

Kvantummechanika gyakorlat
(2012/13 őszi félév)

9. óra

1. feladat: Tekintsük a következő Hamilton operátorral leírható 1 dimenzióban mozgó részecskét:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2 - \gamma\delta(\hat{x}),$$

ahol $\gamma > 0$ konstans. Határozzuk meg az energiaszinteket a perturbációs számítás legalacsonyabb rendjében, ha

a., $-\gamma\delta(\hat{x})$ tekintendő perturbációnak.

b., $\frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2$ tekintendő perturbációnak.

Megoldás:

a., A perturbálatlan Hamilton operátor

$$\hat{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2,$$

ami a harmonikus oszcillátornak felel meg. Ennek energiaszintjei

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

A perturbációs számítás legalacsonyabb rendjében az n . energiaszint korrekciója:

$$\Delta E_n = \left(\Psi_n^{(0)}, -\gamma\delta(\hat{x})\Psi_n^{(0)}\right),$$

ahol $\Psi_n^{(0)}$ a \hat{H}_0 operátor megfelelő sajátfüggvénye.

$$\Delta E_n = -\gamma \int_{-\infty}^{\infty} \left(\Psi_n^{(0)}(x)\right)^* \delta(x)\Psi_n^{(0)}(x) = -\gamma \left|\Psi_n^{(0)}(0)\right|^2.$$

Tudjuk, hogy az oszcillátor sajátfüggvények:

$$\Psi_n^{(0)} = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}} H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x\right),$$

ahol a H_n Hermite polinomok eleget tesznek a

$$H_n(X) = (-1)^n e^{X^2} \frac{d}{dX^n} e^{-X^2}$$

összefüggésnek. Utóbbiak kifejezhetőek az alábbiak szerint is:

$$H_n(X) = \begin{cases} n! \sum_{l=0}^{n/2} \frac{(-1)^{\frac{n}{2}-l}}{(2l)!(\frac{n}{2}-l)!} (2X)^{2l}, & \text{ha } n \text{ páros,} \\ n! \sum_{l=0}^{(n-1)/2} \frac{(-1)^{\frac{n-1}{2}-l}}{(2l+1)!(\frac{n-1}{2}-l)!} (2X)^{2l+1}, & \text{ha } n \text{ páratlan.} \end{cases}$$

Ez azt jelenti, hogy

$$H_n(0) = \begin{cases} n! \frac{(-1)^{n/2}}{(n/2)!}, & \text{ha } n \text{ páros,} \\ 0, & \text{ha } n \text{ páratlan.} \end{cases}$$

Az energiaszintek korrekciója ezzel:

$$\Delta E_n = -\gamma \frac{1}{2^n n!} \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/2} H_n^2(0) = \begin{cases} -\gamma \frac{n!}{2^n} \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/2} \left(\left(\frac{n}{2} \right)! \right)^{-2}, & \text{ha } n \text{ páros,} \\ 0, & \text{ha } n \text{ páratlan.} \end{cases}$$

Az elsőrendű korrekció akkor jó közelítés, ha

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

b., A perturbálatlan Hamilton operátor most

$$\hat{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2m} - \gamma\delta(\hat{x}).$$

Tudjuk, hogy Dirac-delta potenciálban egyetlen kötött állapot van, melynek hullámfüggvénye:

$$\Psi(x) = \begin{cases} \sqrt{\kappa} e^{-\kappa x}, & \text{ha } x > 0 \\ \sqrt{\kappa} e^{\kappa x}, & \text{ha } x \leq 0, \end{cases}$$

ahol $\kappa = \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}}$. A részecske energiája:

$$E^{(0)} = -\frac{m\gamma^2}{2\hbar^2}.$$

Az ehhez jövő korrekció:

$$\Delta E = \left(\Psi, \frac{1}{2} m\omega^2 \hat{x}^2 \Psi \right) = \frac{1}{2} m\omega^2 \int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x)|^2 x^2 dx = m\omega^2 \kappa \int_0^{\infty} e^{-2\kappa x} x^2 dx = \frac{1}{4} \frac{m\omega^2}{\kappa^2}.$$

A perturbációs számítás akkor működik, ha

$$\Delta E \ll |E^{(0)}|.$$

Behelyettesítve azt találjuk, hogy ez a feltétel pontosan akkor teljesül, ha

$$\frac{\omega\hbar^2}{m\gamma^2} \ll 1.$$

2. feladat: Egy hidrogénatomra hosszúhullámú fényt bocsátunk. Mekkora a valószínűsége első közelítésben, hogy a kezdeti $\{n_0, l_0, m_0\} \equiv j$ kvantumszámokkal rendelkező állapotból $\{n', l', m'\} \equiv f$ állapotba jut a rendszer?

Megoldás: A hullámfüggvény időfejlődését a Schrödinger-egyenlet írja le:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(t) = (\hat{H}_0 + \hat{H}_I) \Psi(t),$$

ahol a hullámfüggvény térváltozóit nem írtuk ki expliciten. A \hat{H}_0 operátor a hidrogénatom energia operátora, \hat{H}_I pedig a fényvel való kölcsönhatáshoz tartozó energia operátora, utóbbit tekintjük perturbációnak. A hullámfüggvényt fejtsük ki a \hat{H}_0 operátor sajátfüggvényei szerint (ezeket ismerjük):

$$\Psi(t) = \sum_i c_i(t) \Psi_i^{(0)},$$

ahol az időfejlődést bepakoltuk a kifejtési együtthatókba. Beírva ezt a kifejtést a Schrödinger egyenletbe kapjuk:

$$i\hbar \sum_i \dot{c}_i(t) \Psi_i^{(0)} = \sum_i c_i(t) E_i^{(0)} \Psi_i^{(0)} + \sum_i c_i(t) \hat{H}_I \Psi_i^{(0)},$$

ahol kihasználtuk, hogy $\hat{H}_0 \Psi_i^{(0)} = E_i^{(0)} \Psi_i^{(0)}$. $E_i^{(0)}$ a perturbálatlan hidrogénatom i . energiaszintje, innentől elhagyjuk róla a 0 indexet. Szorozzuk meg skalárisan az egyenlet mindkét oldalát a keresendő végállapottal, vagyis $\Psi_f^{(0)}$ -fel!

$$i\hbar \dot{c}_f(t) = E_f c_f(t) + \sum_i c_i(t) \left(\Psi_f^{(0)}, \hat{H}_I \Psi_i^{(0)} \right)$$

Amit ki kell számolnunk, az éppen a $c_f(t)$ kifejtési együttható, ennek abszolútérték-négyzete adja a valószínűséget. A megoldást perturbációs sor alakjában képzeljük el:

$$c_f(t) = c_f^{(0)}(t) + c_f^{(1)}(t) + \dots$$

ahol a növekvő sorszámú tagok egyre kisebbnek tekintendők. Nulladik közelítésben teljesen elhagyjuk a kölcsönhatási tagot, $c_f(t)$ sorából pedig csak a 0. indexű számít:

$$i\hbar \dot{c}_f^{(0)} = E_f c_f^{(0)}(t) \implies c_f^{(0)}(t) = c_f^{(0)}(t=0) \cdot e^{-\frac{i}{\hbar} E_f t} = \delta_{fj} \cdot e^{-\frac{i}{\hbar} E_f t}.$$

Az utolsó egyenlőségénél kihasználtuk, hogy a rendszert a j . állapotából indítottuk. Abszolútérték-négyzetet véve láthatóan azt találjuk, hogy a rendszer tetszőleges idő után is 100% valószínűséggel a kezdeti állapotában van.

Nézzük meg, hogyan módosul ez az eredmény első közelítésben! A $c_f(t)$ -re vonatkozó differenciál-egyenletben most már az elsőrendű tagokat is megtartjuk (jobb oldalon az összegzés után elegendő $c_i(t) \approx c_i^{(0)}(t) = \delta_{ij} \cdot e^{-\frac{i}{\hbar} E_i t}$ -t venni):

$$i\hbar \left(\dot{c}_f^{(0)} + \dot{c}_f^{(1)} \right) = E_f \left(c_f^{(0)} + c_f^{(1)} \right) + \sum_i \delta_{ij} \cdot e^{-\frac{i}{\hbar} E_i t} \left(\Psi_f, \hat{H}_I \Psi_i \right)$$

A nulladrendű tagok kiesnek, az összegzés pedig elvégezhető:

$$i\hbar\dot{c}_f^{(1)}(t) = E_f c_f^{(1)}(t) + \left(\Psi_f, \hat{H}_I \Psi_j\right) \cdot e^{-\frac{i}{\hbar} E_j t}.$$

A megoldást $c_f^{(1)}(t) = b_f^{(1)}(t) \cdot e^{-\frac{i}{\hbar} E_f t}$ alakban keresve, $b_f^{(1)}(t)$ -re kapjuk, hogy:

$$i\hbar\dot{b}_f^{(1)}(t) = \left(\Psi_f, \hat{H}_I \Psi_j\right) \cdot e^{-\frac{i}{\hbar}(E_j - E_f)t}.$$

Ennek a differenciálegyenletnek a $b_f^{(1)}(t=0) = 0$ feltételt kielégítő megoldása:

$$b_f^{(1)}(t) = -\frac{i}{\hbar} \int_0^t \left(\Psi_f, \hat{H}_I \Psi_j\right) \cdot e^{-\frac{i}{\hbar}(E_j - E_f)t'} dt'.$$

A keresett valószínűség ezzel (feltéve, hogy $f \neq j$):

$$P_{j \rightarrow f} = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_0^t \left(\Psi_f, \hat{H}_I \Psi_j\right) \cdot e^{-\frac{i}{\hbar}(E_j - E_f)t'} dt' \right|^2$$

Hátra van még a kölcsönhatási energiához tartozó \hat{H}_I operátor, és a kiválasztási szabályok felírása. Hosszúhullámú fény esetében az elektromos tér az atom helyén homogénnek vehető, csak a tér értéke hullámzik harmonikusan: $E = E_0 \sin \omega t$. A kölcsönhatási energiák összegébe legnagyobb járulékot adó tag az ebben az elektromos térben a hidrogénatom elektromos dipolmomentumának potenciális energiája:

$$\hat{H}_I = -\hat{p}E,$$

ahol \hat{p} a dipolmomentum elektromos tér irányú vetülete. Ha az elektromos tér irányának a z tengelyt választjuk (e az elemi töltés):

$$\hat{H}_I = -e\hat{r} \cos \theta E.$$

Ekkor a keresett valószínűségben szereplő skalárszorzat arányos lesz a következő, teljes térszögre vonatkozó integrállal:

$$\left(\Psi_f, \hat{H}_I \Psi_j\right) \sim \int d\Omega (Y_l^{m'})^* \cos \theta Y_{l_0}^{m_0}.$$

Láthatóan $l' = l_0$ esetén az integrál zérus, hiszen ekkor $\cos \theta$ -ban páratlan lesz az integrandus (a gömbfüggvények tértükrözésre $Y_l^m \rightarrow (-1)^l Y_l^m$ módon változnak). Az is látszik, hogy ellenben $m' = m_0$ kell legyen, az ortogonalitás miatt. A megfelelő kiválasztási szabályok a következők:

$$n' = \text{tetszőleges}, \quad l' = l_0 \pm 1, \quad m' = m_0.$$

Ezen relációk szükségesek ahhoz, hogy ne nulla valószínűséget kapjunk.

Érdemes megvizsgálni, hogy ha teljesülnek a fenti feltételek, milyen frekvencia esetén tapasztalunk nagy valószínűséggel átmenetet. Az idő szerinti integrál:

$$P_{j \rightarrow f} \sim \left| \int_0^t \sin \omega t' e^{-\frac{i}{\hbar}(E_j - E_f)t'} dt' \right|^2,$$

mely elvégezhető, ha beírjuk a sin függvény $\sin(x) = \frac{e^{ix} - e^{-ix}}{2i}$ alakját:

$$P_{j \rightarrow f} \sim \frac{1}{4} \left| \frac{e^{i(\omega - \frac{E_j - E_f}{\hbar})t} - 1}{\omega - \frac{E_j - E_f}{\hbar}} + \frac{e^{-i(\omega + \frac{E_j - E_f}{\hbar})t} - 1}{\omega + \frac{E_j - E_f}{\hbar}} \right|^2$$

Látszik, hogy akkor nagy a valószínűség, ha a két nevező közül valamelyik nullához közeli, azaz

$$\hbar\omega = \pm(E_j - E_f).$$

Ez azt jelenti, hogy egy foton energiája meg kell egyezzen a két atomi állapot energiájának különbségével. A pozitív-negatív előjel a fény-elnyelődéshez, illetve kibocsátáshoz tartozik.