delta x)^2 \geq$$

$$\geq \omega \sqrt{(\Delta p)^2 (\Delta x)^2} \geq \frac{1}{2} \hbar \omega.$$

b) $E = \frac{p^2}{2m} - \frac{e^2}{r}$. A mag környezetében r_0 mértékben elmosódott elektron impulzusának átlagos eltérése zérustól $\Delta p \sim \frac{\hbar}{r_0}$. $E(r_0) = \frac{\hbar^2}{2mr_0^2} - \frac{e^2}{r_0}$. $E(r_0)$ minimális, ha $r_0 = \frac{\hbar}{me^2}$, ekkor $E = -\frac{me^4}{2\hbar^2}$.

c) $E = \frac{p^2}{2m}$. A részecske lokalizáltsága, $\Delta x \leq a$, a potenciál-völgy szélessége, így $\Delta p \geq \frac{\hbar}{2\Delta x} \geq \frac{\hbar}{2a}$, $E \geq \frac{\hbar^2}{8ma^2}$.

3. Legyen ψ tetszőleges, normált hullámfüggvény.

$$\frac{d}{dt} (\psi, \hat{A} \psi) = \left(\frac{\partial \psi}{\partial t}, \hat{A} \psi \right) + \left(\psi, \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \psi \right) + \left(\psi, \hat{A} \frac{\partial \psi}{\partial t} \right).$$

A Schrödinger-egyenlet szerint $\frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} \hat{H} \psi$, ezt behelyettesítve, közvetlenül a bizonyítandó egyenlőség adódik.

4. $\mathbf{r}$ és $\mathbf{p}$ az időtől explicit módon nem függenek, ezért csak a $\hat{H}$ -val való kommutátorokat kell kiszámítanunk. Ehhez felhasználjuk a 2.18. feladatban megismert összefüggést:

$$[\hat{A}(\mathbf{r}), \hat{\mathbf{p}}] = i\hbar \frac{d\hat{A}}{d\mathbf{r}}.$$

$$\text{a) } [\hat{H}, \hat{\mathbf{r}}] = \left[\frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m}, \hat{\mathbf{r}} \right] = -i\hbar \frac{\hat{\mathbf{p}}}{m}; \quad \frac{d}{dt} \langle \hat{\mathbf{r}} \rangle = \frac{\hat{\mathbf{p}}}{m}.$$

$$[\hat{H}, \hat{\mathbf{p}}] = [\hat{V}(\mathbf{r}), \hat{\mathbf{p}}] = i\hbar \frac{d\hat{V}(\mathbf{r})}{d\mathbf{r}}, \quad \frac{d}{dt} \langle \hat{\mathbf{p}} \rangle = -\frac{d\hat{V}(\mathbf{r})}{d\mathbf{r}}.$$

b) (mozgás elektromágneses térben)

$$[\hat{H}, \hat{\mathbf{r}}] = \left[\frac{\left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \right)^2}{2m}, \hat{\mathbf{r}} \right] = -\frac{i\hbar}{m} \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \right),$$

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{\mathbf{r}} \rangle = \frac{1}{m} \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \hat{\mathbf{A}}(\mathbf{r}, t) \right).$$

$$[\hat{H}, \hat{\mathbf{p}}] = i\hbar \frac{\partial \hat{H}}{\partial \mathbf{r}} = i\hbar \left\{ -\frac{e}{2mc} \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \hat{\mathbf{A}}(\mathbf{r}, t) \right) \frac{\partial \hat{\mathbf{A}}}{\partial \mathbf{r}} + e \frac{\partial \hat{\phi}}{\partial \mathbf{r}} \right\},$$

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{\mathbf{p}} \rangle = \frac{e}{2mc} \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \hat{\mathbf{A}}(\mathbf{r}, t) \right) \frac{\partial \hat{\mathbf{A}}}{\partial \mathbf{r}} - e \frac{\partial \hat{\phi}}{\partial \mathbf{r}}.$$

Ezek éppen a klasszikus összefüggések kvantummechanikai megfelelői.

4.45. Azok a megmaradó mennyiségek, amelyeknek operátorai felcserélhetők a Hamilton-operátorral, és az időtől explicit módon nem függnének.

- $E, \mathbf{p}, \mathbf{L}, L^2$;
- E, p_x, p_y, L_z ;
- E, L_x, L_y, L_z, L^2 ;
- E, p_z, L_z ;
- p_x, p_y, L_z .

4.46. A Hamilton-operátor:

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left(\hat{p}_x + \frac{e}{c} B \hat{y} \right)^2 + \frac{\hat{p}_y^2}{2m} + \frac{\hat{p}_z^2}{2m}.$$

A felcserélési törvények kiszámításához felhasználjuk az

$$[\hat{A}(\mathbf{r}), \hat{\mathbf{p}}] = i\hbar \frac{\partial \hat{A}(\mathbf{r})}{\partial \mathbf{r}}, [\hat{A}(\mathbf{p}), \hat{\mathbf{r}}] = -i\hbar \frac{\partial \hat{A}(\mathbf{p})}{\partial \mathbf{p}}$$

összefüggéseket. Legyen $\omega = \frac{eB}{mc}$.

$$[\hat{H}, \hat{x}_0] = [\hat{H}, \hat{x}] + \frac{1}{m\omega} [\hat{H}, \hat{p}_y] = -i\hbar \frac{\partial \hat{H}}{\partial p_x} + \frac{i\hbar}{m\omega} \frac{\partial \hat{H}}{\partial y} = 0.$$

$$[\hat{H}, \hat{y}_0] = -\frac{1}{m\omega} [\hat{H}, \hat{p}_x] = 0. \quad x_0, y_0 \text{ tehát valóban mozgásállandó.}$$

$[\hat{x}_0, \hat{y}_0] = -\frac{i\hbar}{m\omega}$, tehát nem mérhetők egyszerre pontosan.

4.47. Legyen pl. Schrödinger-képben $[\hat{A}, \hat{B}] = i\hat{C}$. Ekkor Heisenberg-képben $\hat{A}_H = \hat{U}^\dagger \hat{A} \hat{U}$, $\hat{B}_H = \hat{U}^\dagger \hat{B} \hat{U}$ és $[\hat{A}_H, \hat{B}_H] = \hat{U}^\dagger [\hat{A}, \hat{B}] \hat{U} = i\hat{C}_H$, mivel az $\hat{U}$ operátor unitér.

4.48. A Hamilton-operátor független az időtől, ezért az időfejllesztő-operátor $\hat{U}(t, t_0) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t-t_0)\right)$, és $t_0=0$ választással $\hat{x}_H = \exp\left(\frac{i\hat{H}t}{\hbar}\right) \hat{x} \exp\left(-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}\right)$.

$$[\hat{H}, \hat{x}] = -\frac{\hbar^2}{m} \frac{\partial}{\partial x} = -\hbar \frac{ip}{m}, \quad [\hat{H}, [\hat{H}, x]] = 0,$$

ezért a 2.20. feladat eredményét felhasználva azt kapjuk, hogy

$$\hat{x}_H = \hat{x} + \frac{\hat{p}}{m} t.$$

9. $\hat{x}$ és $\hat{p}$ nem függ az időtől explicit módon, ezért

$$\frac{d\hat{x}_H}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}_H, \hat{x}_H] = \frac{i}{\hbar} \hat{U}^\dagger(t) [\hat{H}, \hat{x}] \hat{U}(t) \quad \text{és}$$

$$\frac{d\hat{p}_H}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}_H, \hat{p}_H] = \frac{i}{\hbar} \hat{U}^\dagger(t) [\hat{H}, \hat{p}] \hat{U}(t).$$

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 \hat{x}^2 = \frac{\hat{p}_H^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 \hat{x}_H^2, \quad \text{így}$$

$$\frac{d\hat{x}_H}{dt} = \frac{\hat{p}_H}{m}, \quad \frac{d\hat{p}_H}{dt} = -m\omega^2 \hat{x}_H.$$

Az egyenletrendszer megoldása az $\hat{x}_H(0) = \hat{x}$, $\hat{p}_H(0) = \hat{p}$ kezdeti feltételekkel:

$$\hat{x}_H(t) = \hat{x} \cos \omega t + \frac{\hat{p}}{m\omega} \sin \omega t,$$

$$\hat{p}_H(t) = \hat{p} \cos \omega t - m\omega \hat{x} \sin \omega t.$$

$$4.50. [\hat{p}_H(t_1), \hat{x}_H(t_2)] = -i\hbar \cos(\omega t_1 - \omega t_2),$$

$$[\hat{p}_H(t_1), \hat{p}_H(t_2)] = -im\omega\hbar \sin(\omega t_1 - \omega t_2),$$

$$[\hat{x}_H(t_1), \hat{x}_H(t_2)] = -\frac{i\hbar}{m\omega} \sin(\omega t_1 - \omega t_2).$$

4.51. $\Psi(x, 0) = \sum_n a_n \psi_n(x)$, ahol $a_n = \int \psi_n^*(x) \Psi(x, 0) dx$ és $\psi_n(x)$ a Hamilton-operátor sajátfüggvényeit jelöli.

$$\Psi(x, t) = \sum_n a_n \psi_n(x) e^{-iE_n t/\hbar} = \int G(\xi, x, t) \Psi(\xi, 0) d\xi,$$

ahol

$$G(\xi, x, t) = \sum_n \psi_n^*(\xi) \psi_n(x) e^{-iE_n t/\hbar}.$$

Szabad mozgásnál a sajátfüggvények

$$\psi_p(x) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}} e^{(i/\hbar)px},$$

ezért

$$G(\xi, x, t) = \int \frac{1}{2\pi\hbar} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \left[p(x - \xi) - \frac{p^2}{2m} t \right] \right\} dp =$$

$$= \left(\frac{m}{2\pi i \hbar t} \right)^{1/2} \exp \left(\frac{im}{2\hbar t} (x - \xi)^2 \right),$$

$$\Psi(x, t) = \int \left(\frac{m}{2\pi i \hbar t} \right)^{1/2} \frac{1}{(2\pi a^2)^{1/4}} \times$$

$$\times \exp \left\{ -\frac{\xi^2}{4a^2} + \frac{im}{2\hbar t} (x - \xi)^2 \right\} d\xi =$$

$$= \frac{1}{(2\pi a^2)^{1/4} \left(1 + \frac{\hbar^2 t^2}{4m^2 a^4} \right)^{1/4}} \times$$

$$\times \exp \left\{ -\frac{x^2}{4a^2 \left(1 + \frac{\hbar^2 t^2}{4m^2 a^4} \right)} \left(1 - \frac{i\hbar t}{2ma^2} \right) \right\}.$$

Vö. a 3.15. feladattal.

32. A Hamilton-operátor impulzusrepresentációban:

$$\hat{H} = \frac{p^2}{2m} - \frac{m\omega^2 \hbar^2}{2} \frac{\partial^2}{\partial p^2},$$

a Schrödinger-egyenlet:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Phi(p, t) = \left(\frac{p^2}{2m} - \frac{m\omega^2 \hbar^2}{2} \frac{\partial^2}{\partial p^2} \right) \Phi(p, t).$$

A megoldásokat $\Phi(p, t) = \varphi(p) e^{-iEt/\hbar}$ alakban keresve, $\varphi(p)$ -re a

$$\frac{d^2 \varphi}{dp^2} + \frac{2}{m\omega^2 \hbar^2} \left(E - \frac{p^2}{2m} \right) \varphi = 0$$

egyenletet kapjuk.

A koordináta-representációbeli megoldás mintájára az adódik, hogy az $E_n = \omega\hbar \left(n + \frac{1}{2} \right)$ sajátértékekhez hozzárendelt saját-függvények:

$$\varphi_n(p) = (2^n n! \pi^{1/2} p_0)^{-1/2} H_n \left(\frac{p}{p_0} \right) e^{-1/2 \left(\frac{p}{p_0} \right)^2}, \quad n = 0, 1, 2, \dots,$$

ahol $p_0 = (m\omega\hbar)^{1/2}$, és H_n Hermite-polinom.

33. A Hamilton-operátor önmagában teljes operátorrendszert alkot, a bázisvektorokat jelölje $|n\rangle$. A koordinátaoperátor mátrixelemei:

$$\langle n | \hat{x} | m \rangle = \int \langle n | \hat{x} | x' \rangle \langle x' | m \rangle dx' =$$

$$= \int \psi_n^*(x') x' \psi_m(x') dx' =$$

$$= x_0^2 N_n N_m \int_{-\infty}^{\infty} \xi H_n(\xi) H_m(\xi) e^{-\xi^2} d\xi,$$

ahol $x_0 = \left(\frac{\hbar}{m\omega} \right)^{1/2}$, $N_n = (2^n n! \sqrt{\pi} x_0)^{-1/2}$, H_n Hermite-polinom.

Az Hermite-polinomok alkotófüggvénye

$$G(s) = \exp(-s^2 - 2sz) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{S^n}{n!} H_n(z),$$

amelyre fennáll, hogy $\left. \frac{d^n}{ds^n} G(s) \right|_{s=0} = H_n(z)$. Az integrál ennek segítségével számítható ki:

$$\begin{aligned} & \int_{-\infty}^{\infty} e^{-s^2 + 2s\xi} e^{-t^2 + 2t\xi} \xi e^{-\xi^2} d\xi = \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{s^n t^m}{n! m!} \int_{-\infty}^{\infty} \xi H_n(\xi) H_m(\xi) e^{-\xi^2} d\xi = \\ &= \sqrt{\pi} (s+t) e^{2st} = \sqrt{\pi} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{2^k (s^{k+1} t^k + s^k t^{k+1})}{k!}. \end{aligned}$$

Ebből látható, hogy

$$\langle n | \hat{x} | m \rangle = \begin{cases} x_0 \left(\frac{n+1}{2} \right)^{1/2}, & \text{ha } m = n+1, \\ x_0 \left(\frac{n}{2} \right)^{1/2}, & \text{ha } m = n-1, \end{cases}$$

másképpen

$$(\hat{x}) = x_0 \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{\frac{1}{2}} & 0 & 0 & \dots \\ \sqrt{\frac{1}{2}} & 0 & \sqrt{\frac{2}{2}} & 0 & \dots \\ 0 & \sqrt{\frac{2}{2}} & 0 & \sqrt{\frac{3}{2}} & \dots \\ & & & \ddots & \ddots \end{pmatrix}.$$

4.54. Most az

$$\langle n | \hat{p} | m \rangle = -i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n(x) \frac{d\psi_m(x)}{dx} dx$$

integrált kell kiszámítanunk. Az előző feladat megoldásához hasonlóan, számítással azt kapjuk, hogy $\langle n | \hat{p} | m \rangle = i\hbar x_0^{-2} (n-m) \langle n | \hat{x} | m \rangle$, azaz

$$\hat{p} = \frac{i\hbar}{x_0} \begin{pmatrix} 0 & -\sqrt{\frac{1}{2}} & 0 & 0 & \dots \\ \sqrt{\frac{1}{2}} & 0 & -\sqrt{\frac{2}{2}} & 0 & \dots \\ 0 & \sqrt{\frac{2}{2}} & 0 & -\sqrt{\frac{3}{2}} & \dots \\ & & & \ddots & \ddots \end{pmatrix}.$$

Az eredmény másképpen is megkapható:

$$\frac{d\hat{x}_H}{dt} = \frac{\hat{p}_H}{\mu}, \quad \text{így} \quad \frac{d}{dt} \langle n | \hat{x}_H | m \rangle = \frac{1}{\mu} \langle n | \hat{p}_H | m \rangle.$$

Figyelembe véve, hogy $\langle n | \hat{x}_H | m \rangle = \langle n | \hat{x} | m \rangle \exp(i\omega_{nm}t)$, és $\langle n | \hat{p}_H | m \rangle = \langle n | \hat{p} | m \rangle \exp(i\omega_{nm}t)$, ahol $\omega_{nm} = \frac{E_n - E_m}{\hbar} = \omega(n-m)$, az eredmény közvetlenül adódik.

4.55. Az energia-sajátfüggvények:

$$\psi_n(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{1}{a}} \cos \frac{n\pi}{2a} x, & \text{ha } n \text{ páros,} \\ \sqrt{\frac{1}{a}} \sin \frac{n\pi}{2a} x, & \text{ha } n \text{ páratlan.} \end{cases} \quad (|x| < a)$$

A végeredmény egyszerű integrálás útján adódik. $x_{nm} = 0$, ha n és m párossága megegyezik,

$$x_{nm} = \frac{4a}{\pi^2} \left[\frac{1}{(n+m)^2} \sin \frac{(n+m)\pi}{2} + \frac{1}{(n-m)^2} \sin \frac{(n-m)\pi}{2} \right],$$

ha n páros, m páratlan,

$$x_{nm} = \frac{4a}{\pi^2} \left[\frac{1}{(n+m)^2} \sin \frac{(n+m)\pi}{2} - \frac{1}{(n-m)^2} \sin \frac{(n-m)\pi}{2} \right],$$

ha n páratlan, m páros.

Az impulzusmátrix az előző feladatban használt módszerrel gyorsan felírható:

$$\langle n | \hat{p}_H | m \rangle = \mu \frac{d}{dt} \langle n | \hat{x}_H | m \rangle = \mu \frac{i}{\hbar} (E_n - E_m) \langle n | \hat{x}_H | m \rangle,$$

azaz $p_{nm} = \mu \frac{i}{\hbar} (E_n - E_m) x_{nm}$.

4.56. $\langle n | \hat{x}_H | m \rangle = \langle n | \hat{x} | m \rangle \exp\left(\frac{i}{\hbar} (E_n - E_m) t\right)$, tehát

$$\frac{d}{dt} \langle n | \hat{x}_H | m \rangle = \frac{i}{\hbar} (E_n - E_m) \langle n | \hat{x}_H | m \rangle.$$

Ezt felhasználva

$$\begin{aligned} \sum_n (E_n - E_m) |\langle n | \hat{x} | m \rangle|^2 &= \sum_n (E_n - E_m) |\langle n | \hat{x}_H | m \rangle|^2 = \\ &= \sum_n (E_n - E_m) \langle n | \hat{x}_H | m \rangle \langle m | \hat{x}_H | n \rangle = \\ &= \frac{1}{2} \frac{\hbar}{i} \sum_n \left[\langle m | \hat{x}_H | n \rangle \frac{d}{dt} \langle n | \hat{x}_H | m \rangle - \right. \\ &\quad \left. - \langle n | \hat{x}_H | m \rangle \frac{d}{dt} \langle m | \hat{x}_H | n \rangle \right] = \\ &= \frac{1}{2} \frac{\hbar}{i} \langle m | \hat{x}_H \hat{x}_H - \hat{x}_H \hat{x}_H | m \rangle = \frac{1}{2} \frac{\hbar}{i} \langle m | \hat{x} \hat{x} - \hat{x} \hat{x} | m \rangle = \frac{\hbar^2}{2\mu}. \end{aligned}$$

5. Impulzusmomentum

5.1. a) Mivel a három operátor nem cserélhető fel egymással, a közös sajátfüggvény mindhárom zérus sajátértékéhez kell tartozzék. Ilyen pl. egy tetszőleges $f(r)$ gömbszimmetrikus függvény.

b) $\hat{L}^2 Y_l^m(\vartheta, \varphi) = l(l+1)\hbar^2 Y_l^m(\vartheta, \varphi)$,
 $\hat{L}_z Y_l^m(\vartheta, \varphi) = m\hbar Y_l^m(\vartheta, \varphi)$, így az $Y_l^m(\vartheta, \varphi) + Y_l^{m'}(\vartheta, \varphi)$ függvény sajátfüggvénye $\hat{L}^2$ -nek, de nem sajátfüggvénye $\hat{L}_z$ -nek, ha $m \neq m'$.

c) $\sin \vartheta (e^{i\varphi} + e^{-i\varphi}) \sim \frac{x}{r}$ az előzőek alapján $\hat{L}^2$ -nek sajátfüggvénye, de $\hat{L}_z$ -nek nem. Egyszerű differenciálással belátható, hogy $\hat{L}_x$ -nek is sajátfüggvénye.

4.2. $Y_1^0 \sim \cos \vartheta = \frac{z}{r}$ az $\hat{L}_z$ -nek a zérus sajátértékhez tartozó sajátfüggvénye, melyre $l=1$. Így az $\frac{x}{r}$ függvényre $l=1$ és $\hat{L}_x$ sajátértéke zérus.

4.3. Célszerű az operátorok derékszögű koordinátákkal kifejezett alakjait használni; az eredmények egyszerű differenciálással adódnak. Polárkoordinátákra áttérve megmutatható, hogy az operátorok r -től függetlenek, ezért gömbszimmetrikus függvényekkel való szorzás nem változtatja meg az összefüggéseket.

4.4. $2(x^2 - y^2)f(x^2 + y^2 + z^2) = r^2 f(r^2) \sin^2 \vartheta (e^{i2\varphi} + e^{-i2\varphi})$, így $L_z \frac{1}{2}$ valószínűséggel veszi fel a ± 2 értékeket.

4.5. $\langle L_x \rangle = \langle \psi, \hat{L}_x \psi \rangle \sim \langle \psi, [\hat{L}_y, \hat{L}_z] \psi \rangle =$
 $= \langle \psi, \hat{L}_y (\hat{L}_z \psi) \rangle - \langle (\psi, \hat{L}_z) \hat{L}_y \psi \rangle = 0.$

4.6. Legyenek a z' irányba mutató egységvektor iránycosinuszai $\cos \alpha, \cos \beta, \cos \vartheta$.

$$\begin{aligned} \langle L_{z'} \rangle &= \langle L_x \rangle \cos \alpha + \langle L_y \rangle \cos \beta + \langle L_z \rangle \cos \vartheta = \\ &= m \cdot \cos \vartheta. \end{aligned}$$

4.7. Mivel az x és y irányok egyenrangúak, azaz $\langle L_x^2 \rangle = \langle L_y^2 \rangle$, ezért

$$\langle L_x^2 \rangle = \frac{\langle L^2 \rangle - \langle L_z^2 \rangle}{2} = \frac{l(l+1) - m^2}{2} \hbar^2.$$

$$5.8. \hat{S}_x = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & \alpha \\ \alpha^+ & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{S}_y = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i\alpha \\ i\alpha^+ & 0 \end{pmatrix},$$

$$\hat{S}_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad |\alpha|^2 = 1.$$

Felhasználtuk, hogy $\hat{S}_x, \hat{S}_y, \hat{S}_z$ hermitikus operátorok.

$$5.9. [\hat{j}_3, \hat{j}_+] = \hat{j}_+, [\hat{j}_3, \hat{j}_-] = -\hat{j}_-, [\hat{j}_+, \hat{j}_-] = 2\hat{j}_3,$$

$$[\hat{j}^2, \hat{j}_3] = [\hat{j}^2, \hat{j}_+] = [\hat{j}^2, \hat{j}_-] = 0.$$

5.10. A felcserélési relációból adódik, hogy

$$\hat{j}_3 \hat{j}_+ |j, m\rangle = (m+1) \hat{j}_+ |j, m\rangle,$$

$$\hat{j}_3 \hat{j}_- |j, m\rangle = (m-1) \hat{j}_- |j, m\rangle, \quad \text{és}$$

$$\hat{j}^2 = \hat{j}_+ \hat{j}_- + \hat{j}_3^2 - \hat{j}_3.$$

Feltéve, hogy az állapotok normáltak, azt kapjuk, hogy

$$\hat{j}_+ |j, m\rangle = \sqrt{j(j+1) - m(m+1)} |j, m+1\rangle,$$

$$\hat{j}_- |j, m\rangle = \sqrt{j(j+1) - m(m-1)} |j, m-1\rangle.$$

5.11. A felcserélési relációkból következik, hogy $\hat{A}_x$ és $\hat{A}_y$ zérustól különböző mátrixelemei a következők:

$$\langle lm | \hat{A}_x | lm-1 \rangle = i \langle lm | \hat{A}_y | lm-1 \rangle,$$

$$\langle lm | \hat{A}_x | lm+1 \rangle = -i \langle lm | \hat{A}_y | lm+1 \rangle.$$

Az $[\hat{L}_+, \hat{A}_+] = [\hat{L}_-, \hat{A}_-] = 0$ felcserélési szabályokat felhasználva belátható, hogy

$$\langle lm | \hat{A}_+ | lm-1 \rangle = \langle lm-1 | \hat{A}_- | lm \rangle = a \sqrt{l(l+1) - m(m-1)},$$

ahol az a tényező m -től független. Az $[\hat{A}_+, \hat{L}_-] = [\hat{L}_+, \hat{A}_-] = 2\hat{A}_z$ felcseréléséből következik, hogy $\hat{A}_z$ -nek csak a diagonális mátrixelemei zérustól különbözőek:

$\langle lm | \hat{A}_z | lm \rangle = a \cdot m$. Tudjuk, hogy

$$\hat{L}_+ |lm\rangle = \hbar \sqrt{l(l+1) - m(m+1)} |lm+1\rangle,$$

$$\hat{L}_- |lm\rangle = \hbar \sqrt{l(l+1) - m(m-1)} |lm-1\rangle, \quad \text{és}$$

$$\hat{L}_z |lm\rangle = m\hbar |lm\rangle.$$

Mindezekből következnek a feladat állításai.

$$12. \text{ A } \begin{pmatrix} \cos \vartheta & \sin \vartheta e^{-i\varphi} \\ \sin \vartheta e^{i\varphi} & -\cos \vartheta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$$

sajátérték-egyenletet kell megoldani. $\lambda = \pm 1$, a normált sajátvektorok:

$$\lambda_1 = 1, \quad \begin{pmatrix} \cos \frac{\vartheta}{2} \\ \sin \frac{\vartheta}{2} e^{i\varphi} \end{pmatrix},$$

$$\lambda_2 = -1, \quad \begin{pmatrix} -\sin \frac{\vartheta}{2} \\ \cos \frac{\vartheta}{2} e^{i\varphi} \end{pmatrix}.$$

13. A $\begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}$ spinhullámfüggvényt kifejtjük az előző feladatban meghatározott bázisvektorok szerint:

$$\begin{pmatrix} e^{i\alpha} \cos \delta \\ e^{i\beta} \sin \delta \end{pmatrix} = c_1 \begin{pmatrix} \cos \frac{\vartheta}{2} \\ \sin \frac{\vartheta}{2} e^{i\varphi} \end{pmatrix} + c_2 \begin{pmatrix} -\sin \frac{\vartheta}{2} \\ \cos \frac{\vartheta}{2} e^{i\varphi} \end{pmatrix}.$$

$$|c_1|^2 = \left| \cos \frac{\vartheta}{2} \cos \delta e^{-i\alpha} + \sin \frac{\vartheta}{2} \sin \delta e^{i(\varphi-\beta)} \right|^2, \quad \text{ill.}$$

$$|c_2|^2 = \left| -\sin \frac{\vartheta}{2} \cos \delta e^{-i\alpha} + \cos \frac{\vartheta}{2} \sin \delta e^{i(\varphi-\beta)} \right|^2$$

annak valószínűsége, hogy a spin vetülete a ϑ, φ irányba mutató tengelyre $\frac{1}{2}$, ill. $-\frac{1}{2}$.

$$|c_1|^2 = \cos^2 \frac{\vartheta}{2} \cos^2 \delta + \sin^2 \frac{\vartheta}{2} \sin^2 \delta + \frac{1}{2} \sin \vartheta \sin 2\delta \cos (\varphi + \alpha - \beta),$$

$$|c_2|^2 = \sin^2 \frac{\vartheta}{2} \cos^2 \delta + \cos^2 \frac{\vartheta}{2} \sin^2 \delta - \frac{1}{2} \sin \vartheta \sin 2\delta \cos (\varphi + \alpha - \beta),$$

$$|c_1|^2 + |c_2|^2 = 1.$$

5.14. Azok a ϑ, φ polárszögek jelölik ki a keresett tengely irányát, melyekre az előző feladat jelöléseit használva $|c_1|^2 = 1$, $|c_2|^2 = 0$. Ez teljesül, ha $\vartheta = 2\delta$, $\varphi = \beta - \alpha$.

5.15. Használjuk fel az előző feladatok eredményeit!

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \cos \frac{\vartheta}{2} \begin{pmatrix} \cos \frac{\vartheta}{2} \\ \sin \frac{\vartheta}{2} e^{i\varphi} \end{pmatrix} - \sin \frac{\vartheta}{2} \begin{pmatrix} -\sin \frac{\vartheta}{2} \\ \cos \frac{\vartheta}{2} e^{i\varphi} \end{pmatrix}.$$

A megfelelő valószínűségek: $\cos^2 \frac{\vartheta}{2}$, ill. $\sin^2 \frac{\vartheta}{2}$.

5.16. Először a $\hat{J}_z$ operátor sajátfüggvényeit határozzuk meg. A nájtérték-egyenlet mátrixalakban ($\hbar = 1$ egységekben)

$$\begin{pmatrix} -i\frac{\partial}{\partial\varphi} + \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & -i\frac{\partial}{\partial\varphi} - \frac{1}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = m \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix},$$

mert $J_z = L_z + S_z$, és $L_z = -i\frac{\partial}{\partial\varphi}$. Ennek megoldásai:

$$\begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_1(r, \vartheta) \exp \left[i \left(m - \frac{1}{2} \right) \varphi \right] \\ f_2(r, \vartheta) \exp \left[i \left(m + \frac{1}{2} \right) \varphi \right] \end{pmatrix},$$

m félegész. E megoldások közül kell kiválasztanunk azokat, amelyek $\hat{L}^2$ -nek is sajátfüggvényei, tehát

$$\begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} R_1(r) Y_{l, m-1/2}(\vartheta, \varphi) \\ R_2(r) Y_{l, m+1/2}(\vartheta, \varphi) \end{pmatrix},$$

is teljesül, ahol Y gömbfüggvényt jelent. Végül ki kell elégítenie a $\hat{J}^2 \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = j(j+1) \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}$ egyenletet.

$$\hat{J}^2 = \hat{L}^2 + \hat{S}^2 + 2\hat{L}\hat{S};$$

mátrixalakban:

$$\hat{J}^2 = \begin{pmatrix} \hat{L}^2 + \frac{3}{4} + \hat{L}_z & \hat{L}_- \\ \hat{L}_+ & \hat{L}^2 + \frac{3}{4} - \hat{L}_z \end{pmatrix},$$

$$\text{ahol } \hat{L}_{\pm} = \hat{L}_x \pm i\hat{L}_y.$$

Mivel a gömbfüggvényekre fennáll, hogy

$$\hat{L}_+ Y_{lm} = \sqrt{(l-m)(l+m+1)} Y_{l, m+1},$$

$$\hat{L}_- Y_{l, m} = \sqrt{(l+m)(l-m+1)} Y_{l, m-1},$$

ezért R_1 -nek és R_2 -nek az

$$\begin{aligned} \left[l(l+1) - j(j+1) + m + \frac{1}{4} \right] R_1 + \sqrt{\left(l + \frac{1}{2} \right)^2 - m^2} R_2 &= 0, \\ \sqrt{\left(l + \frac{1}{2} \right)^2 - m^2} R_1 + \left[l(l+1) - j(j+1) - m + \frac{1}{4} \right] R_2 &= 0 \end{aligned}$$

homogén egyenletrendszer kell kielégítenie. Ennek akkor van a triviálistól különböző megoldása, ha $j = l \pm \frac{1}{2}$.

5.17. A 11 operátorból legfeljebb három választható úgy ki, hogy páronként felcserélhetőek legyenek.

Három lehetőség van:

- a) L^2, L_i, S_k ;
- b) J^2, L^2, J_i ;
- c) S^2, J^2, J_i .

5.18. $\lambda_1 = \hbar$; $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$, $\lambda_2 = -\hbar$; $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$, $\lambda_3 = 0$; $\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$.

5.19. A
$$\begin{pmatrix} \cos \vartheta & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} \sin \vartheta e^{-i\varphi} \\ 0 & -\cos \vartheta & -\frac{i}{\sqrt{2}} \sin \vartheta e^{i\varphi} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \sin \vartheta e^{i\varphi} & \frac{i}{\sqrt{2}} \sin \vartheta e^{-i\varphi} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix}$$

sajátértékegyenletet kell megoldani.

A normált sajátvektorok:

$\lambda_1 = 1$;
$$\begin{pmatrix} \cos^2 \frac{\vartheta}{2} e^{-i\varphi} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \sin \vartheta \\ \sin^2 \frac{\vartheta}{2} e^{i\varphi} \end{pmatrix},$$

$\lambda_2 = 0$;
$$\begin{pmatrix} -\frac{1}{\sqrt{2}} \sin \vartheta e^{-i\varphi} \\ \cos \vartheta \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \sin \vartheta e^{i\varphi} \end{pmatrix},$$

$\lambda_3 = -1$;
$$\begin{pmatrix} -\sin^2 \frac{\vartheta}{2} e^{-i\varphi} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \sin \vartheta \\ -\cos^2 \frac{\vartheta}{2} e^{i\varphi} \end{pmatrix}.$$

A mágneses tér legyen z irányú, és ϑ, φ jelölje ki azt a tengelyt, amelynek irányába eső teljes impulzusmomentum-komponens meghatározott érték. A spinhullámfüggvények az 5.19. feladat megoldásában találhatók. A keresett intenzitások:

$m=1$: $w(1) = \cos^4 \frac{\vartheta}{2},$

$w(0) = \frac{1}{2} \sin^2 \vartheta,$

$w(-1) = \sin^4 \frac{\vartheta}{2};$

$m=0$: $w(1) = \frac{1}{2} \sin^2 \vartheta,$

$w(0) = \cos^2 \vartheta,$

$w(-1) = \frac{1}{2} \sin^2 \vartheta;$

$m=-1$: $w(1) = \sin^4 \frac{\vartheta}{2},$

$w(0) = \frac{1}{2} \sin^2 \vartheta,$

$w(-1) = \cos^4 \frac{\vartheta}{2}.$

5.21. a) A legáltalánosabb spinhullámfüggvény $\begin{pmatrix} e^{i\alpha} \cos \delta \sin \varepsilon \\ e^{i\beta} \sin \delta \sin \varepsilon \\ e^{i\gamma} \cos \varepsilon \end{pmatrix}$

alakú.

b) Az $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$ állapotban a spin z tengely irányú.

c) Tetszőleges állapot spinje nem mutat meghatározott irányba, a ϑ, φ polárszögekre túlhatározott egyenletrendszer adódik.

5.22. α és β jelölje a $\frac{\hbar}{2}$, ill. a $-\frac{\hbar}{2}$ értékekhez tartozó egyrészecske S_z -sajátfüggvényeket!

	S	S_z	$\hat{S}_1 \hat{S}_2$ sajátértéke
$\psi_{1,1} = \alpha(1)\alpha(2)$	$\hbar$	$\hbar$	$\hbar^2/4$
$\psi_{1,0} = \frac{1}{\sqrt{2}}[\alpha(1)\beta(2) + \beta(1)\alpha(2)]$	$\hbar$	0	$\hbar^2/4$
$\psi_{1,-1} = \beta(1)\beta(2)$	$\hbar$	$-\hbar$	$\hbar^2/4$
$\psi_{0,0} = \frac{1}{\sqrt{2}}[\alpha(1)\beta(2) - \beta(1)\alpha(2)]$	0	0	$-\frac{3}{4}\hbar^2$

5.23. A teljes spin és annak z komponense közös sajátfüggvényei V -nek is sajátfüggvényei. Ez következik pl. abból, hogy

$$V = \frac{A}{r^3} \left[\frac{(\hat{\mathbf{g}}_1 + \hat{\mathbf{g}}_2)^2}{2} - \frac{3((\hat{\mathbf{g}}_1 + \hat{\mathbf{g}}_2) \cdot \mathbf{r})^2}{2r^2} \right].$$

A sajátfüggvényeknek megfelelő kölcsönhatási energiák:

$$V_{1,1} = V_{1,-1} = -\frac{2A}{d^3}; \quad V_{1,0} = \frac{4A}{d^3}; \quad V_{0,0} = 0.$$

5.24. A szinglett állapot energiaeltolódása $-3A$, a tripletté A .

5.25. $t=0$ -kor a hullámfüggvény

$$\alpha(1)\beta(2) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{1,0} + \psi_{0,0}).$$

$$\psi(t) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\psi_{1,0} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \frac{4At}{d^3}\right) + \psi_{0,0} \right].$$

Majd $t = \frac{\hbar d^3 \pi}{4A}$ idő múlva

$$\psi = -\frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_{1,0} - \psi_{0,0}] = -\beta(1)\alpha(2),$$

tehát a spinek megfordultak.

5.26. A mozgásegyenlet:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} S_1 \\ S_2 \end{pmatrix} = \frac{e\hbar}{2mc} \mathcal{H} \sigma_z \begin{pmatrix} S_1 \\ S_2 \end{pmatrix},$$

a z tengely a mágneses tér irányába mutat. A megoldás:

$$\begin{pmatrix} S_1(t) \\ S_2(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S_1(0) \\ S_2(0) \end{pmatrix} \exp\left(\mp \frac{ie\mathcal{H}}{2mc} t\right).$$

Az adott kezdeti feltételek mellett

$$\langle S_x \rangle = \cos \frac{e\mathcal{H}}{mc} t, \quad \langle S_y \rangle = \sin \frac{e\mathcal{H}}{mc} t, \quad \langle S_z \rangle = 0.$$

A spin az xy -síkban forog.

5.27. A Pauli-egyenlet:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = \hat{H}_0 \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} - \mu_0 \hbar (\hat{\mathbf{g}} \cdot \mathcal{H}) \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix},$$

ahol μ_0 a részecske mágneses momentuma. A hullámfüggvényt

$$\begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = \varphi(\mathbf{r}, t) \begin{pmatrix} S_1(t) \\ S_2(t) \end{pmatrix}$$

alakban írjuk, ekkor

$$i\hbar \frac{\partial \varphi}{\partial t} = \hat{H}_0 \varphi, \quad \text{és} \quad i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} S_1 \\ S_2 \end{pmatrix} = -\mu_0 \hbar (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathcal{H}) \begin{pmatrix} S_1 \\ S_2 \end{pmatrix}.$$

5.28. A mozgásegyenletek:

$$i\hbar \frac{\partial S_1}{\partial t} = \frac{e\hbar}{2mc} \mathcal{H}(t) S_1,$$

$$i\hbar \frac{\partial S_2}{\partial t} = -\frac{e\hbar}{2mc} \mathcal{H}(t) S_2.$$

Megoldásuk:

$$S_1 = c_1 \exp \left[-\frac{ie}{2mc} \int_0^t \mathcal{H}(t') dt' \right],$$

$$S_2 = c_2 \exp \left[\frac{ie}{2mc} \int_0^t \mathcal{H}(t') dt' \right].$$

A kezdeti feltételekből

$$c_1 = \exp(-i\alpha) \cos \delta, \quad c_2 = \exp(i\alpha) \sin \delta.$$

$$\vartheta = 2\delta, \quad \varphi = 2 \left[\alpha + \frac{e}{2mc} \int_0^t \mathcal{H}(t') dt' \right]$$

jelölik ki azt az irányt, amely mentén a spin $\frac{1}{2}$.

$$5.29. \quad i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} S_1 \\ S_2 \end{pmatrix} = \frac{e\hbar}{2mc} \begin{pmatrix} H_0 & H'_x - iH'_y \\ H'_x + iH'_y & -H_0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} S_1 \\ S_2 \end{pmatrix}.$$

A csatolt differenciálegyenlet-rendszer megoldása:

$$S_1 = A e^{ip_1 t} + B e^{ip_2 t},$$

$$S_2 = e^{i\omega t} \begin{pmatrix} p_1 + \frac{e}{2mc} H_0 & p_2 + \frac{e}{2mc} H_0 \\ \frac{e}{2mc} H' & \frac{e}{2mc} H' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A e^{ip_1 t} \\ B e^{ip_2 t} \end{pmatrix}.$$

A és B a kezdeti feltételekből meghatározható,

$$p_{1,2} = -\frac{\omega}{2} \pm \sqrt{\frac{\omega^2}{4} - \omega \frac{e}{2mc} H_0 + \left(\frac{e}{2mc} \right)^2 (H_0^2 + H'^2)}.$$

A keresett valószínűség:

$$p(t) = \frac{q^2 \sin^2 \vartheta}{1 - 2q \cos \vartheta + q^2} \sin^2 \left[\frac{t}{2} \omega \sqrt{1 - 2q \cos \vartheta + q^2} \right],$$

$$\text{ahol} \quad q = \frac{e \sqrt{H_0^2 + H'^2}}{mc\omega}, \quad \text{tg } \vartheta = \frac{H'}{H_0}.$$

6. Közelítő módszerek

6.1. A perturbált Hamilton operátor $\begin{pmatrix} E_1 & V \\ V^* & E_2 \end{pmatrix}$. Ennek sajátértékei

$$W_{1,2} = \frac{E_1 + E_2}{2} \pm \frac{((E_1 - E_2)^2 + 4|V|^2)^{1/2}}{2},$$

az energiaszintek tehát eltolódnak. Egy $\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}$ állapot időbeli változása az

$$i\hbar \begin{pmatrix} \dot{c}_1 \\ \dot{c}_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} E_1 & V \\ V^* & E_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}$$

egyenletből határozható meg. Ennek a kezdeti feltételt kielégítő megoldása:

$$\begin{pmatrix} c_1(t) \\ c_2(t) \end{pmatrix} = \frac{1}{W_2 - W_1} \begin{pmatrix} W_2 - E_1 \\ -V^* \end{pmatrix} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} W_1 t\right) + \frac{E_1 - W_1}{(W_2 - W_1)V} \begin{pmatrix} V \\ W_2 - E_1 \end{pmatrix} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} W_2 t\right).$$

A perturbációs számítás első közelítésében az energiaszintek nem változnak, a (normálatlan) energiasajátállapotok a

$$\psi_n = \varphi_n + \sum_{m=1}^2 \frac{V_{mn}}{E_n - E_m} \varphi_m$$

összefüggésből számíthatók ki, ahol $\varphi_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$, $\varphi_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$. Az állapot időbeli fejlődését leíró egyenlet:

$$\begin{pmatrix} c_1(t) \\ c_2(t) \end{pmatrix} = \frac{E_2 - E_1}{(E_2 - E_1)^2 + |V|^2} \begin{pmatrix} E_2 - E_1 \\ -V^* \end{pmatrix} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_1 t\right) + \frac{V^*}{(E_2 - E_1)^2 + |V|^2} \begin{pmatrix} V \\ E_2 - E_1 \end{pmatrix} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_2 t\right).$$

6.2. A koordináta-rendszer z tengelyét a külső elektromos tér irányába fektetve, a perturbáló potenciál $V = -eEr \cos \vartheta$, ahol E az elektromos térerősség nagysága. A hidrogénatom alapállapotában $w = \int \psi_{100}^* V \psi_{200} d^3r = 0$. A második energiaszint elfajult, az átmeneti mátrixelemek közül csak az $\int \psi_{210}^* V \psi_{200} d^3r = -3eEa_H$ különbözik nullától (a_H a Bohrsugár). Az energiakorrekciókra így a

$$\begin{vmatrix} -w & -3eEa_H & 0 & 0 \\ -3eEa_H & -w & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -w & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -w \end{vmatrix} = 0$$

szekuláris egyenletet kapjuk. Ebből

$$w_1 = 3eEa_H, \quad w_2 = -3eEa_H, \quad w_3 = w_4 = 0.$$

Így az $n=2$ energiaszint külső elektromos térben három szintre hasad fel, melyek közül a középső kétszeresen továbbra is degenerált.

- 6.3.** $\frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{210} \pm \psi_{200})$. Ez megkapható közvetlen számítás útján, és a degenerált energiaszintre vonatkozó perturbációs számítás egyenleteiből is.
- 6.4.** A perturbációs számítás második közelítésében

$$\Delta E = -\frac{1}{2} \alpha \mathcal{E}^2 = -\sum_{n>1} \frac{|\langle 1s | V | nlm \rangle|^2}{E_n - E_1},$$

ahol $V = -e\mathcal{E}z$. Föltéve, hogy a folytonos spektrum járuléka elhanyagolható,

$$-\frac{e^2}{E_1} \sum_{n>1} |\langle 1s | z | nlm \rangle|^2 < \frac{\alpha^2}{2} < \frac{e^2}{E_2 - E_1} \sum_{n>1} |\langle 1s | z | nlm \rangle|^2.$$

Mivel az $|nlm\rangle$ állapotok (a folytonos spektrum elhanyagolásával) teljes rendszert alkotnak, így

$$\sum_n \langle 1s | z | nlm \rangle \langle nlm | z | 1s \rangle = \langle 1s | z^2 | 1s \rangle = a_H^2.$$

Felhasználva még, hogy $E_n = -\frac{e^2}{2n^2 a_H^2}$, a kívánt egyenlőtlenséget kapjuk.

- 6.5.** A perturbáló potenciál, $V = -\mu \mathbf{H}$, μ a részecske mágneses momentuma, $\mathbf{H}$ a mágneses tér. Spin nélküli részecskére $\mu = \mu_0 \mathbf{L}$, ahol $\mathbf{L}$ az impulzusmomentum. Mutasson a koordináta-rendszer z tengelye a mágneses tér irányába, ekkor $V = -\mu_0 H L_z$. A perturbálatlan állapotok L_z szerint degeneráltak. A perturbált sajátfüggvények nulladik közelítésének válasszuk a

$$\psi = \sum_m c_m R_{nl}(r) Y_l^m(\vartheta, \varphi)$$

kombinációt. A $V_{m,m'}$ mátrix diagonális lesz, a diagonális elemek egyben a szekuláris egyenlet megoldásai. Az energiafelhasadás

$$w = -\mu_0 H m \hbar, \quad m = 0, \pm 1, \dots, \pm l,$$

a perturbált sajátfüggvények nulladik közelítésben az

$$R_{nl}(r)Y_l^m(\vartheta, \varphi)$$

függvények.

6.6. A síkbeli rotátor energiaspektruma és normált hullámfüggvényei:

$$E_m = \frac{\hbar^2 m^2}{2\Theta}, \quad \psi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi}, \quad m=0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

Minden gerjesztett állapot kétszeresen elfajult. A perturbáló potenciál $V = -d\mathcal{E} \cos \varphi$. Mivel a $(\psi_m, V\psi_{-m})$ mátrixelem tesszőleges m -re zérus, ezért alkalmazhatjuk a nem elfajult spektrumra vonatkozó perturbációs számítást.

$$\begin{aligned} \int_0^{2\pi} \psi_m^* V \psi_{m'} d\varphi &= -\frac{\mathcal{E}d}{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{i(m'-m)\varphi} \cos \varphi d\varphi = \\ &= \begin{cases} 0, & \text{ha } m' \neq m \pm 1, \\ -\frac{\mathcal{E}d}{2}, & \text{ha } m' = m \pm 1, \end{cases} \end{aligned}$$

így a perturbációs számítás első közelítésében: $\Delta E^{(1)} = 0$, a második közelítésben:

$$\begin{aligned} \Delta E^{(2)} &= \frac{|\langle \psi_m | V | \psi_{m-1} \rangle|^2}{E_m - E_{m-1}} + \frac{|\langle \psi_m | V | \psi_{m+1} \rangle|^2}{E_m - E_{m+1}} = \\ &= \frac{\Theta \mathcal{E}^2 d^2}{\hbar^2 (4m^2 - 1)}. \end{aligned}$$

6.7. Perturbálatlan hullámfüggvényekként választhatjuk az $\hat{L}^2$, $\hat{S}^2$, $\hat{L}_z$, $\hat{S}_z$ operátorok közös sajátfüggvényeit, vagy az $\hat{L}^2$, $\hat{J}^2$, J_z operátorokhoz tartozókat (lásd az 5.16. feladatot). Előző esetben a degenerált spektrumra vonatkozó perturbációs számítást kell alkalmazni, utóbbi esetben egy adott energiaszint perturbációjához csak azok az állapotok adhatnak járulékot, amelyekben l, j és m_j értéke azonos.

A perturbációs számítás első közelítésében:

$$\Delta E_{nlj} = \langle \psi_{nlj} | H' | \psi_{nlj} \rangle =$$

$$= \frac{e^2 \hbar^2}{4m^2 c^2} (j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)) \left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle.$$

A 4.34. feladatban láttuk, hogy

$$\left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle = \frac{1}{n^3(l+1) \left(l + \frac{1}{2} \right) l} \left(\frac{me^2}{\hbar^2} \right)^3.$$

Mivel $s = \frac{1}{2}$, $j = l \pm \frac{1}{2}$, így

$$\Delta E_{nlj} = \frac{me^4}{\hbar^2} \left(\frac{e^2}{\hbar c} \right)^2 \frac{1}{2n^3} \left(\frac{1}{l + \frac{1}{2}} - \frac{1}{j + \frac{1}{2}} \right).$$

6.8. A Hamilton-függvény a relativisztikus mechanikában

$$H = \sqrt{m^2 c^4 + p^2 c^2} - mc^2 + V(r) \approx \frac{p^2}{2m} + V(r) + H',$$

ahol $H' = -\frac{p^4}{8m^3 c^2}$. H' -t tekintjük perturbációnak. A perturbálatlan hullámfüggvények kielégítik a $\left[\frac{\hat{p}^2}{2m} + V(r) \right] \psi = E_0 \psi$

Schrödinger-egyenletet. A perturbációs számítás első közelítésében

$$\Delta E_{nlm} = \langle \psi_{nlm} | H' | \psi_{nlm} \rangle =$$

$$\begin{aligned} &= -\frac{1}{8m^3 c^2} \int \psi_{nlm}^* \hat{p}^4 \psi_{nlm} dV = \\ &= -\frac{1}{2mc^2} \int \psi_{nlm}^* (E - V(r))^2 \psi_{nlm} dV = \\ &= \frac{3E^2}{2mc^2} - \left(\frac{me^4}{\hbar^2} \right) \frac{1}{n^3 mc^2 (2l+1)} = \\ &= \frac{me^4}{\hbar^2} \left(\frac{e^2}{\hbar c} \right)^2 \left[\frac{3}{8n^4} - \frac{1}{(2l+1)n^3} \right]. \end{aligned}$$

Az előző feladat eredményével kombinálva azt kapjuk, hogy a relativisztikus energiakorrekció:

$$\Delta E = \frac{me^4}{\hbar^2} \left(\frac{e^2}{\hbar c} \right)^2 \frac{1}{n^3} \left[\frac{3}{8n} - \frac{1}{2j+1} \right].$$

Ez a spektrum ún. finomszerkezete. Az azonos n_j , de különböző l értékekhez tartozó állapotok degeneráltak.

6.9. A Hamilton-operátor

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \frac{e}{2mc} (\hat{\mathbf{L}} + 2\hat{\mathbf{S}}) \mathcal{H} + \frac{e^2}{8mc^2} (\mathcal{H} \times \mathbf{r})^2,$$

ahol $\mathcal{H}$ a mágneses tér erőssége, $\hat{H}_0$ tartalmazza a spin-pálya kölcsönhatást leíró tagot is. Gyenge mágneses tér esetén a $\mathcal{H}^2$ tényezőt tartalmazó tag elhanyagolható. A $\hat{H}' = \frac{e}{2mc} (\hat{\mathbf{L}} + 2\hat{\mathbf{S}}) \mathcal{H}$ operátort választjuk perturbációnak; ha a z tengelyt a mágneses tér irányába fektetjük, írhatjuk, hogy $\hat{H}' = \frac{e\mathcal{H}}{2mc} (\hat{J}_z + \hat{S}_z)$, $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$ az elektron teljes impulzusmomentuma. A perturbálatlan Hamilton-operátor sajátállapotait az l, j, m_j kvantumszámokkal jellemezhetjük, az egyes energiaszintek $(2j+1)$ -szeresen elfajultak. $\hat{J}_z + \hat{S}_z$ felcserélhető $\hat{J}_z$ -vel, ezért a perturbációs számítás első közelítésében

$$\Delta E_{nljm_j} = \left\langle \psi_{nljm_j} \left| \frac{e\mathcal{H}}{2mc} (\hat{J}_z + \hat{S}_z) \right| \psi_{nljm_j} \right\rangle.$$

Az 5.11. feladat szerint

$$\begin{aligned} \langle \psi_{nljm_j} | S_z | \psi_{nljm_j} \rangle &= m_j \frac{\langle \psi_{nljm_j} | \mathbf{J} \cdot \mathbf{S} | \psi_{nljm_j} \rangle}{j(j+1)\hbar} = \\ &= m_j \hbar \frac{1}{2} \frac{j(j+1) - l(l+1) + s(s+1)}{j(j+1)}, \end{aligned}$$

így a felhasadás $\Delta E_{nljm_j} = \mu_B m_j g \mathcal{H}$, ahol

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2mc}, \quad \text{és} \quad g = 1 + \frac{j(j+1) - l(l+1) + s(s+1)}{2j(j+1)}$$

az ún. giromágneses vagy Landé-faktor. Az eredetileg $(2j+1)$ -szeresen elfajult szintek $2j+1$ egyenközi szintre hasadnak fel.

10. A $\hat{H} = \hat{H}_0 + \frac{e}{2mc} (\hat{\mathbf{L}} + 2\hat{\mathbf{S}}) \mathcal{H} + \frac{e^2}{8mc^2} (\mathcal{H} \times \mathbf{r})^2$ Hamilton-operátor utolsó tagja most is elhanyagolható, ugyanígy $\hat{H}_0$ -ban a spin-pálya kölcsönhatás is. A perturbálatlan Hamilton-operátor sajátállapotait az l, s, m_l, m_s kvantumszámokkal jellemezhetjük. $\hat{L}_z + 2\hat{S}_z$ felcserélhető az $\hat{L}^2, \hat{S}^2, \hat{L}_z, \hat{S}_z$ operátorokkal, így az energiakorrekció:

$$\begin{aligned} \Delta E_{nlsm_l m_s} &= \left\langle \psi_{nlsm_l m_s} \left| \frac{e\mathcal{H}}{2mc} (\hat{L}_z + 2\hat{S}_z) \right| \psi_{nlsm_l m_s} \right\rangle = \\ &= \mu_B \mathcal{H} (m_l + 2m_s). \end{aligned}$$

Megjegyezzük, hogy a spin-pálya felhasadás erre „rakódik rá”, $\Delta E_{\text{spin-pálya}} \sim m_l m_s$.

11. A $\hat{H}' = \frac{e^2}{2m^2 c^2} \frac{1}{r^3} \hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{S}} + \frac{e\mathcal{H}}{2mc} (\hat{L}_z + 2\hat{S}_z)$ operátort kell perturbációnak tekintenünk, a $\mathcal{H}^2$ -et tartalmazó tag most is elhanyagolható. Célszerű $\hat{L}^2, \hat{J}^2, \hat{J}_z$ közös sajátfüggvényeit választani a perturbálatlan Hamilton-operátor sajátfüggvényeinek. A $\hat{H}'$ operátor $\hat{L}^2$ -tel és $\hat{J}_z$ -vel felcserélhető, ezért a perturbált hullámfüggvényt a különböző j értékekhez tartozó sajátfüggvények szuperpozíciójaként keressük:

$$\begin{aligned} \psi &= c_1 \psi_{nlj}^{(0)} = l+1/2, m_j + c_2 \psi_{nlj}^{(0)} = l-1/2, m_j = \\ &= c_1 \frac{R_{nl}^{(0)}}{\sqrt{2l+1}} \left(\sqrt{l+m_j+\frac{1}{2}} Y_{l, m_j-1/2} \right) + \\ &+ c_2 \frac{R_{nl}^{(0)}}{\sqrt{2l+1}} \left(\sqrt{l-m_j+\frac{1}{2}} Y_{l, m_j-1/2} \right) \\ &\quad - \sqrt{l+m_j+\frac{1}{2}} Y_{l, m_j+1/2} \end{aligned}$$

6.13. A Hamilton-operátort $\frac{\hat{p}^2}{2m} - \frac{Ze^2}{r} - \frac{e^2}{r}$ alakban írhatjuk, és a $\hat{H}' = -\frac{e^2}{r}$ operátort tekinthetjük perturbációnak.

$$\Delta E_n = - \left\langle \psi_{nlm} \left| \frac{e^2}{r} \right| \psi_{nlm} \right\rangle = - \frac{mZe^4}{\hbar^2 n^2}.$$

Az egzakt érték:

$$\Delta E_n = E_n(Z+1) - E_n(Z) = - \frac{me^4}{\hbar^2 n^2} \left(Z + \frac{1}{2} \right).$$

A közelítés a $Z \gg 1$ esetben használható.

6.14. A potenciál

$$V(r) = \begin{cases} -\frac{e^2}{R} \left(\frac{3}{2} - \frac{1}{2} \frac{r^2}{R^2} \right), & \text{ha } r \leq R, \\ -\frac{e^2}{r}, & \text{ha } r \geq R, \end{cases}$$

ahol R a mag sugara. A perturbáció így

$$\hat{H}' = \frac{e^2}{R} \left(\frac{R}{r} - \frac{3}{2} + \frac{1}{2} \frac{r^2}{R^2} \right), \quad \text{ha } r \leq R,$$

különben zérus. Az alapállapot energiakorrekciója:

$$\begin{aligned} \Delta E &= \int \psi_{100}^* \hat{H}' \psi_{100} d^3r = \\ &= \frac{e^2}{a_H} \left[1 - 3 \frac{(4 + 4x + x^2)e^{-x} - (4 - x^2)}{x^3} \right], \end{aligned}$$

$$\text{ahol } x = \frac{2R}{a_H}, \quad a_H = \frac{\hbar^2}{me^2}.$$

$$\text{Kis } x\text{-re (ólomnál } x=0,022) \Delta E = \frac{e^2}{a_H} \frac{1}{10} x^2.$$

6.15. Az 1 állapotból a 2-be való átmenet valószínűsége

$$\begin{aligned} W(1 \rightarrow 2) &= \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_0^t \langle \varphi_1 | V | \varphi_2 \rangle \exp \left(-\frac{i}{\hbar} (E_1 - E_2)t' \right) dt' \right|^2 = \\ &= \frac{4|V|^2}{(E_1 - E_2)^2} \sin^2 \frac{E_1 - E_2}{2\hbar} t \end{aligned}$$

a perturbációs számítás első közelítésében. Ebben a közelítésben $W(1 \rightarrow 1) = 0$, mert $\langle \varphi_1 | V | \varphi_1 \rangle = 0$. Második közelítésben

$$\begin{aligned} c_1(t) &= 1 + \left(\frac{i}{\hbar} \right)^2 \int_0^t \int_0^{\tau'} \langle \varphi_1 | V | \varphi_2 \rangle \langle \varphi_2 | V | \varphi_1 \rangle \times \\ &\quad \times \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} [(E_1 - E_2)\tau + (E_2 - E_1)\tau'] \right\} d\tau' d\tau = \\ &= 1 + \frac{i|V|^2}{\hbar(E_2 - E_1)} t + \frac{|V|^2}{(E_2 - E_1)^2} (e^{i\hbar(E_1 - E_2)t} - 1), \quad \text{és} \\ W(1 \rightarrow 1) &= |c_1(t)|^2 = 1 - \frac{4|V|^2}{(E_1 - E_2)^2} \sin^2 \frac{E_1 - E_2}{2\hbar} t. \end{aligned}$$

6.16. A perturbációs számítás első közelítésében

$$\begin{aligned} W(0 \rightarrow 1) &= \frac{1}{\hbar^2} \times \\ &\times \left| \int_{-\infty}^{\infty} \langle \varphi_0 | -e\mathcal{E}(t)x | \varphi_1 \rangle \exp \left(-\frac{i}{\hbar} (E_0 - E_1)t \right) dt \right|^2. \end{aligned}$$

Lineáris harmonikus oszcillátorra

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad \langle \varphi_n | x | \varphi_{n+1} \rangle = \sqrt{\frac{(n+1)\hbar}{2m\omega}}.$$

Így

$$W(0 \rightarrow 1) = \frac{e^2}{2m\hbar\omega} \left| \int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{E}(t) \exp(-i\omega t) dt \right|^2 =$$

$$= \frac{e^2 A^2}{2m\hbar\omega} \exp\left(-\frac{\omega^2 \tau^2}{2}\right).$$

Érdemes megjegyezni, hogy az oszcillátor az elektromos tértől

$$P = \int_{-\infty}^{\infty} e\mathcal{E}(t) dt = eA \text{ teljes impulzust vesz át.}$$

6.17. Az előző feladat megoldása szerint a perturbációs számítás első közelítésében:

$$W(0 \rightarrow 1) = \frac{e^2}{2m\hbar\omega} \left| \int_0^t \mathcal{E} \exp(-i\omega t') dt' \right|^2 =$$

$$= \frac{2e^2 \mathcal{E}^2}{m\hbar\omega^3} \sin^2 \frac{\omega t}{2}.$$

6.18. A perturbációs számítás első közelítésében

$$W(0 \rightarrow k) = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_0^t \left\langle \psi_k \left| \left(-e\mathcal{E}_0 \exp\left(-\frac{t'}{\tau}\right) x \right) \right| \psi_0 \right\rangle \times \right.$$

$$\left. \times \exp\left(\frac{i}{\hbar}(E_k - E_0)t'\right) dt' \right|^2 =$$

$$= \frac{e^2 \mathcal{E}_0^2 |x_{k0}|^2}{\hbar^2 \left(\omega_{k0}^2 - \frac{1}{\tau^2}\right)} \left(1 + \exp\left(-2\frac{t}{\tau}\right) - \exp\left(-\frac{t}{\tau}\right) 2 \cos \omega_{k0} t \right).$$

Itt $|x_{k0}| = \langle \psi_k | x | \psi_0 \rangle$, $\omega_{k0} = \frac{E_k - E_0}{\hbar}$, ψ_k a hidrogénatom sajátfüggvényeit jelöli, és $k \neq 0$.

6.19. A normáltsági feltételből $N = \sqrt{\frac{\lambda^3}{\pi}}$. A Hamilton-operátor

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta - V_0 e^{-r/a}.$$

$$E(\lambda) = \int \varphi_\lambda^* \hat{H} \varphi_\lambda dV = \frac{\hbar^2 \lambda^2}{2m} - V_0 \left(\frac{2\lambda a}{2\lambda a + 1} \right)^3.$$

A $\frac{dE}{d\lambda} = 0$ minimumfeltételből:

$$\frac{(2\lambda a + 1)^4}{2\lambda a} = \frac{12ma^2}{\hbar^2} V_0.$$

Az $x = 2\lambda a$ változóra

$$x^4 + 4x^3 + 6x^2 + \left(4 - \frac{12ma^2 V_0}{\hbar^2} \right) x + 1 = 0.$$

A megadott numerikus értékekkel ($m = 0,8 \cdot 10^{-24}$ g, a proton-neutron redukált tömeg): $x = 1,34$, $E = -2,18$ MeV, ami valamivel nagyobb, a $-2,23$ MeV egzakt megoldásnál.

6.20. A hullámfüggvény

$$\psi(x) = \begin{cases} 0, & \text{ha } x < 0, \\ x e^{-ax}, & \text{ha } x > 0. \end{cases}$$

Az energia várható értéke:

$$\langle E \rangle = \frac{\int_0^\infty x e^{-ax} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + cx \right) x e^{-ax} dx}{\int_0^\infty x^2 e^{-2ax} dx} = \frac{3c}{2a} + \frac{\hbar^2 a^2}{2m}.$$

$\langle E \rangle$ minimális, ha $a = \left(\frac{3cm}{2\hbar^2} \right)^{1/3}$. Ekkor

$$\langle E \rangle = \frac{9}{4} \left(\frac{2\hbar^2 c^2}{3m} \right)^{1/3}.$$

A pontos eredmény:

$$E_0 = \frac{1}{2} \left(\frac{81\pi^2 \hbar^2 c^2}{16m} \right)^{1/3}$$

- 6.21. A normáltsági feltételből $N = \left(\frac{2c}{\pi} \right)^{1/4}$. A Hamilton-operátor várható értéke az adott hullámfüggvénnyel jellemzett állapotban

$$\begin{aligned} \langle E \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{2c}{\pi} \right)^{1/2} e^{-cx^2} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 \right) e^{-cx^2} dx = \\ &= \frac{m\omega^2}{8c} + \frac{c\hbar^2}{2m}. \end{aligned}$$

$\langle E \rangle$ minimális, ha $c = \frac{m\omega}{2\hbar}$, ezzel a hullámfüggvény

$$\psi = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4} \exp\left(-\frac{m\omega}{\hbar} x^2\right), \quad \text{és} \quad \langle E \rangle = E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}.$$

Az eredmények pontosak, mivel a próbafüggvényt helyesen választottuk.

- 6.22. A keresett hullámfüggvényt megpróbáljuk a legegyszerűbb módon felírni a következő feltételek mellett: tartalmaz egy paramétert, véges az egész x tengely mentén, $x \rightarrow \pm\infty$ esetén zérushoz tart és ortogonális az alapállapot

$$\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4} \exp\left(-\frac{m\omega}{\hbar} x^2\right)$$

hullámfüggvényére. Ilyen a $\psi_1(x) = Nxe^{-cx^2}$ függvény. A normáltsági feltételből $N = 4 \left(\frac{2c^3}{\pi} \right)^{1/4}$. Az energia várható értéke:

$$\langle E \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_1^*(x) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 \right) \psi_1(x) dx =$$

$$= \frac{3m\omega^2}{8c} + \frac{3\hbar^2 c}{2m}.$$

$\langle E \rangle$ minimális, ha $c = \frac{m\omega}{2\hbar}$, ezzel a hullámfüggvény

$$\psi_1 = \left(\frac{2}{\sqrt{\pi}} \right)^{1/2} \left(\frac{m\omega}{\hbar} \right)^{3/4} x \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2\right), \quad \text{és}$$

$$\langle E \rangle = E_1 = \frac{3}{2} \hbar\omega.$$

- 6.23. A normáltsági feltételből $A = 2 \left(\frac{8c^3}{\pi} \right)^{1/4}$. Az energia várható értéke

$$\begin{aligned} \langle E \rangle &= \int_0^{\infty} A^2 e^{-cr^2} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta - \frac{e^2}{r} \right] e^{-cr^2} r^2 dr = \\ &= \frac{3c\hbar^2}{2m} - 2e^2 \sqrt{\frac{2c}{\pi}}. \end{aligned}$$

$\langle E \rangle$ minimális, ha $c = \frac{8}{9} \frac{e^4 m^2}{\pi \hbar^4}$, ekkor

$$\langle E \rangle = -\frac{8}{3\pi} \frac{e^4 m}{2\hbar^2} \cong -0,848 E_0.$$

$$6.24. \quad b = \frac{3}{2} \frac{me^2}{\hbar^2}, \quad \langle E \rangle = -\frac{3}{4} \frac{me^4}{2\hbar^2}.$$

- 6.25. Az energia várható értékét a

$$\begin{vmatrix} H_{11} - S_{11}W & H_{12} - S_{12}W \\ H_{21} - S_{21}W & H_{22} - S_{22}W \end{vmatrix} = 0$$

szekuláris egyenletből kell meghatározni.

$$H_{11} = \int_{-1}^1 (1-x^2) \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \right] (1-x^2) dx = \frac{4\hbar^2}{3m},$$

$$H_{22} = \int_{-1}^1 (1-x^4) \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \right] (1-x^4) dx = \frac{16\hbar^2}{7m},$$

$$H_{12} = H_{21} = \int_{-1}^1 (1-x^4) \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \right] (1-x^2) dx = \frac{8\hbar^2}{5m},$$

$$S_{11} = \int_{-1}^1 (1-x^2)^2 dx = \frac{16}{15}, \quad S_{22} = \int_{-1}^1 (1-x^4)^2 dx = \frac{64}{45},$$

$$S_{12} = S_{21} = \int_{-1}^1 (1-x^2)(1-x^4) dx = \frac{128}{105}.$$

Az egyenlet gyökei:

$$w_1 = 1,23 \frac{\hbar^2}{m}, \quad w_3 = 12,77 \frac{\hbar^2}{m}.$$

A pontos energiaértékek:

$$E_1 = 1,23 \frac{\hbar^2}{m}, \quad E_3 = 11,10 \frac{\hbar^2}{m}.$$

Csak a páros sajátfüggvényekkel foglalkoztunk, mivel $(1-x^2)$ és $(1-x^4)$ is páros függvény.

- 6.26. Legyen $E \leq V(x)$, ha $x \leq x_0$. A kváziklasszikus közelítés a fordulópont közelében nem érvényes, az x_0 pontot közrefogó $a < x_0 < b$ tartományban a Schrödinger-egyenlet pontos megoldását kell ismerni. A kváziklasszikus hullámfüggvény

$$\psi(x) = \begin{cases} \frac{A}{\sqrt{|p|}} \exp\left(-\int_x^{x_0} \frac{1}{\hbar} |p(x')| dx'\right), & \text{ha } x \leq a, \\ \frac{C}{\sqrt{p}} \sin\left(\int_{x_0}^x \frac{1}{\hbar} p(x') dx' + \alpha\right), & \text{ha } x \geq b, \end{cases}$$

ahol $p = \sqrt{2m(E - V(x))}$, és feltételeztük, hogy a klasszikusan elérhetetlen tartományban a hullámfüggvény exponenciálisan csökken.

Az $a < x < b$ tartományban a potenciális energia az x_0 pont környezetében sorbafejthető:

$$V(x) = E - V'(x_0)(x - x_0).$$

A Schrödinger-egyenlet

$$\left[\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V'(x_0)(x - x_0) \right] \psi(x) = 0.$$

A 4.23. feladat szerint ennek megoldása az ún. Airy-függvény-nel írható fel, $\psi(x) = \Phi(\xi)$, ahol $\xi = \left(\frac{2mV'(x_0)}{\hbar^2} \right)^{1/3} (x - x_0)$.

A kváziklasszikus közelítés alkalmazhatóságának feltételéből következik, hogy az a, b pontokban $|\xi| \gg 1$. Az Airy-függvény aszimptotikus alakja:

$$\Phi(\xi) = \begin{cases} \frac{1}{2} \xi^{-1/4} \exp\left(-\frac{2}{3} \xi^{3/2}\right), & \text{ha } \xi \gg 1, \\ |\xi|^{-1/4} \sin\left(\frac{2}{3} |\xi|^{3/2} + \frac{\pi}{4}\right), & \text{ha } \xi \ll -1. \end{cases}$$

Mivel $x > x_0$ esetén $\frac{2}{3} |\xi|^{3/2} = \frac{1}{\hbar} \int_{x_0}^x p(x') dx'$, $x < x_0$ esetén

$$\frac{2}{3}\xi^{3/2} = \frac{1}{\hbar} \int_x^{x_0} |p(x')| dx', \text{ így}$$

$$\psi(x) = \begin{cases} \frac{B}{2\sqrt{|p|}} \exp\left(-\int_x^{x_0} \frac{1}{\hbar} |p(x')| dx'\right), & \text{ha } x=a, \\ \frac{B}{\sqrt{p}} \sin\left(\int_{x_0}^x \frac{1}{\hbar} p(x') dx' + \frac{\pi}{4}\right), & \text{ha } x=b. \end{cases}$$

Az illesztés eredménye, hogy $2A=C=B$, $\alpha = \frac{\pi}{4}$.

Az $E \geq V(x)$, ha $x \geq x_0$ esetben a fentihez hasonló gondolatmenet azt adja, hogy a kváziklasszikus hullámfüggvény

$$\psi(x) = \begin{cases} \frac{A}{\sqrt{p}} \sin\left(\int_x^{x_0} \frac{1}{\hbar} p(x') dx' + \frac{\pi}{4}\right), & \text{ha } x \leq a, \\ \frac{A}{2\sqrt{|p|}} \exp\left(-\int_{x_0}^x \frac{1}{\hbar} |p(x')| dx'\right), & \text{ha } x \geq b, \end{cases} \quad \text{és } a < x_0 < b.$$

6.27. A klasszikus fordulópontok legyenek a és b úgy, hogy $E \leq V(x)$, ha $x \leq a$ és $E \leq V(x)$, ha $x \geq b$. A fordulópontok körüli pontos megoldással megfelelően illesztett kváziklasszikus hullámfüggvény az $a < x < b$ tartományban az előző feladat szerint

$$\begin{aligned} \psi(x) &= \frac{A}{\sqrt{p}} \sin\left(\int_a^x \frac{1}{\hbar} p(x') dx' + \frac{\pi}{4}\right) = \\ &= \frac{B}{\sqrt{p}} \sin\left(\int_x^b \frac{1}{\hbar} p(x') dx' + \frac{\pi}{4}\right). \end{aligned}$$

Mivel

$$\begin{aligned} \frac{A}{\sqrt{p}} \sin\left(\int_a^x \frac{1}{\hbar} p(x') dx' + \frac{\pi}{4}\right) &= \\ &= -\frac{A}{\sqrt{p}} \sin\left(\int_x^b \frac{1}{\hbar} p(x') dx' + \frac{\pi}{4} - \frac{\pi}{2} + \int_b^a \frac{1}{\hbar} p(x') dx'\right), \end{aligned}$$

ezért

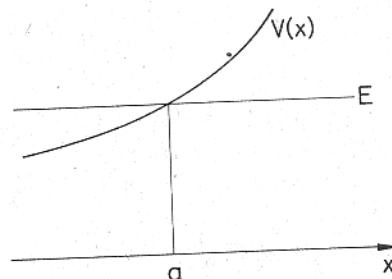
$$B = (-1)^{n+1} A, \quad \text{és} \quad \int_b^a \frac{1}{\hbar} p(x) dx - \frac{\pi}{2} = n\pi, \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

A fázisintegrál

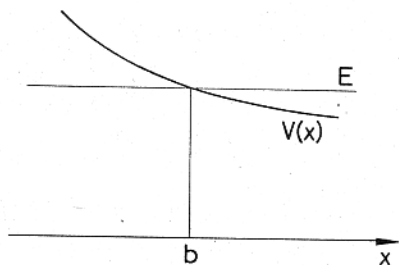
$$\oint p dx = 2 \int_a^b p dx = 2\pi\hbar\left(n + \frac{1}{2}\right).$$

6.28. Felhasználjuk, hogy a lineárisan független kváziklasszikus megoldások a következő alakúak:

$$\left. \begin{aligned} &\frac{A}{\sqrt{|p|}} \exp\left(-\int_x^b \frac{1}{\hbar} |p(x')| dx'\right) + \frac{B}{\sqrt{|p|}} \exp\left(\int_x^b \frac{1}{\hbar} |p(x')| dx'\right), \text{ ha } x \leq b \\ &\frac{2A}{\sqrt{p}} \sin\left(\int_b^x \frac{1}{\hbar} p(x') dx' + \frac{\pi}{4}\right) + \frac{B}{\sqrt{p}} \cos\left(\int_b^x \frac{1}{\hbar} p(x') dx' + \frac{\pi}{4}\right), \text{ ha } x \geq b \end{aligned} \right\} \text{ l. az ábrát!}$$



$$\left. \begin{aligned} \frac{2C}{\sqrt{p}} \sin\left(\int_x^a \frac{1}{\hbar} p(x') dx' + \frac{\pi}{4}\right) + \frac{D}{\sqrt{p}} \cos\left(\int_x^a \frac{1}{\hbar} p(x') dx' + \frac{\pi}{4}\right), \quad \text{ha } x \leq a \\ \frac{C}{\sqrt{|p|}} \exp\left(-\int_a^x \frac{1}{\hbar} |p(x')| dx'\right) + \frac{D}{\sqrt{|p|}} \exp\left(\int_a^x \frac{1}{\hbar} |p(x')| dx'\right), \quad \text{ha } x \geq a \end{aligned} \right\} \text{1. az ábrát!}$$



$x \geq b$ esetén a feladat megoldása kifutó síkhullám,

$$\begin{aligned} \psi_{\text{III}} = \frac{\alpha}{\sqrt{p}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int p(x') dx'\right) = \frac{\alpha}{\sqrt{2p}} (1+i) \sin\left(\int_b^x \frac{1}{\hbar} p(x') dx' + \frac{\pi}{4}\right) + \\ + \frac{\alpha}{\sqrt{2p}} (1-i) \cos\left(\int_b^x \frac{1}{\hbar} p(x') dx' + \frac{\pi}{4}\right). \end{aligned}$$

Az $a \leq x \leq b$ tartományban

$$\begin{aligned} \psi_{\text{II}} = \frac{\alpha}{2\sqrt{2|p|}} (1+i) \exp\left(-\int_x^b \frac{1}{\hbar} |p(x')| dx'\right) + \frac{\alpha}{\sqrt{2|p|}} (1-i) \exp\left(\int_x^b \frac{1}{\hbar} |p(x')| dx'\right) = \\ = \frac{\beta}{\sqrt{|p|}} \exp\left(-L + \int_a^x \frac{1}{\hbar} |p(x')| dx'\right) - 2i \frac{\beta}{\sqrt{|p|}} \exp\left(L - \int_a^x \frac{1}{\hbar} |p(x')| dx'\right), \end{aligned}$$

ahol
$$\beta = \frac{\alpha}{2\sqrt{2}} (1+i).$$

Az $x \leq a$ tartományban

$$\begin{aligned} \psi_{\text{I}} = \frac{\beta}{\sqrt{p}} e^{-L} \cos\left(\int_x^a \frac{1}{\hbar} p(x') dx' + \frac{\pi}{4}\right) - 2i \frac{2\beta}{\sqrt{p}} e^L \sin\left(\int_x^a \frac{1}{\hbar} p(x') dx' + \frac{\pi}{4}\right) = \\ = \frac{2\beta}{\sqrt{p}} \left[\left(-e^L + \frac{1}{4} e^{-L}\right) \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_x^a p(x') dx'\right) + \right. \\ \left. + \left(e^L + \frac{1}{4} e^{-L}\right) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_x^a p(x') dx'\right) \right]. \end{aligned}$$

Az áthatolási együttható:

$$G = \left| \frac{\alpha}{2\beta \left(\frac{1}{4} e^{-L} - e^L\right)} \right|^2 = e^{-2L} \left(1 - \frac{1}{4} e^{-2L}\right)^{-2} \approx e^{-2L}.$$

7. Szórásszámítás

7.1.

$$\psi(x, t) \rightarrow \begin{cases} \int A(p) \left[\exp\left(\frac{i}{\hbar} \left(px - \frac{p^2}{2m} t\right)\right) + \right. \\ \left. + R(p) \exp\left(\frac{i}{\hbar} \left(-px - \frac{p^2}{2m} t\right)\right) \right] dp, & \text{ha } x \rightarrow -\infty, \\ \int A(p) D(p) \exp\left(\frac{i}{\hbar} \left(px - \frac{p^2}{2m} t\right)\right) dp, & \text{ha } x \rightarrow \infty. \end{cases}$$

Ez megoldása a Schrödinger-egyenletnek. Tegyük fel, hogy $A(p)$ csak olyan kis tartományban nem zérus, amelyen $R(p) \approx \approx R(p_0)$, $D(p) \approx D(p_0)$. Nagy negatív t értéknél

$$\psi(x \rightarrow -\infty, t \rightarrow -\infty) \approx \int A(p) \exp\left(\frac{i}{\hbar} \left(px - \frac{p^2}{2m} t\right)\right) dp,$$

mivel az integrandus második tagja nagyon gyorsan oszcillál, így járuléka elhagyható. $\psi(x \rightarrow \infty, t \rightarrow -\infty) \cong 0$, mert az integrandus itt is gyorsan oszcillál. Nagy negatív t értéknél tehát a balról érkező hullámcsomag van jelen. Nagy pozitív t értékénél az előzőekhez hasonló megfontolással

$$\psi(x \rightarrow -\infty, t \rightarrow \infty) \approx R(p_0) \int A(p) \exp\left(\frac{i}{\hbar}\left(-px - \frac{p^2}{2m}t\right)\right) dp,$$

ami visszaverődött hullámcsomagot ír le,

$$\psi(x \rightarrow \infty, t \rightarrow \infty) \approx D(p_0) \int A(p) \exp\left(\frac{i}{\hbar}\left(px - \frac{p^2}{2m}t\right)\right) dp,$$

ami a potenciálgáton áthaladt hullámcsomag. Az áthaladás, ill. a visszaverődés valószínűsége: $|D(p_0)|^2$, ill. $|R(p_0)|^2$.

7.2.

$$\psi(x, t) \rightarrow \begin{cases} \int A(p) \left[\exp\left(\frac{i}{\hbar}\left(px - \frac{p^2}{2m}t\right)\right) + R(p) \exp\left(\frac{i}{\hbar}\left(-px - \frac{p^2}{2m}t\right)\right) \right] dp, & x \rightarrow -\infty, \\ \int A(p) D(p) \exp\left(\frac{i}{\hbar}\left(px - \frac{p^2}{2m}t\right)\right) dp, & x \rightarrow \infty. \end{cases}$$

A bejövő hullámcsomag áramsűrűsége:

$$j_{be} = \frac{1}{m} \left(\int A(p) \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\left(px - \frac{p^2}{2m}t\right)\right) dp \right) \times \int p A(p) \exp\left(\frac{i}{\hbar}\left(px - \frac{p^2}{2m}t\right)\right) dp \approx \frac{p_0}{m},$$

ha $\int A(p) dp = 1$.

A visszavert hullámcsomag áramsűrűsége

$$j_v = \frac{1}{m} \left(\int A(p) R^*(p) \exp\left(\frac{i}{\hbar}\left(px + \frac{p^2}{2m}t\right)\right) dp \right) \times \int p A(p) \exp\left(\frac{i}{\hbar}\left(px - \frac{p^2}{2m}t\right)\right) dp \approx -\frac{p_0}{m} |R(p_0)|^2.$$

$$\times \int (-p) A(p) R(p) \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\left(px + \frac{p^2}{2m}t\right)\right) dp \approx -\frac{p_0}{m} |R(p_0)|^2.$$

Az áthaladt hullámcsomag áramsűrűsége:

$$j_{át} = \frac{1}{m} \left(\int A(p) D^*(p) \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\left(p'x - \frac{p'^2}{2m}t\right)\right) dp \right) \times \int p' A(p) D(p) \exp\left(\frac{i}{\hbar}\left(p'x - \frac{p'^2}{2m}t\right)\right) dp \approx \frac{\sqrt{p_0^2 - 2mV_0}}{m} |D(p_0)|^2.$$

Az áthaladás, ill. a visszaverődés valószínűsége $\left| \frac{j_{át}}{j_{be}} \right|$, ill. $\left| \frac{j_v}{j_{be}} \right|$.

7.3. A hullámfüggvény aszimptotikus alakja általános esetben

$$\psi \rightarrow \begin{cases} A \exp\left(\frac{i}{\hbar} px\right) + B \exp\left(-\frac{i}{\hbar} px\right), & \text{ha } x \rightarrow -\infty, \\ C \exp\left(\frac{i}{\hbar} px\right) + D \exp\left(-\frac{i}{\hbar} px\right), & \text{ha } x \rightarrow \infty. \end{cases}$$

Legyen $C = \alpha A + \beta B$, ahol α és β a potenciálgát alakjától függő (komplex) állandók. ψ komplex konjugáltja is megoldása a Schrödinger-egyenletnek,

$$\psi^* \rightarrow \begin{cases} A^* \exp\left(-\frac{i}{\hbar} px\right) + B^* \exp\left(\frac{i}{\hbar} px\right), & \text{ha } x \rightarrow -\infty, \\ C^* \exp\left(-\frac{i}{\hbar} px\right) + D^* \exp\left(\frac{i}{\hbar} px\right), & \text{ha } x \rightarrow \infty, \end{cases}$$

és $D^* = \alpha B^* + \beta A^*$ vagy $D = \beta^* A + \alpha^* B$. Mivel az áramsűrűség (a két lineárisan független megoldásból (ψ és ψ^*) képzett Wronski-determináns) x -től független, ezért $|A|^2 - |B|^2 = |C|^2 - |D|^2$, amiből következik, hogy $|\alpha|^2 - |\beta|^2 = 1$. A negatív x -tengely irányából bejövő részecskére $D=0$, az áthatolás, ill. a visszaverődés valószínűsége

$$\left| \frac{B}{A} \right|^2 = \left| \frac{\beta^*}{\alpha^*} \right|^2, \quad \text{ill.} \quad \left| \frac{C}{A} \right|^2 = \left| \alpha + \beta \frac{B}{A} \right|^2 = \left| \frac{1}{\alpha^*} \right|^2.$$

A pozitív x tengely irányából bejövő részecskére $A=0$, az áthatolás, ill. a visszaverődés valószínűsége

$$\left| \frac{C}{D} \right| = \left| \frac{\beta}{\alpha^*} \right|^2 = \left| \frac{\beta^*}{\alpha} \right|^2, \quad \text{ill.} \quad \left| \frac{B}{D} \right|^2 = \left| \frac{1}{\alpha^*} \right|^2.$$

7.4. A kötött állapotok hullámfüggvényére a

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} - \frac{\hbar^2}{m} \beta \delta(x) \psi(x) = E \psi(x)$$

Schrödinger-egyenlet érvényes. Ennek megoldása

$$\psi(x) = \begin{cases} \sqrt{\alpha} e^{-\alpha x}, & \text{ha } x > 0, \\ \sqrt{\alpha} e^{\alpha x}, & \text{ha } x < 0, \end{cases}$$

ahol $\alpha^2 = -\frac{2mE}{\hbar^2}$. Integráljuk az egyenletet $-\varepsilon$ és ε között, majd ε -nal tartsunk zérushoz. Az eredmény:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} [\psi'(x+0) - \psi'(x-0)] - \frac{\hbar^2}{m} \beta \psi(0) = 0.$$

Behelyettesítve ide a fenti megoldást azt kapjuk, hogy $E = -\frac{\hbar^2 \beta^2}{2m}$. A szórási állapotokat

$$\psi(x) = \begin{cases} \exp\left(\frac{i}{\hbar} p x\right) + R \exp\left(-\frac{i}{\hbar} p x\right), & \text{ha } x < 0, \\ D \exp\left(\frac{i}{\hbar} p x\right), & \text{ha } x > 0 \end{cases}$$

alakban keressük. A határfeltételek azt adják, hogy

$$1 + R = D, \quad \frac{i}{\hbar} p(D - 1 + R) = \beta D,$$

amiből

$$R = -\frac{1}{1 + i \frac{p}{\hbar \beta}}, \quad D = \frac{1}{1 - i \frac{\beta \hbar}{p}}.$$

R -nek és D -nek, a szórási amplitúdónak pólusa van a $p = i\hbar\beta$, azaz az $E = -\frac{\hbar^2 \beta^2}{2m}$ helyen, tehát éppen a kötött állapot energiájánál. Az ortogonalitás integrálással egyszerűen megmutatható.

7.5. A Schrödinger-egyenlet megoldása:

$$\psi(x) = \begin{cases} \exp\left(\frac{i}{\hbar} p x\right) + R \exp\left(-\frac{i}{\hbar} p x\right), & \text{ha } x < 0, \\ D \exp\left(\frac{i}{\hbar} p x\right), & \text{ha } x > 0. \end{cases}$$

A határfeltételek: ψ folytonos az $x=0$ pontban, deriváltjának

ugrása pedig $\int_{-\infty}^{\infty} \frac{2m}{\hbar^2} V(x) \psi(x) dx = \beta \psi(0)$. Így $1 + R = D$,

$$\frac{ip}{\hbar} (D - 1 + R) = \beta D. \quad \text{A visszaverődési együttható } |R|^2 = \frac{\hbar^2 \beta^2}{4p^2 + \beta^2 \hbar^2}, \text{ az áthatolási együttható } |D|^2 = \frac{4p^2}{4p^2 + \beta^2 \hbar^2}.$$

7.6. $E > V_0$ esetén az áthatolás valószínűsége

$$T = \frac{4E(E - V_0)}{V_0^2 \sin^2 \frac{qa}{\hbar} + 4E(E - V_0)},$$

a visszaverődés valószínűsége

$$R = \frac{V_0^2 \sin^2 \frac{qa}{\hbar}}{V_0^2 \sin^2 \frac{qa}{\hbar} + 4E(E - V_0)}, \quad \text{ahol } q = \sqrt{2m(E - V_0)}.$$

$$R = 0, \quad \text{ha } a = n \frac{\hbar}{2q}, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

$0 < E < V_0$ esetén

$$T = \frac{4E(V_0 - E)}{V_0^2 \operatorname{sh}^2 \frac{a}{2d} + 4E(V_0 - E)}, \quad R = \frac{V_0^2 \operatorname{sh}^2 \frac{a}{2d}}{V_0^2 \operatorname{sh}^2 \frac{a}{2d} + 4E(V_0 - E)},$$

ahol

$$d = \frac{\hbar}{\sqrt{8m(V_0 - E)}}.$$

5 eV energiájú elektronra $T \approx 0,28$; 5 eV energiájú protonra $T \approx 10^{-42}$.

7.7. Az áthatolási valószínűség,

$$T = \frac{4\sqrt{E(E+V_0)}}{(\sqrt{E+V_0} + \sqrt{E})^2},$$

a visszaverődési valószínűség,

$$R = \frac{V_0^2}{(\sqrt{E+V_0} + \sqrt{E})^4}, \quad \text{ha } E > 0.$$

Ha $-V_0 < E < 0$, akkor $T=0$ és $R=1$, a hullámfüggvény az $x > 0$ tartományban $\psi \sim \exp\left(-\frac{x}{2d}\right)$ alakú, ahol $d = \hbar\sqrt{8m|E|}$.

7.8. Az áthatolási valószínűség kváziklasszikus közelítésben

$$T \sim \exp\left[-\frac{2}{\hbar} \int_0^{x_0} \sqrt{2m(|E| - \mathcal{E}x)} dx\right],$$

ahol $x=0$ és $x=x_0 = \frac{|E|}{\mathcal{E}}$ a klasszikus fordulópontok.

Az integrál kiszámítása után azt kapjuk, hogy $T \sim \exp\left[-\frac{4}{3} \frac{\sqrt{2m}}{\hbar \mathcal{E}} |E|^{3/2}\right]$. A kváziklasszikus közelítés akkor alkalmazható, ha a fordulóponttól való távolság $|x - x_0| \gg \frac{1}{2} \left(\frac{\hbar^2}{m\mathcal{E}}\right)^{1/3}$. A T -re felírt kifejezés akkor érvényes, ha

a potenciálgát szélessége, $x_0 = \frac{|E|}{\mathcal{E}} \gg \frac{1}{2} \left(\frac{\hbar^2}{m\mathcal{E}}\right)^{1/3}$, azaz $\frac{2\sqrt{2m}}{\hbar \mathcal{E}} |E|^{3/2} \gg 1$, tehát az áthatolási együttható kicsi.

7.9. Kváziklasszikus közelítésben

$$T \sim \exp\left[-\frac{2}{\hbar} \int_{R_0}^R \sqrt{2m(V(r) - E)} dr\right], \quad \text{ahol } \frac{e_1 e_2}{R} = E.$$

Az integrálást elvégezve azt kapjuk, hogy

$$T \sim \exp\left[-\frac{\sqrt{8me_1 e_2}}{\hbar} \left(\frac{\pi}{2} \sqrt{R} - \sqrt{R_0}\right)\right], \quad \left(\frac{R_0}{R}\right)^{1/2}$$

nagyságrendű közelítésben.

7.10. A radiális hullámfüggvény aszimptotikus alakjában szereplő δ_l fázisok k -függését kell vizsgálni a $k \rightarrow 0$ határesetben,

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}.$$

Nagy távolságok esetén a radiális hullámfüggvényre érvényes egyenletben a potenciál elhanyagolható:

$$R_l'' + \frac{2}{r} R_l' + \left[k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2}\right] R_l = 0,$$

ami a szabad mozgást leíró egyenlet. Ennek megoldása

$$R_l = c_1 (-1) \frac{l(2l+1)!!}{k^{2l+1}} r^l \left(\frac{d}{r dr}\right)^l \frac{\sin kr}{r} + \\ + c_2 (-1)^l \frac{r^l}{(2l-1)!!} \left(\frac{d}{r dr}\right)^l \frac{\cos kr}{r}.$$

$kr \gg 1$ esetén

$$R_l \sim \frac{1}{r} \sin\left(kr - \frac{\pi l}{2} + \delta_l\right),$$

ahol $\text{tg } \delta_l \sim \delta_l = \frac{c_2}{c_1(2l-1)!!(2l+1)!!} k^{2l+1}$. k kicsi, ezért valamennyi fázis kicsi. A parciális szórásamplitúdók

$$f_l = \frac{1}{2ik} (e^{2i\delta_l} - 1) \approx \frac{\delta_l}{k},$$

ezért kis k esetén $f_l \sim k^{2l}$, így valamennyi $l \neq 0$ parciális amplitúdó kicsi az $l=0$ amplitúdó mellett. Ezért a teljes szórásamplitúdó

$$f(\vartheta) \approx f_0 = \frac{\delta_0}{k} = \frac{c_2}{c_1} \equiv -\alpha, \quad d\sigma = \alpha^2 d\Omega, \quad \sigma = 4\pi\alpha^2.$$

7.11. A $\psi = \sum_{l=0}^{\infty} A_l P_l(\cos \vartheta) R_l(r)$ parciális sort használva $r < a$ esetén

$$\chi'' + (k^2 + \kappa^2)\chi = 0, \text{ ahol } \chi = rR_0, \quad k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}, \quad \kappa^2 = \frac{2mV_0}{\hbar^2}. \text{ Az}$$

$r=0$ pontban eltűnő megoldás

$$\chi = A \sin Kr, \quad K^2 = k^2 + \kappa^2.$$

$r > a$ esetén

$$\chi'' + k^2\chi = 0, \quad \chi = B \sin(kr + \delta_0).$$

A határfeltételek szerint $\frac{\chi'}{\chi}$ folytonos az $r=a$ helyen, ezért

$$k \text{ ctg}(ka + \delta_0) = K \text{ ctg}(Ka) \equiv D^{-1}, \quad \text{tg } \delta_0 = \frac{kD - \text{tg } ka}{1 + kD \text{ tg } ka}.$$

Ha $ka \ll 1$, akkor

$$\text{tg } \delta_0 \approx \frac{k(D-a)}{1 + k^2 Da},$$

ha $k^2 Da \ll 1$, akkor

$$\text{tg } \delta_0 \approx k(D-a).$$

$$\sigma = \frac{4\pi}{k^2} \sin^2 \delta_0 = 4\pi(D-a)^2 = 4\pi a^2 \left(1 - \frac{\text{tg } Ka}{Ka}\right)^2.$$

Ha $k \ll \kappa$, akkor

$$\sigma \approx 4\pi a^2 \left(1 - \frac{\text{tg } \kappa a}{\kappa a}\right)^2.$$

Ha Ka a $\frac{\pi}{2}$ páratlan számú többszöröse, akkor a hatás-

keresztmetszet nagy, ekkor D nagy és $\text{tg } \delta_0 \approx \frac{1}{\text{tg } ka}$, $\sigma \approx$

$\approx \frac{4\pi}{k^2} (1 - k^2 a^2)$. Ha $\kappa a \rightarrow \frac{\pi}{2}(2n+1)$, akkor a potenciálvölgyben $E \approx 0$ kötött állapot létezik, és ún. rezonanciaszórás jön létre.

7.12. Az előző feladat eredményében V_0 előjelét kell megváltoztatni, és ennek megfelelően κ helyett az $i\kappa$ szorzatot írni.

$$\sigma = 4\pi a^2 \left(1 - \frac{\text{th } \kappa a}{\kappa a}\right)^2.$$

A $\kappa a \gg 1$ határesetben, ami az a sugarú átlátszatlan gömbön való szórásnak felel meg, $\sigma = 4\pi a^2$, a klasszikus érték négyszerese.

7.13. A Schrödinger-egyenlet

$$i \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi + (V_r - iV_i) \psi, \quad \text{ill.}$$

$$-i \frac{\partial \psi^*}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi^* + (V_r + iV_i) \psi^*.$$

Szorozzuk az első ψ^* -gal, a másodikat ψ -vel, és vonjuk ki az elsőből a másodikat. Így a

$$\frac{\partial}{\partial t} (\psi^* \psi) + \text{grad } \mathbf{j} = -\frac{2}{\hbar} V_i \psi^* \psi$$

kontinuitási egyenletre jutunk,

$$\mathbf{j} = \frac{\hbar}{2im} (\psi^* \text{grad } \psi - \psi \text{grad } \psi^*).$$

Az egyenlet fizikai jelentése az, hogy egységnyi térfogatban időegység alatt $\frac{2V_i}{\hbar} \psi^* \psi$ részecske abszorbeálódik. Az abszorpció hatáskeresztmetszet definíciója szerint ez

$$N \sigma_{ab} v \psi^* \psi, \quad \text{így} \quad \sigma_{ab} = \frac{2V_i}{\hbar N v}.$$

7.14. A hullámfüggvény aszimptotikus kifejezése:

$$\psi = \frac{i}{2kr} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) P_l(\cos \vartheta) [(-1)^{l+1} e^{-ikr} - S_l e^{ikr}].$$

A feladat feltételei szerint $l < l_0$ esetén $S_l = 0$, így δ_l komplex, és képzetes része nagyon nagy, $l \geq l_0$ esetén $S_l = 1$, $\delta_l = 0$. A rugalmas szórás amplitúdója

$$f(\vartheta) = -\frac{1}{2ik} \sum_{l=0}^{l_0} (2l+1) P_l(\cos \vartheta).$$

A hatáskeresztmetszet nagy l_0 mellett

$$\sigma_e = \frac{\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{l_0} (2l+1) \approx \frac{\pi l_0^2}{k^2} = \pi a^2.$$

Az optikai tétel megadja a teljes hatáskeresztmetszetet:

$$\text{Im } f(0) = \frac{k \sigma_t}{4\pi}, \quad \text{innen } \sigma_t = 2\pi a^2.$$

A reakció hatáskeresztmetszet $\sigma_r = \pi a^2$, az atommag geometriai keresztmetszete.

7.15. A $(\Delta + k^2)\psi(\mathbf{r}) = U(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r})$, $U(\mathbf{r}) = \frac{2mV(\mathbf{r})}{\hbar^2}$ Schrödinger-egyenlet által leírt szórásprobléma a

$$\psi_{\mathbf{k}}^+(\mathbf{r}) = \varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) - \frac{1}{4\pi} \int \frac{\exp(ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|)}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} U(\mathbf{r}') \psi_{\mathbf{k}}^+(\mathbf{r}') d\mathbf{r}',$$

$$\varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}$$

integrálegyenlet formájában írható fel. A $\psi_{\mathbf{k}}^+(\mathbf{r}) = \varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ Born-

közelítés akkor alkalmazható, ha a potenciál r_0 hatótávolságán belül fennáll, hogy

$$|\varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})| \gg \left| \frac{1}{4\pi} \int \frac{\exp(ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|)}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} U(\mathbf{r}') \varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}') d\mathbf{r}' \right|.$$

Mivel a legtöbb, gyakorlatilag fontos potenciál $r=0$ -ban éri el maximális értékét, ezért azt írhatjuk, hogy

$$\frac{1}{4\pi} \left| \int \frac{U(\mathbf{r})}{r} \exp(ikr + i\mathbf{k}\mathbf{r}) d\mathbf{r} \right| \ll 1.$$

Gömbszimmetrikus potenciálra a szögekre való integrálás után adódik, hogy

$$\frac{1}{2kr_0^2} \left| \int_0^\infty V(r) (\exp(2ikr) - 1) dr \right| \ll \frac{\hbar^2}{2mr_0^2}.$$

Ha a részecskék kinetikus energiája nagy, $kr_0 \gg 1$, akkor az exponenciális tag járuléka elhagyható, és így

$$\frac{1}{2kr_0^2} \left| \int_0^\infty V(r) dr \right| \ll \frac{\hbar^2}{2mr_0^2}.$$

Kis kinetikus energiánál az exponenciális tag sorbafejthető, és az adódik, hogy

$$\frac{1}{r_0^2} \left| \int_0^\infty V(r) r dr \right| \ll \frac{\hbar^2}{2mr_0^2},$$

ami az előbbinél jóval erősebb megszorítás.

A $V(r) = V_0 e^{-r/r_0}$ potenciálra azt kapjuk, hogy $kr_0 \ll 1$ esetén $2mr_0^2 V_0 \ll \hbar^2$, $kr_0 \gg 1$ esetén $mr_0 V_0 \ll \hbar k^2$.

A szórásamplitúdó Born-közelítésben

$$f(\vartheta) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int V(r) \exp(-i\mathbf{q}\mathbf{r}) d\mathbf{r},$$

ahol $\mathbf{q} = \mathbf{k}' - \mathbf{k}$, $\mathbf{k}' = k\mathbf{n}'$ a részecske szórás utáni hullámvektora. A polártengelyt a $\mathbf{q}$ irányba fektetve, a szögek szerinti integrálás elvégezhető. Eredményül azt kapjuk, hogy

$$f(\vartheta) = -\frac{2m}{\hbar^2} \int_0^\infty V(r) \frac{\sin qr}{q} r dr, \quad q = 2k \sin \frac{\vartheta}{2}.$$

A $V(r) = \frac{\alpha}{r} e^{-r/a}$ potenciálra

$$d\sigma = 4a^2 \left(\frac{\alpha m a}{\hbar^2} \right)^2 \frac{d\Omega}{(q^2 a^2 + 1)^2},$$

$$\sigma = 16\pi a^2 \left(\frac{\alpha m a}{\hbar^2} \right)^2 \frac{1}{4k^2 a^2 + 1}.$$

7.17. a) $d\sigma = 2\pi a^2 \left(\frac{mV_0 a^2}{\hbar^2} \right)^2 \exp(-q^2 a^2) d\Omega,$

$$\sigma = \frac{2\pi^2}{k^2} \left(\frac{mV_0 a^2}{\hbar^2} \right)^2 (1 - \exp(-4k^2 a^2)).$$

b) $d\sigma = 4a^2 \left(\frac{mV_0 a^2}{\hbar^2} \right)^2 \frac{(\sin qa - qa \cos qa)^2}{(qa)^6} d\Omega,$

$$\sigma = \frac{2\pi}{k^2} \left(\frac{mV_0 a^2}{\hbar^2} \right)^2 \left[1 - \frac{1}{(2ka)^2} + \frac{\sin 4ka}{(2ka)^3} - \frac{\sin^2 2ka}{(2ka)^4} \right].$$

7.18. Az atom töltéssűrűségét jelölje $\varrho(r)$. A Poisson-egyenlet $\Delta\varphi = -4\pi\varrho(r)$. Ebből következik, hogy

$$\int \varphi \exp(-i\mathbf{q}\mathbf{r}) d\mathbf{r} = \frac{4\pi}{q^2} \int \varrho \exp(-i\mathbf{q}\mathbf{r}) d\mathbf{r}.$$

$\varrho = -en(r) + e\delta(\mathbf{r})$, $n(r)$ az elektronsűrűség. Ezt beírva kapjuk, hogy

$$\int V \exp(-i\mathbf{q}\mathbf{r}) d\mathbf{r} = \frac{4\pi e^2}{q^2} (1 - F(q)),$$

ahol $F(q) = \int n(r) \exp(-i\mathbf{q}\mathbf{r}) d\mathbf{r}$, az atom alakfaktora. A hidrogénatom alapállapotában

$$n(r) = \frac{1}{\pi a^3} \exp\left(-\frac{2r}{a}\right),$$

a az első Bohr-sugár.

$$F(q) = \frac{4\pi}{q} \int_0^\infty n(r) \sin qr dr = \frac{1}{\left(1 + \frac{q^2 a^2}{4}\right)^2}.$$

A differenciális hatáskeresztmetszet:

$$d\sigma = \frac{4a^2(8 + q^2 a^2)^2}{(4 + q^2 a^2)} d\Omega \quad \left(q = 2k \sin \frac{\vartheta}{2} \right),$$

a teljes hatáskeresztmetszet:

$$\sigma = \frac{\pi a^2}{3} \frac{7k^4 a^4 + 18k^2 a^2 + 12}{(k^2 a^2 + 1)^3}.$$

Ha $ka \gg 1$, akkor $\sigma = \frac{7\pi}{3k^2}$.

8. Töbttestprobléma

8.1. A Schrödinger-egyenlet

$$\left[\sum_{k=1}^N \left(-\frac{\hbar^2}{2m_k} \Delta_k + \hat{U}_k(\mathbf{r}_k) \right) + \frac{1}{2} \sum_{k \neq l=1}^N \hat{V}_{kl}(\mathbf{r}_k - \mathbf{r}_l) \right] \psi = E\psi.$$

Új koordinátákat vezetünk be: