

Név:

Neptun kód:

1. Feladat**25 pont**

Tekintsünk egy véges mélységű gömbszimmetrikus potenciálgödröt:

$$V(r) = \begin{cases} -V_0 & r \leq R \\ 0 & r > R \end{cases} \quad (V_0 > 0)!$$

Milyen feltétel mellett lesz a rendszernek kötött gömbszimmetrikus sajátállapota ($-V_0 < E < 0$, $\ell = 0$)?

Segítség: $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u(r)}{dr^2} + \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2mr^2} u(r) + V(r) u(r) = E u(r)$

Megoldás

$$r \leq R$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u(r)}{dr^2} - V_0 u(r) = E u(r)$$

$$\frac{d^2 u(r)}{dr^2} + \frac{2m(E + V_0)}{\hbar^2} u(r) = 0$$

$$\alpha^2 = \frac{2m(E + V_0)}{\hbar^2} > 0$$

$$\frac{d^2 u(r)}{dr^2} + \alpha^2 u(r) = 0 \rightarrow u(r) = A \sin \alpha r$$

ugyanis az $u(0) = 0$ feltételnek teljesülnie kell.

$$r > R$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u(r)}{dr^2} = E u(r)$$

$$\frac{d^2 u(r)}{dr^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} u(r) = 0$$

$$\kappa^2 = -\frac{2mE}{\hbar^2} > 0$$

$$\frac{d^2 u(r)}{dr^2} - \kappa^2 u(r) = 0 \rightarrow u(r) = B e^{-\kappa r}$$

mert a hullámfüggvény a végtelenben lecseng (normálhatóság).

Határfeltételek:

$$A \sin \alpha R = B e^{-\kappa R}$$

$$\alpha A \cos \alpha R = -\kappa B e^{-\kappa R}$$

$\Downarrow$

$$-\alpha \cot \alpha R = \kappa \rightarrow -\alpha R \cot \alpha R = \kappa R$$

Érdemes bevezetni az

$$x = \alpha R > 0 \quad \text{és} \quad y = \kappa R > 0$$

változókat, melyekkel a

$$-x \cot x = y$$

egyenletet kapjuk. Mivel a $-x \cot x$ függvény a $(k\pi, (2k+1)\frac{\pi}{2})$ intervallumokban ($k = 0, 1, 2, \dots$) negatív értékeket vesz fel, a fenti egyenletnek akkor lesz megoldása, ha

$$(2k+1)\frac{\pi}{2} > x > (k+1)\pi \quad (k \in \mathbb{N}_0) .$$

Ugyanakkor fennáll, hogy

$$\alpha^2 + \kappa^2 = \frac{2mV_0}{\hbar^2} \rightarrow x^2 + y^2 = \frac{2mV_0R^2}{\hbar^2}$$

ezért akkor létezik legalább egy megoldás, ha

$$\frac{2mV_0R^2}{\hbar^2} > \left(\frac{\pi}{2}\right)^2 \rightarrow \underline{V_0R^2 > \frac{\hbar^2\pi^2}{8m}}$$

2. Feladat

25 pont

Egy elektron Yukawa-potenciálban mozog:

$$V(r) = -ke^2 \frac{e^{-\lambda r}}{r}.$$

Tekintsük a hidrogénatomot perturbálatlan rendszernek: $V_0(r) = -ke^2/r$!

a) Fejtsük sorba a Yukawa-potenciált λ -ban másodrendig! Írjuk fel a perturbáció operátorát és határozzuk meg a hidrogénatom kötött állapotainak energiakorrekcióját a perturbációs számítást első rendjében! Hogyan módosul az állapotok elfajultsága? (20)

Segítség: Használjuk a gyakorlaton levezetett összefüggést: $\langle n\ell m | r | n\ell m \rangle = \frac{a_0}{2}(3n^2 - \ell(\ell + 1))$.

b) Bizonyítsuk, hogy a perturbációs számítás másodrendjében tisztán λ^4 -nel arányos energiakorrekciót kapunk! (5)

Segítség: A másodrendű energiakorrekció: $\Delta E_n^{(2)} = \sum_{n'(\neq n)} \frac{|\langle n | \Delta V | n' \rangle|^2}{E_{n'} - E_n}$ (Az állítás a folytonos spektrum figyelembevételével is fennáll, de azzal most ne foglalkozzunk!)

Megoldás

a) A potenciális energia sorfejtése másodrendig:

$$V(r) = -\frac{ke^2}{r} + \lambda ke^2 - \lambda^2 \frac{ke^2}{2} r$$

és ennek alkalmas felosztása:

$$\begin{aligned} V(r) &= V_0(r) + \Delta V(r) \\ V_0(r) &= -\frac{ke^2}{r} \\ \Delta V(r) &= \Delta V_1(r) + \Delta V_2(r) \\ \Delta V_1(r) &= \lambda ke^2 \\ \Delta V_2(r) &= -\lambda^2 \frac{ke^2}{2} r \end{aligned}$$

Mivel a perturbáció radiális potenciál

$$\langle n\ell m | \Delta V | n\ell' m' \rangle \propto \int d\Omega Y_\ell^m(\Omega)^* Y_{\ell'}^{m'}(\Omega) = \delta_{\ell\ell'} \delta_{mm'}$$

tehát a perturbáció mátrixa egy sajátaltérben belül diagonális. Ezért az elsőrendű energiakorrekció:

$$\begin{aligned} \Delta E_{nlm}^{(1)} &= \langle n\ell m | \Delta V | n\ell m \rangle = \lambda ke^2 - \lambda^2 \frac{ke^2}{2} \langle n\ell m | r | n\ell m \rangle \\ &= \lambda ke^2 - \lambda^2 \frac{ke^2 a_0}{4} (3n^2 - \ell(\ell + 1)). \end{aligned}$$

Az energiaszintek az ℓ mellékkvantumszám szerint λ^2 -tel arányosan felhasadnak, az elsőrendű energiaszintek degeneráltsága $(2\ell + 1)$.

b) Másodrendű energiakorrekció:

$$\begin{aligned}
\Delta E_{nlm}^{(2)} &= \sum_{\substack{n'l'm' \\ (\neq nlm)}} \frac{|\langle nlm | \Delta V | n'l'm' \rangle|^2}{E_{n'} - E_n} \\
&= \underbrace{\sum_{\substack{n'l'm' \\ (\neq nlm)}} \frac{|\langle nlm | \Delta V_1 | n'l'm' \rangle|^2}{E_{n'} - E_n}}_{\sim \lambda^2} + 2 \operatorname{Re} \underbrace{\sum_{\substack{n'l'm' \\ (\neq nlm)}} \frac{\langle nlm | \Delta V_1 | n'l'm' \rangle \langle nlm | \Delta V_2 | n'l'm' \rangle}{E_{n'} - E_n}}_{\sim \lambda^3} \\
&\quad + \underbrace{\sum_{\substack{n'l'm' \\ (\neq nlm)}} \frac{|\langle nlm | \Delta V_2 | n'l'm' \rangle|^2}{E_{n'} - E_n}}_{\sim \lambda^4}
\end{aligned}$$

Mivel

$$\langle nlm | \Delta V_1 | n'l'm' \rangle = \lambda k e^2 \delta_{nn'} \delta_{ll'} \delta_{mm'}$$

a perturbációs számítás másodrendjében λ^4 -nel arányos energiakorrekciót kapunk.

3. Feladat

25 pont

Legyen egy $\ell = 1$ impulzusmomentumú töltött részecske perturbálatlan Hamilton-operátora

$$H_0 = \omega_0 L_z + \frac{K}{\hbar^2} L_z^2 \quad (\omega_0, K > 0).$$

a) Írjuk fel a Hamilton-operátor mátrixát az $|1, -1\rangle$, $|1, 0\rangle$, $|1, 1\rangle$ bázisban! Mik a perturbálatlan rendszer sajátenergiái! (5)

Helyezzük a rendszert y irányú, B indukciójú mágneses térbe, amit a $W = \omega L_y$ perturbáló operátorral írunk le, ahol $\omega = \frac{\mu_B B}{\hbar}$.

b) Írjuk fel a perturbáció mátrixát! (Használjuk az $L_{\pm}$ léptető operátorokat!) (10)

c) Határozzuk meg az energiaszintek elsőrendű perturbációs korrekcióját, ha $\hbar\omega_0 \neq K$, illetve $\hbar\omega_0 = K$! (10)

Megoldás:

a)

$$H_0 = \begin{pmatrix} \hbar\omega_0 + K & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \hbar\omega_0 - K \end{pmatrix} \rightarrow E \in \{\hbar\omega_0 + K, 0, \hbar\omega_0 - K\}$$

b)

$$W = \omega L_y = \frac{\omega}{2i} (L_+ - L_-)$$

$$W|1, -1\rangle = \frac{\sqrt{2}\hbar\omega}{2i} |1, 0\rangle$$

$$W|1, 0\rangle = \frac{\sqrt{2}\hbar\omega}{2i} |1, 1\rangle - \frac{\sqrt{2}\hbar\omega}{2i} |1, -1\rangle$$

$$W|1, 1\rangle = -\frac{\sqrt{2}\hbar\omega}{2i} |1, 0\rangle$$

$$W = \frac{\sqrt{2}}{2} \hbar\omega \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}$$

c) $\hbar\omega_0 \neq K$ esetén H_0 -nak három különböző sajátértéke van, így a nemdegenerált elsőrendű perturbációs energia korrekciók:

$$E_{1,-1}^{(1)} = E_{1,0}^{(1)} = E_{1,1}^{(1)} = 0$$

$\hbar\omega_0 = K$ esetén H_0 -nak az $|1, 0\rangle$ és $|1, 1\rangle$ állapotokhoz tartozó sajátenergiája zérus:

$$H_0 = \begin{pmatrix} 2\hbar\omega_0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

A $|1, -1\rangle$ állapot energia korrekciója

$$E_{1,-1}^{(1)} = 0.$$

Degenerált elsőrendű perturbáció számítással:

$$W_{(0,1)} = \frac{\sqrt{2}}{2}\hbar\omega \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

$\Downarrow$

$$E_{(0,1)}^{(1)} = \pm \frac{\sqrt{2}}{2}\hbar\omega$$

tehát a szint felhasad.

4. Feladat

25 pont

Egy hidrogénatomot kisülés alatt lévő kondenzátor lemezei közé juttatunk. A külső z irányú elektromos tér az

$$\mathcal{E}(t) = \mathcal{E}_0 e^{-t/\tau} \Theta(t)$$

függvénnyel írható le, ahol $\Theta(t)$ a lépésfüggvény.

a) Milyen valószínűséggel gerjesztődik az elektron az alapállapotból az első gerjesztett állapotba hosszú idő eltelte után ($t \gg \tau$)? (20)

b) Vizsgáljuk meg a $\tau \rightarrow \infty$ határesetet! Ugyanezt az eredményt kapnánk a Fermi-aranyszabály alkalmazásával is? (5)

Segítség: $c_n^{(1)}(t) = -\frac{i}{\hbar} \int_0^t \langle n | W(t') | 0 \rangle e^{\frac{i}{\hbar}(E_n - E_1)t'} dt'$, $E_n = -\frac{\hbar^2}{2ma_0^2} \frac{1}{n^2}$, $a_0 = \frac{\hbar^2}{mke^2}$

$$P_{10}(r) = \frac{2e^{-r/a_0}}{a_0^{3/2}}, \quad P_{20}(r) = \frac{2e^{-r/2a_0}}{(2a_0)^{3/2}} \left(1 - \frac{r}{2a_0}\right), \quad P_{21}(r) = \frac{2e^{-r/2a_0}}{\sqrt{3}(2a_0)^{3/2}} \frac{r}{2a_0},$$

$$z = \sqrt{\frac{4\pi}{3}} r Y_1^0(\vartheta, \varphi), \quad \int_0^\infty dx x^n e^{-ax} = \frac{n!}{a^{n+1}}$$

Megoldás:

a)

$$W(\vec{r}, t) = W(\vec{r}) F(t)$$

$$W(\vec{r}) = e\mathcal{E}_0 z = \sqrt{\frac{4\pi}{3}} e\mathcal{E}_0 r Y_1^0(\vartheta, \varphi)$$

$$F(t) = e^{-t/\tau} \Theta(t)$$

$$\langle 200 | W(\vec{r}) | 100 \rangle \propto \int d\Omega Y_0^0(\vartheta, \varphi)^* Y_1^0(\vartheta, \varphi) Y_0^0(\vartheta, \varphi) = 0$$

$$\langle 21m | W(\vec{r}) | 100 \rangle \propto \int d\Omega Y_1^m(\vartheta, \varphi)^* Y_1^0(\vartheta, \varphi) Y_0^0(\vartheta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \delta_{m0}$$

$$\begin{aligned} \langle 210 | W(\vec{r}) | 100 \rangle &= \frac{1}{\sqrt{3}} e\mathcal{E}_0 \int_0^\infty dr r^3 P_{10}(r) P_{21}(r) = \frac{4}{2^{3/2} 3} \frac{e\mathcal{E}_0}{a_0^3} \int_0^\infty dr r^3 \frac{r}{2a_0} e^{-3r/2a_0} \\ &= \frac{2}{2^{3/2} 3} e\mathcal{E}_0 a_0 \int_0^\infty dx x^4 e^{-3x/2} = \frac{2}{2^{3/2} 3} e\mathcal{E}_0 a_0 \frac{2^5 \cdot 24}{3^5} \\ &= \frac{2^8}{3^5 \sqrt{2}} e\mathcal{E}_0 a_0 \end{aligned}$$

$$\omega_{21} = \frac{E_2 - E_1}{\hbar} = \frac{3\hbar}{8ma_0^2}$$

$$\int_0^t e^{-t'/\tau} e^{i\omega_{21}t'} dt' = \frac{1 - \exp\left(-t\left(\frac{1}{\tau} - i\omega_{21}\right)\right)}{\frac{1}{\tau} - i\omega_{21}}$$

$$c_{210}^{(1)}(t) = -\frac{i}{\hbar} \frac{2^8}{3^5 \sqrt{2}} e\mathcal{E}_0 a_0 \frac{1 - \exp\left(-t\left(\frac{1}{\tau} - i\omega_{21}\right)\right)}{\frac{1}{\tau} - i\omega_{21}}$$

$$\begin{aligned}
P_{210}^{(1)}(t) &= \frac{2^{15}}{3^{10}} \left(\frac{e\mathcal{E}_0 a_0}{\hbar} \right)^2 \left| \frac{1 - \exp\left(-t \left(\frac{1}{\tau} - i\omega_{21}\right)\right)}{\frac{1}{\tau} - i\omega_{21}} \right|^2 \\
&= \frac{2^{15}}{3^{10}} \left(\frac{e\mathcal{E}_0 a_0}{\hbar} \right)^2 \frac{1}{\frac{1}{\tau^2} + \omega_{21}^2} \left[\left(1 - e^{-t/\tau} \cos \omega_{21} t\right)^2 + e^{-2t/\tau} \sin^2 \omega_{21} t \right] \\
&= 0.555 \left(\frac{e\mathcal{E}_0 a_0}{\hbar} \right)^2 \frac{1}{\frac{1}{\tau^2} + \omega_{21}^2} \left(1 + e^{-2t/\tau} - 2e^{-t/\tau} \cos \omega_{21} t\right) \\
\lim_{t \rightarrow \infty} P_{210}^{(1)}(t) &= 0.555 \left(\frac{e\mathcal{E}_0 a_0}{\hbar} \right)^2 \frac{1}{\frac{1}{\tau^2} + \omega_{21}^2}
\end{aligned}$$

b)

$$\begin{aligned}
\lim_{\tau \rightarrow \infty} \lim_{t \rightarrow \infty} P_{210}^{(1)}(t) &= 0.555 \left(\frac{e\mathcal{E}_0 a_0}{\hbar \omega_{21}} \right)^2 = 0.555 \left(\frac{e\mathcal{E}_0 a_0}{\hbar \omega_{21}} \right)^2 \\
&= 0.555 \left(\frac{8me\mathcal{E}_0 a_0^3}{3\hbar^2} \right)^2
\end{aligned}$$

Ha a perturbációra vesszük a $\tau \rightarrow \infty$ határesetet, $F(t) = \Theta(t)$, és a Fermi-aranyszabályt alkalmazzuk, akkor $t \rightarrow \infty$ határesetben elsőrendű átmenet csak azonos energiájú állapotba lehetséges, tehát gerjesztett állapotba nem kerülhet a rendszer.