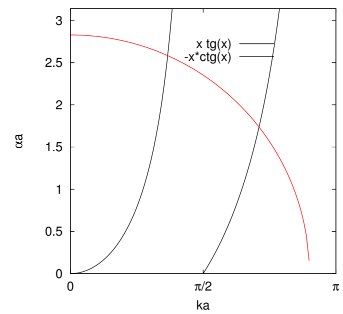
3. gyakorlat (February 26, 2020)

1. **Kétállapotú modell rendszer**

   Egy véges potenciál gödörben két kötött állapot létezik. A gödör szélességét hirtelen megnöveljük Δx távolsággal. Mi lesz az időfüggő Schrödinger egyenlet megoldása? A Megoldást keressük

   $$\psi(x,t) = c_1(t)\varphi_1(x) + c_2(t)\varphi_2(x)$$

   alakban, ahol E_1, φ_1 és E_2, φ_2 az eredeti potenciálban mozgó részecske energiája és hullámfüggvénye a két kötött állapotban.

   Az időfüggő Schrödinger egyenlet:

   $$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + V(x)\psi\ .$$

   Legyen az új potenciál $V(x) = V_0(x) + \Delta V(x)$. Helyettesítsük be a hullámfüggvény megadott alakját:

   $$\begin{aligned} i\hbar\dot{c}_1\varphi_1(x) + i\hbar\dot{c}_2\varphi_2(x) &= \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\varphi_1}{dx^2} + V_0(x)\varphi_1(x)\right)c_1(t) + \Delta V(x)\varphi_1(x)c_1(t) \\ &+ \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\varphi_2}{dx^2} + V_0(x)\varphi_2(x)\right)c_2(t) + \Delta V(x)\varphi_2(x)c_2(t) \end{aligned}$$

   $$i\hbar\dot{c}_1\varphi_1(x) + i\hbar\dot{c}_2\varphi_2(x) = E_1c_1(t) + \Delta V(x)\varphi_1(x)c_1(t) + E_2c_2(t) + \Delta V(x)\varphi_2(x)c_2(t)$$

   Tudjuk, hogy $\varphi_1(x)$ és $\varphi_2(x)$ normáltak és merőlegesek egymásra:

   $$\int_{-\infty}^{\infty}\varphi_1^*(x)\varphi_2(x)dx = 0, \qquad \int_{-\infty}^{\infty}\varphi_1^*(x)\varphi_1(x)dx = \int_{-\infty}^{\infty}\varphi_2^*(x)\varphi_2(x)dx = 1$$

   Szorozzuk be az előző egyenletet φ_1^*-gyel és φ_2^*-vel, mjd integráljunk:

   $$\begin{aligned} i\hbar\dot{c}_1 &= (E_1 + \Delta V_{11})c_1 + \Delta V_{12}c_2 \\ i\hbar\dot{c}_2 &= \Delta V_{21}c_1 + (E_2 + \Delta V_{22})c_2\ , \end{aligned}$$

   ahol $\Delta V_{ij} = \int_{-\infty}^{\infty}\varphi_i^*(x)\Delta V(x)\varphi_j(x)dx$. Az elsőrendű, állandóegyütthatós differenciál egyenletet könnyedén megoldhatjuk.

2. Az előadáson tanult rekurziós összefüggéseket felhasználva határozzuk meg a hely és a potenciális energia várható értékét. A várható értéke egy mennyiségnek: $< f >= \int f(x)p(x)dx$, ahol annak a valószínűsége hogy az $x, x+dx$ intervallumban vagyunk $p(x)dx$. A Hullámfüggvény abszolútértékenek a valószínűségi értelmezése szerint$p(x) = |\varphi(x)|^2(x)$. Ezek szerint
   $< f >= \int f(x)\varphi^*(x)\varphi(x)dx$.

   $$\varphi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2^n n! x_0\sqrt{\pi}}}H_n(\frac{x}{x_0})e^{-\frac{x^2}{2x_0^2}}$$

   $$H_{n+1}(q) = 2qH_n(q) - H_n'(q), \qquad H_n'(q) = 2nH_{n-1}(q), \qquad 2qH_n(q) = H_{n+1}(q) + 2nH_{n-1}'(q)$$

3. Helyezzük a harmonikus oszcillátort homogén elektromos térbe! A Schrödinger egyenlet

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\varphi}{dx^2} - \frac{1}{2}m\omega^2 x^2\varphi(x) - \mathcal{E}qx\varphi(x) = E\varphi(x) ,$$

ahol $\mathcal{E}$ az elektromos tér, q pedig a részecske töltése. Hogyan módosulnak az energia nívók és a hullámfüggvények? Mi történik klasszikus esetben, ha egy rugót homogén erőtérbe teszünk? Hogyan lehetne a potenciális energiát $\frac{1}{2}m\omega^2(x+d)^2$ alakban felírni?

HF:

Tekintsünk egy kétdimenziós harmonikus oszcillátort, amelynek a Schrödinger egyenlete:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Phi(x,y)}{\partial x^2} - \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Phi(x,y)}{\partial y^2} + \frac{1}{2}m\omega^2(x^2+y^2)\Phi(x,y) = E_{n,m}\Phi(x,y) .$$

Mutassuk meg, hogy a $\Phi(x,y) = \varphi_n(x)\varphi_m(y)$ szorzat függvény kielégíti a fenti egyenletet, ahol φ_n az 1D harmonikus oszcillátor hullámfüggvénye! Mi lesz $E_{n,m}$?

Szorgalmi:

Határozzuk meg az időfüggetlen Schrödinger egyenlet normálható megoldásait a következő potenciálok esetére:

a.)

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{ha} \quad x < -a \\ -V_0 & \text{ha} \quad -a \le x \le 0 \\ \infty & \text{ha} \quad x > 0 \end{cases}$$

b.)

$$V(x) = \begin{cases} -\gamma\delta(x+a) & \text{ha} \quad x < 0 \\ \infty & \text{ha} \quad x > 0 \end{cases}$$

c.)

$$V(x) = \begin{cases} -\gamma\delta(x) & \text{ha} \quad |x| < a \\ \infty & \text{ha} \quad |x| \ge a \end{cases}$$

d.)

$$V(x) = \begin{cases} \gamma\delta(x) & \text{ha} \quad |x| < a \\ \infty & \text{ha} \quad |x| \ge a \end{cases}$$