Kvantummechanika A – gyakorlat
2. ZH

Megoldások

1. feladat – *Immpulzusmomentum-összeadás*

(**7.5 pont**)
Válaszoljunk először az alábbi rövid kérdésekre!

1. Egy $|j_1, m_1\rangle_1$ és egy $|j_2, m_2\rangle_2$ állapotú részecskéből álló rendszer teljes impulzusmomentumát mérve $|J, M\rangle$-et kapunk. Mekkora lehet J értéke?

2. Ugyanezen rendszerben hogyan függ M értéke az alkotóelemek impulzusmomentumának z-komponenseitől (azaz m_1 és m_2-től)?

3. Tegyük fel, hogy $|J, M\rangle$ állapotnál csak J értékét ismerem. Mit tudunk mondani ekkor M lehetséges értékeiről?

Feladat
Egy dobozban összezártunk egy $|s_1, m_1\rangle_1 = |{}^3\!/\!_2, m_1\rangle_1$ és egy $|s_2, m_2\rangle_2 = |{}^1\!/\!_2, m_2\rangle_2$ spin-kvantumszámokkal jellemezhető részecskét.

1. Milyen lehetséges értékeket mérhetünk az összetett rendszer teljes impulzusmomentumra (jelölje ezt J) és annak z-komponensére (jelölje M)? Ábrázoljuk ezeket a szokásos M-J grafikonon!

2. Tegyük fel, hogy a mérés eredménye
$$|J, M\rangle = |2, 1\rangle \ .$$
Az impulzusmomentum-összeadás általános szabályainak segítségével írjuk fel ennek az állapotnak a kifejtését először anélkül, hogy konkrétan meghatároznánk az együtthatókat!

3. Mekkora valószínűséggel van a második részecske az $m_2 = +{}^1\!/\!_2$ (spin fel), valamint az $m_2 = -{}^1\!/\!_2$ (spin le) állapotban a fenti $|J, M\rangle = |2, 1\rangle$ állapotban?

Megoldás

Rövid kérdések megoldásai:

1. $J \in \{|j_1 - j_2|, |j_1 - j_2| + 1, \ldots, j_1 + j_2 - 1, j_1 + j_2\}$,

2. $M = m_1 + m_2$,

3. $M \in \{-J, -J + 1, \ldots, J - 1, J\}$.

Feladatok megoldásai:

1. Az adott értékeket a rövid feladatok megoldásaiba behelyettesítve: $J \in \{1, 2\}$, így a $J = 1$ esetben $M \in \{-1, 0, 1\}$, míg a $J = 2$ esetben $M \in \{-2, -1, 0, 1, 2\}$. Ezeket a pontokat kellett ábrázolni az M-J grafikonon.

2. Általánosan az alábbi alakban írható fel a mérés eredménye:

$$|2,1\rangle = A\left|\frac{3}{2},\frac{1}{2}\right\rangle_1\left|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle_2 + B\left|\frac{3}{2},\frac{3}{2}\right\rangle_1\left|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle_2 .$$

3. Az A és B Clebsch–Gordan-együtthatók meghatározhatók pl. a

$$|2,2\rangle = |3/2,3/2\rangle_1|1/2,1/2\rangle_2$$

állapot egyszeri leléptetésével, azaz

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

míg

$$\begin{aligned}\hat{J}_-\left|\frac{3}{2},\frac{3}{2}\right\rangle_1\left|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle_2 &= \hbar\sqrt{\frac{3}{2}\left(\frac{3}{2}+1\right)-\frac{3}{2}\left(\frac{3}{2}-1\right)}\left|\frac{3}{2},\frac{1}{2}\right\rangle_1\left|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle_2 \\ &+ \hbar\sqrt{\frac{1}{2}\left(\frac{1}{2}+1\right)-\frac{1}{2}\left(\frac{1}{2}-1\right)}\left|\frac{3}{2},\frac{3}{2}\right\rangle_1\left|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle_2 \\ &= \hbar\sqrt{3}\left|\frac{3}{2},\frac{1}{2}\right\rangle_1\left|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle_2 + \hbar\left|\frac{3}{2},\frac{3}{2}\right\rangle_1\left|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle_2 .\end{aligned}$$

Átrendezve az egyenletet:

$$\boxed{|2,1\rangle = \sqrt{\frac{3}{4}}\left|\frac{3}{2},\frac{1}{2}\right\rangle_1\left|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle_2 + \sqrt{\frac{1}{4}}\left|\frac{3}{2},\frac{3}{2}\right\rangle_1\left|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle_2} ,$$

azaz $|A|^2 = 3/4$ valószínűséggel mérünk spin-fel állapotot, míg $|B|^2 = 1/4$ valószínűséggel mérünk spin-le állapotot.

2. feladat – *Időfüggetlen perturbációszámítás*

(7.5 pont)
A perturbációszámítás első rendjében számítsuk ki az alapállapoti korrekcióját egy hidrogénszerű atomnak abban az esetben, ha perturbációként figyelembe vesszük az atommag véges kiterjedését. Az egyszerűség kedvéért legyen az atommag egy R-sugarú gömb, és térfogatában egyenletesen eloszló töltése pedig Ze. Ebben az esetben az elektron potenciális energiája:

$$V(r) = \begin{cases} -\frac{Ze^2}{R}\left(\frac{3}{2} - \frac{1}{2}\frac{r^2}{R^2}\right) , & \text{ha } 0 \leq r \leq R \\ -\frac{Ze^2}{r} , & \text{ha } r > R \end{cases} .$$

Segítség: $\psi_{100}(\mathbf{r}) = e^{-r/a}/\sqrt{\pi a^3}$, és integráláskor vegyük figyelembe, hogy $R \ll a$.

Megoldás

Először meg kell határozni a perturbáló Hamilton-operátort. Tudjuk, hogy

$$\hat{H} = \hat{H}^{(0)} + \hat{H}' = \hat{K} + \hat{V} ,$$

ahol $\hat{K}$ jelöli a kinetikus tagot a teljes Hamilton-operátorban. A perturbálatlan Hamilton-operátor legyen a hidrogénatom Hamilton-operátora, azaz

$$\hat{H}^{(0)} = \hat{K} - \frac{Ze^2}{\hat{r}} .$$

Ennélfogva a perturbáló Hamilton-operátor

$$\hat{H}' = \hat{H} - \hat{H}^{(0)} = \hat{V} + \frac{Ze^2}{\hat{r}} = \begin{cases} -\frac{Ze^2}{R}\left(\frac{3}{2} - \frac{1}{2}\frac{\hat{r}^2}{R^2}\right) + \frac{Ze^2}{\hat{r}} & , \text{ha } 0 \leq r \leq R \\ 0 & , \text{ha } r > R \end{cases} .$$

Vegyük észre, hogy csak a magon belül van perturbáció. Az alapállapoti energia elsőrendű korrekciója

$$\begin{aligned} E_{100}^{(1)} &= \langle \psi_{100}(\mathbf{r}) | \hat{H}' | \psi_{100}(\mathbf{r}) \rangle = \frac{Ze^2}{\pi a^3} \int \mathrm{d}^3 r \; e^{-2r/a} \left[-\frac{1}{R}\left(\frac{3}{2} - \frac{1}{2}\frac{r^2}{R^2}\right) + \frac{1}{r} \right] \\ &= \frac{4Ze^2}{a^3} \int_0^R \mathrm{d}r \; r^2 e^{-2r/a} \left[-\frac{1}{R}\left(\frac{3}{2} - \frac{1}{2}\frac{r^2}{R^2}\right) + \frac{1}{r} \right] = \frac{4Ze^2}{a^3}\left[A + B + C\right] . \end{aligned}$$

Mivel $R \ll a$, így az integrandusban az exponenciális $e^{-2r/a} \approx 1$ integrálási tartományon, így az integrál az alábbi három db hatványfüggvény integráljára esik szét:

$$A = -\frac{3}{2R}\int_0^R \mathrm{d}r \; r^2 = -\frac{R^2}{2} , \quad B = \frac{1}{2R^3}\int_0^R \mathrm{d}r \; r^4 = \frac{R^2}{10} , \quad C = \int_0^R \mathrm{d}r \; r = \frac{R^2}{2} .$$

A korrekció így

$$\boxed{E_{100}^{(1)} = \frac{2}{5}\frac{Ze^2}{a^3}R^2} .$$

3. feladat – *Időfüggő perturbációszámítás*

(**5 pont**)
Tekintsünk egy háromállapotú rendszert az alábbi Hamilton-operátorral:

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} E_1 & 0 & K(t) \\ 0 & E_2 & F(t) \\ K(t) & F(t) & E_3 \end{pmatrix} ,$$

ahol

$$K(t) = \begin{cases} V \ , & \text{ha } 0 \le t < t_0 \\ 0 \ , & \text{egyébként} \end{cases}$$

és $F(t) = \alpha\delta(t - t_0/2)$. A részecske a távoli múltban $|3\rangle = (0, 0, 1)^{\mathrm{T}}$ állapotban volt. Határozzuk meg, hogy a perturbációszámítás első rendjében milyen valószínűséggel melyik állapotokban tartózkodik a rendszer t_1 időpontban ($t_1 > t_0$)?

Megoldás

A perturbáló időfüggő operátort egyszerűen leolvashatjuk:

$$\hat{\mathcal{V}}(t) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & K(t) \\ 0 & 0 & F(t) \\ K(t) & F(t) & 0 \end{pmatrix} .$$

A $3 \to 1$ átmenet mátrixeleme:

$$\mathcal{V}_{13}(t) = \langle 1|\hat{\mathcal{V}}(t)|3\rangle = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 0 & K(t) \\ 0 & 0 & F(t) \\ K(t) & F(t) & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} = K(t) ,$$

míg a $3 \to 2$ átement mátrixeleme:

$$\mathcal{V}_{23}(t) = \langle 2|\hat{\mathcal{V}}(t)|3\rangle = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 0 & K(t) \\ 0 & 0 & F(t) \\ K(t) & F(t) & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} = F(t) .$$

A $3 \to 1$ átmeneti valószínűség

$$P_{3\to 1} = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_{-\infty}^{t_1} \mathrm{d}\tau \; K(\tau) e^{i\omega_{13}\tau} \right|^2 ,$$

ahol $\omega_{13} = (E_1 - E_3)/\hbar$. Az integrál

$$\int_{-\infty}^{t_1} \mathrm{d}\tau \; K(\tau) e^{i\omega_{13}\tau} = \int_{0}^{t_0} \mathrm{d}\tau \; V e^{i\omega_{13}\tau} = \frac{V}{i\omega_{13}} (e^{i\omega_{13}t_0} - 1) .$$

Az átmenet valószínűsége így

$$P_{3\to 1} = \frac{V^2}{\hbar^2\omega_{13}^2} |e^{i\omega_{13}t_0} - 1|^2 = \boxed{\frac{2V^2}{\hbar^2\omega_{13}^2}[1 - \cos(\omega_{13}t_0)]} .$$

A $3 \to 2$ átmemeti valószínűség

$$P_{3\to 2} = \frac{1}{\hbar^2}\left|\int\limits_{-\infty}^{t_1} \mathrm{d}\tau \; F(\tau)e^{i\omega_{23}\tau}\right|^2 = \frac{\alpha^2}{\hbar^2}\left|\int\limits_{-\infty}^{t_1} \mathrm{d}\tau \; \delta(\tau - t_0/2)e^{i\omega_{23}\tau}\right|^2 = \frac{\alpha^2}{\hbar^2}|e^{i\omega_{23}t_0/2}|^2 = \boxed{\frac{\alpha^2}{\hbar^2}},$$

ahol $\omega_{23} = (E_2 - E_3)/\hbar$.

4. feladat – *Időfüggetlen perturbációszámítás*

(5 pont)
Legyen adott egy rendszer a következő Hamilton-operátorral:

$$\hat{H} = \frac{V_0}{9}\begin{pmatrix} 18-9\varepsilon & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2+33\varepsilon & 0 & 2+6\varepsilon & 10-6\varepsilon \\ 0 & 0 & 36 & 0 & 0 \\ 0 & 2+6\varepsilon & 0 & 11+24\varepsilon & -8+12\varepsilon \\ 0 & 10-6\varepsilon & 0 & -8+12\varepsilon & 5+24\varepsilon \end{pmatrix}.$$

Segítség: Ez egy blokkdiagonális mátrix, csak elbújt!

1. Bontsuk szét a teljes Hamilton-operátort perturbálatlan és perturbáló operátorok összegére: $\hat{H} = \hat{H}^{(0)} + \hat{H}' = \hat{H}^{(0)} + \varepsilon\hat{H}^{(1)}$, majd számoljuk ki az $E_n^{(0)}$ perturbálatlan energiaszinteket és $|\psi_n^{(0)}\rangle$ sajátállapotokat! Legyünk figyelmesek, és ne akarjuk kiszámítani az 5×5-ös mátrix determinánsát!

2. A nem-degenerált altéren számoljuk ki a perturbációszámítás első rendjében az energiakorrekciót!

3. Hány dimenziós a degenerált altér? Konstruáljuk meg a W_{mn} mátrixot, majd adja meg a degenerált energiaszintek elsőrendű korrekcióit!

4. ~~Az új energiaszintek ismeretében oldjuk meg a teljes $\hat{H}$ mátrix sajátérték-problémáját (ismét legyünk figyelmesek és ne ötödfokú egyenletet akarjunk megoldani), és vesse össze az eredményeket a perturbációszámításból kapott értékekkel!~~

Megoldás

1. A $V_0/9$ prefaktor nélkül a perturbálatlan mátrix sajátértékproblémájának megoldásához felírandó determináns az alábbi lesz:

$$\begin{aligned}\det[\hat{H}^{(0)} - \lambda\hat{\mathbb{1}}] &= \begin{vmatrix} 18-\lambda & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2-\lambda & 0 & 2 & 10 \\ 0 & 0 & 36-\lambda & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & 11-\lambda & -8 \\ 0 & 10 & 0 & -8 & 5-\lambda \end{vmatrix} \\ &= \begin{vmatrix} 18-\lambda & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 36-\lambda & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2-\lambda & 2 & 10 \\ 0 & 0 & 2 & 11-\lambda & -8 \\ 0 & 0 & 10 & -8 & 5-\lambda \end{vmatrix} \\ &= (18-\lambda)(36-\lambda)\begin{vmatrix} 2-\lambda & 2 & 10 \\ 2 & 11-\lambda & -8 \\ 10 & -8 & 5-\lambda \end{vmatrix}.\end{aligned}$$

A 3×3-as mátrixnak felírtam a táblára a sajátértékeit: $\lambda_{3,4,5} = \{18, 9, -9\}$. A perturbálatlan energiaszintek így

$$\boxed{E_1^{(0)} = 2V_0\ , \quad E_2^{(0)} = 4V_0\ , \quad E_3^{(0)} = 2V_0\ , \quad E_4^{(0)} = V_0\ , \quad E_5^{(0)} = -V_0}\ .$$

Vegyük észre, hogy lesz egy kétdimenziós degenerált altér is. A sajátvektorok meghatározását kezdjük az $E_2^{(0)} = 4V_0$ energiával (persze mindegy, hogy melyikkel). Helyettesítsük vissza a sajátértéket a mátrixba, aminek az imént számítottuk ki a determinánsát:

$$\begin{pmatrix} -18 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -34 & 0 & 2 & 10 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & -25 & -8 \\ 0 & 10 & 0 & -8 & -31 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \\ d \\ e \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} .$$

Leolvasható, hogy $a = 0$ és c tetszőleges. A „maradék” egyenletrendszer mátrixának determinánsa

$$\begin{vmatrix} -34 & 2 & 10 \\ 2 & -25 & -8 \\ 10 & -8 & -31 \end{vmatrix} \neq 0 ,$$

azaz csak a triviális megoldás lehetséges, így $b = d = e = 0$, ennélfogva a normált sajátvektor

$$\boxed{|\Psi_2^{(0)}\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}} .$$

Az $E_5^{(0)} = -V_0$ esetben az egyenletrendszer:

$$\begin{pmatrix} 27 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 11 & 0 & 2 & 10 \\ 0 & 0 & 45 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & 20 & -8 \\ 0 & 10 & 0 & -8 & 14 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \\ d \\ e \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} .$$

Látjuk, hogy $a = c = 0$. A „maradék” egyenletrendszer

$$\begin{pmatrix} 11 & 2 & 10 \\ 2 & 20 & -8 \\ 10 & -8 & 14 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b \\ d \\ e \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} .$$

Ennek megoldása lesz a $b = -1$, $d = 1/2$ és $e = 1$. A normált sajátvektor így

$$\boxed{|\Psi_5^{(0)}\rangle = \frac{1}{3} \begin{pmatrix} 0 \\ -2 \\ 0 \\ 1 \\ 2 \end{pmatrix}} .$$

Az $E_4^{(0)} = V_0$ esetben az egyenletrendszer

$$\begin{pmatrix} 9 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -7 & 0 & 2 & 10 \\ 0 & 0 & 27 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & 2 & -8 \\ 0 & 10 & 0 & -8 & -4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \\ d \\ e \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} ,$$

ahol újfent $a = c = 0$. A „maradék” egyenletrendszer

$$\begin{pmatrix} -7 & 2 & 10 \\ 2 & 2 & -8 \\ 10 & -8 & -4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b \\ d \\ e \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} .$$

Ennek megoldása lesz $b = d = 1$ és $e = 1/2$, így a normált sajátvektor

$$\boxed{|\Psi_4^{(0)}\rangle = \frac{1}{3} \begin{pmatrix} 0 \\ 2 \\ 0 \\ 2 \\ 1 \end{pmatrix}}$$

Végül tekintsük az $E_1^{(0)} = E_3^{(0)} = 2V_0$ degenerált alteret. Az egyenletrendszerünk most

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -16 & 0 & 2 & 10 \\ 0 & 0 & 18 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & -7 & -8 \\ 0 & 10 & 0 & -8 & -13 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \\ d \\ e \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} .$$

Láthatjuk, hogy a tetszőleges, így legyen $a = 0$, míg $c = 0$ (ez nem választás kérdése). Újfent felírva a „maradék” egyenletrendszert:

$$\begin{pmatrix} -16 & 2 & 10 \\ 2 & -7 & -8 \\ 10 & -8 & -13 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b \\ d \\ e \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} ,$$

amit megold a $b = 1/2$, $d = -1$ és $e = 1$, azaz a sajátvektor

$$\boxed{|\Psi_3^{(0)}\rangle = \frac{1}{3} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ -2 \\ 2 \end{pmatrix}} .$$

A degenerált altérből válasszunk egy a $|\Psi_3^{(0)}\rangle$-ra merőleges vektort. Ez legyen a fenti egyenlet triviális megoldása, azaz (ez már normált is)

$$\boxed{|\Psi_1^{(0)}\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}} .$$

2. A nemdegenerált altéren az energiakorrekciók:

$$E_2^{(1)} = \langle\Psi_2^{(0)}|\hat{H}'|\Psi_2^{(0)}\rangle = \frac{V_0\varepsilon}{9}\langle\Psi_2^{(0)}| \begin{pmatrix} -9 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 33 & 0 & 6 & -6 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 6 & 0 & 24 & 12 \\ 0 & -6 & 0 & 12 & 24 \end{pmatrix} |\Psi_2^{(0)}\rangle = 0 \ ,$$
$$E_5^{(1)} = \langle\Psi_5^{(0)}|\hat{H}'|\Psi_5^{(0)}\rangle = 4\varepsilon V_0 \ ,$$
$$E_4^{(1)} = \langle\Psi_4^{(0)}|\hat{H}'|\Psi_4^{(0)}\rangle = 4\varepsilon V_0 \ .$$

Összefoglalva

$$\boxed{E_2^{(1)} = 0 \ , \quad E_4^{(1)} = 4\varepsilon V_0 \ , \quad E_5^{(1)} = 4\varepsilon V_0} \ .$$

3. A degenerált altéren a perturbáció mátrixa kétdimenziós, mátrixelemei:

$$\begin{aligned} W_{11} &= \langle\Psi_1^{(0)}|\hat{H}'|\Psi_1^{(0)}\rangle = -V_0\varepsilon \ , \\ W_{12} &= \langle\Psi_1^{(0)}|\hat{H}'|\Psi_3^{(0)}\rangle = 0 \ , \\ W_{21} &= \langle\Psi_3^{(0)}|\hat{H}'|\Psi_1^{(0)}\rangle = 0 \ , \\ W_{22} &= \langle\Psi_3^{(0)}|\hat{H}'|\Psi_3^{(0)}\rangle = V_0\varepsilon \ , \end{aligned}$$

azaz

$$\mathbf{W} = V_0\varepsilon \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \ .$$

A mátrix egyből diagonális, és a diagonális elemei adják meg az energiakorrekciókat, ennélfogva

$$\boxed{E_1^{(1)} = -\varepsilon V_0 \ , \quad E_3^{(1)} = \varepsilon V_0} \ .$$

Pót-ZH megoldások: https://tinyurl.com/2fcpre6.