Kvantummechanika gyakorlat
(2012/13 őszi félév)

8. óra

1. feladat: Határozzuk meg az $m = 0$ kvantumszámmal jellemzett H-atom állapotokban az $\hat{L}_1$ és $\hat{L}_2$ operátorok átlagát!

Megoldás: A szóban forgó operátorok kifejezése

$$\hat{L}_1 = i\hbar\Big(\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} + \cos\varphi\,\mathrm{ctg}\,\theta\frac{\partial}{\partial\varphi}\Big),$$

$$\hat{L}_2 = i\hbar\Big(\mathrm{ctg}\,\theta\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi} - \cos\varphi\frac{\partial}{\partial\theta}\Big).$$

Tudjuk, hogy az $m = 0$ kvantumszámmal rendelkező sajátállapotok (a gömbfüggvények megfelelő tulajdonsága miatt) nem függenek a φ szögtől, ezért az operátorok hatása ezen állapotokon egyszerűbb:

$$\hat{L}_1\Psi_{nl0} = i\hbar\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\theta}\Psi_{nl0}, \qquad \hat{L}_2\Psi_{nl0} = -i\hbar\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\theta}\Psi_{nl0}.$$

Az $\hat{L}_1$ operátor átlaga:

$$< \hat{L}_1 >= \Big(\Psi_{nl0}, \hat{L}_1\Psi_{nl0}\Big) = \int dV\,\Psi^*_{nl0}\hat{L}_1\Psi_{nl0} = i\hbar\int_0^\infty drr^2\int_0^\pi d\theta\sin\theta\psi^*_{nl0}\frac{\partial\psi_{nl0}}{\partial\theta}\int_0^{2\pi} d\varphi\sin\varphi = 0,$$

ahol ismét kihasználtuk, hogy a ψ_{nl0} függvények φ függetlenek, illetve azt, hogy a sin függvény egy teljes periódusra vett integrálja zérus.

Az $\hat{L}_2$ operátor átlaga hasonlóan számítható:

$$< \hat{L}_2 >= \Big(\Psi_{nl0}, \hat{L}_2\Psi_{nl0}\Big) = \int dV\,\Psi^*_{nl0}\hat{L}_2\Psi_{nl0} = -i\hbar\int_0^\infty drr^2\int_0^\pi d\theta\sin\theta\psi^*_{nl0}\frac{\partial\psi_{nl0}}{\partial\theta}\int_0^{2\pi} d\varphi\cos\varphi = 0.$$

2. feladat: Tekintsük a következő Hamilton operátorral rendelkező anharmonikus oszcillátort:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2 + \lambda\hat{x}^3,$$

ahol jobb oldal utolsó tagját tekintsük perturbációnak. Mekkora az n. energiaszint korrekciója első közelítésben?

Megoldás: A harmonikus oszcillátor energiaszintjei:

$$E_n = \Big(n + \frac{1}{2}\Big)\hbar\omega,$$

melyek a perturbáció hatására eltolódnak. Az eltolódás mértéke első közelítésben ($\mathcal{O}(\lambda)$ rendben) az n. szintre:

$$\Delta E_n = \left(\Psi_n^{(0)}, \lambda \hat{x}^3 \Psi_n^{(0)}\right),$$

ahol $\Psi_n^{(0)}$ a perturbálatlan oszcillátor n. energia sajátfüggvénye.

A hely operátora kifejezhető a harmonikus oszcillátor léptetőoperátoraival:

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

vagyis a keresett ΔE_n korrekció így írható:

$$\Delta E_n = \lambda \left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^{3/2} \left(\Psi_n^{(0)}, (\hat{a}^\dagger + \hat{a})^3 \Psi_n^{(0)}\right).$$

A kifejezésben szereplő skalárszorzatban felbontjuk a zárójelet (ügyelve az operátorok sorrendjére!):

$$\left(\Psi_n^{(0)}, (\hat{a}^\dagger + \hat{a})^3 \Psi_n^{(0)}\right) = \left(\Psi_n^{(0)}, (\hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger\hat{a} + \hat{a}^\dagger\hat{a}\hat{a} + \hat{a}\hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger + \hat{a}\hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}\hat{a}^\dagger\hat{a} + \hat{a}\hat{a}\hat{a})\Psi_n^{(0)}\right).$$

Tudjuk, hogy a léptetőoperátorok hatása az oszcillátor energia-sajátállapotain

$$\hat{a}^\dagger \Psi_n^{(0)} = \sqrt{n+1}\,\Psi_{n+1}^{(0)}, \qquad \hat{a}\Psi_n^{(0)} = \sqrt{n}\,\Psi_{n-1}^{(0)},$$

ezért csak olyan tag adhatna járulékot, amelyben ugyanannyi fel- és lefelé léptető operátor van, ellenkező esetben a skalárszorzat két tényezőjében különböző sajátfüggvények jelennek meg, az ortogonalitás miatt pedig ilyen esetben nullát kapunk. Láthatóan egyetlen tag sincs az összegben olyan, ahol megegyező számú $\hat{a}$ és $\hat{a}^\dagger$ lenne, ezért az energiakorrekció első közelítésben:

$$\Delta E_n = 0.$$

3. feladat: Oldjuk meg az előző feladatot $\lambda\hat{x}^4$ -es perturbáció esetén is!

Megoldás: A fentiekkel analóg módon az n. energiaszint korrekciója most így írható:

$$\Delta E_n = \lambda \left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^2 \left(\Psi_n^{(0)}, (\hat{a}^\dagger + \hat{a})^4 \Psi_n^{(0)}\right).$$

Láttuk, hogy a skalárszorzatból csak azok a tagok adnak járulékot, ahol azonos számú $\hat{a}$ és $\hat{a}^\dagger$ operátor van. Felbontva a zárójelet (operátorsorrendre ismét ügyelve!), csak a releváns tagokat kiírva kapjuk:

$$\left(\Psi_n^{(0)}, (\hat{a}^\dagger + \hat{a})^4 \Psi_n^{(0)}\right) = \left(\Psi_n^{(0)}, (\hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger\hat{a}\hat{a} + \hat{a}\hat{a}^\dagger\hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}\hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger\hat{a} + \hat{a}^\dagger\hat{a}\hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a}\hat{a}^\dagger\hat{a} + \hat{a}\hat{a}\hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger)\Psi_n^{(0)}\right).$$

A skaláris szorzat linearitását, illetve a normálás $(\Psi_n^{(0)}, \Psi_n^{(0)}) = 1$ relációját alkalmazva kapjuk:

$$\left(\Psi_n^{(0)}, (\hat{a}^\dagger + \hat{a})^4 \Psi_n^{(0)}\right) = 6\left(n^2 + n + \frac{1}{2}\right),$$

HF: Ellenőrizzük az egyenlőséget!

Így az energiakorrekció:

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