5. gyakorlat (okt. 9.)

1. Dirac-delta hély potenciál $V(r) = \gamma\delta(r-R)$

   Gömbön belül: $\varphi(r) = j_l(kr)$

   Gömbön kívül: $\varphi(r) = aj_l(kr) + bn_l(kr)$

   Határfeltételek:

$$j_l(kR) = aj_l(kR) + bn_l(kR), \qquad akj_l'(kR) + bkn_l'(kR) - kj_l'(kR) = \frac{2m}{\hbar^2}\gamma j_l(kR)$$

$$\begin{pmatrix} j_l(kR) & n_l(kR) \\ kj_l'(kR) & kn_l'(kR) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} j_l(kR) \\ \frac{2m}{\hbar^2}\gamma j_l(kR) + kj_l'(kR) \end{pmatrix}$$

$\begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix}$	$\frac{1}{det}\begin{pmatrix} d & -b \\ -c & a \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$	$\frac{du-bv}{det} = x$ $\frac{-cu+av}{det}) = y$ $\frac{y}{x} = \frac{av-cu}{du-bv}$

$$\mathrm{tg}(\delta_l) = \frac{j_l(kR)\left(\frac{2m}{\hbar^2}\gamma j_l(kR) + kj_l'(kR)\right) - kj_l'(kR)j_l(kR)}{kn_l'(kR)j_l(kR) - n_l(kR)\left(\frac{2m}{\hbar^2}\gamma j_l(kR) + kj_l'(kR)\right)}$$

   Az alacsony energiás határesetben $l = 0$, és $j_0(r) = \frac{\sin(r)}{r}$, $n_0(r) = -\frac{\cos(r)}{r}$.

$$\mathrm{tg}(\delta_0) = \frac{2\sin^2(kR)}{\frac{\hbar^2 k}{m\gamma} + 2\sin(kR)\cos(kR)}, \qquad \lim_{k\to 0} \frac{2\sin^2(kR)}{\frac{\hbar^2 k}{m\gamma} + 2\sin(kR)\cos(kR)} = \sin(kR) \Longrightarrow \qquad \delta_0 = kR$$

   A tljes hatáskeresztmetszet:

$$\sigma_{tot} = \frac{4\pi}{k^2}(kR)^2 = 4\pi R^2$$

2. Hullámcsomag homogén elektromos térben:

   A hullámcsomag: $\psi(x,0) = \frac{1}{\sqrt{x_0\sqrt{\pi}}}e^{-\frac{x^2}{2x_0^2}}$

   A rendszer Hamilton operátora és az időfüggő Schrödinger egyenlet:

$$H = \frac{p^2}{2m} - \mathcal{E}qx, \qquad i\hbar\partial_t\psi = H\psi$$

   Ha ismerjük a Hamilton operátor spektrumát: $H\varphi_n = E_n\varphi_n$, akkor az időfüggő Schrödinger egyenlet megoldása:

$$\psi(t) = \sum_n c_n e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}\varphi_n, \qquad c_n = \langle\varphi_n|\psi(0)\rangle$$

   A stacionárius Schrödinger egyenlet:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\varphi}{dx^2} - \mathcal{E}\Pi x\varphi = E\varphi$$

   Keressünk egy karakterisztikus távolságot:

$$\frac{\hbar^2}{2mx_0^2} = \mathcal{E}qx_0, \qquad x_0 = \left(\frac{\hbar^2}{2m\mathcal{E}q}\right)^{\frac{1}{3}}$$

Mutassuk meg, hogy a Schrödinger egyenletet át lehet írni a következő alakba:

$$-\frac{d^2\varphi}{d\xi^2} - \xi\varphi(\xi) = 0 \ ,$$

ahol $\xi = \dfrac{x}{x_0} + \dfrac{E}{\mathcal{E}qx_0}$! A differenciálegyenlet megoldása az Airy függvények: $\varphi(E,x) = \mathrm{Ai}(-\frac{x}{x_0} + \frac{E}{\mathcal{E}qx_0})$.
Az időfüggő megoldás:

$$\psi(t,x) = \int_{-\infty}^{\infty} c(E) e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \mathrm{Ai}(-\frac{x}{x_0} + \frac{E}{\mathcal{E}qx_0}) dE, \quad c(E) = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{Ai}(-\frac{x}{x_0} + \frac{E}{\mathcal{E}qx_0}) \frac{1}{\sqrt{x_0\sqrt{\pi}}} e^{-\frac{x^2}{2x_0^2}} dx$$

Hogyan változik időben a hullámcsomag tömegközéppontja: $\langle\psi(t)|x|\psi(t)\rangle$? Hogyan lehetne egyszerűbben számolni?

Az időfüggő Schrödinger egyenlet formális megoldása:

$$i\hbar\partial_t\psi(t) = H\psi(t), \qquad \psi(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}\psi(0)$$

Az x operátor várható értéke:

$$\langle\psi(t)|x|\psi(t)\rangle = \langle e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}\psi(0)|x|e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}\psi(0)\rangle = \langle\psi(0)|e^{\frac{i}{\hbar}Ht} x e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}|\psi(0)\rangle$$

Használjuk a Hausdorff kifejtést:

$$e^{\frac{i}{\hbar}Ht} x e^{-\frac{i}{\hbar}Ht} = x + \frac{i}{\hbar}[H,x]t + \frac{1}{2}\left(\frac{i}{\hbar}\right)^2 [H,[H,x]]t^2 + \dots$$

Ebben az esetben:

$$[H,x] = \frac{\hbar}{i}\frac{p}{m}, \qquad [H,[H,x]] = \frac{\hbar}{im}[H,p] = \left(\frac{\hbar}{i}\right)^2 \frac{\mathcal{E}q}{m}$$

tehát

$$e^{\frac{i}{\hbar}Ht} x e^{-\frac{i}{\hbar}Ht} = x + \frac{p}{m}t + \frac{1}{2}\frac{\mathcal{E}q}{m}t^2$$

A tömegközéppont tehát:

$$\langle\psi(t)|x|\psi(t)\rangle = \langle\psi(0)|x + \frac{p}{m}t + \frac{1}{2}\frac{\mathcal{E}q}{m}t^2|\psi(0)\rangle = \frac{1}{2}\frac{\mathcal{E}q}{m}t^2$$