

2015/16/1 Kvantummechanika B 2.ZH

2015. december 10.

Információk

0. A ZH ideje minimum 90 perc, maximum 180 perc.
1. Az összesen elérhető pontszám 270 pont.
2. A jeles érdemjegy eléréséhez nem szükséges az összes feladat hibátlan megoldása
3. Az elégséges jegy megszerzéséhez mindenképpen oldjatok a sok állapotú rendszereket, és a könnyebb degenerált perturbáció számításokat!
4. Nem véletlenül lehet füzetet használni!
5. Minden feladat legyen külön lapon, szépen, jól átláthatóan leírva!
6. Egyéb kérdéssel forduljatok bizalommal a gyakorlatvezetőkhez!

1. Hidrogénatom

1.1. Várható értékek

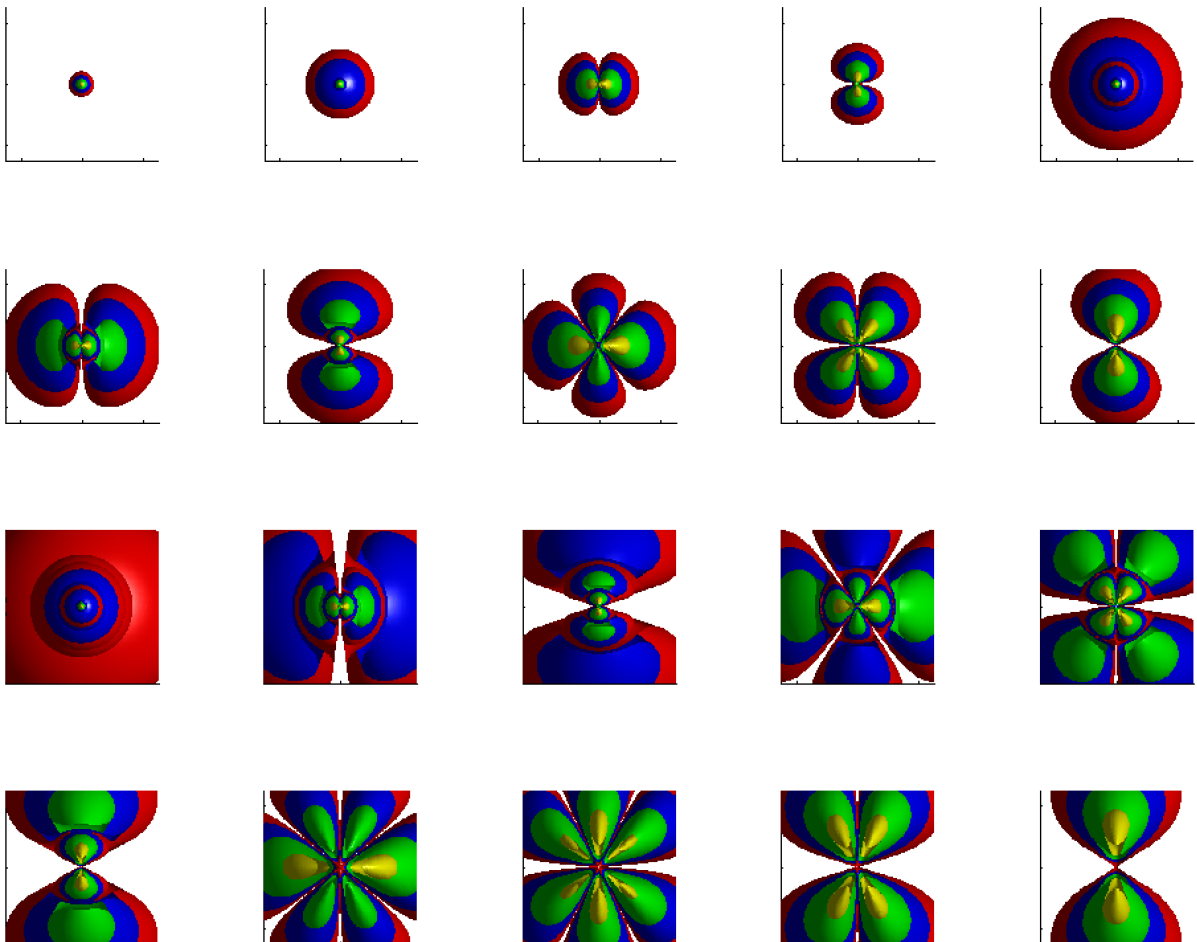
Legyen egy hidrogén atom $n, l = n - 1$ kvantumszámokkal rendelkező állapotban. Megmutatható, hogy a hullámfüggvény radiális része az következő:

$$R_{n,l-1} = N_n r^{n-1} \exp\left(-\frac{r}{na}\right) \quad (1)$$

- Határozzuk meg a normálási tényezőt!
- Határozzuk meg $\langle r \rangle$ és $\langle r^2 \rangle$ várható értékeket!
- Mutassuk meg, hogy $\sigma_r = \frac{\langle r \rangle}{\sqrt{2n+1}}$
- Növekvő n -re egyre keskenyebb, és ezzel egyidejűleg egyre csúcsosabb lesz a hullámfüggvény, Mit jelent ez fizikailag?

1.2. Hullámfüggvény

Jelöljék be mindegyik képhez, hogy mely nlm kvantumszámokhoz tartoznak!



2. Elektron mágneses térben

2.1. Konstans tér

Vegyünk egy elektront és tegyük konstans mágneses térbe: $\vec{B} = B_0 \vec{e}_z$. Az elektron Hamilton operátora (spin-függő rész):

$$H_0 = \frac{eB_z}{m} S_z \quad (2)$$

- a. Írjuk fel ezt mátrix alakban!

Kapcsoljunk be egy perturbációt, úgy hogy egy konstans x irányú mezőt alkalmazunk:

$$H' = \frac{e}{m} B_x S_x \quad (3)$$

- b. Írjuk fel ezt is mátrix alakban!
c. Oldjuk meg $H = H_0 + H'$ sajátérték problémáját!
d. Becsüljük meg az alapállapot energiát variációs módszerrel is. Legyen az próbafüggvény az alábbi:

$$|\Psi\rangle = \begin{pmatrix} \cos(\alpha) \\ \sin(\alpha) \end{pmatrix} \quad (4)$$

- e. Mennyire tér el az egzakt megoldástól?

2.2. Oszcilláló tér

Legyen a mágneses tér időfüggő:

$$\vec{B} = B_0 \cos(\omega t) \vec{e}_z \quad (5)$$

- a. Határozzuk meg az elektron Hamilton operátorát!

$$H = -\gamma \vec{B} \cdot \vec{S} \quad (6)$$

- b. Kezdeti állapot legyen olyan, hogy S_x -et megmérve $\frac{\hbar}{2}$ -t kapunk. Határozzuk meg az állapot időfejlődését! Vigyázat! Hamilton is függ explicite az időtől!
c. Mekkora annak valószínűsége, hogy az elektron x irányú spinjének mérésekor $-\frac{\hbar}{2}$ -t mérünk! Lehetséges, hogy teljesen megforduljon? Hogy függ ez a mágneses tér nagyságától?

3. Variáció számítás

3.1. Elméleti alapok

Bizonyára felmerült a kérdés minden esetben, hogy a variációs módszernél egyáltalán minek próbafüggvény? Mindenki tud variálni, és megkeresni egy funkcionál szélsőértékét. Amennyiben ez a szélsőérték minimum, meg is találtuk a keresett hullámfüggvényt!

- a. Keressük meg a variációszámítás szabályait alkalmazva az energia-funkcionál szélsőértékét. Milyen egyenletet kapunk? Olyan függvényekre szorítkozunk, melyeknek egyre normáltak. Tekintsük ezt egy holonom kényszernek!
b. A kapott differenciál egyenlet megoldása mennyire közelíti jól a valódi megoldását a problémának?
c. Milyen esetben kapunk egzakt megoldást?

3.2. Mi lehet a baj?

Természetesen ismerjük a dobozba zárt részecske kvantummechanikáját. Azt is tudjuk, hogy megfelelő koordinátázás esetén az alapállapot hullámfüggvénye:

$$\Psi(x, y, z) = \sqrt{\frac{8}{abc}} \sin\left(\frac{\pi}{a}x\right) \sin\left(\frac{\pi}{b}y\right) \sin\left(\frac{\pi}{c}z\right) \quad (7)$$

Míg az energia:

$$E_{111} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m} \left(\frac{1}{a^2} + \frac{1}{b^2} + \frac{1}{c^2} \right) \quad (8)$$

Alkalmazzuk erre a variációs módszert! Harmonikus oszcillátor esetén láttunk, hogy e^{-bx^2} próbafüggvénnyel vissza kaptuk az egzakt megoldást! Most legyen a próbafüggvényünk a következő:

$$\Psi_p = N \sin(k_x x) \sin(k_y y) \sin(k_z z) \quad (9)$$

- A fenti próbafüggvényt használva becsüljük meg az alapállapot energiát!
- Az egyszerű, naiv számolás során beleütközünk egy problémába, hogy 0-t kapunk eredményül, ami biztosan nem lehet jó! Mi lehet ennek az oka? Ezek szerint nem jó mindenre ez a módszer? Mikor alkalmazható?

3.3. Összehasonlítás

Perturbáljuk az egydimenziós harmonikus oszcillátort egy λx^6 -os taggal.

- Mikor tekinthető ez a tag perturbációnak? Adjuk meg egy skálázást a bemenetei paraméterekkel (m, ω_0, \hbar).
- Oldjuk meg a. részt máshogyan is! Mihez lehet még mérni λ paramétert?
- Vegyük próbafüggvénynek az alábbi

$$\Psi_p = N e^{-bx^2}$$

Becsüljük meg az alapállapot energiát variációs módszerrel!

- Mekkora az energijárulék a perturbálatlan energiához képest? Hasonlítsuk össze ezt az energijárulékot azzal, amit nem degenerált perturbációszámításnál kapunk!

3.4. Hélium alapállapota

Becsüljük meg a Hélium atom alapállapot energiáját! A próbafüggvényt legyen két hidrogénatom alapállapot hullámfüggvényének (100 állapotának) szorzata. A Hamilton függvény tartalmazza a két Coulomb potenciálban mozgó részecske hullámfüggvényét, és a kölcsönhatási tagot is!

$$H = \frac{p_1^2}{2m} + \frac{Ze^2}{r_1} + \frac{p_2^2}{2m} + \frac{Ze^2}{r_2} + \frac{e^2}{|r_1 - r_2|} \quad (10)$$

$$\Phi_{100} = \left(\frac{Z^3}{\pi a_0^3} \right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{Zr}{a_0}} \quad (11)$$

Annyit még tegyünk meg, hogy a Hidrogén hullámfüggvénybe egy módosított Z -t teszünk bele ($Z \rightarrow Z^*$). Ennek van fizikai megfontolása is. Mi lehet ez a megfontolás? Ezt a módosított Z lesz az paraméter, amelyet hangolunk majd ($Z^* < Z$). Megoldás során mindenképpen maradjon érvényben a többet ésszel, mint erővel elv! Vegyük észre a lehetséges trükköket!

4. Degenerált perturbációszámítás

4.1. A speciálisan választott paraméterek

Adott egy olyan rendszer, hogy x, y irányban be van zárva egy dobozba, z irányban pedig kvadratikusan mozog!

$$V(x, y, z) = \frac{1}{2} m \omega^2 z^2 + V(x, y)_{\text{doboz}} \quad (12)$$

A doboz méretei a, b , ahol $a = b$. Abban az érdekes helyzetben vagyunk, hogy van egy összefüggés a kvadratikusság paramétere és a doboz paramétere között:

$$2\omega = \frac{\hbar\pi^2}{ma^2} \quad (13)$$

- Melyik a legalacsonyabb degenerált energiaszint? Hányszorosan degenerált? Mik a hozzá tartozó hullámfüggvények?
- Van-e háromszorosan degenerált energiaszint? Mik a hullámfüggvények?
- Vegyük az utóbbi esetet. Adjunk a potenciálhoz egy $V(x, y)_p = \lambda xyz$ tagot. Adjuk meg a szintek felhasadását. Ábrázoljuk ezt a szokásos diagramon is!

4.2. Hét állapotú rendszer

Adott az alábbi hét állapotú rendszer leíró Hamilton operátor:

$$H_0 = \begin{pmatrix} \epsilon_0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \epsilon_0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \epsilon_0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \epsilon_1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \epsilon_1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \epsilon_2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \epsilon_2 \end{pmatrix} \quad (14)$$

Perturbáció legyen a következő:

$$H' = \begin{pmatrix} 0 & 0 & w & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ w & 0 & w & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 2w & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2w & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -iw \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & iw & 0 \end{pmatrix} \quad (15)$$

Legyen $w \ll \epsilon_0 < \epsilon_1 < \epsilon_2$. Oldjuk meg a felhasadások problémáját! Mik a jó saját függvények? Ezek után legyen $\epsilon_i = \epsilon(i+1)$, míg $w = \frac{4}{3}\epsilon$. Mik lesznek a nívók sorrendjei, ha kezdetben $s_1 = s_2 = s_3 = \epsilon$, $p_1 = p_2 = 2\epsilon$, $d_1 = d_2 = 3\epsilon$ voltak. Legyenek ezek a szintek index szerint növekvő sorrendben ($s_3 \geq s_2 \geq s_1$).

5. Pontozás

Feladatszám	Maximális pontszám	Szerzett pontszám
1.1	20	
1.2	10	
2.1	20	
2.2	30	
3.1	20	
3.2	10	
3.3	40	
3.4	50	
4.1	40	
4.2	30	
Összesített	270	

Gyakorlat értékelése (ettől nem függ az érdemjegy :))

Értékelj 1-5 közötti skálán az alábbi kérdéseket

Kérdés	Értékelés (1-5)
Mennyire volt érthető a gyakorlat anyaga?	
Milyen volt az óra hangulata?	
Kielégítőek voltak-e a kérdésekre adott válaszok?	
Elégedett vagy-e a kapott jeggyel (első ZH)?	
Elegendő tudást nyújtott-e a gyakorlat?	

Min változtatnál?

Bármely megjegyzés