Kvantummechanika A – gyakorlat

8. gyakorlat

Impulzusmomentum összeadás és nem-degenerált időfüggetlen perturbációszámítás

1. feladat

Jellemezzünk két alrendszert $l = 1$ és $s = 1/2$ kvantumszámokkal. Határozzuk meg, hogy milyen lehetséges állapotai lehetnek a teljes rendszernek, illetve számítsunk ki minden Clebsch–Gordan-együtthatót! Az alrendszerek lehetséges állapotai:

$$|1, m_l\rangle_l = \begin{cases} |1,1\rangle_l \\ |1,0\rangle_l \\ |1,-1\rangle_l \end{cases}$$

és

$$|1/2, m_s\rangle_s = \begin{cases} |1/2, 1/2\rangle_s \\ |1/2, -1/2\rangle_s \end{cases} .$$

A teljes rendszerben $j \in \{|l-s|, \ldots, l+s\} = \{1/2, 3/2\}$ és $m_j \in \{-j, \ldots, j\}$. A „szélső” állapotok továbbra is egyértelműek, azaz

$$|3/2, 3/2\rangle_j = |1,1\rangle_l |1/2, 1/2\rangle_s \qquad \text{és} \qquad |3/2, -3/2\rangle_j = |1,-1\rangle_l |1/2, -1/2\rangle_s .$$

A léptetőoperátor az előző gyakorlaton tárgyalt esethez hasonlóan $\hat{J}_\pm = \hat{L}_\pm \otimes \hat{\mathbb{1}}_s + \hat{\mathbb{1}}_l \otimes \hat{S}_\pm$. Hattassuk a lefelé léptető léptetőoperátort a $|3/2, 3/2\rangle_j$ állapotra! A bal oldal

$$\hat{J}_- |3/2, 3/2\rangle_j = \hbar\sqrt{3/2(3/2+1) - 3/2(3/2-1)}\,|3/2, 1/2\rangle_j = \hbar\sqrt{3}\,|3/2, 1/2\rangle_j .$$

A jobb oldal

$$\begin{aligned} &\hat{L}_- |1,1\rangle_l |1/2, 1/2\rangle_s + |1,1\rangle_l \hat{S}_- |1/2, 1/2\rangle_s \\ &= \hbar\sqrt{1(1+1)}\,|1,0\rangle_l |1/2\rangle_s + \hbar\sqrt{1/2(1/2+1) - 1/2(1/2-1)}\,|1,1\rangle_l |1/2, -1/2\rangle_s \\ &= \hbar\sqrt{2}\,|1,0\rangle_l |1/2, 1/2\rangle_s + \hbar |1,1\rangle_l |1/2, -1/2\rangle_s . \end{aligned}$$

Átrendezve az egyenletet

$$|3/2, 1/2\rangle_j = \sqrt{\frac{2}{3}}|1,0\rangle_l |1/2, 1/2\rangle_s + \sqrt{\frac{1}{3}}|1,1\rangle_l |1/2, -1/2\rangle_s .$$

Az újonnan felírt állapotra is hattassuk a lefelé lépő léptetőoperátort! A bal oldal ekkor

$$\hat{J}_- |3/2, 1/2\rangle_j = \hbar\sqrt{3/2(3/2+1) - 1/2(1/2-1)}\,|3/2, -1/2\rangle_j = \hbar 2 |3/2, -1/2\rangle_j ,$$

míg a jobb oldal

$$\hat{J}_- \left[\sqrt{\frac{2}{3}}|1,0\rangle_l |1/2, 1/2\rangle_s + \sqrt{\frac{1}{3}}|1,1\rangle_l |1/2, -1/2\rangle_s\right] .$$

Innen az első tag

$$\sqrt{\frac{2}{3}}\left[\hat{L}_-|1,0\rangle_l|{}^1\!/\!{}_2,{}^1\!/\!{}_2\rangle_s+|1,0\rangle_l\hat{S}_-|{}^1\!/\!{}_2,{}^1\!/\!{}_2\rangle_s\right]$$
$$=\hbar\sqrt{\frac{4}{3}}|1,-1\rangle_l|{}^1\!/\!{}_2,{}^1\!/\!{}_2\rangle_s+\hbar\sqrt{\frac{2}{3}}|1,0\rangle_l|{}^1\!/\!{}_2,-{}^1\!/\!{}_2\rangle_s\ ,$$

míg a második tag

$$\sqrt{\frac{1}{3}}\left[\hat{L}_-|1,1\rangle_l|{}^1\!/\!{}_2,-{}^1\!/\!{}_2\rangle_s+|1,1\rangle_l\underbrace{\hat{S}_-|{}^1\!/\!{}_2,-{}^1\!/\!{}_2\rangle_s}_{=0}\right]=\hbar\sqrt{\frac{2}{3}}|1,0\rangle_l|{}^1\!/\!{}_2,-{}^1\!/\!{}_2\rangle_s\ .$$

Összegyűjtve a tagokat és átrendezve az egyenletet

$$|{}^3\!/\!{}_2,-{}^1\!/\!{}_2\rangle_j=\sqrt{\frac{1}{3}}|1,-1\rangle_l|\frac{1}{2},{}^1\!/\!{}_2\rangle_s+\sqrt{\frac{2}{3}}|1,0\rangle_l|{}^1\!/\!{}_2,-{}^1\!/\!{}_2\rangle_s\ .$$

Ezzel az összes $j={}^3\!/\!{}_2$ állapotot megkaptuk. A következő lépés – ahogy előző gyakorlaton is láttuk – az lesz, hogy az állapotok ortonormáltságát kihasználva felírjuk a $j={}^1\!/\!{}_2$ állapotokat. Kezdjük az $|{}^1\!/\!{}_2,{}^1\!/\!{}_2\rangle_j$ állapottal! Általánosan

$$|{}^1\!/\!{}_2,{}^1\!/\!{}_2\rangle_j=A|1,0\rangle_l|{}^1\!/\!{}_2,{}^1\!/\!{}_2\rangle_s+B|1,1\rangle_l|{}^1\!/\!{}_2,-{}^1\!/\!{}_2\rangle_s\ ,$$

ahol A és B a meghatározandó Clebsch–Gordan-együtthatók. Tudjuk, hogy

$${}_j\langle{}^3\!/\!{}_2,{}^1\!/\!{}_2|{}^1\!/\!{}_2,{}^1\!/\!{}_2\rangle_j=\sqrt{\frac{2}{3}}A+\sqrt{\frac{1}{3}}B=0$$

és

$${}_j\langle{}^1\!/\!{}_2,{}^1\!/\!{}_2|{}^1\!/\!{}_2,{}^1\!/\!{}_2\rangle_j=|A|^2+|B|^2=1\ .$$

Az ortonormáltság alapján felírt két egyenlet szerint $A=\pm\sqrt{{}^1\!/\!{}_3}$ és $B=\mp\sqrt{{}^2\!/\!{}_3}$. A fázisokat valósnak válaszottuk, illetve az előjelet a Condon–Shortley-konvenció szerint rögzíthetjük, azaz

$$\mathcal{C}(l,l;s,j-l|j,j)=\mathcal{C}(1,1;{}^1\!/\!{}_2,-{}^1\!/\!{}_2|{}^1\!/\!{}_2,{}^1\!/\!{}_2)=B>0\ .$$

Ennélfogva

$$|{}^1\!/\!{}_2,{}^1\!/\!{}_2\rangle_j=-\sqrt{\frac{1}{3}}|1,0\rangle_l|{}^1\!/\!{}_2\rangle_s+\sqrt{\frac{2}{3}}|1,1\rangle_l|{}^1\!/\!{}_2,-{}^1\!/\!{}_2\rangle_s\ .$$

Az utolsó ismeretlen $|{}^1\!/\!{}_2,-{}^1\!/\!{}_2\rangle_j$ állapot meghatározásához léptessük le az $|{}^1\!/\!{}_2,{}^1\!/\!{}_2\rangle_j$ állapotot! A bal oldal ekkor

$$\hat{J}_-|{}^1\!/\!{}_2,{}^1\!/\!{}_2\rangle_j=\hbar|{}^1\!/\!{}_2,-{}^1\!/\!{}_2\rangle_j\ ,$$

míg a jobb oldal

$$\hat{J}_-\left[-\sqrt{\frac{1}{3}}|1,0\rangle_l|{}^1\!/\!{}_2\rangle_s+\sqrt{\frac{2}{3}}|1,1\rangle_l|{}^1\!/\!{}_2,-{}^1\!/\!{}_2\rangle_s\right]\ .$$

Innen az első tag

$$
\begin{aligned}
&-\sqrt{\frac{1}{3}}\left[\hat{L}_-|1,0\rangle_l|{}^1\!/\!_2,{}^1\!/\!_2\rangle_s + |1,0\rangle_l\hat{S}_-|{}^1\!/\!_2,{}^1\!/\!_2\rangle_s\right] \\
&= -\hbar\sqrt{\frac{2}{3}}|1,-1\rangle_l|{}^1\!/\!_2,{}^1\!/\!_2\rangle_s - \hbar\sqrt{\frac{1}{3}}|1,0\rangle_l|{}^1\!/\!_2,-{}^1\!/\!_2\rangle_s \ ,
\end{aligned}
$$

és a második tag

$$
\sqrt{\frac{2}{3}}\left[\hat{L}_-|1,1\rangle_l|{}^1\!/\!_2,-{}^1\!/\!_2\rangle_s + |1,1\rangle_l\underbrace{\hat{S}_-|{}^1\!/\!_2,-{}^1\!/\!_2\rangle_s}_{=0}\right] = \hbar\sqrt{\frac{4}{3}}|1,0\rangle_l|{}^1\!/\!_2,-{}^1\!/\!_2\rangle_s \ .
$$

Összevonva a megfelelő tagokat és újfent átrendezve az egyenletet:

$$
|{}^1\!/\!_2,-{}^1\!/\!_2\rangle_j = -\sqrt{\frac{2}{3}}|1,-1\rangle_l|{}^1\!/\!_2,{}^1\!/\!_2\rangle_s + \sqrt{\frac{1}{3}}|1,0\rangle_l|{}^1\!/\!_2,-{}^1\!/\!_2\rangle_s \ .
$$

Ezzel a lépéssel a feladat végére értünk, az összes lehetséges $|j,m_j\rangle_j$ állapotot felírtuk az alrendszerek állapotainak direkt szorzataival és a Clebsch–Gordan-együtthatókkal.

2. feladat (még több impulzusmomemntum)

Legyen egy H-atom elektronja lefelé mutató ($m_s = -{}^1\!/\!_2$) spinnel a $\psi_{nlm} = \psi_{210} = |2,1,0\rangle$ állapotban. Milyen lehetséges értékeket kaphatunk $\hat{J}^2$ mérésekor (ugye tudjuk, hogy $\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{L}} + \hat{\mathbf{S}}$) és milyen valószínűséggel?

Először vegyük észre, hogy $\hat{J}^2$ mérésekor az n főkvantumszámmal nem kell foglakoznunk, azaz a feladat egy $l = 1, m = 0$ és $s = {}^1\!/\!_2, m_s = -{}^1\!/\!_2$ alrendszerekből álló összetett rendszer impulzusmomentumára vonatkozik. A H-atom tehát az $|1,0\rangle_l|{}^1\!/\!_2,-{}^1\!/\!_2\rangle_s$ állapotban van, és arra vagyunk kíváncsiak, hogy ekkor $m + m_s = m_j = -{}^1\!/\!_2$ mellett milyen valószínűséggel mérhetünk $j \in \{|l-s|,\ldots,l+s\} = \{{}^3\!/\!_2,{}^1\!/\!_2\}$ értékeket. Az előző feladatban éppen ezeket az állapotokat építettük fel, így tudjuk, hogy

$$
\begin{aligned}
|{}^1\!/\!_2,-{}^1\!/\!_2\rangle_j &= -\sqrt{\frac{2}{3}}|1,-1\rangle_l|{}^1\!/\!_2,{}^1\!/\!_2\rangle_s + \sqrt{\frac{1}{3}}|1,0\rangle_l|{}^1\!/\!_2,-{}^1\!/\!_2\rangle_s \ , \\
|{}^3\!/\!_2,-{}^1\!/\!_2\rangle_j &= \sqrt{\frac{1}{3}}|1,-1\rangle_l|{}^1\!/\!_2,{}^1\!/\!_2\rangle_s + \sqrt{\frac{2}{3}}|1,0\rangle_l|{}^1\!/\!_2,-{}^1\!/\!_2\rangle_s \ .
\end{aligned}
$$

Mindkét egyenletből fejezzük ki a keresett $|1,0\rangle_l|{}^1\!/\!_2,-{}^1\!/\!_2\rangle_s$ állapotot!

$$
\begin{aligned}
|1,0\rangle_l|{}^1\!/\!_2,-{}^1\!/\!_2\rangle_s &= \sqrt{3}|{}^1\!/\!_2,-{}^1\!/\!_2\rangle_j + \sqrt{2}|1,-1\rangle_l|{}^1\!/\!_2,{}^1\!/\!_2\rangle_s \ , \\
|1,0\rangle_l|{}^1\!/\!_2,-{}^1\!/\!_2\rangle_s &= \sqrt{\frac{3}{2}}|{}^3\!/\!_2,-{}^1\!/\!_2\rangle_j - \sqrt{\frac{1}{2}}|1,-1\rangle_l|{}^1\!/\!_2,{}^1\!/\!_2\rangle_s \ .
\end{aligned}
$$

A két egyenletből (pl. az elsőhöz hozzáadva a második kétszeresét, majd elosztva minden 3-mal):

$$
|1,0\rangle_l|{}^1\!/\!_2,-{}^1\!/\!_2\rangle_s = \sqrt{\frac{2}{3}}|{}^3\!/\!_2,-{}^1\!/\!_2\rangle_j + \sqrt{\frac{1}{3}}|{}^1\!/\!_2,-{}^1\!/\!_2\rangle_j \ ,
$$

azaz $j = {}^3\!/\!_2$ a mérések ${}^2\!/\!_3$-ában, míg $j = {}^1\!/\!_2$ a maradék ${}^1\!/\!_3$ esetben.

Bevezető az időfüggetlen és nem-degenerált perturbációszámításhoz

Az alábbiakban az előadáson elhangzottak rövid összefoglalója szerepel. Tekintsünk egy olyan rendszert, amely Hamilton-operátora felírható mint egy ismert $\hat{H}^{(0)}$ perturbálatlan és egy „kicsiny" $\hat{H}'$ perturbáló Hamilton-operátor összege, azaz

$$\hat{H} = \hat{H}^{(0)} + \hat{H}' \; .$$

A $\hat{H}^{(0)}$ operátor $E_n^{(0)}$ sajátértékeit és $|\psi_n^{(0)}\rangle$ sajátállapotait ismerjük, és ezen a gyakorlaton tegyük fel, hogy nincs degeneráció, azaz $E_n^{(0)} \neq E_m^{(0)}$, ha $n \neq m$. A teljes $\hat{H}$ rendszerét keressük sor alakjában mint

$$\begin{aligned} E_n &= E_n^{(0)} + E_n^{(1)} + E_n^{(2)} + \dots \; , \\ |\psi_n\rangle &= |\psi_n^{(0)}\rangle + |\psi_n^{(1)}\rangle + \dots \end{aligned}$$

Az előadáson tanultak alapján az energia első és másodrendű korrekciója:

$$\begin{aligned} E_n^{(1)} &= \langle \psi_n^{(0)} | \hat{H}' | \psi_n^{(0)} \rangle \; , \\ E_n^{(2)} &= \sum_{m \neq n} \frac{|\langle \psi_m^{(0)} | \hat{H}' | \psi_n^{(0)} \rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \; , \end{aligned}$$

és a sajátvektor elsőrendű korrekciója:

$$|\psi_n^{(1)}\rangle = \sum_{n \neq m} \frac{\langle \psi_n^{(0)} | \hat{H}' | \psi_m^{(0)} \rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} |\psi_m^{(0)}\rangle \; .$$

Nincs más hátra, mint hogy alkalmazzuk, amit tanultunk!

3. feladat

Vegyük a már (túl) jól ismert harmonikus oszcillátort és perturbáljuk meg egy koordinátában negyedrendű taggal, azaz

$$\hat{H} = \underbrace{\frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 \hat{x}^2}_{\hat{H}^{(0)}} + \underbrace{\lambda \hat{x}^4}_{\hat{H}'} \; ,$$

ahol λ egy megfelelő dimenziójú kicsiny paraméter. Szeretnénk meghatározni a perturbáció hatására fellépő elsőrendű korrekciót. A $\hat{H}^{(0)}$ Hamilton-operátorú rendszer ismert:

$$E_n^{(0)} = \hbar\omega(n + 1/2) \qquad \text{és} \qquad |\psi_n^{(0)}\rangle = |n\rangle \; ,$$

ahol $\langle n|m\rangle = \delta_{nm}$. A feladatot léptetőoperátorok segítségével oldjuk meg (de meg lehetne máshogy is, de talán így egyszerűbb). Léptetőoperátorokkal felírhatjuk a koordináta operátort mint

$$\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (a + a^\dagger) \; ,$$

ahol $a^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle$ és $a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle$, ennélfogva

$$\hat{H}' = \lambda\left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^2 (a+a^\dagger)(a+a^\dagger)(a+a^\dagger)(a+a^\dagger) \ .$$

Az elsőrendű energiakorrekció

$$E_n^{(1)} = \langle n|\hat{H}'|n\rangle = \text{sok tag}\ldots$$

A sok tagból azonban nagyon sok eltűnik a sajátvektorok ortnormáltsága miatt, ugyanis csak azok a tagok maradnak meg, melyek a léptetőoperátorok hattatása után arányosak lesznek $\langle n|n\rangle = 1$-el. Ez csak akkor fordulhat elő, ha egy léptetőoperátor szorzatban ugyanannyi $a, a^\dagger$ operátor van (aki nem hiszi járjon utána). A megmaradó tagok kis kombinatorikával az alábbiak:

$$\begin{aligned}
\langle n|aaa^\dagger a^\dagger|n\rangle &= (n+1)(n+2) \ ,\\
\langle n|aa^\dagger aa^\dagger|n\rangle &= (n+1)^2 \ ,\\
\langle n|a^\dagger aaa^\dagger|n\rangle &= (n+1)n \ ,\\
\langle n|a^\dagger aa^\dagger a|n\rangle &= n^2 \ ,\\
\langle n|a^\dagger a^\dagger aa|n\rangle &= n(n-1) \ ,\\
\langle n|aa^\dagger a^\dagger a|n\rangle &= n(n+1) \ .
\end{aligned}$$

Összevonva a megmaradó tagokat az energiakorrekció elsőrendben:

$$E_n^{(1)} = \lambda\left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^2 \big(6n(n+1)+3\big) \ .$$

4. feladat

Tekintsük a végtelen mély potenciálgödör esetét, azonban most a gödör közepén legyen még egy Dirac-deltával arányos tag a potenciálban, azaz

$$\hat{H}' = \alpha\delta(x - {}^a\!/_2) \ .$$

A perturbálatlan eset megoldását már láttuk korábbi gyakorlatokon:

$$\begin{aligned}
E_n^{(0)} &= \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{n\pi}{a}\right)^2 \ ,\\
|\psi_n^{(0)}(x)\rangle &= \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) \ .
\end{aligned}$$

A Dirac-delta hatására az elsőrendű energiakorrekció:

$$\begin{aligned}
E_n^{(1)} = \langle\psi_n^{(0)}|\hat{H}'|\psi_n^{(0)}\rangle &= \int_0^a \mathrm{d}x\ |\psi_n^{(0)}(x)|^2\alpha\delta(x - {}^a\!/_2) = \alpha|\psi_n^{(0)}({}^a\!/_2)|^2\\
&= \frac{2\alpha}{a}\sin^2\left(\frac{n\pi}{2}\right) = \begin{cases}\frac{2\alpha}{a}\ , & \text{ha } n \text{ páratlan}\\ 0\ , & \text{ha } n \text{ páros}\end{cases} \ .
\end{aligned}$$

A zérus korrekció érthető, hiszen a páros esetben a hullámfüggvény eltűnik a potenciál-gödör közepén:

$$\psi_{2k}^{(0)}({}^{a}\!/\!{}_{2}) \propto \sin\left(\frac{2k\pi}{a}\frac{a}{2}\right) = 0 \,,$$

azaz nem tartózkodhat itt részecske, és ezt nem befolyásolja a perturbáció sem. Az $n = 1$ esetben a hullámfüggvény elsőrendű korrekciója:

$$|\psi_{n=1}^{(1)}\rangle = \sum_{m\neq 1}^{\infty} \frac{\langle\psi_m^{(0)}|\hat{H}'|\psi_1^{(0)}\rangle}{E_1^{(0)} - E_m^{(0)}} |\psi_m^{(0)}\rangle \;.$$

A számlálóban megjelenő mátrixelem

$$\begin{aligned}
\langle\psi_m^{(0)}|\hat{H}'|\psi_1^{(0)}\rangle &= \frac{2\alpha}{a}\int\limits_0^a \mathrm{d}x\ \sin\left(\frac{m\pi x}{a}\right)\sin\left(\frac{\pi x}{a}\right)\delta(x - {}^{a}\!/\!{}_{2}) \\
&= \frac{2\alpha}{a}\sin\left(\frac{m\pi}{2}\right) = \frac{2\alpha}{a}\begin{cases} (-1)^k \,, & \text{ha } m = 2k+1 \text{ (páratlan)} \\ 0 \,, & \text{ha } m = 2k \text{ (páros)} \end{cases} \;.
\end{aligned}$$

Így a korrekció (átírva az összegzést $m = 2k + 1$ alapján)

$$|\psi_{n=1}^{(1)}\rangle = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{2\alpha}{a} \frac{(-1)^k}{\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\pi}{a}\right)^2 - \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{(2k+1)\pi}{a}\right)^2} |\psi_{2k+1}^{(0)}\rangle = \frac{4\alpha m a}{\hbar^2\pi^2}\sum_{k=1}^{\infty}\frac{(-1)^k}{1 - (2k+1)^2}|\psi_{2k+1}^{(0)}\rangle \;.$$

A megjelenő végtelen sor kézzel nem összegezhető fel, de numerikusan igen (szorgalmi feladat).