

Kvantummechanika vegyészeknek

Vizsgatételek 2008

1. A fizikai mennyiség reprezentálása a kvantummechanikában

A dinamikai alapmennyiségek (koordináta, impulzus) operátorai. Heisenberg-féle felcserélési törvények. Származtatott mennyiségek (impulzusmomentum, kinetikus- és potenciális energia). A Hamilton operátor. Fizikai mennyiségek számértékei.

2. A fizikai állapot reprezentálása a kvantummechanikában

A hullámfüggvény fogalma. Valószínűségi interpretáció. Köött- és szabad állapotok hullámfüggvénye. Várható értékek. Időfejlődés, a szuperpozíció elve, időfüggő Schrödinger-egyenlet. Stacionárius állapotok. Fizikai mennyiségek időfüggése, kvantummechanikai időderivált, Heisenberg-féle mozgásegyenlet.

3. Absztrakt kvantummechanika

A kvantummechanika reprezentációfüggetlen megfogalmazása. Unitér transzformációk a Hilbert-térben. Sűrűségoperátor, Liouville-egyenlet. Tiszta- és kevert állapotok. Az időfüggő Schrödinger egyenlet diszkussziója: az idő, mint operátor, normaórzés, formális megoldás.

4. Reprezentációk

Mátrixreprezentációk diszkrét- és folytonos spektrum esetén. Reprezentáció függvénytérben. Impulzus- és koordináta-sajátfüggvények teljessége és egymással való kapcsolata. Impulzus- és koordináta-reprezentáció. Operátorok értelmezési tartománya, a Heisenberg-féle felcserélési törvény érvényességének határai. A felcserélési törvény exponenciális alakja.

5. Spin és impulzusmomentum

Az impulzusmomentum operátora és algebrai tulajdonságai. Az L^2 operátor. Az L_z operátor sajátértékproblémája. A spin, mint impulzusmomentum. Pauli-féle spinmátrixok. Spinor-formalizmus. Azonos részecskék. A Pauli elv. Antiszimmetrizálás. Spinkoordináta. Slater-determinánsok. A teljes impulzusmomentum. Léptető operátorok. A sajátértékek reprezentációfüggetlen meghatározása. Impulzusmomentumok összeadása, Clebsch-Gordan együtthatók. Többelektronos rendszerek spinfüggvényei, multiplicitások, elágazási diagram.

6. A Heisenberg féle bizonytalansági reláció

Valószínűségi számítási alapok: momentumok, várható érték, szórás.

Kvantummechanikai vonatkozások: operátorok szórása adott állapotban. Bizonytalansági reláció (levezetés és fizikai interpretáció). Lokalizált részecske, hullámcsomag. A hullámcsomag szétfolyása. A minimális hullámcsomag. Elhajlás, interferencia. Anyag-hullám dualitás. Alagúteffektus.

7. **Klasszikus limesz**

Korrespondencia-elv. Ehrenfest tétele. (A $\hbar \rightarrow 0$ limesz és a WKB sajnos nem volt.)

8. **Perturbációszámítás**

Matematikai alapok. Tudománytörténeti vonatkozások. Rayleigh-Schrödinger perturbációszámítás. Degenerált és nemdegenerált eset, időfüggő perturbációk. Kvantumátmenetek kiválasztásai szabályai.

9. **A kvantum oszcillátor**

A harmonikus oszcillátor Schrödinger egyenlete koordináta- és impulzus-reprezentációban. Az egyenlet megoldása, rezgési hullámfüggvények, energiaspektrum. Zérusponyi energia. Abszorpció- és emisszióoperátorok: a harmonikus oszcillátor Schrödinger egyenletének reprezentációfüggetlen megoldása. Fotonok keltése és eltüntetése. A Morse-oszcillátor egzakt tárgyalása. Anharmonicitás, mint perturbáció.

10. **Szimmetriák a kvantummechanikában**

Megmaradó mennyiségek. Az impulzusoperátor, mint az eltolás generátora. Az impulzuszórátor, mint a forgatás generátora. Szimmetriák és megmaradási tételek. (Energiamegmaradás és időeltolás, paritás megmaradás és időtükrözés sajnos nem volt.) Szimmetriaoperátorok. A Hamilton-operátor szimmetriacsoportja. Szimmetria és degeneráció. A véletlen degeneráció fogalma. A tiltott kereszteződés szabálya.