Kvantummechanika gyorstalpaló

2019. január 5.

1. Bevezetés

A kvantummechanika formalizmusának az alapja a $\mathcal{H}$ komplex Hilbert tér. A kvantummechanikai állapotok a $\mathcal{H}$ Hilbert tér elemei, vektorai.

1.1. Dirac-jelölés

A $\mathcal{H}$ Hilbert tér elemei a $|\psi\rangle$ vektorok. A $\mathcal{H}^*$ duális térben a vektorokat $\langle\phi|$ -vel jelöljük.
A vektorok skalárszorzására a következő igaz:

- $\langle\phi|\psi\rangle \in \mathbb{C}$
- $\langle\phi|\psi\rangle = \langle\psi|\phi\rangle^*$
- $||\psi\,||^2 = \langle\psi|\psi\rangle \geq 0$

További azonosságok:

- $(c\,|\psi\rangle)^* = c^*\,\langle\psi|$

1.1.1. Reprezentáció

Számolások során a Hilbert-tér általában az $\mathcal{L}^2$-tér. Ilyenkor az absztrakt $|\psi\rangle$ vektorok helyett a $\psi(x)$ függvényt használjuk:

$$\psi : \mathbb{R} \to \mathbb{C} \in \mathcal{L}^2 \iff ||\psi\,||^2 = \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx < \infty \tag{1}$$

1.2. Kvantumállapot és Born-féle értelmezés

A kvantummechanikában minden állapothoz rendelhető egy $|\psi\rangle$ vektor. Az ilyen állapotok 1-re normált állapotok kell hogy legyenek, vagyis $||\psi\,|| = \langle\psi|\psi\rangle = 1$. Abban az esetben ha adott egy $|j\rangle$ *diszkrét, ortonormált* bázis, $|\psi\rangle$ felírható ezen a bázison:

$$|\psi\rangle = \sum_{j=0}^{n} c_j\,|j\rangle = \sum_{j=0}^{n} \langle j|\psi\rangle\,|j\rangle \tag{2}$$

ahol $c_j = \langle j|\psi\rangle$ komplex együtthatók. Fontos: a Born-féle értelmezés alapján $|c_j|^2$ annak a valószínűsége, hogy a $|\psi\rangle$ állapottal jellemzett rendszer éppen a $|j\rangle$ sajátállapotban található. A normálási feltételből következik, hogy

$$1 = \langle\psi|\psi\rangle = \sum_{k=0}^{n} c_k^* \sum_{j=0}^{n} c_j\,\langle k|j\rangle = \sum_{k=0}^{n} |c_k|^2 = 1 \tag{3}$$

továbbá

$$\sum_{j=0}^{n} |j\rangle\,\langle j| = \hat{1} \tag{4}$$

A valószínűségi értelmezés alapján, ha egy rendszer a $|a\rangle$ állapotban van preparálva és arra vagyok kíváncsi, hogy mi a valószínűsége annak, hogy $|b\rangle$ állapotban találom, akkor a $p = |\langle b|a\rangle|^2$ értéket kell kiszámolni.
Ha $|\phi\rangle$ és $|\psi\rangle$ két kvantumállapot, akkor az átmeneti amplitúdó:

$$\langle\phi|\psi\rangle = \sum_j \langle\phi|j\rangle \langle j|\psi\rangle = \sum_j \phi_j^* \psi_j \tag{5}$$

1.3. Fiziaki mennyiségek és operátorok

A $\mathcal{H}$ Hilbert téren értelmezhetők az $\hat{A} : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$ típusú operátorok. Értelmezhető az $\hat{A}$ operátor hermitikus adjungáltja a következő képpen :

$$\langle\phi| \hat{A} |\psi\rangle = \langle\psi| \hat{A}^\dagger |\phi\rangle \tag{6}$$

Itt $\hat{A}^\dagger$ -ot az $\hat{A}$ hermitikus adjungáltjának nevezzük és igaz, hogy ha

$$|w\rangle = \hat{A}|v\rangle \implies \langle w| = \langle v| \hat{A}^\dagger \tag{7}$$

Definíció. *A $\hat{H}$ operátort hermitikusnak nevezzük ha $\hat{H}^\dagger = \hat{H}$.*

Tétel. *A kvantummechanikában minden fizikai állapothoz rendelhető egy hermitikus operátor.*

Példa. *Az impulzus operátora $\hat{p} = -i\hbar\nabla$, az energia operátora $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{V}$.*

Definíció. *Egy $\hat{U}$ operátort unitérnek nevezünk, ha $\hat{U}^{-1} = \hat{U}^\dagger$.*

Példa. *Az időfejlődés operátora $\hat{U}(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}$ unitér operátor.*

A hermitikus operátorok sajátértékei mindig valósak. Ha egy operátor sajátvektorai ortonormált bázist alkotnak, akkor:

$$\hat{A} = \sum_n a_n |n\rangle \langle n| \text{, ahol } \hat{A}|n\rangle = a_n |n\rangle$$

Tétel. *Egy hermitikus operátor sajátvektorai mindig ortgonálisak.*

Illetve, ha egy $\hat{A}$ operátor sajátvektorai ortonormált bázist alkotnak, akkor egy tetszőleges $|\psi\rangle$ vektor kifejthető ezen a bázison:

$$\hat{A}|n\rangle = a_n |n\rangle \text{, és } \langle n|m\rangle = \delta_{mn} \implies |\psi\rangle = \sum_n \langle n|\psi\rangle |n\rangle \equiv \sum_n c_n |n\rangle$$

Legyen most $\hat{A}$ hermitikus, $|\psi\rangle$ egy állapot, úgy, hogy $\hat{A}|n\rangle = a_n|n\rangle$ és $|\psi\rangle = \sum_n c_n |n\rangle$. Ekkor az $\hat{A}|\psi\rangle$ vektor b_m együtthatói az $|n\rangle$ bázison:

$$b_m = \langle m|\hat{A}\psi\rangle = \sum_n \langle m| \hat{A} |n\rangle \langle n|\psi\rangle = \sum_n A_{mn} c_n$$

Ezért

$$A_{mn} = \langle m|\hat{A}|n\rangle$$

$|\langle\phi|\hat{A}|\psi\rangle|^2$ az minek a valószínűsége?

1.4. Folytonos bázis, impulzus-reprezentáció

1.4.1. Hely-bázis

Eddig azzal foglalkoztunk, mi van, ha diszkrét bázisunk van, pl az $|n\rangle$ energia-sajátállapotok bázisa. A kvantummechanikában a bázis általában valamilyen mérhető mennyiséghez tartozó $\hat{O}$ hermitikus operátor sajátvektoraiból áll. Vannak olyan operátorok, melyeknek a spektruma folytonos, így a bázis is folytonos lesz. A leggyakoribb ilyen eset az $\hat{x}$ helyoperátorhoz tartozó $|x\rangle$ hely-bázis és a $\hat{p}$ impulzus-operátorhoz tartozó $|p\rangle$ impulzus-bázis.
Ekkor $|x\rangle$ az az állapot amelyben a részecske pontosan az x helyen van és $\hat{x}\,|x\rangle = x\,|x\rangle$. Hasonlóan $|p\rangle$ is impulzus-sajátállapot: $\hat{p}\,|p\rangle = p\,|p\rangle$. Az előbbiek alapján egy tetszőleges $|\psi\rangle$ állpotban annak a valószínűsége, hogy a részecske az x helyen található: $|\,\langle x|\psi\rangle\,|^2$. A $\langle x|\psi\rangle$ valószínűségi amplitúdót nevezzük hullámfüggvénynek:

$$\psi(x) = \langle x|\psi\rangle \tag{8}$$

A normálási feltétel így fog kinézni:

$$1 = \int \mathrm{d}x|\psi(x)|^2 = \int \mathrm{d}x\,\langle\psi|x\rangle\,\langle x|\psi\rangle \tag{9}$$

illetve

$$\int \mathrm{d}x\,|x\rangle\,\langle x| = \hat{1} \tag{10}$$

Hasonlóan a diszkrét esethez, itt is definiáljuk az ortonormáltságot:

$$\langle x'|x\rangle = \delta(x - x') \tag{11}$$

ezért

$$\psi(x') = \langle x'|\psi\rangle = \int \mathrm{d}x\,\langle x'|x\rangle\,\langle x|\psi\rangle = \int \mathrm{d}x\delta(x - x')\psi(x) \tag{12}$$

Az átmeneti amplitúdó a $|\phi\rangle$ és $|\psi\rangle$ kvantumállapotok között így fog alakulni:

$$\langle\phi|\psi\rangle = \int \mathrm{d}x\,\langle\phi|x\rangle\,\langle x|\psi\rangle = \int \mathrm{d}x\phi^*(x)\psi(x) \tag{13}$$

1.4.2. Impulzus-bázis

Impulzus-bázisban igaz, hogy $\hat{p}\,|p\rangle = p\,|p\rangle$. Tudjuk, hogy $\hat{p} = -i\hbar\partial_x$ (1D-ben). Állítsuk elő a $|p\rangle$ állapotot $|x\rangle$ bázisban:

$$|p\rangle = \int \mathrm{d}x\,|x\rangle\,\langle x|p\rangle \tag{14}$$

és legyen $\langle x|p\rangle = \phi_p(x)$. Ekkor egyrészt igaz, hogy

$$\langle x|\hat{p}|p\rangle = \langle x|p|p\rangle = p\,\langle x|p\rangle = p\phi_p(x) \tag{15}$$

másrészt

$$\hat{p}\,\langle x|p\rangle = -i\hbar\frac{\partial\phi_p(x)}{\partial x} \tag{16}$$

tehát

$$-i\hbar\frac{\partial\phi_p(x)}{\partial x} = p\phi_p(x) \implies \phi_p(x) = Ae^{\frac{i}{\hbar}px} \tag{17}$$

A normalizálás az előbbihez hasonló módon történik:

$$\langle p'|p\rangle = \delta(p-p') \tag{18}$$

emiatt:

$$\delta(p-p') = \langle p'|p\rangle = \int \mathrm{d}x \, \langle p'|x\rangle \, \langle x|p\rangle \tag{19}$$

$$= \int \mathrm{d}x \phi^*_{p'}(x)\phi_p(x) \tag{20}$$

$$= \int \mathrm{d}x A^2 e^{\frac{i}{\hbar}(p-p')x} \tag{21}$$

$$= 2\pi\hbar A^2 \delta(p-p') \tag{22}$$

Innen pedig következik, hogy $A = 1/\sqrt{2\pi\hbar}$.
Át lehet váltani a hullámfüggvényt impulzustérbe is, felhasználva, hogy $\hat{x}\,|x\rangle = x\,|x\rangle$ és $\langle p|x\rangle = \tilde{\phi}_x(p)$

$$|x\rangle = \int \mathrm{d}p \, |p\rangle \, \langle p|x\rangle \tag{23}$$

Az előző esethez hasonlóan

$$\langle p|\hat{x}|x\rangle = \langle p|x|x\rangle = x\,\langle p|x\rangle = x\tilde{\phi}_x(p) \tag{24}$$

Most jön egy trükk: az $\hat{x}$ operátor hatása impulzustérben $\hat{x} = i\hbar\partial_p$, ezért

$$\hat{x}\,\langle p|x\rangle = i\hbar\frac{\partial\tilde{\phi}_x(p)}{\partial p} \tag{25}$$

Így

$$i\hbar\frac{\partial\tilde{\phi}_x(p)}{\partial p} = x\tilde{\phi}_x(p) \implies \tilde{\phi}_x(p) = Be^{-\frac{i}{\hbar}px} \tag{26}$$

Az előbbiekhez hasonlóan belátható, hogy $B = 1/\sqrt{2\pi\hbar}$. Azt kaptuk tehát, hogy $\phi_p(x)$ és $\tilde{\phi}_x(p)$ egymás komplex konjugáltjai, amit el is vártunk, hiszen $\langle p|x\rangle = \langle x|p\rangle^*$ definíció szerint.

1.5. Kommutátorok

Definíció. *Az $\hat{A}$ és $\hat{B}$ kommutátora $\left[\hat{A},\hat{B}\right] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$.*

Tétel. *Ha $\hat{A}$ és $\hat{B}$ kommutálnak, azaz $\left[\hat{A},\hat{B}\right] = 0$, akkor van közös sajátvektor-rendszerük, azaz létezik olyan ψ állapot mindkét operátornak sajátállapota.*

Tétel. *Ha $\hat{A}$ és $\hat{B}$* ***nem*** *kommutálnak, azaz $\left[\hat{A},\hat{B}\right] \neq 0$, akkor* ***nincs*** *közös sajátvektor-rendszerük, azaz nem létezik olyan $|\psi\rangle$ állapot, amely mindkét operátor sajátállapota.*

Megjegyzés. *Ha két operátor nem kommutál, attól még egy adott $|\psi\rangle$ állapot mindkét operátor sajátvektorainak bázisán kifejthető lehet, és ezek egymásba áttranszformálhatók. Pl. $[\hat{x},\hat{p}] = i\hbar$, de létezik $\langle p|\psi\rangle$ és $\langle x|\psi\rangle$ kifejtés is.*

- $[\hat{x}_i, \hat{x}_j] = 0$
- $[\hat{p}_i, \hat{p}_j] = 0$
- $[\hat{x}_i, \hat{p}_j] = i\hbar\delta_{ij}\mathbf{1}$
- $\left[\hat{L}_i, \hat{L}_j\right] = i\hbar\varepsilon_{ijk}\hat{L}_k$
- $\left[\hat{S}_i, \hat{S}_j\right] = i\hbar\varepsilon_{ijk}\hat{S}_k$
- $\left[\hat{J}_i, \hat{J}_j\right] = i\hbar\varepsilon_{ijk}\hat{J}_k$
- $\left[\hat{J}^2, \hat{J}_i\right] = \left[\hat{S}^2, \hat{S}_i\right] = \left[\hat{L}^2, \hat{L}_i\right] = 0$
- $\left[\hat{L}_i, \hat{S}_j\right] = 0$
- $\left[\hat{x}_i, \hat{L}_j\right] = i\hbar\varepsilon_{ijk}\hat{x}_k$
- $\left[\hat{p}_i, \hat{L}_j\right] = i\hbar\varepsilon_{ijk}\hat{p}_k$
- Ha $\hat{A}$ hermitikus $\implies \hat{A}^\dagger = \hat{A} \implies \left[\hat{A}^\dagger, \hat{A}\right] = 0$

2. Harmonikus oszcillátor

A harmonikus oszcillátor esetén a Hamilton-operátor ugyanz, mint a klasszikus Hamilton-függvény:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2 \tag{27}$$

3D esetben:

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}(\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2) + \frac{1}{2}m\omega^2(\hat{x}^2 + \hat{y}^2 + \hat{z}^2) \tag{28}$$

Az energiasajátértékekhez meg kell oldani a $\hat{H}\left|n\right\rangle = E_n\left|n\right\rangle$ egyenletet. Ennek a megoldása 1D-ben folytonos bázison:

$$\left|n\right\rangle = \psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{(2^n n!)}} \cdot \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \cdot e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}} \cdot H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x\right) \tag{29}$$

ahol H_n-ek a Hermite-polinomok:

$$H_n(z) = (-1)^n e^{z2}\frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}z^n}e^{-z^2} \tag{30}$$

Ezekből

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega \tag{31}$$

Az állapotok léptető operátorait a következő képpen definiáljuk:

- $\hat{a} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(\hat{x} + \frac{i}{m\omega}\hat{p}\right)$
- $\hat{a}^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(\hat{x} - \frac{i}{m\omega}\hat{p}\right)$
- $\left[\hat{a}, \hat{a}^\dagger\right] = \hat{1}$
- $\hat{a}\left|n\right\rangle = \sqrt{n}\left|n-1\right\rangle$
- $\hat{a}^\dagger\left|n\right\rangle = \sqrt{n+1}\left|n+1\right\rangle$
- $\left|n\right\rangle = \frac{(\hat{a}^\dagger)^n}{\sqrt{n!}}\left|0\right\rangle$ folytonos bázison $\left|0\right\rangle = Ce^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}}$

3. Impulzusmomentumok

3.1. Pálya-impulzusmomentum

A kvantummechanikai impulzusmomentum operátora $\hat{\vec{L}} = \hat{\vec{r}} \times \hat{\vec{p}} = -i\hbar(\vec{r} \times \nabla)$.
Gömbi koordinátarendszerben felírva:

- $\hat{L}^2 = -\hbar^2\left(\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right)$
- $\hat{L}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}$
- $\hat{L}_\pm = \hat{L}_x \pm i\hat{L}_y$
- $\hat{L}_+ = \hbar e^{i\varphi}\left(\frac{\partial}{\partial\theta} - i\cot\theta\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)$
- $\hat{L}_- = \hbar e^{-i\varphi}\left(-\frac{\partial}{\partial\theta} - i\cot\theta\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)$
- $\left[\hat{L}_+, \hat{L}_-\right] = 2\hbar L_z$
- $\hat{L}^2 = \hat{L}_+\hat{L}_- + \hat{L}_z^2 - \hbar\hat{L}_z$

Az $\hat{L}$ operátor sajátállapotait két kvantumszám határozza meg , l és m_l, a sajátvektorokat ezért $\left|l, m_l\right\rangle$ jelöli. A sajátértékek a következők lehetnek: $l \in \{0, 1, 2, ...\}$, $m_l \in \{-l, ...0, ..., l\}$.
Ezzel a jelöléssel igazak a következő azonosságok:

- $\hat{L}^2\left|l, m_l\right\rangle = \hbar^2 l(l+1)\left|l, m_l\right\rangle$
- $\hat{L}_z\left|l, m_l\right\rangle = \hbar m_l\left|l, m_l\right\rangle$
- $\hat{L}_\pm\left|l, m_l\right\rangle = \hbar\sqrt{l(l+1) - m_l(m_l \pm 1)}\left|l, m_l \pm 1\right\rangle$
- $\hat{L}_+\left|l, m_l = l\right\rangle = 0$ és $\hat{L}_-\left|l, m_l = -l\right\rangle = 0$

Ha $\left|l, m_l\right\rangle$-eket az $\mathcal{L}^2$ téren akarjuk ábrázolni, akkor:

$$\langle\theta, \varphi|l, m_l\rangle = Y_l^{m_l}(\theta, \varphi) \tag{32}$$

$$\langle l', m_l'|l, m_l\rangle = \int_0^\pi \sin\theta d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi (Y_{l'}^{m_l'})^* Y_l^{m_l} = \delta_{ll'}\delta_{m_l m_l'} \tag{33}$$

Az $Y_l^{m_l}(\theta, \varphi)$ függvények a <u>*gömbi harmonikusok*</u>

3.2. Spin

A spin-operátort $\hat{S}$ jelöli, sajátállapotait két kvantumszám adja meg, s és m_s, úgy, hogy $s \in \{0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, ...\}$ és $m_s \in \{-s, -s+1, ..., s-1, s\}$

3.2.1. Az $s = \frac{1}{2}$ spin és a Pauli-mátrixok

Feles spin esetén $s = \frac{1}{2}$, ezért $m_s \in \{-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\}$. Az állapotokat a következő rövidítéssel jelöljük:

$$|+\rangle \equiv |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle \tag{34}$$

$$|-\rangle \equiv |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle \tag{35}$$

Ez egy kétállapotú rendszert határoz meg, egy tetszőleges állapotvektor:

$$|\psi\rangle = \alpha\,|+\rangle + \beta\,|-\rangle \ \ , \ \ |\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1 \tag{36}$$

Ebben az esetben a spin operátora $\vec{S} = \frac{\hbar}{2}\vec{\sigma}$, ahol

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \tag{37}$$

$$\sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \tag{38}$$

$$\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{39}$$

A σ_k-ra vonatkozó azonosságok:

- $\sigma_z\,|+\rangle = \frac{\hbar}{2}\,|+\rangle$
- $\sigma_z\,|-\rangle = -\frac{\hbar}{2}\,|-\rangle$
- $[\sigma_i, \sigma_j] = 2i\varepsilon_{ijk}\sigma_k$
- $\sigma_k\sigma_l = \delta_{kl}\mathbf{1} + i\varepsilon_{klj}\sigma_j$
- $(\vec{u}\vec{\sigma})(\vec{v}\vec{\sigma}) = (\vec{u}\cdot\vec{v})\mathbf{1} + i(\vec{u}\times\vec{v})\vec{\sigma}$
- $\sigma_+ = \sigma_x + i\sigma_y$
- $\sigma_- = \sigma_x - i\sigma_y$

3.3. Teljes impulzusmomentum

3.4. Impulzusmomentumok összeadása és Clebsch–Gordan együtthatók

Az pálya-impulzusmomentum és a spin különböző Hilbert-tér elemei, ezért ha össze akarom adni őket, akkor a Hilbert-terek direkt szorzatát kell képezni. Legyen egy rendszer (pl. H-atom elektronja) ami spinnel és pálya-impulzusmomentummal is rendelkezik. Legyenek a spin sajátállapotok $|s, m_s\rangle$ illetve a pálya-impulzusmomentum sajátállapotok $|l, m_l\rangle$. Ekkor a teljes impulzusmomentum sajátállapotai a két tér elemeinek direkt szorzata:

$$|j, m\rangle = |l, m_l\rangle \otimes |s, m_s\rangle \equiv |l, m_l\rangle\, |s, m_s\rangle \equiv |l, m_l, s, m_s\rangle \tag{40}$$

Ezen a szorzattéren hat a $\hat{\vec{J}}$ operátor, amit így definiálunk:

$$\hat{\vec{J}} = \hat{\vec{L}} + \hat{\vec{S}} \tag{41}$$

Ez a jelölés pongyola, mert a $\hat{\vec{J}}$-nek a szorzattéren vagyis $\mathcal{H}_L \otimes \mathcal{H}_S$-en kell hatnia, ezért korrektül:

$$\hat{J}_k = \hat{L}_k \otimes \hat{1} + \hat{1} \otimes \hat{S}_k \tag{42}$$

Ez a következő képpen hat a sajátállapotokra:

$$\hat{J}^2\, |j, m\rangle = \hbar^2 j(j+1)\, |j, m\rangle \tag{43}$$

$$\hat{J}_z\, |j, m\rangle = \hbar m\, |j, m\rangle \tag{44}$$

Szintén be lehet vezetni a léptető operátorokat:

- $\hat{J}_\pm = \hat{J}_x \pm i\hat{J}_y$
- $\hat{J}_+\hat{J}_- = \hat{J}^2 - \hat{J}_z^2 + \hbar\hat{J}_z$
- $\hat{J}_-\hat{J}_+ = \hat{J}^2 - \hat{J}_z^2 - \hbar\hat{J}_z$
- $\left[\hat{J}_+, \hat{J}_-\right] = 2\hbar\hat{J}_z$
- $\left[\hat{J}_z, \hat{J}_\pm\right] = \pm\hbar\hat{J}_\pm$
- $\hat{J}_\pm\, |j, m\rangle = \hbar\sqrt{j(j+1) - m(m \pm 1)}\, |j, m \pm 1\rangle$

4. Hidrogén-atom

Megjegyzés. *Ha a főkvantumszám n, akkor $l_{max} = n - 1$ vagyis $l \in \{0, 1, ..., n-1\}$*

5. Perturbációszámítás

5.1. Időfüggetlen perturbációszámítás

5.1.1. Nemdegenerált eset

Adott egy $\hat{H}$ operátor ami úgy néz ki, hogy $\hat{H} = \hat{H}^{(0)} + \lambda\hat{W}$, ahol λ kicsi, $\lambda\hat{W}$ a perturbáció, $\hat{H}^{(0)}$-nak pedig ismerjük a sajátállapotait:

$$\hat{H}^{(0)} |n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)} |n^{(0)}\rangle \ , \quad n = 1, 2, ... \tag{45}$$

A $\hat{H}$ sajátérték-problémájának megoldása így fog kinézni sorfejtett alakban:

$$E_n = \lambda^0 E_n^{(0)} + \lambda^1 E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + ... \tag{46}$$

$$|n\rangle = \lambda^0 |n^{(0)}\rangle + \lambda^1 |n^{(1)}\rangle + \lambda^2 |n^{(2)}\rangle + ... \tag{47}$$

Az elsőrendű korrekciók a fentiek alapján:

$$E_n^{(1)} = \langle n^{(0)}| \hat{W} |n^{(0)}\rangle \tag{48}$$

$$|n^{(1)}\rangle = \sum_{k \neq n} \frac{\langle k^{(0)}| \hat{W} |n^{(0)}\rangle}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} |k^{(0)}\rangle \tag{49}$$

Másodrendű energia-korrekció:

$$E_n^{(2)} = \sum_{k \neq n} \frac{\left| \langle k^{(0)}| \hat{W} |n^{(0)}\rangle \right|^2}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} \tag{50}$$

Figyelem! A fenti korrekciók csak nemdegenerált energiaspektrum esetében igazak.

5.1.2. Degenerált eset

Akkor kell alkalmazni, amikor két vagy több energiaszint egybeesik, vagyis létezik egy degenerált sajátaltér. Ekkor a következő szerint járunk el:

- Vegyük a degenerált altérbe tartozó **perturbálatlan sajátvektorokat**.
- Ezután ezekkel a vektorokkal számítsuk ki a $W_{mn} = \langle m| \hat{W} |n\rangle$ mátrixelemeket.
- Az így kiszámolt mátrix sajátérték-problémájának megoldásai lesznek a perturbált energiaszintek.

5.2. Időfüggő perturbációszámítás

Most megengedjük, hogy a perturbáció függjön expliciten az időtől:

$$\hat{H}(t) = \hat{H}^{(0)} + \lambda\hat{W}(t) \tag{51}$$

A következő lépésben be kell vezetni az $\omega_{mn} = (E_m - E_n)/\hbar$ mennyiséget, és a perturbálatlan $\hat{H}^{(0)}$ operátor $|m\rangle$ illetve $|n\rangle$ sajátvektoraiból kiszámítjuk a $W_{mn}(t) = \langle m|\,\hat{W}(t)\,|n\rangle$ mátrixelemeket. Legyen most $|i\rangle$ a kezdeti (initial) $|f\rangle$ pedig a végső (final) állapot. Ekkor annak a valószínűsége, hogy $|i\rangle$ állapotból indulva t idő elteltével a rendszer $|f\rangle$ állapotban található:

$$P(i \to f) = P_{fi} = \frac{1}{\hbar^2}\left|\int\limits_0^t W_{fi}(\tau)e^{i\omega_{fi}\tau}d\tau\right|^2 \tag{52}$$