Kvantummechanika gyakorlo feladatok 2 - Megoldások

1. feladat Feladatunk meghatározni, hogy a hullámfüggvényben milyen gömbfüggvények fordulnak elő. Végezzük el a következő azonos átalakításokat:

$$\psi(r,\theta,\varphi) = R(r)\cdot\Big[\sin^2\theta\cdot\sin(2\varphi)+\sin(2\theta)e^{i\varphi}+\cos^2\theta\Big] =$$

$$= R(r)\cdot\Big[\sin^2\theta\cdot\frac{e^{2i\varphi}}{2i}-\sin^2\theta\cdot\frac{e^{-2i\varphi}}{2i}+2\sin\theta\cos\theta e^{i\varphi}+\Big(\cos^2\theta-\frac{1}{3}\Big)+\frac{1}{3}\Big].$$

Észrevehető, hogy a zárójelben az összes tag valamelyik gömbfüggvénnyel arányos:

$$\psi(r,\theta,\varphi) = R(r)\cdot\Big[A\cdot Y_2^2+B\cdot Y_2^{-2}+C\cdot Y_2^1+D\cdot Y_2^0+E\cdot Y_0^0\Big].$$

Ez azt jelenti, hogy az l, m kvantumszámokra következő értékek jöhetnek szóba:

l	m
2	2
2	-2
2	1
2	0
0	0

L^2 -re $\hbar^2\cdot l(l+1)$, L_z -re $\hbar\cdot m$ mérhető.

2. feladat A hidrogénatom energia sajátfüggvényei:

$$\Psi_{nlm} = r^l u_{nl}(r)e^{-\frac{r}{na_0}}Y_l^m(\theta,\varphi).$$

Jelen esetben (használva u_{21} képletét):

$$\Psi_{21m} = \Big(\frac{1}{2a_0}\Big)^{3/2}\frac{r}{\sqrt{3}a_0}e^{-\frac{r}{2a_0}}Y_1^m(\theta,\varphi).$$

Az energia korrekciója első közelítésben:

$$\Delta E = \Big(\Psi_{21m},\frac{C}{r^3}\Psi_{21m}\Big) = \int dV\,\Psi_{21m}^*\frac{C}{r^3}\Psi_{21m}.$$

Behelyettesítjük a hullámfüggvényt, majd az integrált szétválasztjuk radiális változó és szögek szerint:

$$\Delta E = \Big(\frac{1}{2a_0}\Big)^3\frac{C}{3a_0^2}\int_0^\infty dr\,re^{-\frac{r}{a_0}}\int d\Omega(Y_1^m)^*Y_1^m.$$

A gömbfüggvényekre vett szögintegrál az ortonormáltság miatt éppen 1, a radiális integrál pedig az $\tilde{r} = r/a_0$ új változó bevezetésével végezhető el:

$$\Delta E = \frac{C}{24a_0^3}\int_0^\infty d\tilde{r}\,\tilde{r}e^{-\tilde{r}} = -\frac{C}{24a_0^3}\int_0^\infty d\tilde{r}\,\tilde{r}\frac{d}{d\tilde{r}}e^{-\tilde{r}} = \frac{C}{24a_0^3}\int_0^\infty d\tilde{r}\,e^{-\tilde{r}} = \frac{C}{24a_0^3}.$$

3. feladat Tudjuk, hogy $L_z = \hbar m$, így $L_z = 3\hbar$ esetén az $m = 3$ értékről van szó, amiből következik, hogy $l \geqq 3$. A kikötésnek megfelelően viszont $n = \{1, 2, 3, 4\}$, ami szerint l nem lehet nagyobb 3-nál. Így: $n = 4$, $l = 3$, $m = 3$. A szóbajövő hullámfüggvény:

$$\psi_{433}(r, \theta, \varphi) = r^3 u_{43}(r) e^{-\frac{r}{4a_0}} Y_3^3(\theta, \varphi).$$

4. feladat A harmonikus oszcillátor energiaszintjei:

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

melyek a perturbáció hatására eltolódnak. Az eltolódás mértéke első közelítésben az n. energiaszintre:

$$\Delta E_n = \left(\Psi_n^{(0)}, H_I \Psi_n^{(0)}\right) = \left(\Psi_n^{(0)}, (\lambda_1 \hat{a}\hat{a}\hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger + \lambda_2 \hat{a}\hat{a}\hat{a}^\dagger)\Psi_n^{(0)}\right)$$

ahol $\Psi_n^{(0)}$ a perturbálatlan oszcillátor n. energia sajátfüggvénye.
Felhasználva a léptetőoperátorok hatását az oszcillátor energia-sajátállapotain:

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

tudjuk, hogy csak olyan tag adhat 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: $\left(\Psi_n^{(0)}, \Psi_m^{(0)}\right) = 0$;$\left(n \neq m\right)$. Így a korrekciós tag leegyszerűsödik:

$$\Delta E_n = \lambda_1 \left(\Psi_n^{(0)}, (\hat{a}\hat{a}\hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger)\Psi_n^{(0)}\right)$$

Számítsuk ki az operátorok hatását:

$$\hat{a}\hat{a}\hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger\Psi_n^{(0)} = \sqrt{n+1}\hat{a}\hat{a}\hat{a}^\dagger\Psi_{n+1}^{(0)} = \sqrt{n+1}\sqrt{n+2}\hat{a}\hat{a}\Psi_{n+2}^{(0)} =$$

$$= \sqrt{n+1}\,(n+2)\,\hat{a}\Psi_{n+1}^{(0)} = (n+1)\,(n+2)\,\Psi_n^{(0)} = (n^2+3n+2)\Psi_n^{(0)}$$

Így az n. energiaszint korrekciója első közelítésben:

$$\Delta E_n = \lambda_1(n^2+3n+2)\left(\Psi_n^{(0)}, \Psi_n^{(0)}\right) = \lambda_1(n^2+3n+2)$$