Test nr 5
grupa Konrada Patkowskiego

1. Energia stanu podstawowego pewnego układu wynosi E_0. Dla dowolnej funkcji ψ z przestrzeni Hilberta tego układu wartość średnia hamiltonianu, $\epsilon = \frac{\langle\psi|H\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle}$, spełnia warunek

   a) $\epsilon \leq 0$ b) $\epsilon \geq 0$ c) $\epsilon \leq E_0$ d) $\epsilon \geq E_0$

2. Szukamy metodą wariacyjną przybliżonej funkcji falowej stanu podstawowego pewnego układu w klasie funkcji zależnych od jednego parametru rzeczywistego α. Obliczyliśmy, że wartość średnia hamiltonianu dla funkcji z tej klasy wynosi $\epsilon(\alpha) = (\alpha-1)^2 - 2$. Zatem przybliżona energia stanu podstawowego jest równa

   a) -2 b) -1 c) 1 d) 2

3. Niech E_a, E_b, E_c będą wariacyjnymi przybliżeniami do energii stanu podstawowego atomu wodoru, otrzymanymi odpowiednio w klasach funkcji próbnych ψ_a, ψ_b, ψ_c:

   $$\psi_a(\alpha) = e^{-\alpha r},$$
   $$\psi_b(\alpha) = e^{-\alpha r^2},$$
   $$\psi_c(\alpha,\beta) = (1+\beta r)e^{-\alpha r^2},$$

   gdzie α, β są (rzeczywistymi) parametrami, $\alpha > 0$. Które nierówności są prawdziwe:

   a) $E_a < E_b < E_c$ b) $E_a < E_c < E_b$ c) $E_b < E_c < E_a$ d) $E_c < E_b < E_a$

4. W metodzie Ritza szukamy przybliżonej funkcji falowej jako kombinacji liniowej funkcji $\chi_1, \ldots, \chi_N$. W tym celu policzyliśmy macierze $\mathbf{H}$ i $\mathbf{S}$ o elementach $H_{ij} = \langle\chi_i|H\chi_j\rangle$ i $S_{ij} = \langle\chi_i|\chi_j\rangle$. Jeśli funkcje χ_i są ortonormalne, macierz $\mathbf{S}$ jest macierzą jednostkową; energia stanu podstawowego otrzymana metodą Ritza jest wówczas równa

   a) wyznacznikowi macierzy $\mathbf{H}$,

   b) sumie elementów diagonalnych H_{ii} macierzy $\mathbf{H}$,

   c) sumie wartości własnych macierzy $\mathbf{H}$,

   d) najniższej wartości własnej macierzy $\mathbf{H}$.

Uwaga. W pytaniach dotyczących rachunku zaburzeń (5–8) zakładamy normalizację pośrednią ($\langle\psi^{(0)}|\psi^{(k)}\rangle = 0$ dla $k > 0$) oraz brak degeneracji.

5. Poprawki $\psi^{(1)}, \psi^{(2)}, E^{(1)}, E^{(2)}$ wiąże ze sobą równanie

   a) $H_0\psi^{(2)} + H'\psi^{(1)} = E^{(0)}\psi^{(0)} + E^{(1)}\psi^{(1)} + E^{(2)}\psi^{(2)}$

   b) $H_0\psi^{(1)} + H'\psi^{(2)} = E^{(0)}\psi^{(0)} + E^{(1)}\psi^{(1)} + E^{(2)}\psi^{(2)}$

   c) $H_0\psi^{(2)} + H'\psi^{(1)} = E^{(0)}\psi^{(2)} + E^{(1)}\psi^{(1)} + E^{(2)}\psi^{(0)}$

   d) $H_0\psi^{(1)} + H'\psi^{(2)} = E^{(0)}\psi^{(2)} + E^{(1)}\psi^{(1)} + E^{(2)}\psi^{(0)}$

6. Iloczyn skalarny $\langle\psi^{(0)}|H_0\psi^{(1)} + H'\psi^{(0)}\rangle$ jest równy

   a) $E^{(0)}$ b) $E^{(1)}$ c) $E^{(1)} + E^{(0)}$ d) $E^{(1)} - E^{(0)}$

7. Pierwsza poprawka do funkcji falowej dla $n-$tego stanu, $\psi_n^{(1)}$, dana jest wzorem

   a) $\displaystyle\sum_{m\neq n} \frac{\langle\psi_m^{(0)}|H'\psi_n^{(0)}\rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}$ b) $\displaystyle\sum_{m\neq n} \frac{\langle\psi_m^{(0)}|H'\psi_n^{(0)}\rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}\psi_m^{(0)}$

   c) $\displaystyle\sum_{m\neq n} \frac{\left|\langle\psi_m^{(0)}|H'\psi_n^{(0)}\rangle\right|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}$ d) $\displaystyle\sum_{m\neq n} \frac{\left|\langle\psi_m^{(0)}|H'\psi_n^{(0)}\rangle\right|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}\psi_m^{(0)}$

8. Dokładna energia E_0 stanu podstawowego oraz współczynniki $E_0^{(0)}, E_0^{(1)}, E_0^{(2)}$ jej rozwinięcia w rachunku zaburzeń spełniają zawsze warunek

   a) $E_0^{(0)} + E_0^{(1)} \geq E_0$ b) $E_0^{(1)} \leq 0$ c) $E_0^{(2)} \geq 0$ d) $E_0^{(0)} + E_0^{(1)} \leq E_0$