KVANTUMMECHANIKA I. Gyakorlat

Sailer Kornél

1 . gyakorlat

1. Mutassuk meg, hogy ha monokromatikus Röntgen-sugárzás (ν frekvenciájú síkhullám) szóródik atomi elektronon, akkor a szórt Röntgen-sugárzás ν' frekvenciájára

$$h\nu' - h\nu = -\frac{4h^2\nu\nu'}{m_e c^2}\sin^2\frac{\theta}{2} \tag{1.0.1}$$

adódik, ahol θ a szórási szög, h a Planck-állandó, m_e az elektron nyugalmi tömege, c a vákuumbeli fénysebesség. A bizonyításhoz éljünk azzal a feltevéssel, hogy a Röntgen-sugárzásban a $h\nu$ energiájú, $h\vec{k}$ ($|\vec{k}|c = 2\pi\nu$) impulzusú foton rugalmasan ütközik az atom szabadnak tekinthető, kezdetben nyugalomban levő elektronjával. Határozza meg a Röntgen-sugárzás hullámhosszának eltolódását a Compton-szórásban!

2. A relativisztikus részecskére vonatkozó Einstein-féle energia, impulzus és nyugalmi tömeg közti összefüggés alapján mutassa meg, hogy a foton nyugalmi tömege zérus kell legyen.

3. Határozza meg az ideális vezető L oldalélű, kockaalakú üregében az elektromos térerősségre vonatkozó

$$\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2\vec{E}}{\partial t^2} - \Delta\vec{E} = 0 \tag{1.0.2}$$

homogén hullámegyenlet állóhullámú megoldásainak teljes rendszerét. Használja fel, hogy ideális vezető felületén az elektromos térerősség azonosan zérus, és hogy az elektromos hullám transzverzális.

4. Határozza meg ideális vezető kockaalakú üregében az $(\omega, \omega+d\omega)$ körfrekvencia-intervallumba eső elektromágneses állóhullámú módusok számát!

5. Tegyük fel, hogy egy ν frekvenciájú lineáris harmónikus oszcillátor eleget tesz a Planck-féle hipotézisnek, azaz csak az $\epsilon_0 = h\nu$ energiakvantum egész számú többszöröseinek megfelelő energiaértékeket vehet fel! Tegyük fel, hogy az oszcillátor a T hőmérsékletű környezetével termikus egyensúlyban van, azaz annak a w_n valószínűsége, hogy az oszcillátor energiája $\epsilon_n = n\epsilon_0$:

$$w_n = \frac{e^{-\frac{\epsilon_n}{k_B T}}}{\sum_{n'=0}^{\infty} e^{-\frac{\epsilon_{n'}}{k_B T}}}. \tag{1.0.3}$$

Mivel egyenlő ekkor a ν frekvenciájú oszcillátor $\bar{\epsilon}$ átlagos energiája? Mit mondhatunk a klasszikus mechanikai lineáris oszcillátor átlagenergiájáról, amikoris $\epsilon_0 \to 0$, azaz az oszcillátor folytonosan vehet fel tetszőleges energiaértékeket. Mit mondhatunk a kvantált oszcillátor átlagenergiájáról a Planck-hipotézis alapján, ha $h\nu/k_BT >> 1$, ill. ha $h\nu/k_BT << 1$?

6. A kvantummechanikai oszcillátor a kvantummechanika értelmében, mint azt később meg fogjuk tanulni, $\epsilon_n = (\frac{1}{2} + n)h\nu$ $(n = 0, 1, 2, \ldots)$ diszkrét energiaértékeket vehet fel. Milyen következménye van a Planck-hipotézistől való eltérésnek az előző feladatban feltett kérdések tekintetében?

2 . gyakorlat

1. Egy véletlen kísérlet lehetséges kimenetelei A_1, A_2, ..., A_n, amelyek rendre N_1, N_2, ..., N_n gyakorisággal következnek be $N \gg 1$ számú függetlenül elvégzett, azonos kísérletben. Mivel egyenlők a kísérlet egyes kimeneteleinek r_k $(k = 1, 2, \ldots, n)$ relatív gyakoriságai és azok összege? Mivel egyenlő a véletlen kísérlet egyes kimenetelei $w_k = \lim_{N\to\infty} r_k$ $(k = 1, 2, \ldots, n)$ valószínűségeinek összege? Milyen pontos alsó és felső korlátja van a w_k valószínűségeknek?

2. Az f diszkrét valószínűségi változó az f_1, f_2, ..., f_n lehetséges értékeit rendre w_1, w_2, ..., w_n valószínűséggel veszi fel. Mivel egyenlő az f valószínűségi változó $\bar{f}$ várható értéke és $\Delta^2 f$ szórásnégyzete?

3. Ha f diszkrét valószínűségi változó, amely csak az 1/2, 1/3 és 1/4 értékeket veheti fel, rendre 1/6, 2/3 és 1/6 valószínűséggel, akkor mivel egyenlő $\bar{f}$ és $\Delta^2 f$.

4. Legyen f az a valószínűségi változó, amelyet kockadobás eredményeként kapunk, lehetséges értékei 1, 2, ..., 6, és tegyük fel, hogy minden dobási eredmény egyenlően valószínű, w. Mivel egyenlő ez a w valószínűség, és mi a kockadobás eredményének $\bar{f}$ várható értéke és relatív szórása?

5. Legyen x valószínűségi változó, amely a -1, 0, $+1$ értékeket veheti fel rendre 10^{-3}, $1-2\cdot10^{-3}$, 10^{-3} valószínűséggel. Határozza meg $\bar{x}$-et, $\Delta^2 x$-et és x relatív szórását!

6. Legyen ξ folytonos valószínűségi változó, amely értékét a valós számok között veszi fel. Definíció szerint a ξ változó valószínűségi eloszlásfüggvénye

$$F(x) = w(\xi \leq x) \tag{2.0.4}$$

annak a valószínűsége, mint x függvénye, hogy ξ az x-nél nem nagyobb értéket vesz fel. Mutassa meg, hogy $F(-\infty) = 0$, $F(\infty) = 1$ és hogy $F(x)$ monoton növekvő függvény.

7. Legyen ξ folytonos valószínűségi változó, amely értékét a valós számok között veszi fel. Definíció szerint a ξ változó $f(x)$ valószínűségi sűrűségfüggvényét a

$$w(\xi \leq x + dx) - w(\xi \leq x) = f(x)dx \tag{2.0.5}$$

összefüggés határozza meg. Ez azt jelenti, hogy $f(x)dx$ annak a valószínűsége, hogy a ξ valószínűségi változó az $(x, x+dx)$ infinitezimális intervallumban veszi fel az értékét. Mutassa meg, hogy a valószínűségi sűrűségfüggvény nem negatív, $f(x) \geq 0$; hogy

$$F(x) = \int_{-\infty}^{x} f(x')dx'; \tag{2.0.6}$$

és hogy

$$1 = \int_{-\infty}^{\infty} f(x)dx. \tag{2.0.7}$$

Ha az eloszlásfüggvény differenciálható, akkor $f(x) = dF(x)/dx$.

8. Bizonyítsa be általában, hogy a szórásnégyzet mindig kiszámolható, mint a valószínűségi változó négyzete várható értékének és a várható értéke négyzetének a különbsége:

$$\Delta^2 x = \overline{(x-\bar{x})^2} = \overline{x^2} - \bar{x}^2. \tag{2.0.8}$$

Vizsgálja külön a diszkrét, majd a folytonos valószínűségi változó esetét.

9. Ha ξ egyenletes eloszlású valószínűségi változó, azaz ha

$$f(x) = \begin{cases} C, & \text{ha} \quad x \in [a,b] \\ 0, & \text{ha} \quad x \notin [a,b] \end{cases} \tag{2.0.9}$$

akkor határozza meg $F(x)$ valószínűségi eloszlásfüggvényt, $\bar{\xi}$-t és $\Delta^2\xi$-t.

10. Legyen ξ normális eloszlású valószínűségi változó, azaz a valószínűségi sűrűségfüggvénye

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{-\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma^2}}, \tag{2.0.10}$$

ahol x_0 tetszőleges valós paraméter, $\sigma > 0$ paraméter. Határozza meg $F(x)$ eloszlásfüggvényt; mutassa meg, hogy $F(\infty) = 1$, és határozza meg $\bar{\xi}$-t és $\Delta^2\xi$-t.

3 . gyakorlat

1. Határozza meg az intenzitás-eloszlást a felfogó ernyőn a Young-féle kettős réses interferencia-kísérletben.

2. Mutassa meg, hogy azok az $f(x) : x \in R \mapsto f \in C$ függvények, amelyek az alábbi tulajdonságúak, L_α lineáris vektorteret alkotnak a komplex számtest fölött:

   (a) értelmezési tartományuk az $x \in [a,b]$ intervallum;

(b) létezik tetszőleges 2 függvény esetén a

$$\int_a^b f_1^*(x) f_2(x) dx \tag{3.0.11}$$

integrál, amelynek értéke komplex szám;

(c) tetszőleges függvény eleget tesz az $f(b) = e^{i\alpha} f(a)$ határfeltételnek, ahol $\alpha \in [0, 2\pi)$ adott valós szám.

3. Mutassa meg, hogy az L_α függvénytéren értelmezett

$$\langle f_1 | f_2 \rangle = \int_a^b f_1^*(x) f_2(x) dx \tag{3.0.12}$$

skalárszorzat

(a) lineáris a második tényezőjében;

(b) $\langle f_1 | f_2 \rangle = \langle f_2 | f_1 \rangle^*$ tulajdonságú;

(c) pozitív szemidefinit, azaz $\langle f | f \rangle \geq 0$ és akkor és csak akkor zérus az értéke, ha $f(x) \equiv 0$.

4. Az L_α függvénytér önmagára történő lineáris leképezéseit lineáris operátoroknak nevezzük. Jelöljön $\hat{O}$ tetszőleges, L_α-n értelmezett lineáris operátort. Az $\hat{O}$ lineáris operátor mátrixelemein az

$$\langle f | \hat{O} | g \rangle = \langle f | \hat{O} g \rangle \tag{3.0.13}$$

skalárszorzatot értjük. Itt és az alábbi definíciókban f, $g \in L_\alpha$ tetszőleges függvények. Az $\hat{O}$ operátor komplex konjugáltján olyan operátort értünk, amelynek tetszőleges mátrixelemére

$$\langle f | \hat{O}^* | g \rangle = \langle f | \hat{O} | g \rangle^*. \tag{3.0.14}$$

Az $\hat{O}$ lineáris operátor adjungáltján azt az $\hat{O}^\dagger$ operátort értjük, amelyre

$$\langle f | \hat{O}^\dagger | g \rangle = \langle g | \hat{O} | f \rangle^*. \tag{3.0.15}$$

Az $\hat{O}$ operátort önadjungáltnak nevezzük (a bevezetett skalárszorzatra nézve), ha $\hat{O}^\dagger = \hat{O}$, azaz ha tetszőleges mátrixelemre

$$\langle f | \hat{O} | g \rangle = \langle g | \hat{O} | f \rangle^* \tag{3.0.16}$$

A fenti definíciókat figyelembe véve mutassuk meg, hogy

(a) $\hat{x} = x\cdot$ operátor lineáris és önadjungált;

(b) $\hat{p}_x = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$ operátor lineáris és önadjungált

az L_α függvénytéren.

5. Határozza meg az L_α függvénytéren értelmezett $\hat{p}_x = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$ operátor sajátértékeit és normált sajátfüggvényeit.

4 .gyakorlat

1. Egy részecske az $x_0 = 0$, $x_1 = a, \ldots, x_N = Na$ rácspontok által meghatározott egy-dimenziós rácson tartózkodik. A részecskének $(N+1)$ darab független állapota van, amelyek rendre megfelelnek annak, hogy a részecske az egyes rácspontok valamelyikében tartózkodik, ezért a részecske állapotainak Hilbert-tere $N+1$ dimenziós. A részecske állapotait ezért $(N+1)$ elemű, komplex számokból alkotott számoszlopokkal ábrázolhatjuk.

   (a) Mutassuk meg, hogy tetszőleges $\underline{\psi}$ és $\underline{\phi}$ oszlopvektorok esetén

   $$\underline{\psi}^\dagger \underline{\phi} = \sum_{j=0}^{N} \psi_j^* \phi_j \tag{4.0.17}$$

   eleget tesz a Hilbert-téren szokásosan értelmezett skalárszorzat tulajdonságainak. Itt ψ_j a $\underline{\psi}$ számoszlop j-edik sorának eleme.

   (b) Ábrázoljuk azt a koordináta-sajátállapotot, hogy a részecske az x_j ($j = 0, 1, \ldots, N$) rácspontban tartózkodik, az $\underline{x}^j$ $(N+1)$-elemű oszlopvektorral:

   $$\underline{x}^j = \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} \tag{4.0.18}$$

   ahol a j-edik sorban álló elem 1 és az oszlop többi eleme zérus, azaz $x_k^j = \delta_{k,j}$. Keresse meg a helykoordináta-operátort, azaz azt az $\underline{\underline{x}}$ mátrixot, amelynek az $\underline{x}^j$ vektorok rendre az x_j sajátértékhez tartozó sajátvektorai:

   $$\underline{\underline{x}}\ \underline{x}^j = x_j \underline{x}^j. \tag{4.0.19}$$

   (c) Az $\underline{x}^j$ koordináta-sajátállapotok segítségével írja fel a Hilbert-tér egy tetszőleges, 1-re normált vektorát. Írja fel az $\underline{\underline{x}}$ koordináta-operátor hatását egy ilyen tetszőleges állapotvektorra explicit módon.

   (d) Mutassa meg, hogy az impulzus

   $$p_{j,k} = \frac{i\hbar}{a}(\delta_{j,k+1} - \delta_{j,k-1}) \tag{4.0.20}$$

   mátrixa (operátora) az

   $$[\underline{\underline{x}}, \underline{\underline{p}}] = i\hbar \underline{\underline{c}} \tag{4.0.21}$$

   Heisenberg-féle határozatlansági relációt elégíti ki, ahol $c_{j,k} = \delta_{j,k-1} + \delta_{j,k+1}$. (Diszkrét rácson a határozatlansági reláció annyiban módosul, hogy az egyenlőség jobb oldalán nem az egységmátrix, hanem a $\underline{\underline{c}}$ mátrix áll.)

2. Legyenek $\hat{f}$, $\hat{g}$ és $\hat{h}$ tetszőleges lineáris operátorok és λ tetszőleges komplex szám. Mutassuk meg a kommutátorok alábbi tulajdonságait:

   (a)
$$\lambda[\hat{f}, \hat{g}] = [\lambda\hat{f}, \hat{g}] = [\hat{f}, \lambda\hat{g}], \tag{4.0.22}$$

   (b)
$$[\hat{f}, \hat{g} + \hat{h}] = [\hat{f}, \hat{g}] + [\hat{f}, \hat{h}], \tag{4.0.23}$$

   (c)
$$[\hat{f}, \hat{g}] = -[\hat{g}, \hat{f}], \tag{4.0.24}$$

   (d) Jacobi-azonosság:
$$[\hat{f}, [\hat{g}, \hat{h}]] + [\hat{g}, [\hat{h}, \hat{f}]] + [\hat{h}, [\hat{f}, \hat{g}]] = 0. \tag{4.0.25}$$

3. Fejezze ki az $[\hat{A}\hat{B}, \hat{C}]$ kommutátort az $[\hat{A}, \hat{C}]$ és a $[\hat{B}, \hat{C}]$ kommutátorokkal!

5 . gyakorlat

1. Legyen $\hat{A}(\lambda)$ a λ valós paramétertől függő operátor és deriváltjának a definíciója
$$\frac{d\hat{A}}{d\lambda} = \lim_{\epsilon\to 0} \frac{\hat{A}(\lambda+\epsilon) - \hat{A}(\lambda)}{\epsilon}. \tag{5.0.26}$$
   Mutassa meg, hogy

   (a) érvényes a Leibnitz-szabály,
$$\frac{d}{d\lambda}(\hat{A}\hat{B}) = \frac{d\hat{A}}{d\lambda}\hat{B} + \hat{A}\frac{d\hat{B}}{d\lambda}; \tag{5.0.27}$$

   (b) továbbá, hogy ha létezik az $\hat{A}(\lambda)$ operátor inverze, akkor
$$\frac{d}{d\lambda}[\hat{A}(\lambda)]^{-1} = -\hat{A}^{-1}(\lambda)\frac{d\hat{A}(\lambda)}{d\lambda}\hat{A}^{-1}(\lambda). \tag{5.0.28}$$

2. Mutassa meg, hogy ha az $\hat{A}$ és $\hat{B}$ operátorok eleget tesznek az
$$[[\hat{A}, \hat{B}], \hat{A}] = 0 \tag{5.0.29}$$
   relációnak, akkor tetszőleges $m \geq 1$ egész szám esetén
$$[\hat{A}^m, \hat{B}] = m\hat{A}^{m-1}[\hat{A}, \hat{B}] \tag{5.0.30}$$
   azonosság teljesül. A bizonyítást célszerű teljes indukcióval végezni.

3. Mi a szükséges és elégséges feltétele annak, hogy

$$(\hat{A}\hat{B})^2 = \hat{A}^2\hat{B}^2 \tag{5.0.31}$$

teljesüljön?

4. Ha létezik az $\hat{A}$ és a $\hat{B}$ operátorok inverze, akkor mivel egyenlő $(\hat{A}\hat{B})^{-1}$?

5. A geometriai sor összege

$$\sum_{n=0}^{\infty} x^n = \frac{1}{1-x}, \qquad |x| < 1. \tag{5.0.32}$$

Ennek általánosítása az operátorokra vonatkozó Neumann-sor:

$$\sum_{n=0}^{\infty} \hat{C}^n = (\hat{1} - \hat{C})^{-1}, \tag{5.0.33}$$

feltételezve, hogy $\hat{C}$ kellően ,,jó tulajdonságú" operátor ahhoz, hogy a sor ,,valamilyen értelemben" konvergáljon.

Fejtse sorba a Neumann-sor felhasználásával az $(\hat{A} - \lambda\hat{B})^{-1}$ operátort a λ paraméter hatványai szerint, ha létezik $\hat{A}^{-1}$.

6. * Komplex z_1 és z_2 számok esetén

$$e^{z_1+z_2} = e^{z_1}e^{z_2} \tag{5.0.34}$$

azonosságként teljesül az exponenciális függvényre. Ugyanakkor általában, ha $\hat{A}$ és $\hat{B}$ tetszőleges operátorok, akkor

$$e^{\hat{A}+\hat{B}} \neq e^{\hat{A}}e^{\hat{B}}. \tag{5.0.35}$$

Mutassa meg, hogy ha

$$[\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]] = [\hat{B}, [\hat{A}, \hat{B}]] = 0, \tag{5.0.36}$$

akkor

$$e^{\hat{A}+\hat{B}} = e^{\hat{A}}e^{\hat{B}}e^{\frac{1}{2}[\hat{A},\hat{B}]}. \tag{5.0.37}$$

Használja fel, hogy az $e^{\hat{A}}$ operátor a Taylor-sorával van értelmezve,

$$e^{\hat{A}} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\hat{A}^n}{n!}. \tag{5.0.38}$$

A megoldáshoz: A feladatot úgy oldhatjuk meg egyszerűen, hogy differenciálegyenletet vezetünk le a $\hat{T}(s) = e^{s\hat{A}}e^{s\hat{B}}$ operátorra, képezve annak az s valós paraméter szerinti deriváltját,

$$\frac{d\hat{T}(s)}{ds} = (\hat{A} + \hat{B} + s[\hat{A}, \hat{B}])\hat{T}(s). \tag{5.0.39}$$

Ahhoz, hogy a jobb oldal s-ben lineáris alakot öltsön, fel kellett használnunk az exponenciális függvény Taylor-sorát, valamint a 2. feladatban bizonyított azonosságot, s ezután újra felösszegezni a Taylor-sort. Keressük a differenciálegyenlet $\hat{T}(0) = \hat{1}$ kezdeti feltételhez tartozó megoldását

$$\hat{T}(s) = e^{s\hat{P}+\frac{1}{2}s^2\hat{Q}} \tag{5.0.40}$$

alakban és mutassuk meg, hogy $\hat{P}$ és $\hat{Q}$ alkalmas választása esetén a differenciálegyenletnek ez valóban megoldása. Végül a keresett azonosságot az $s = 1$ helyettesítéssel kapjuk.

6 . gyakorlat

1. Az evolúciós operátor eleget tesz az

$$i\hbar \frac{\partial \hat{U}(t, t_0)}{\partial t} = \hat{H}(t)\hat{U}(t, t_0) \tag{6.0.41}$$

mozgásegyenletnek. Mutassa meg, hogy az

$$i\hbar \frac{\partial \hat{U}(t, t_0)}{\partial t_0} = \hat{U}(t, t_0)\hat{H}(t_0) \tag{6.0.42}$$

differenciálegyenlet is teljesül.

2. * Mutassa meg, hogy az evolúciós operátor

$$\hat{U}(t, t_0) = Te^{-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} d\tau \hat{H}(\tau)} \tag{6.0.43}$$

alakba írható, ahol T az időrendezés operátora, ami tetszőleges időtől függő $\hat{A}(t)$ operátor esetén a különböző időargumentumoknál vett tényezők szorzatára az alábbi módon hat:

$$\begin{aligned} T(\hat{A}(t_1)\hat{A}(t_2)) &= \begin{cases} \hat{A}(t_1)\hat{A}(t_2), & \text{ha} \quad t_1 > t_2 \\ \hat{A}(t_2)\hat{A}(t_1), & \text{ha} \quad t_2 > t_1 \end{cases} \\ &= \Theta(t_2 - t_1)\hat{A}(t_2)\hat{A}(t_1) + \Theta(t_1 - t_2)\hat{A}(t_1)\hat{A}(t_2). \end{aligned} \tag{6.0.44}$$

Itt $\Theta(x) = 1$, ha $x > 0$ és $= 0$, ha $x < 0$, az úgynevezett Heaviside-féle lépcsőfüggvény.

Javaslat: A bizonyításhoz meg kell mutatni, hogy a feltételezett alak megoldása az evolúciós operátor differenciálegyenletének az $\hat{U}(t_0, t_0) = \hat{1}$ kezdőfeltétellel. Ahhoz, hogy erről meggyőződjön, írja fel a feltételezett megoldás Taylor-sorát, deriválja azt tagonként t szerint parciálisan, majd végezze el tagonként az időrendezést és összegezze fel újra a Taylor-sort.

3. A 4. gyakorlat 1. feladatában megtaláltuk az egy-dimenziós rácson mozgó, koordináta-sajátállapotban levő részecske koordináta-hullámfüggvényeit,

$$x^j(x_k) = \langle x^k | x^j \rangle = \underline{x}^{k\dagger} \underline{x}^j = \delta_{j,k} \tag{6.0.45}$$

(diszkrét változós függvények), és ezek lineáris szuperpozíciójaként előállítottuk egy tetszőleges állapot

$$\psi(x_k) = \langle x^k | \psi \rangle = \underline{x}^{k\dagger} \underline{\psi} \tag{6.0.46}$$

koordináta-hullámfüggvényét (diszkrét változós komplex értékű függvények). Meghatyároztuk továbbá a koordináta-operátor $\underline{\underline{x}}$ és az impulzus-operátor $\underline{\underline{p}}$ mátrixát koordináta-reprezentációban.

(a) Mutassa meg, hogy a koordináta-operátor tetszőleges állapot $\psi(x_k)$ hullámfüggvényére úgy hat, hogy x_k-val szorozza azt,

$$\hat{x}\psi(x_k) = x_k \psi(x_k), \tag{6.0.47}$$

továbbá az impulzus operátora tetszőleges $\psi(x_k)$ hullámfüggvényre úgy hat, hogy

$$\hat{p}\psi(x_k) == \sum_{j=0}^{N} p_{k,j} \psi(x_j), \tag{6.0.48}$$

ahol $p_{k,j} = \frac{\hbar}{ia}(\delta_{k,j} - \delta_{k,j-1})$, ami éppen a folytonos esetből ismert $\hat{p}_x = \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}$ operátor differenciahányados segítségével felírt közelítése, diszkretizált alakja.

(b) Periódikus határfeltételt írva elő a hullámfüggvényre, $\psi(x_0) = \psi(x_N)$, keresse meg az impulzus-operátor 1-re normált sajátfüggvényeit és sajátértékeit. *Javaslat:* Az impulzus sajátértékegyenletét írja fel, és abból fejezze ki az impulzus-sajátfüggvény $x_{k+1} = x_k + a$ helyen felvett értékét az x_k helyen felvett értékével. Használja fel az így kapott rekurziós képletet arra, hogy kifejezze az impulzus-sajátfüggvény x_k rácspontban felvett értékét az $x_0 = 0$ rácspontban felvett értékével. Ha így megkapta a rekurziós képlet megoldását, akkor rója ki a periódikus határfeltételt, azaz hogy az impulzus-sajátfüggvény értéke az $x_0 = 0$ és az $x_N = Na$ rácspontokban megegyezik. Ebből kiolvashatja az impulzus lehetséges sajátértékeit, majd meghatározhatja az egyes sajátértékekhez tartozó 1-re normált sajátfüggvényeket. A normálási feltétel $\sum_{k=0}^{N} |\psi(x_k)|^2 = 1$. Vegyük észre, hogy a bevezetett impulzus sajátértékei nem valósak, azaz $\hat{p}$ nem igazi fizikai mennyiség.

(c) A rácson szabadon mozgó részecske önadjungált Hamilton-operátora

$$\hat{H}_0 = \frac{1}{2m}\hat{p}^\dagger \hat{p}. \tag{6.0.49}$$

Határozza meg a szabad részecske lehetséges energiasajátállapotait, ha a részecske hullámfüggvénye eleget tesz a periódikus határfeltételnek.

7 . gyakorlat

1. Az m tömegű pontrészecske L hosszúságú 1-dimenziós dobozba van zárva. A részecske n-edik stacionárius állapotának energiája $E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m}$, hullámfüggvénye $\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}}\sin(k_n x)$, ahol $k_n = \frac{(n+1)\pi}{L}$ és $n = 0, 1, 2, \ldots$ Határozza meg, hogy mivel egyenlő az n-edik stacionárius állapotban a $\Delta p_x \cdot \Delta x$ szorzat, ahol $\Delta f = \langle\psi_n|\hat{f}^2 - (\overline{f})^2|\psi_n\rangle^{\frac{1}{2}}$ az f mennyiség szórása és $\overline{f} = \langle\psi_n|\hat{f}|\psi_n\rangle$ az f mennyiség várható értéke.

2. A m tömegű részecske 1-dimenziós mozgást végez a

$$V(x) = \begin{cases} +\infty, & \text{ha} \quad |x| > L \\ -V_0, & \text{ha} \quad L > |x| > a \\ 0, & \text{ha} \quad a > |x| \geq 0 \end{cases} \tag{7.0.50}$$

potenciálban, ahol $V_0 > 0$ és $0 < a < L$. Határozza meg a részecske stacionárius állapotainak energiáját és hullámfüggvényét.

3. Az m tömegű pontrészecske a

$$V(x) = \begin{cases} 0, & \text{ha} \quad |x| > \frac{1}{2}L \\ -V_0 & \text{ha} \quad \frac{1}{2}L > |x| \geq 0 \end{cases} \tag{7.0.51}$$

potenciálban mozog, ahol $V_0 > 0$.

   (a) Melyek a részecske kötött állapotainak energiái és hullámfüggvényei?

   (b) Vizsgáljunk olyan nem kötött állapotokat, amikor a részecske $x \to +\infty$ irányból „érkezik". Határozzuk meg az R reflexiós (visszaverődési) és a T transzmissziós (áthaladási) együtthatót (valószínűséget) és mutassuk meg, hogy $R + T = 1$.

   (c) Ismételjük meg a fenti vizsgálatot abban az esetben, ha $V_0 < 0$, azaz a részecske nem potenciálgödör, hanem potenciálgát jelenlétében mozog. Diszkutáljuk külön azt az esetet, amikor $0 < E < -V_0$ teljesül a részecske E energiájára.

4. Határozzuk meg egy L oldalélű, kocka alakú dobozba zárt részecske alapállapotának E_0 energiáját és $\psi_0(x, y, z)$ hullámfüggvényét. Tegyük fel, hogy a doboz falainál a részecske potenciális energiája $+\infty$-né válik, a doboz belsejében pedig a részecske potenciális energiája zérus. Hasonlítsa össze az E_0-ra kapott eredményt azzal, amit a határozatlansági elv alapján becsülne.

8 . gyakorlat

1. Számoljuk ki egy pontrészecske teljes impulzusmomentum-operátora $\hat{j}_i$ Descartes-komponenseinek mátrixelemeit a $|j, m_j\rangle$ bázisban, ahol

$$\hat{\vec{j}}^2 |j, m_j\rangle = \hbar^2 j(j+1)|j, m_j\rangle, \qquad \hat{j}_z|j, m_j\rangle = \hbar m_j|j, m_j\rangle. \tag{8.0.52}$$

Javaslat: Szerkesszük meg $\hat{j}_z$ mátrixát, $\langle j, m_j'|\hat{j}_z|j, m_j\rangle$-t, utána határozzuk meg $\hat{j}_\pm|j, m_j\rangle$-t, majd ennek ismeretében $\hat{j}_\pm$ mátrixait, majd azokból lineáris kombináció révén $\hat{j}_x$ és $\hat{j}_y$ mátrixait.

2. Az előző feladat eredményét felhasználva határozzuk meg az $s = \frac{1}{2}$ spinű részecske spin-operátorainak mátrixelemeit az $\hat{\vec{s}}^2$ és az $\hat{s}_z$ operátorok közös sajátvektoraiból alkotott bázisban, majd olvassuk ki az eredményből a Pauli-mátrixokat.

3. Ábrázoljuk az $s = 1$ spinű részecske spinállapotait számoszlopokkal, és az $\hat{\vec{s}}^2$ és az $\hat{s}_z$ operátorok közös sajátvektoraiból alkotott bázisban határozzuk meg a spin-operátorok mátrixait! (Használjuk fel az 1. feladat eredményét!)

   Tegyük fel, hogy a részecske mágneses dipólmomentummal rendelkezik, amelynek operátora $\hat{\vec{\mu}} = -g\hat{\vec{s}}$. Határozzuk meg a részecske energiasajátállapotait homogén, sztatikus $\vec{B}$ mágneses indukciójú külső mágneses térben, ha a részecske a tér adott pontjában rögzítve van.

4. Az $s = 2$ spinű részecske $l = 2$ pályaimpulzusmomentumú állapotban van. Melyek az $\hat{\vec{l}}^2$, $\hat{l}_z$, $\hat{\vec{s}}^2$, $\hat{s}_z$ operátorok közös sajátvektorai, ill. a $\hat{\vec{j}}^2$, $\vec{j}_z$, $\hat{\vec{l}}^2$, $\hat{\vec{s}}^2$ operátorok közös sajátvektorai, és milyen kapcsolat van az impulzusmomentum-állapotok Hilbert-terének szóban forgó alterében értelmezett ezen két bázis között?

   Határozza meg a Hilbert-tér ezen alteréhez tartozó impulzusmomentum-sajátállapotok koordináta-spin hullámfüggvényeit, azaz a

   (a) $\langle \theta, \varphi | l, m, s, m_s\rangle$ bázisfüggvényeket, ill. a
   (b) $\langle \theta, \varphi | j, m_j, l, s\rangle$ bázisfüggvényeket,

   ahol (r, θ, φ) a részecske $\vec{r}$ helyzetvektorának gömbi polárkoordinátái.

9 . gyakorlat

1. Határozzuk meg a

$$\hat{H} = \frac{\hat{\vec{l}}^2}{2\Theta} \tag{9.0.53}$$

   Hamilton-operátorral adott térbeli rotátor energiaszintjeit, azok elfajultságának mértékét és az energiasajátállapotok hullámfüggvényeit. A $\Theta > 0$ paraméter a rotátor tehetetlenségi nyomatéka. Milyen az energiasajátállapotok paritása? Utóbbi kérdés megválaszolásakor vegyük figyelembe, hogy

$$Y_{l,m}(\pi - \theta, \varphi + \pi) = (-1)^l Y_{l,m}(\theta, \varphi). \tag{9.0.54}$$

2. Tegyük fel, hogy m tömegű részecske mozog a

$$V(r) = \begin{cases} -V_0 < 0, & \text{ha} \quad 0 \le r < a \\ 0, & \text{ha} \quad a \le r \end{cases} \tag{9.0.55}$$

centrális potenciálban. Jellemezze először kvalitatív módon az energiaspektrumot, valamint adja meg a stacionárius állapotokat jellemző „jó” kvantumszámokat. Határozza meg előbb a kötött állapotok hullámfüggvényeit, majd pedig a szórási állapotokéit.

Javaslat: Írja fel a radiális Schrödinger-egyenlet explicit alakját és a hozzá tartozó határfeltételeket. A radiális Schrödinger-egyenletről mutassa meg, hogy az a szférikus Bessel-függvények

$$\left(\frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho}\frac{d}{d\rho} + 1 - \frac{l(l+1)}{\rho^2}\right) f_l(\rho) = 0 \tag{9.0.56}$$

alakú differenciálegyenlete. Ennek a közönséges másodrendű lineáris differenciálegyenletnek 2 független megoldása van: a $j_l(\rho)$ szférikus Bessel-függvény és az $n_l(\rho)$ szférikus Neumann-függvény. A szférikus Bessel-függvény reguláris az origóban, azaz $j_l(\rho = 0)$ =véges, míg a szférikus Neumann-függvény az origóban szinguláris. A 2 megoldás-függvény a $\rho \to 0$, ill. a $\rho \to \infty$ határesetben aszimptotikusan

$$\begin{aligned} j_l(\rho) &\overset{\rho\to 0}{\sim} \frac{\rho^l}{(2l)!!}, \qquad n_l(\rho) \overset{\rho\to 0}{\sim} \frac{(2l+1)!!}{2l+1}\frac{1}{\rho^{l+1}}, \\ j_l(\rho) &\overset{\rho\to\infty}{\sim} \frac{\sin(\rho - \frac{l}{2}\pi)}{\rho}, \qquad n_l(\rho) \overset{\rho\to\infty}{\sim} \frac{\cos(\rho - \frac{l}{2}\pi)}{\rho} \end{aligned} \tag{9.0.57}$$

viselkedést mutat. A szférikus Bessel- és Neumann-függvényekből lineáris kombinációval képezzük az origóban szinguláris Henkel-függvényeket:

$$h_l^{(\pm)}(\rho) = n_l(\rho) \pm i j_l(\rho). \tag{9.0.58}$$

A Henkel-függvények a $\rho \to \infty$ aszimptotikus tartományban

$$h_l^{(\pm)} \overset{\rho\to\infty}{\sim} \frac{1}{\rho} e^{\pm i(\rho - l\frac{\pi}{2})} \left(1 \pm i\frac{l(l+1)}{2\rho} - \dots\right) \tag{9.0.59}$$

viselkedést mutatnak.

Kötött állapotok esetén vezesse be a $\kappa = \sqrt{-2mE}/\hbar$ paramétert és a $\rho = i\kappa r$ független változót. A radiális hullámfüggvény a $\rho \to \infty$ aszimptotikus tartományban a normálhatóság miatt csak az exponenciálisan lecsengő megoldás lehet, ugyanakkor az origóban korlátosnak kell lennie a megoldásnak. Ennek alapján eldöntheti, hogy a potenciál belső és külső tartományában a radiális hullámfüggvénynek a szférikus Bessel-egyenlet melyik megoldásával kell arányosnak lennie. Írja fel ezután a potenciál belső és külső tartományának közös határán érvényes határfeltételeket. Ezekből a határfeltételi egyenletekből meghatározhatja a hullámfüggvényt a belső, ill. a külső tartományban szorzó együtthatók arányát, továbbá az energiasajátértékeket? Végül a normálási feltétellel egyértelművé teheti a hullámfüggvényt.

Szórási állapotok esetén vezesse be a $k = \sqrt{2mE}/\hbar$ paramétert és vezesse be a $\rho = kr$ független változót. Írja fel a radiális hullámfüggvény alakját a potenciál belső és külső tartományában a szférikus Bessel- és Neumann-függvények lineáris kombinációjaként, majd rója ki a megoldás korlátosságának feltételét az origóban és a két tartomány határán a szükséges határfeltételeket. A külső tartományban válassza úgy a lineáris kombinációs együtthatók alakját, hogy a megoldás a potenciál centrumától távol l pályaimpulzusmomentumú állapotnak feleljen meg, azaz az aszimptotikusan távoli tartományban a kívánt

$$\frac{\sin(\rho - \delta_l - l\frac{\pi}{2})}{\rho} \tag{9.0.60}$$

alakot öltse, ahol δ_l az l-edik parciális hullám fáziseltolódása. Írja fel azt az egyenletet, amelynek megoldása szolgáltatja a δ_l fáziseltolódást.

10 . gyakorlat

1. Szerkesszük meg egy 2-elektron rendszer eredőspin-sajátállapotait leíró spin-hullámfüggvényeket az egyes elektronok spin-hullámfüggvényeiből.

   Javaslat: Induljunk ki abból, hogy az eredő spin $z-$vetülete $\hat{S}_z = \hat{s}_{1z} + \hat{s}_{2z}$. Milyen összefüggés következik ebből a megfelelő M_S, m_{s1}, m_{s2} sajátértékekre? Ennek alapján tippeljük meg a különböző $\langle \sigma_1, \sigma_2 | S, M_S \rangle$ hullámfüggvények alakját, majd mutassuk meg, hogy azok az $S = 0$ szinglett, vagy az $S = 1$ triplett állapothoz tartoznak.

2. Szerkesszük meg a spin-szinglett állapotú 2-elektron rendszer teljes $\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \sigma_1, \sigma_2)$ hullámfüggvényét. Hogyan jut érvényre a Pauli-elv a TKP mozgásának leválasztása előtt és után? Fejtsük ki a 2 részecske relatív mozgását (a belső mozgást) leíró koordináta-hullámfüggvényt parciális hullámok szerint!

3. Ismételjük meg az előző feladatot spin-triplett állapotú elektronrendszer hullámfüggvénye esetén.

4. Szerkesszük meg az S eredő spinű 2-elektronrendszer adott J teljes impulzus-momentumú állapotainak $\Psi_{JM_JSM_S}(r, \theta, \varphi, \sigma_1, \sigma_2)$ belső hullámfüggvényeit.

   Javaslat: Előbb keressük meg az adott l relatív pályaimpulzusmomentumú állapotokhoz tartozó, jól definiált J-vel jellemzett állapotokat, majd rakjuk össze a teljes $\Psi_{JM_JSM_S}(r, \theta, \varphi, \sigma_1, \sigma_2)$ hullámfüggvényt az előbbik lineáris kombinációiból.

11 . gyakorlat

1. A He-atom stacionárius állapotait fogjuk vizsgálni.

   (a) Írjuk fel a He-atom Hamilton-operátorát. Éljünk azzal a közelítéssel, hogy az atommag nyugalomban van a koordinátarendszer origójában.

   (b) Hanyagoljuk el az elektron-elektron kölcsönhatást és a spin-pálya kölcsönhatást! Hogyan módosul a Hamilton-operátor? Legyenek a

$$\hat{h} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta - \frac{2e^2}{r} \tag{11.0.61}$$

egy-részecskés Hamilton-operátor sajátfüggvényei és sajátértékei (az egy-részecskés energiák) rendre $\varphi_\alpha(\vec{r})$ és ϵ_α, továbbá az egy-részecskés spin-sajátállapotok $\alpha(\sigma)$ és $\beta(\sigma)$, amelyek rendre az $m_s = +\frac{1}{2}$, ill. $-\frac{1}{2}$ sajátértékekhez tartoznak. Ha az elektronok egyike a φ_1, ϵ_1 , másika pedig a φ_2, $\epsilon_2 \neq \epsilon_1$ állapotban található, akkor milyen állapotok tartoznak az atom $E = \epsilon_1 + \epsilon_2$ energiaszintjéhez, amelyek egyúttal az eredő spin $\hat{\vec{S}}^2$, $\hat{S}_z$ operátorainak is sajátállapotai.

Javaslat: (a) Szerkessze meg először két, egymással kölcsön nem ható elektron összes (8 darab) szorzatalakú hullámfüggvényét. Teljesítik-e ezek a Pauli-elvet? (b) Szerkessze meg a 2-elektron rendszer eredő spinjének sajátállapotait. Szerkesszen ezekhez olyan 2-elektron koordináta-hullámfüggvényeket, amelyekkel az eredő spin sajátállapotait szorozva teljesül a Pauli-elv. Hány olyan független állapotot találunk az $E = \epsilon_1 + \epsilon_2$ energiájú 2-elektronrendszer Hilbert-terében, amelyek kielégítik a Pauli-elvet, 8 állapotot vagy kevesebbet?

(c) Az előző pont eredménye alapján mi lenne a He-atom alapállapotának hullámfüggvénye, ha elhanyagolható lenne az elektron-elektron és a spin-pálya kölcsönhatás? Legyen $\varphi_0(\vec{r})$ az egy-részecskés alapállapot koordinátahullámfüggvénye és legyen ϵ_0 az egy-részecskés alapállapot energiája.

(d) Ha nem hanyagoljuk el az elektron-elektron kölcsönhatást, de a spin-pálya kölcsönhatást továbbra is elhanyagoljuk, akkor hogyan tudnánk meghatározni az atom azon energia-sajátállapotainak energiáit, amelyekről azt mondhatjuk, hogy az egyik, ill. a másik elektron rendre a φ_1, ϵ_1 , ill. a φ_2, ϵ_2 egy-részecskés állapotban van.

Javaslat: Írja fel a Hamilton-operátor sajátérték-egyenletét, azaz a stacionárius Schrödinger-egyenletet! Keresse a megoldást az előző pontban megtalált eredőspin-sajátállapotok lineáris kombinációjaként, majd ezt behelyettesítve a Schrödinger-egyenletbe, írjon fel homogén lineáris algebrai egyenletrendszert a lineáris kombináció együtthatóira. Ebben az egyenletrendszerben szerepel a Hamilton-operátor $\langle S'M_S'|\hat{H}|SM_S\rangle$ mátrixa, ami egy 4×4-es mátrix. Írja fel ennek segítségével az energia-sajátértékeket meghatározó egyenletet.

(e) Határozza meg az előző pontban szereplő Hamilton-mátrix explicit alakját, pontosabban mutassa meg, hogy a Hamilton-mátrix diagonális, és el nem tűnő elemei

$$\begin{aligned} \langle 0,0|\hat{H}|0,0\rangle &= \epsilon_1 + \epsilon_2 + C_s, \\ \langle 1,M_S|\hat{H}|1,M_S\rangle &= \epsilon_1 + \epsilon_2 + C_a, \end{aligned} \tag{11.0.62}$$

ahol

$$C_s = C + X, \qquad C_a = C - X \tag{11.0.63}$$

és

$$C = \int d\vec{r}_1 \int d\vec{r}_2 \frac{e^2|\varphi_1(\vec{r}_1)|^2|\varphi_2(\vec{r}_2)|^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \tag{11.0.64}$$

az elektronok közötti Coulomb-kölcsönhatás energiája, és

$$X = \int d\vec{r}_1 \int d\vec{r}_2 \varphi_1^*(\vec{r}_1)\varphi_2(\vec{r}_1)\frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}\varphi_1^*(\vec{r}_1)\varphi_2(\vec{r}_1) \tag{11.0.65}$$

az úgy nevezett *kicserélődési kölcsönhatás,* amelynek nincsen klasszikus elektrodinamikai megfelelője, tisztán kvantum-effektus. Értékelje ezután szavakban, hogy mi is történt a 2-elektronrendszer kölcsönhatásmentes esetben $E = \epsilon_1 + \epsilon_2$ energiaszintjével az elektron-elektron kölcsönhatás következtében.

Kvantummechanika 1. Kérdések az 1. zh.-ra való felkészüléshez

1. Egymástól függetlenül, N-szer megismételjük ugyanazt a véletlen kísérletet és azt tapasztaljuk, hogy a kísérlet n-edik lehetséges eredménye N_n-szer következett be. Mi az n-edik eredmény relatív gyakorisága?
2. Mi egy véletlen kísérlet n-edik eredményének relatív gyakorisága és bekövetkezési valószínűsége között a kapcsolat?
3. Ha az f mennyiség véletlenszerűen, w_n valószínűséggel veszi fel rendre az f_n értékeket $(n = 1, 2, \ldots, K)$, akkor mivel egyenlő az f mennyiség $\bar{f}$ várható értéke?
4. Ha az f mennyiség véletlenszerűen, w_n valószínűséggel veszi fel rendre az f_n értékeket $(n = 1, 2, \ldots, K)$, akkor mivel egyenlő az f mennyiség $\Delta^2 f$ szórásnégyzete?
5. A Planck-féle hipotézis szerint melyek egy lineáris harmonikus oszcillátor energiájának lehetséges értékei?
6. Minek a kvantáltságát bizonyítja a fotoeffektus?
7. Mi az a Compton-szórás?
8. Hogyan változik a Röntgen-sugárzás frekvenciája Compton-szórás során?
9. Milyen összefüggés van a monokromatikus fényhullám klasszikus jellemzői (körfrekvencia, hullámszám) és a foton jellemzői (energia, impulzus) között?
10. Milyen összefüggés áll fenn a foton energiája és impulzusa között?
11. Mennyi a foton nyugalmi tömege?
12. Mit mond a de Broglie-féle összefüggés az elektron impulzusának nagysága és az elektron hullámhossza közötti kapcsolatról?
13. A hidrogén-atom Bohr-féle modelljében hogyan van kvantálva az elektron, azaz milyen feltételnek tesz eleget a hullámhossza?
14. Milyen összefüggés van a fotoeffektust kiváltó fény frekvenciája és a kilépő fotoelektronok kinetikus energiája között (Einstein-féle összefüggés)?
15. Hogyan függ a fotoeffektus során kilépő elektronok kinetikus energiája a fény intenzitásától?
16. Hogyan függ fotoeffektus során a kilépő elektronok száma a fény intenzitásától?
17. Hogyan szól a Stefan-Boltzmann-törvény?
18. Hogyan szól a Planck-féle sugárzási törvény?
19. Hogyan szól a Wien-féle eltolódási törvény?
20. Hogyan szól a Bragg-feltétel?
21. Mit bizonyít a Franck-Hertz-kísérlet és hogyan?
22. Mi a Davisson-Germer-kísérlet lényege?

23. Milyen matematikai objektum felel meg a kvantummechanikában az állapotoknak és a fizikai mennyiségeknek?
24. Hogyan szól a lineáris szuperpozíció elve?
25. Mit jelent, hogy az $\hat{O}$ operátor lineáris?
26. Hogyan van definiálva az adjungált operátor?
27. Mi az unitér operátor definíciója?
28. Milyen tulajdonságokkal van értelmezve az állapotvektorok skaláris szorzata?
29. Mit mond ki a határozatlansági elv?
30. Mit mond ki a Heisenberg-féle határozatlansági reláció?
31. Melyek a Heisenberg-féle csererelációk?
32. Milyen tulajdonságú egy fizikai mennyiség operátora?
33. Mikor nevezünk egy operátort önadjungáltnak?
34. Írja fel az $\hat{f}$ operátor sajátérték-egyenletét!
35. Milyen tulajdonságúak az önadjungált operátor sajátértékei?
36. Mit jelent, hogy az $\hat{f}$ önadjungált operátor $\langle\phi_n$ sajátvektorai teljes rendszert alkotnak?
37. Mit jelent, hogy az $\hat{f}$ önadjungált operátor $\langle\phi_n$ állapotvektorai $(n = 1, 2, \ldots)$ ortonormáltak?
38. Ha a $\langle\varphi_1$ és a $\langle\varphi_2$ állapotok ortonormált teljes rendszert alkotnak, akkor milyen alakú ennek a fizikai rendszernek egy tetszőleges $\langle\Phi$ állapota?
39. Hogyan van értelmezve az $\hat{f}$ operátorhoz tartozó fizikai mennyiség várható értéke a $\langle\psi$ állapotban?
40. Legyen az elektron abban a $\langle\phi_n$ állapotban, amelyik az f fizikai mennyiség $\hat{f}$ operátorának f_n sajátértékhez tartozó sajátvektora. Mérjük ebben az állapotban az f fizikai mennyiség értékét! Mi a mérés eredménye?
41. Milyen valószínűséggel veszi fel az f fizikai mennyiség valamelyik lehetséges f_n értékét a $\langle\psi$ állapotban?
42. Hogyan van értelmezve a $[\hat{f}, \hat{g}]$ kommutátor?
43. Mikor mondjuk, hogy két fizikai mennyiség egyidejűleg mérhető?
44. Egyidejűleg mérhető-e az f és a g fizikai mennyiség, ha operátoraik felcserélhetők?
45. Egyidejűleg mérhető-e az f és a g fizikai mennyiség, ha operátoraik nem felcserélhetők?
46. Milyen kapcsolatot teremt az evoluciós operátor a kezdeti $\langle\psi(t_0)$ állapot és a $t > t_0$ pillanatbeli $\langle\psi(t)$ állapot között?
47. Milyen tulajdonságú operátor az evolúciós operátor?
48. Írja fel a $\langle\psi(t)$ állapotvektor időbeli változását leíró Schrödinger-egyenletet!
49. Milyen állapotokat nevezünk stacionárius állapotoknak?
50. Hogyan függ az E_n energiájú stacionárius állapot az időtől?

51. Milyen tulajdonságú operátor a Hamilton-operátor?
52. Mi a Hamilton-operátor fizikai jelentése?
53. Miért mondhatjuk, hogy a Hamilton-operátor a vizsgált fizikai rendszer matematikai modellje?
54. Írja fel az időtől független stacionárius állapotot meghatározó egyenletet!
55. Hogyan változik egy tetszőleges $\hat{f}(t)$ fizikai mennyiség várható értéke az idő függvényében?
56. Mit mondhatunk egy tetszőleges, az időtől explicit módon nem függő fizikai mennyiség várható értékének időbeli változásáról, a ha a fizikai rendszer stacionárius állapotban van?

Kvantummechanika 1. Kérdések a 2. zh.-hoz

1. Hogyan van értelmezve az evolúciós operátor?
2. Milyen matematikai tulajdonságai vannak az evolúciós operátornak?
3. Mi a kapcsolat az evolúciós operátor és a Hamilton-operátor között?
4. Írja fel az evolúciós operátor mozgásegyenletét!
5. Hogyan szólnak egy részecske esetén a Heisenberg-féle csererelációk?
6. Mit mond ki a határozatlansági elv?
7. Írja fel a részecske x helykoordinátájára és p_x impulzuskomponensére vonatkozó Heisenberg-féle határozatlansági relációt!
8. Legyen $\phi_n(\vec{r})$ a részecske energia-sajátállapota, amelyre

$$\hat{H}\phi_n(\vec{r}) = E_n\phi_n(\vec{r}), \tag{11.0.66}$$

   ahol $\hat{H}$ a részecske időtől független Hamilton-operátora. Írja fel ugyanezen állapot időtől függő hullámfüggvényét!
9. Mi az $\hat{x}$ koordináta-operátor és a $\hat{p}_x$ impulzus-operátor kifejezése koordináta-reprezentációban?
10. Tetszőleges $p_0 \in (-\infty, +\infty)$ esetén a $\phi(x) = \cos(p_0 x)$ függvény sajátfüggvénye-e
    (a) az impulzus $\hat{p}_x$ operátorának, és
    (b) az impulzus operátora négyzetének, azaz $\hat{p}_x^2$-nek.
11. Hogyan kell kiszámítani koordináta-reprezentációban a $|\psi\rangle$ és a $|\Phi\rangle$ állapotok $\langle\Phi|\psi\rangle$ skalárszozatát?
12. Hogyan kell kiszámítani koordináta-reprezentációban a $|\psi\rangle$ állapotú, 1-dimenziós mozgást végző részecske esetén
    (a) a koordináta $\bar{x} = \langle\psi|\hat{x}|\psi\rangle$ várható értékét, és $\Delta^2 x = \langle\psi|\hat{x}^2 - \bar{x}^2|\psi\rangle$ szórásnégyzetét;
    (b) az impulzus $\bar{x} = \langle\psi|\hat{p}_x|\psi\rangle$ várható értékét és $\Delta^2 p_x = \langle\psi|\hat{p}_x^2 - \bar{p}_x^2|\psi\rangle$ szórásnégyzetét?
13. Szabad részecske stacionárius hullámfüggvénye $\phi(x) = Ae^{ikx}$. Mennyi a részecske p_x impulzusának és $\frac{p_x^2}{2m}$ kinetikus energiájának a várható értéke ebben az állapotban?

14. Ha $\psi(x)$ a részecske hullámfüggvénye, akkor mi annak a valószínűsége, hogy a részecskét az $(x, x+dx)$ intervallumban találjuk?
15. Hogyan van értelmezve a 3-dimenziós térben mozgó, $\psi(\vec{r})$ hullámfüggvénnyel jellemzett állapotban található részecske esetén az $\vec{r}$ helyen történő megtalálás valószínűségi sűrűségfüggvénye és a rszecske valószínűségi áramsűrűsége?
16. Hogyan szól a megtalálási valószínűségre vonatkozó kontinuitási egyenlet?
17. A $\psi_n(x,t)$ stacionárius állapotban van a részecske. Hogyan függ a megtalálási valószínűség sűrűsége és a valószínűségi áramsűrűség az időtől? Miért?
18. Legyen az egy-dimenziós mozgást végző részecske a $\phi_n(x)$ stacionárius állapotban.
    (a) Mi annak a valószínűsége, hogy a részecskét az $(x, x+dx)$ intervallumban találjuk?
    (b) Mi annak a valószínűsége, hogy a részecskét az $[a, b]$ intervallumban találjuk?
    (c) Mekkora a $\phi_n(x)$ állapotban a valószínűségi áramsűrűség?
19. A részecske abban az impulzus-sajátállapotban van, amely az impulzus $\vec{p}$ sajátértékéhez tartozik. Számolja ki a részecske $\vec{j}$ valószínűségi áramsűrűségét ebben az állapotban.
20. Írjon fel egy olyan hullámcsomag hullámfüggvényét koordináta-reprezentációban, amelyben a $\vec{p}$ impulzusú síkhullám-állapot megtalálási valószínűsége $w(\vec{p})$. Egyértelmű-e a válasz? Miért?
21. Írja fel a dobozba zárt részecske Hamilton-operátorát és a stacionárius állapotokra vonatkozó Schrödinger-egyenletet 1-dimenziós esetben és oldja meg! Milyen határfeltételeknek kell eleget tegyen a stacionárius állapotok hullámfüggvénye? Folytonos vagy diszkrét az energiaspektrum, kötött vagy szórási állapotok a stacionárius állapotok? Milyen kvantumszámmal jellemezhető a stacionárius állapot, kvalitatíve mi jellemzi a stacionárius állapotok energiáinak elhelyezkedését az energiatengelyen?
22. Mennyi az L hosszúságú, egy-dimenziós dobozba zárt részecskének az impulzusbizonytalansága a Heisenberg-féle határozatlansági elv értelmében az alapállapotban?
23. Becsülje meg a határozatlansági elv alapján a dobozba zárt részecske alapállapoti energiáját!
24. Vizsgáljuk az L hosszúságú, egy-dimenziós dobozba zárt részecske stacionárius állapotait!
    (a) Mi a kapcsolat a félhullámhossz és a doboz hossza között?
    (b) Melyek a részecske energiájának lehetséges értékei?
25. Egy részecske mozog vonzó sztatikus potenciáltérben az x-tengely mentén. A potenciál $U(x) < 0$, alulról korlátos, $U(x) \geq U_0$ és a végtelenben eltűnik, $U(x) \to 0$, ha $|x| \to \infty$. Milyen intervallumba esnek az energiasajátértékek? Vannak-e kötött és nem kötött állapotok és mit mondhatunk ezek energiájáról?
26. Egy részecske mozog az $U(x) = 0$, ha $x \leq 0$, $U(x) = U_0 > 0$, ha $x > 0$ potenciállépcső terében az x-tengely mentén. Milyen intervallumba esnek az energiasajátértékek? Vannak-e kötött és nem kötött állapotok és mit mondhatunk ezek energiájáról?
27. Részecske derékszögű potenciálgát, $V(x) = 0$, ha $x < 0$ és $x > a$, $V(x) = V_0 > 0$, ha $0 < x < a$, jelenlétében mozog az x-tengely mentén. Írja fel a stacionárius állapotokra vonatkozó Schrödinger-egyenletet! Tegye fel, hogy olyan részecskét írunk le, amelyik $x \to -\infty$ felől érkezik a potenciálgáthoz! Í rja fel, hogy ekkor

milyen a megoldás alakja, és írja fel azokat a határfeltételeket, amelyeket a stacionárius állapot időtől független hullámfüggvényének ki kell elégítenie!

28. Hogyan van értelmezve potenciálgát jelenlétében a reflexiós tényező és a transzmissziós tényező? Milyen relációt elégít ki a reflexiós és a transzmissziós tényező és miért?
29. Írja fel a lineáris harmónikus oszcillátor Hamilton-operátorát koordináta-reprezentációban és a lineáris harmónikus oszcillátor stacionárius állapotaira vonatkozó Schrödinger-egyenletet! Milyen a lineáris harmónikus oszcillátor energiaspektruma? Milyen kvantumszámmal jellemezhetők a lineáris harmónikus oszcillátor energiaszintjei, adja meg az azokra vonatkozó kvantitatív összefüggést is! Milyen csererelációnak tesz eleget az energiakvantumot keltő és eltüntető operátor? Hogyan van értelmezve az energiakvantumok számának operátora? Hogyan lehet az alapállapotból felépíteni az energiakvantumainak keltő operátora segítségével a lineáris harmónikus oszcillátor valamennyi gerjesztett állapotát?
30. Írja fel a lineáris harmonikus oszcillátor Hamilton-operátorát koordináta-reprezentációban!
31. Milyen kapcsolat van a lineáris harmonikus oszcillátor tömege, direkciós állandója és klasszikus mozgásának körfrekvenciája között?
32. Hogyan néz ki a lineáris harmonikus oszcillátor Hamilton-operátorának alakja az oszcillátor kvantumai számának $\hat{n}$ operátorával kifejezve?
33. Melyek a stacionárius állapotú lineáris harmonikus oszcillátor lehetséges energiái?
34. Mennyi a lineáris harmonikus oszcillátor energiája az alapállapotban,
    (a) a klasszikus mechanika szerint,
    (b) a kvantummechanika szerint?
35. Miért nem nulla a lineáris harmonikus oszcillátor alapállapoti energiája?
36. Hogyan van definiálva egy pontrészecske pályaimpulzusmomentumának operátora?
37. Milyen csererelációkat elégítenek ki a pályaimpulzusmomentum Descartes-komponensei?
38. Hogyan van értelmezve a pályaimpulzusmomentum négyzetének operátora?
39. Milyen csererelációkat elégít ki a pályaimpulzusmomentum négyzetének operátora a pályaimpulzusmomentum Descartes-komponenseinek operátoraival?
40. Melyek a pályaimpulzusmomentum négyzete operátorának sajátértékei?
41. Ha egy állapot a pályaimpulzusmomentum négyzetének $\ell = 3$-hoz tartozó sajátállapota és egyúttal a pályaimpulzusmomentum z-irányú vetülete operátorának is sajátállapota, akkor mik lehetnek a vetület sajátértékei?
42. Ha két független részecske egyikének $j_1 = \frac{1}{2}$, másikának $j_2 = \frac{1}{2}$ az impulzusmomentuma, akkor melyek az eredő impulzusmomentum lehetséges J értékei?
43. Mely sajátértékegyenletek megoldásai az $Y_{\ell,m}(\theta,\varphi)$ gömbfelületi függvények?
44. Mi a kapcsolat a Laplace-operátor $\Delta_{\theta,\varphi}$ szögfüggő része és a pályaimpulzusmomentum négyzetének operátora között?
45. Írja fel a szabad részecske Hamilton-operátorát koordináta-reprezentációban az impulzusoperátor segítségével és a pályaimpulzusmomentum operátorának segítségével!