Szabó Vencel HGACP9

1.1. A Hamilton operátor $\hat{H} = -qEx$

A Hamilton-operátor harmonikus potenciálban;

$$\hat{H} = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 \hat{x}^2}{2}$$

Az alapállapoti energia;

$$E_n^{(0)} = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)$$

Az $\hat{x}$ felírható, mint $\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left(\hat{a} + \hat{a}^+\right)$

Az elsőrendben az energia a következő lesz;

$$E_n^{(1)} = \langle n|\hat{H}|n\rangle = -qE\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\langle n|\hat{a} + \hat{a}^+|n\rangle$$

$$= -qE\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\langle n|\hat{a}|n\rangle - qE\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\langle n|\hat{a}^+|n\rangle$$

A léptető operátorok miatt a skalárszorzás a mindkét esetben 0-t fog adni, így az elsőrendű energia korrekció 0.

Másodrend;

$$E_n^{(2)} = q^2E^2\frac{\hbar}{2m\omega}\left[\sum_{m\neq n}\frac{(n+1)\langle m|n+1\rangle}{\hbar\omega(n-m)} + \sum_{m\neq n}\frac{n\langle m|n-1\rangle}{\hbar\omega(n-m)}\right] =$$

A léptetőoperátorok miatt csak az $m = n+1$ illetve $m = n-1$ tagok fognak nemnulla eredményt adni.

$$q^2 E^2 \frac{\hbar}{2m\omega} \frac{1}{\hbar\omega} \left[\frac{n}{n-(n-1)} + \frac{n+1}{n-(n+1)} \right] =$$

Közös nevezőre hozva;

$$\frac{n(n-(n+1)) + (n+1)(n-(n-1))}{(n-(n-1))(n-(n+1))} =$$

$$\frac{n(1) + (n+1)(-1)}{-1 \cdot -1} = = \frac{-1}{1} = -1$$

$\frac{q^2 E^2}{2m\omega^2}$ lesz a keresett eredmény.

A Schrödinger egyenlet változócserés megoldása;

$[H^0 + \hat{H}^1] \psi = E \psi$ Írjuk a Hamilton-operátort;

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 - qE\hat{x} \right) \psi = E \psi$$

Legyen $x = x' + \frac{qE}{m\omega^2}$

ekkor $x^2 = x'^2 + \frac{q^2E^2}{m^2\omega^4} + 2x' \frac{qE}{m\omega^2}$

Ezt beírva a Schrödinger-egyenletbe;

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{1}{2}m\omega^2\left(x'^2+2x'\frac{qE}{m\omega^2}+\frac{q^2E^2}{m^2\omega^4}\right)-qEx'-\frac{q^2E^2}{m\omega^2}\right]\psi=E\psi$$

$$\cancel{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x'^2}+\frac{1}{2}m\omega^2x'^2+x'qE+\frac{q^2E^2}{2m\omega^2}-\frac{m\omega^2 qEx'}{2}+\frac{q^2E^2}{2}}$$

$$\frac{1}{2}m\omega^2x'^2+x'qE+\frac{q^2E^2}{2m\omega^2}-qEx'-\frac{q^2E^2}{m\omega^2}$$

Egyszerűsítés után a következőket kapjuk;

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x'^2}+\frac{1}{2}m\omega^2x'^2-\frac{1}{2}\frac{q^2E^2}{m\omega^2}\right]\psi=E\psi$$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x'^2}+\frac{1}{2}m\omega^2x'^2\right)\psi-\frac{1}{2}\frac{q^2E^2}{m\omega^2}\psi=E\psi$$

Vegyük észre a harmonikus potenciált a kifejezésben.

A harmonikus oszcillátor energiáját kaina

$$\left[\hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)-\frac{1}{2}\frac{q^2E^2}{m\omega^2}\right]\psi=E\psi$$

A megkapott kifejezésben már nincs operátor.

2. feladat

$$\hat{H}^{(0)} = a\mathcal{H}\hat{S}_z + b\mathcal{H}\hat{I}_z$$

Az operátort hattatva a sajátállapotraj

$$\hat{H}^{(0)}|S\,M_S\rangle||\,M_I\rangle = (a\mathcal{H}\hat{S}_z + b\mathcal{H}\hat{I}_z)|S\,M_S\rangle|I\,M_I\rangle$$

Az elsőrendű

$$E^{(1)}_{M_S M_I} = \langle I\,M_I|\langle S\,M_S|\hat{H}^{1}|S\,M_S\rangle|I\,M_I\rangle$$

A rendezésből csak a nemnulla tagokat írva a következőket kapjuk

$$\langle I\,M_I|\langle S\,M_S|\hat{S}_z^2 - \frac{1}{3}\hat{S}^2|S\,M_S\rangle|I\,M_I\rangle =$$

$$\hbar^2 M_S^2 - \frac{1}{3}\hbar^2 S(S+1)$$

$$|M_I\ \langle S\,M_S|A\,\hat{S}_z\,\hat{I}_z|S\,M_S\rangle|I\,M_I\rangle =$$

$$A\hbar^2 M_S M_I$$

Az elsőrendű korrekció így

$$E^{(1)}_{M_S M_I} = \frac{D}{2}(3\cos^2\theta - 1)\left(\hbar^2 M_S^2 - \frac{1}{3}\hbar^2 S(S+1)\right) + A\hbar^2 M_S M_I$$

$\hat{S}$ egy elektron spinjét jelöli, így értéke $\frac{1}{2}$

$M_S = \pm\frac{1}{2} \Rightarrow M_S^2 = \frac{1}{4}$

Így az $\left(M_S^2 - \frac{1}{3} S(S+1)\right)\hbar^2$ kifejezést átírva;

$\frac{1}{4} - \frac{1}{3} \cdot \frac{1}{2} \cdot \frac{3}{2} = 0$

Ekkor a teljes kifejezés felírható, mint;

$$E^{(1)}_{M_S M_I} = A\hbar^2 M_S M_I$$

2. rendű perturbációs számítás

A képlet szerint

$$E^{(2)}_{M_I S_I} = \sum_{M_I' \neq M_I} \sum_{S_I \neq S_I'} \frac{\langle I' M_I' | \langle S' M_S' | \hat{H}' | S M_S \rangle | I M_I \rangle}{E^{(0)}_{M_S M_I} - E^{(0)}_{M_S M_I'}}$$

$\delta_{M_S M_S'} \delta_{M_I M_I'} \neq 0$ ha $M_S = M_S'$ $M_I = M_I'$

Ez viszont a summázási feltétel miatt nem fordulhat elő.

Olyan kifejezés fog nemzérus eredményt adni, amiben az $\hat{S}$ és az $\hat{I}$ operátorok is megtalálhatóak.

Egy ilyen tag van;

$$\frac{A}{2}\left(\hat{S}_+ \hat{I}_- + \hat{S}_- \hat{I}_+\right)$$

Írjuk le ezt a tagot;

$$\langle 1' M_s | \langle S' M_s' | \hat{S}_+ \hat{I}_- + \hat{S}_+ \hat{I}_+ | S M_s \rangle | 1 M_1 \rangle =$$

$$\langle 1' M_1' | \langle S' M_s' | \hbar^2 \sqrt{S(S+1) - M_s(M_s+1)} \sqrt{1(1+1) - M_1(M_1-1)} \cdot | S M_{s+1} \rangle | 1 M_1 - 1 \rangle$$

$$+ \langle 1' M_1' | \langle S' M_s' | \hbar^2 \sqrt{S(S+1) - M_S(M_S-1)} \cdot$$

$$\cdot \sqrt{1(1+1) - M_1(M_1+1)} | S \; M_S - 1 \rangle | 1 \; M_1+1 \rangle =$$

$$\hbar^2 \sqrt{S(S+1) - M_S(M_S+1)} \sqrt{1(1+1) - M_1(M_1+1)} \cdot \delta_{M_s' M_s+1} \delta_{M_1 M_1-1}$$

A perturbációszámításnál a másodrendűből eltűnnek a kereszttagok.

$$E^{(2)}_{M_1 M_S} = \sum_{M_S = M_S'} \sum_{M_1 \neq M_1'} \frac{A^2 \hbar^4}{4} \frac{\left(\sqrt{S(S+1) - M_S(M_S+1)} \sqrt{1(1+1) - M_1(M_1+1)} \right)^2}{E^0_{M_S M_1} - E^0_{M_S' M_1'}}$$

$$\cdot \delta_{M_S' M_{S+1}} \delta_{M_1' M_{1-1}}$$

Számítsuk ki a tört nevezőjét.

$$E^{(0)}_{M_s M_1} = \hbar \mathcal{H} (a M_s + b M_1]$$

$$E^0_{M_S M_1} - E^0_{M_S' M_1'} = a \hbar \mathcal{H} (M_S - M_S') + b\hbar (M_1 - M_1')$$

$$E^{(2)}_{M_S M_I} = \frac{A^2\hbar^3}{4\mathcal{H}} \frac{\left(S(S+1) - M_S(M_S+1)\right)\left(I(I+1) - M_I(M_I-1)\right)}{a\left(M_S - (M_S+1)\right) + b\left(M_I - (M_I-1)\right)} +$$

$$\frac{A^2\hbar^3}{4\mathcal{H}} \frac{\left(S(S+1) - M_S(M_S-1)\right)\left(I(I+1) - M_I(M_I+1)\right)}{a\left(M_S - (M_S+1)\right) + b\left(M_I - (M_I-1)\right)}$$

$$= \frac{A^2\hbar^3}{4\mathcal{H}} \frac{\left(S(S+1) - M_S(M_S+1)\right)\left(I(I+1) - M_I(M_I-1)\right)}{b-a}$$

$$+ \frac{A^2\hbar^3}{4\mathcal{H}} \frac{\left(S(S+1) - M_S(M_S-1)\right)\left(I(I+1) - M_I(M_I+1)\right)}{a-b} =$$

$$\frac{A^2\hbar^3}{4\mathcal{H}(a-b)} \Big[S(S+1)I(I+1) - M_S(M_S-1)I(I+1) - S(S+1)M_I(M_I+1) +$$

$$M_I M_S (M_S-1)(M_I+1) - S(S+1)I(I+1) +$$

$$I(I+1)M_S(M_S+1) + S(S+1)M_I(M_I-1) - M_S M_I (M_S+1)(M_I-1) \Big]$$

$$= \frac{A^2\hbar^3}{4\mathcal{H}(a-b)} \Big[2\cdot I(I+1)M_S + S(S+1)M_I\cdot(-2) + M_I M_S\cdot\big(M_S M_I - M_I + M_S - M_I - 1$$

$$- M_S M_I + 1 + M_S\big) \Big] =$$

$$\frac{A^2 \hbar^3}{2 \hbar (a-b)} \left[I(I+1) + M_I M_S (M_S - M_I) - S(S+1) M_I \right] = E^{(2)}_{M_S M_I}$$

CamScanner