Kvantummechanika A – gyakorlat
7. gyakorlat

Impulzusmomentum összeadás

1. feladat

Tekintsünk egy összetett rendszert, melynek két alrendszerében az impulzusmomentum kvantumászáma (pl. H-atomban az l mellékkvantumszám) legyen $s_1 = 2$ és $s_2 = 1$. Tegyük fel, hogy valahogy meg tudjuk mérni a rendszer teljes impulzusmomentumát – értsd. az $|s, m\rangle$ állapotot – és úgy találjuk, hogy $s = 1$ és $m = 1$. Arra vagyunk kíváncsiak, hogy ebben az esetben milyen állapotban lehettek az alrendszerek, és a lehetséges állapotokhoz milyen valószínűségek tartoznak.

Mindenek előtt vezessünk be néhány egyszerű szabályt, ami mentén el tudunk majd indulni egy a fentitől különböző, általánosabb esetben is. A teljes rendszert jelölje $|s, m\rangle$, míg alrendszereit $|s_1, m_1\rangle_1$ és $|s_2, m_2\rangle_2$. Ekkor

1. s nem egyértelmű, viszont ismert értékeket vehet fel:
$$s \in \{|s_1 - s_2|, |s_1 - s_2| + 1, \dots, s_1 + s_2 - 1, s_1 + s_2\} ;$$
2. m egyértelmű: $m = m_1 + m_2$;
3. ha csak s_i-t ismerem, akkor m_i nem egyértelmű, viszont ismert értékeket vehet fel:
$$m_i \in \{-s_i, -s_i + 1, \dots, s_i - 1, s_i\} ;$$
4. ha s_1, s_2 adott, akkor nem változhatnak(!);
5. az állapotok ortogonálisak egymásra:
$$\langle s_i, m_i | s_j, m_j\rangle = \delta_{s_i s_j} \delta_{m_i m_j} .$$

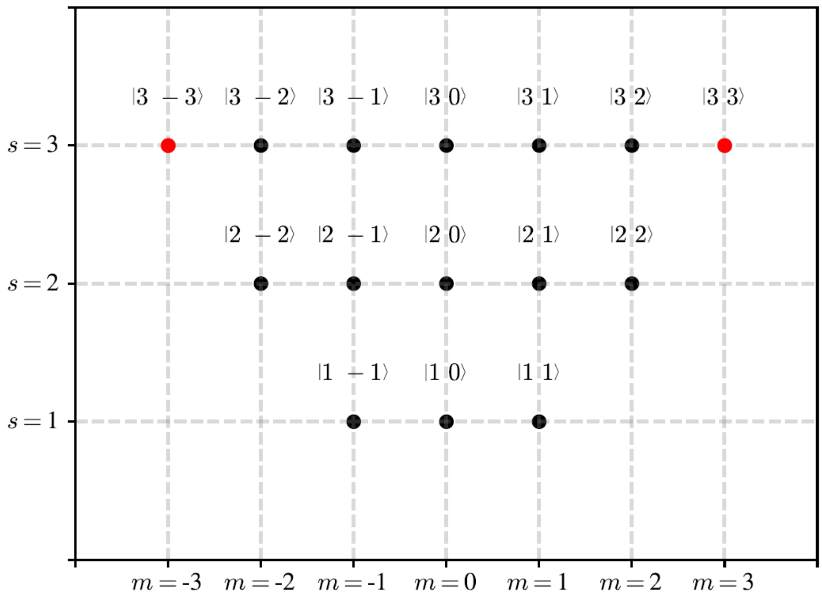
Ezen felül gyűjtsük össze a számolások során előfordolú hasznos képleteket:

1. általánosan a teljes rendszer kifejtése az alrendszerek állapotainak direktszorzatainak és a Clebsch–Gordan-együtthatók segítségével:
$$|s, m\rangle = \sum_{m_1=-s_1}^{s_1} \sum_{m_2=-s_2}^{s_2} \mathcal{C}(s_1, m_1; s_2, m_2 | s, m) |s_1, m_1\rangle_1 |s_2, m_2\rangle_2 ;$$
2. Condon–Shortley-konvenció:
   - legyen minden fázis valós (értsd. $e^{i\varphi} \to \pm 1$),
   - speciálisan: $\mathcal{C}(s_1, s_1; s_2, s - s_1 | s, s) > 0$;

3. léptetőoperátorok hatása:
$$\hat{S}_\pm|sm\rangle = \hbar\sqrt{s(s+1)-m(m\pm 1)}|s\,m\pm 1\rangle\ ,$$
   és
$$\hat{S}_\pm = \hat{S}_\pm^{(1)}\otimes\hat{\mathbb{1}}^{(2)} + \hat{\mathbb{1}}^{(1)}\otimes\hat{S}_\pm^{(2)}\ ;$$
4. ellenőrzésnek hasznos tudni, hogy
$$\mathrm{dim}\mathcal{H}_1\cdot\mathrm{dim}\mathcal{H}_2 = \sum_{s=|s_1-s_2|}^{s_1+s_2}\mathrm{dim}\mathcal{H}_s\ ,$$
   ahol $\mathcal{H}_s$ a s-sel indexelt rendszer Hilbert-terét jelöli.

Elöször „0. lépésként" végezzük el a fenti ellenőrzést a Hilbert-terek dimenziójára vonatkozóan az adott esetünkben. Az első alrendszer lehetséges állapotai
$$|2,m_1\rangle_1 = \begin{cases} |2,-2\rangle_1 \\ |2,-1\rangle_1 \\ |2,0\rangle_1 \\ |2,1\rangle_1 \\ |2,2\rangle_1 \end{cases} \qquad\Longrightarrow\qquad \mathrm{dim}\mathcal{H}_1 = 2s_1+1 = 5\ ,$$
míg a második alrendszer állapotai
$$|1,m_2\rangle_2 = \begin{cases} |1,-1\rangle_2 \\ |1,0\rangle_2 \\ |1,1\rangle_2 \end{cases} \qquad\Longrightarrow\qquad \mathrm{dim}\mathcal{H}_2 = 2s_2+1 = 3\ ,$$
így $\mathrm{dim}\mathcal{H}_1\cdot\mathrm{dim}\mathcal{H}_2 = 15$. A fenti első szabály alapján tudjuk, hogy a teljes rendszer kvantumszáma $s\in\{|s_1-s_2|,\ldots,s_1+s_2\} = \{1,2,3\}$, így a lehetséges állapotok:
$$|1,m\rangle = \begin{cases} |1,-1\rangle \\ |1,0\rangle \\ |1,1\rangle \end{cases} \qquad\Longrightarrow\qquad \mathrm{dim}\mathcal{H}_{s=1} = 3\ ,$$
$$|2,m\rangle = \begin{cases} |2,-2\rangle \\ |2,-1\rangle \\ |2,0\rangle \\ |2,1\rangle \\ |2,2\rangle \end{cases} \qquad\Longrightarrow\qquad \mathrm{dim}\mathcal{H}_{s=2} = 5\ ,$$
$$|3,m\rangle = \begin{cases} |3,-3\rangle \\ |3,-2\rangle \\ |3,-1\rangle \\ |3,0\rangle \\ |3,1\rangle \\ |3,2\rangle \\ |3,3\rangle \end{cases} \qquad\Longrightarrow\qquad \mathrm{dim}\mathcal{H}_{s=3} = 7\ .$$

Ennélfogva $\dim\mathcal{H}_{s=1} + \dim\mathcal{H}_{s=2} + \dim\mathcal{H}_{s=3} = 15$. Meg is van az ellenőrzés. Érdemes a lehetséges állapotokat felvázolni az (s-m)-síkon (ld. 1. ábra). A piros ponttal jelölt



1. ábra. Lehetséges $|s, m\rangle$ állapotok az $(s-m)$-síkon.

állapotok egyértelműek, azaz $m = m_1 + m_2$ csak egyetlen módon keverhető ki a lehetséges m_1, m_2 kvantumszámokból:

$$|3,3\rangle = |2,2\rangle_1 |1,1\rangle_2 \;,$$
$$|3,-3\rangle = |2,-2\rangle_1 |1,-1\rangle_2 \;.$$

A mért teljes rendszerünk az $|1,1\rangle$, ezt szeretnénk felírni a Clebsch–Gordan-együtthatók segítségével. Ehhez ki kell indulnunk valamelyik „szélső”, pirossal jelölt, egyértelmű állapotból. Mivel a $|3,3\rangle$ „közelebb” van célunkhoz, induljunk ki abból. Hattassuk a lefelé léptető operátort a $|3,3\rangle$ állapotra! A bal oldal:

$$\hat{S}_- |3,3\rangle = \hbar\sqrt{3(3+1) - 3(3-1)} |3,2\rangle = \hbar\sqrt{6} |3,2\rangle \;,$$

míg a jobb oldal (később az „$\otimes$” jelölést elhagyjuk)

$$\begin{aligned} \hat{S}_- \left[|2,2\rangle_1 |1,1\rangle_2 \right] &= \hat{S}_-^{(1)} |2,2\rangle_1 \otimes |1,1\rangle_2 + |2,2\rangle_1 \otimes \hat{S}^{(2)} |1,1\rangle_2 \\ &= \hbar\sqrt{2(2+1) - 2(2-1)} |2,1\rangle_1 |1,1\rangle_2 + \hbar\sqrt{1(1+1)} |2,2\rangle_1 |1,0\rangle_2 \\ &= \hbar 2 |2,1\rangle_1 |1,1\rangle_2 + \hbar\sqrt{2} |2,2\rangle_1 |1,0\rangle_2 \;. \end{aligned}$$

Átrendezve a „bal oldal = jobb oldal” egyenletet[1]:

$$|3,2\rangle = \sqrt{\frac{3}{2}} |2,1\rangle_1 |1,1\rangle_2 + \sqrt{\frac{1}{3}} |2,2\rangle_1 |1,0\rangle_2 \;.$$

[1]Ha $s = 3, m = 2$ lett volna mérés eredménye, akkor kész is lennénk: megvannak a Clebsch–Gordan-együtthatók, melyek négyzetei a valószínűségeket adják, illetve az alrendszerek állapotainak direkt szorzatai mint lehetséges állapotok.

Következő lépésként hattassuk újra a lefelé léptető operátort a fenti, újonnan meghatározott $|3,2\rangle$ állapotra! A bal oldal

$$\hat{S}_-|3,2\rangle = \hbar\sqrt{3(3-1)-2(2-1)}|3,1\rangle = \hbar\sqrt{10}|3,1\rangle \ ,$$

míg a jobb oldal

$$\hat{S}_-\left[\sqrt{\frac{2}{3}}|2,1\rangle_1|1,1\rangle_2 + \sqrt{\frac{1}{3}}|2,2\rangle_1|1,0\rangle_2\right] \ ,$$

ahol az első tag

$$\sqrt{\frac{2}{3}}\left[\hat{S}_-^{(1)}|2,1\rangle_1|1,1\rangle_2 + |2,1\rangle_1\hat{S}_-^{(2)}|1,1\rangle_2\right] = \hbar 2|2,0\rangle_1|1,1\rangle_2 + \hbar\frac{2}{\sqrt{3}}|2,1\rangle_1|1,0\rangle_2 \ ,$$

és a második tag

$$\sqrt{\frac{1}{3}}\left[\hat{S}_-^{(1)}|2,2\rangle_1|1,0\rangle_2 + |2,2\rangle_1\hat{S}_-^{(2)}|1,0\rangle_2\right] = \hbar\frac{2}{\sqrt{3}}|2,1\rangle_1|1,0\rangle_2 + \hbar\sqrt{\frac{2}{3}}|2,2\rangle_1|1,-1\rangle_2 \ .$$

Összevonva a megfelelő tagokat

$$|3,1\rangle = \sqrt{\frac{6}{15}}|2,0\rangle_1|1,1\rangle_2 + \sqrt{\frac{8}{15}}|2,1\rangle_1|1,0\rangle_2 + \sqrt{\frac{1}{15}}|2,2\rangle_1|1,-1\rangle_2 \ .$$

Tovább már nem szükséges léptetünk a $|3,1\rangle$ állapot, ehelyett a 1. ábrán most lefelé szeretnénk haladni. Ezt léptetőoperátorok segítségével nem tudjuk megtenni, mivel azok csak az m kvantumszámot tudják megváltoztatni. Használjuk most ki az állapotok ortonormáltságát! Kihasználva a fentebb felírt szabályokat a $|2,2\rangle$ állapotot általánosan felírhatjuk mint

$$|2,2\rangle = A|2,1\rangle_1|1,1\rangle_2 + B|2,2\rangle_1|1,0\rangle_2 \ ,$$

ahol A, B a két meghatározandó Clebsch–Gordan-együtthatónk. Tudjuk, hogy

$$\langle 2,2|2,2\rangle = |A|^2 + |B|^2 = 1$$

és

$$\langle 3,2|2,2\rangle = \sqrt{\frac{2}{3}}A + \sqrt{\frac{1}{3}}B = 0 \ .$$

Továbbá a Condon–Shortley-konvenció következtében:

$$\mathcal{C}(s_1, s_1; s_2, s - s_1|s, s) = \mathcal{C}(2,2;1,0|2,2) = B > 0 \ .$$

Megoldva a fenti egyenletrendszert és kihasználva, hogy $B > 0$:

$$|2,2\rangle = -\sqrt{\frac{1}{3}}|2,1\rangle_1|1,1\rangle_2 + \sqrt{\frac{2}{3}}|2,2\rangle_1|1,0\rangle_2 \ .$$

Léptessük le most a $|2,2\rangle$ állapotot! A bal oldal

$$\hat{S}_-|2,2\rangle = \hbar 2|2,1\rangle \ ,$$

míg a jobb oldal

$$\hat{S}_-\left[-\sqrt{\frac{1}{3}}|2,1\rangle_1|1,1\rangle_2+\sqrt{\frac{2}{3}}|2,2\rangle_1|1,0\rangle_1\right] ,$$

ahol az első tag

$$-\sqrt{\frac{1}{3}}\left[\hat{S}_-^{(1)}|2,1\rangle_1|1,1\rangle_2+|2,2\rangle_1\hat{S}_-^{(2)}|1,0\rangle_2\right]=-\hbar\sqrt{2}|2,0\rangle_1|1,1\rangle_2-\hbar\sqrt{\frac{2}{3}}|2,1\rangle_1|1,0\rangle_2 ,$$

és a második tag

$$\sqrt{\frac{2}{3}}\left[\hat{S}_-^{(1)}|2,2\rangle_1|1,0\rangle_1+|2,2\rangle_1\hat{S}_-^{(2)}|1,0\rangle_2\right]=\hbar\sqrt{\frac{8}{3}}|2,1\rangle_1|1,0\rangle_2+\hbar\frac{2}{\sqrt{3}}|2,2\rangle_1|1,-1\rangle_2 .$$

Újfent összevonva a megfelelő tagok és átrendezve az egyenletet:

$$|2,1\rangle=-\sqrt{\frac{3}{6}}|2,0\rangle_1|1,1\rangle_2+\sqrt{\frac{2}{6}}|2,2\rangle_1|1,-1\rangle_2+\sqrt{\frac{1}{6}}|2,1\rangle_1|1,0\rangle_2 .$$

Most már megvan a szükséges információnk ahhoz, hogy felírjuk a keresett $|1,1\rangle$ állapotot. Újra használjuk ki, hogy az állapotok ortonormáltak! Írjuk fel általánosan az $|1,1\rangle$ állapotot mint

$$|1,1\rangle=A|2,0\rangle_1|1,1\rangle_2+B|2,1\rangle_1|1,0\rangle_2+C|2,2\rangle_1|1,-1\rangle_2 ,$$

ahol most A, B és C a három meghatározandó Clebsch–Gordan-együttható. Tudjuk, hogy

$$\begin{aligned}\langle 2,1|1,1\rangle&=-\sqrt{\frac{3}{6}}A+\sqrt{\frac{1}{6}}B+\sqrt{\frac{2}{6}}C=0 ,\\ \langle 3,1|1,1\rangle&=\sqrt{\frac{6}{15}}A+\sqrt{\frac{8}{15}}B+\sqrt{\frac{1}{15}}C=0 .\end{aligned}$$

Egy előjel erejéig tehát (kihasználjuk, hogy a keresztszorzat megtartja a normát)

$$\pm\begin{pmatrix}A\\B\\C\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}-\sqrt{3/6}\\\sqrt{1/6}\\\sqrt{2/6}\end{pmatrix}\times\begin{pmatrix}\sqrt{2/15}\\\sqrt{8/15}\\\sqrt{1/15}\end{pmatrix}=\cdots=\begin{pmatrix}-\sqrt{1/10}\\\sqrt{3/10}\\-\sqrt{6/10} .\end{pmatrix}$$

A Condon–Shortley-konvenció alapján rögzítjük az előjelet is:

$$\mathcal{C}(s_1,s_1;s_2,s-s_1|s,s)=\mathcal{C}(2,2;1,-1|1,1)=C>0 .$$

Így a keresett állapot

$$|1,1\rangle=\sqrt{\frac{1}{10}}|2,0\rangle_1|1,1\rangle_2-\sqrt{\frac{3}{10}}|2,1\rangle_1|1,0\rangle_2+\sqrt{\frac{6}{10}}|2,2\rangle_1|1,-1\rangle_2 ,$$

ahonnan leolvashatjuk, hogy az $|1,1\rangle$ teljes rendszer állapot esetén milyen állapotokban lehetnek az alrendszerek, és ezek valószínűségét a Clebsch–Gordan-együtthatók négyzete adja:

$$\begin{aligned}|2,0\rangle_1|1,1\rangle_2 &\quad\to\quad 10\% ,\\ |2,1\rangle_1|1,0\rangle_2 &\quad\to\quad 30\% ,\\ |2,2\rangle_1|1,-1\rangle_2 &\quad\to\quad 60\% .\end{aligned}$$

2. („inverz”) feladat

Az előző feladat eredményének és részeredményeinek ismeretében tegyük fel, hogy $m_1 = 1$ és $m_2 = 1$, azaz $m = m_1 + m_2 = 2$. Ekkor milyen értékeket mérhetünk s kvantumszámra és milyen valószínűségekkel? Tudjuk, hogy $m = 2$ csak az $s \in \{2, 3\}$ esetek fordulhatnak elő, és azt is tudjuk már az előző feladat számolásaiból, hogy

$$|3,2\rangle = \sqrt{\frac{2}{3}}|2,1\rangle_1|1,1\rangle_2 + \sqrt{\frac{1}{3}}|2,2\rangle_1|1,0\rangle_2 \ ,$$
$$|2,2\rangle = -\sqrt{\frac{1}{3}}|2,1\rangle_1|1,1\rangle_2 + \sqrt{\frac{2}{3}}|2,2\rangle_1|1,0\rangle_2 \ .$$

Tudjuk, hogy $m_1 = m_2 = 1$, azaz a keresett állapot a $|2,1\rangle_1|1,1\rangle_2$ lesz. Fejezzük ki ezt az állapotot a $|3,2\rangle$ és $|2,2\rangle$ állapot lineárkombinációjaként mint

$$|2,1\rangle_1|1,1\rangle_2 = X|3,2\rangle + Y|2,2\rangle \ .$$

Vegyük észre, hogy ha $X = \sqrt{2/3}$ és $Y = -\sqrt{1/3}$, akkor csak a keresett állapot marad meg, míg a másik – a $|2,2\rangle_1|1,0\rangle_2$ állapot – kiesik, így

$$|2,1\rangle_1|1,1\rangle_2 = \sqrt{\frac{2}{3}}|3,2\rangle - \sqrt{\frac{1}{3}}|2,2\rangle \ .$$

Ez alapján $s = 3$ az esetek 2/3-ában, míg 1/3 valószínűséggel mérhetünk $s = 2$-t.

3. feladat

Mutassuk meg, hogy ha a $\hat{J}_z$ (az impulzusmomentum z-komponense) operátor sajátállapotban van, akkor $\hat{J}_x$ és $\hat{J}_y$ várható értéke a $\hat{J}_z$ sajátállapotban eltűnik! Ha $\hat{J}_z$ sajátállapotban van, akkor a felírható sajátértékegyenlet

$$\hat{J}_z|j,m\rangle = \hbar m|j,m\rangle \ .$$

Tudjuk, hogy az impulzusmomentum operátor komponenseire teljesül az alábbi kommutációs reláció:

$$[\hat{J}_a, \hat{J}_b] = i\hbar\varepsilon_{abc}\hat{J}_c \ ,$$

ahol megjelenik a Levi-Civita-szimbólum. Kezdjük a számolást $\hat{J}_x$-szel, ekkor a várható érték – felhasználva a kommutációs relációt:

$$\begin{aligned}\langle\hat{J}_x\rangle &= \langle j,m|\hat{J}_x|j,m\rangle = -\frac{i}{\hbar}\langle j,m|[\hat{J}_y,\hat{J}_z]|j,m\rangle = -\frac{i}{\hbar}\langle j,m|\hat{J}_y\hat{J}_z - \hat{J}_z\hat{J}_y|j,m\rangle \\ &= -i\langle j,m|\hat{J}_y m - m\hat{J}_y|j,m\rangle = 0 \ .\end{aligned}$$

Ehhez hasonlóan

$$\begin{aligned}\langle\hat{J}_y\rangle &= \langle j,m|\hat{J}_y|j,m\rangle = -\frac{i}{\hbar}\langle j,m|[\hat{J}_z,\hat{J}_x]|j,m\rangle = -i\langle j,m|\hat{J}_z\hat{J}_x - \hat{J}_x\hat{J}_z|j,m\rangle \\ &= -i\langle j,m|m\hat{J}_x - \hat{J}_x m|j,m\rangle = 0 \ .\end{aligned}$$

Alternatív megoldásként írjuk fel a léptetőoperátorokat mint

$$\hat{J}_\pm = \hat{J}_x \pm i\hat{J}_y \ .$$

Tudjuk, hogy a léptetőoperátor várható értéke zérus, mivel

$$\langle \hat{J}_\pm \rangle \propto \langle j, m | j, m \pm 1 \rangle = 0$$

az állapotok ortonormáltsága miatt. Továbbá

$$\langle \hat{J}_\pm \rangle = \langle \hat{J}_x \rangle \pm i \langle \hat{J}_y \rangle = \text{valós} \pm i \cdot \text{valós} = 0 \ ,$$

azaz a egyenlőség teljesüléséhez $\langle \hat{J}_x \rangle$ és $\langle \hat{J}_y \rangle$ külön-külön eltűnik. Ehhez csak azt kell tudnunk, hogy egy hermitikus operátor várható értéke valós, aminek megmutatása egy nagyon rövid szorgalmi feladat.