5. gyakorlat (okt. 4.)

1. A zárthelyi dolgozat példáinak megoldása:

   (a) FELADAT

   Két elektron egy hidrogénszerű atomban a p pályán található: $l_1 = 1$, $l_2 = 1$.

   a.) A teljes $L = l_1 + l_2$ impulzusmomentumuk milyen értékeket vehet fel?

   b.) Mekkora lesz a várható értéke az l_{1z} és l_{2x} operátoroknak az $|L, M\rangle = |1, 1\rangle$ állapotban?

   Megoldás:

   A teljes impulzusmomentum operátor négyzetének lehetséges értékei: $L = l_1 - l_2, \dots l_1 + l_2 = 0, 1, 2$. Az $|L, M\rangle = |2, 2\rangle = |1, 1\rangle|1, 1\rangle$ állapotot egyértelműen fel tudjuk írni szorzat formában. Lefelé léptetés után $|2, 1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|1, 0\rangle|1, 1\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|1, 1\rangle|1, 0\rangle$ állapotot kapjuk. Erre merőleges lesz az $|1, 1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|1, 0\rangle|1, 1\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}|1, 1\rangle|1, 0\rangle$ állapot. Az l_{1z} operátor várható értéke ebben az állapotban:

   $$\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\langle 1, 0|\langle 1, 1| - \frac{1}{\sqrt{2}}\langle 1, 1|\langle 1, 0|\right) l_{1z} \left(\frac{1}{\sqrt{2}}|1, 0\rangle|1, 1\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}|1, 1\rangle|1, 0\rangle\right) =$$
   $$\frac{1}{2}\langle 1, 0|\langle 1, 1|l_{1z}|1, 0\rangle|1, 1\rangle + \frac{1}{2}\langle 1, 1|\langle 1, 0|l_{1z}|1, 0\rangle|1, 1\rangle + \frac{1}{2}\langle 1, 0|\langle 1, 1|l_{1z}|1, 1\rangle|1, 0\rangle +$$
   $$\frac{1}{2}\langle 1, 1|\langle 1, 0|l_{1z}|1, 1\rangle|1, 0\rangle = 0 + 0 + 0 + \frac{1}{2}\hbar$$

   A szorzat állapotokban csak l_{2z} sajátállapotok szerepelnek ezért az l_{2x} állapot várható értéke eltünik.

   (b) Két harmonikus potenciálban mozgó, feles spinű részecske harmonikus potenciállal hat kölcsön egymással. A Hamilton operátorukat a következőképpen írhatjuk fel:

   $$H = \frac{p_1^2}{2m} + \frac{1}{2}m\Omega^2 x_1^2 + \frac{p_2^2}{2m} + \frac{1}{2}m\Omega^2 x_2^2 + \frac{1}{2}m\omega^2(x_1 - x_2)^2$$

   a.) Az $X = x_1 + x_2$ és $x = x_1 - x_2$ változók bevezetésével szeparáljuk a Hamiltun operátort két független operátor összegére és keressük meg a sajátállapotokat és a hozzá tarozó energiákat!

   b.) Mit tudunk mondani a teljes hullámfüggvény szimmetriájáról? Milyen szimmetriájú állapotok lehetnek spin szingulett és spin triplett állapotok?

   Megoldás:

   Vezessük be a $P = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial X}$ és $p = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}$ impulzus operátorokat:

   $$p_1 = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x_1} = \frac{\hbar}{i}\left(\frac{\partial X}{\partial x_1}\frac{\partial}{\partial X} + \frac{\partial x}{\partial x_1}\frac{\partial}{\partial x}\right) = \frac{\hbar}{i}\left(\frac{\partial}{\partial X} + \frac{\partial}{\partial x}\right) = P + p$$
   $$p_2 = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x_2} = \frac{\hbar}{i}\left(\frac{\partial X}{\partial x_2}\frac{\partial}{\partial X} + \frac{\partial x}{\partial x_2}\frac{\partial}{\partial x}\right) = \frac{\hbar}{i}\left(\frac{\partial}{\partial X} - \frac{\partial}{\partial x}\right) = P - p$$

   A kinetikus energia operátora az új impulzusokkal:

   $$\frac{p_1^2}{2m} + \frac{p_2^2}{2m} = \frac{P^2}{m} + \frac{p^2}{m}\ .$$

A potenciális energiát is kifejeyhetjük az új koordinátákkal $x_1 = \frac{1}{2}(X + x)$ és $x_2 = \frac{1}{2}(X - x)$.

$$\frac{1}{2}m\Omega^2(x_1^2 + x_2^2) = \frac{1}{4}m\Omega^2(X^2 + x^2)\ .$$

A teljes Hamilton operátor az új változókban:

$$H = \frac{P^2}{m} + \frac{1}{4}m\Omega^2X^2 + \frac{p^2}{m} + (\frac{1}{4}m\Omega^2 + \frac{1}{2}m\omega^2)x^2 =$$
$$2\left(\frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2}m\left(\frac{\Omega}{2}\right)^2 X^2\right) + 2\left(\frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\left(\left(\frac{\Omega}{2}\right)^2 + \frac{\omega^2}{2}\right)x^2\right)$$

Az X és x változókban a Hamilton operátor szétesik két független harmonikus oszcillátor Hamilton operátorára, amelyek energiája és hullámfüggvényei leolvashatóak: $\omega_1 = \frac{\Omega}{2}$, $\omega_2 = \sqrt{\left(\frac{\Omega}{2}\right)^2 + \frac{\omega^2}{2}}$. $E_{n,m} = 2\hbar\omega_1\left(n + \frac{1}{2}\right) + 2\hbar\omega_2\left(m + \frac{1}{2}\right)$ A hullámfüggvények:

$$\Phi_{n,m}(x_1, x_2) = \varphi_n(\frac{x_1 + x_2}{x_{10}})\varphi_m(\frac{x_1 - x_2}{x_{20}})\ ,$$

ahol φ_n a harmonikus oszcillátor hullámfüggvénye, $x_{10} = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_1}}$, $x_{20} = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_2}}$. $\Phi_{n,m}(x_1, x_2)$ első tagja mindig szimmetrikus a változók felcserélésével szemben, míg a második tag páros m esetén szimmetrikus, páratlan m esetén antiszimmetrikus lesz. Ennek megfelelően az antiszimmetrikus $S = 0$ szimgulett állapot a páros m állapotokkal kombinálódik, amíg az $S = 1$ triplett állapot a páratlan m állapotokkal.

(c) Becsüljük meg a Ritz féle variációs módszerrel az anharmonikus oszcillátor alapállapoti energiáját! Az anharmonikus oszcillátor Hamilton operátora a következő:

$$H = \frac{p^2}{2m} + \alpha x^4$$

Próba függvénynek válasszuk egy ω sajátfrekvenciájú harmonikus oszcillátor alapállapoti hullámfüggvényét és keressük az optimális ω-t! Az energia várhatóértéket számíthatjuk a léptető operátorok segítségével is.

Segítség

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{x}{x_0} + i\frac{p}{p_0}\right), \quad a^+ = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{x}{x_0} - i\frac{p}{p_0}\right), \qquad x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}, \quad p_0 = \sqrt{\hbar m\omega}$$
$$a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle, \quad a^+|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle, \quad \varphi_0(x) = \frac{1}{\sqrt{x_0\sqrt{\pi}}}e^{-\frac{x^2}{2x_0^2}}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} x^{2n}e^{-ax^2}dx = \frac{(2n)!}{2^{2n}n!}\frac{1}{a^n}\sqrt{\frac{\pi}{a}}$$

Megoldás:

Határozzuk meg a próbafüggvény felhasználásával az energi várhatóértéket:

$$E(\omega) = \langle\varphi|H|\varphi\rangle$$

$$\frac{p^2}{2m}|\varphi\rangle = -\frac{1}{\sqrt{x_0\sqrt{\pi}}}\hbar^2\frac{d^2}{dx^2}e^{-\frac{x^2}{2x_0^2}} = -\frac{1}{\sqrt{x_0\sqrt{\pi}}}\hbar^2\frac{1}{x_0^2}\left(1 - \frac{x^2}{x_0^2}\right)e^{-\frac{x^2}{2x_0^2}}$$

A kinetikus energia vérható értéke:

$$\langle\varphi|\frac{p^2}{2m}|\varphi\rangle = \frac{1}{x_0\sqrt{\pi}}\hbar^2\frac{1}{x_0^2}\int_{-infty}^{\infty}\left(1-\frac{x^2}{x_0^2}\right)e^{-\frac{x^2}{x_0^2}}dx = \frac{1}{4}\frac{\hbar^2}{mx_0^2} = \frac{1}{4}\hbar\omega$$

A próbafüggvényünk egy ω frekvenciájú harmonikus oszcillátor alapállapoti hullámfüggvénye, ezért a kinetikus energia várhatóértékének a harmonikus oszcillátor alapállapot energiájának a felének kell lennie!

$$\langle\varphi|\alpha x^4|\varphi\rangle = \frac{1}{x_0\sqrt{\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}\alpha x^4 e^{-\frac{x^2}{x_0^2}}dx = \frac{3}{4}\alpha x_0^4 = \frac{3}{4}\alpha\frac{\hbar^2}{m^2\omega^2}\ .$$

Az energia várható éertéke tehát:

$$E(\omega) = \langle\varphi|H|\varphi\rangle = \frac{1}{4}\hbar\omega + \frac{3}{4}\frac{\alpha\hbar^2}{m^2\omega^2}$$

Az optimális függvény esetén:

$$\frac{dE}{d\omega} = \frac{1}{4}\hbar - \frac{6}{4}\frac{\alpha\hbar^2}{m^2\omega^3} = 0\ .$$

Az optimális $\omega = \sqrt[3]{\frac{6\alpha\hbar}{m^2}}$, $E = \frac{1}{4}\hbar\sqrt[3]{\frac{6\alpha\hbar}{m^2}} + \frac{3}{4}\frac{\alpha\hbar^2}{m^2}\left(\frac{m^2}{6\alpha\hbar}\right)^{\frac{2}{3}} = \frac{1}{4}\hbar\sqrt[3]{\frac{6\alpha\hbar}{m^2}} + \alpha^{\frac{1}{3}}\left(\frac{\hbar^2}{6m}\right)^{\frac{2}{3}}$.

(d) Első Born közelítésben határozzuk meg a Yukawa potenciál differenciális hatáskeresztnetszetét!

$$V(r) = \frac{ke^2}{r}e^{-\frac{r}{r_0}}, \qquad\qquad f(\vartheta) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int V(\mathbf{r})e^{i(\mathbf{k}'-\mathbf{k})\mathbf{r}}d^3r$$

Segítség

$$\int_0^{\infty} x^n e^{-ax}dx = \frac{n!}{a^{n+1}}$$

Megoldás:

Az integrál meghatározásához térjünk át gömbi koordináta rendszerbe. Válasszuk a z-tengelyt párhuzamosan a $\mathbf{q} = \mathbf{k}' - \mathbf{k}$ vektorral, ekkor

$$\begin{aligned}\int V(r)e^{i\mathbf{qr}}d^3r &= \int_0^{\infty} r^2dr\int_0^{2\pi}d\varphi\int_0^{\pi}\sin(\vartheta)d\vartheta V(r)e^{iqr\cos(\vartheta)} \\ &= \frac{4\pi}{q}\int_0^{\infty} r\sin(iqr)V(r)dr\end{aligned}$$

Helyettessük be a Ykawa potenciált:

$$\begin{aligned}f(\mathbf{q}) &= -\frac{2m}{\hbar^2}ke^2\int_0^{\infty}e^{-\frac{r}{r_0}}\sin(iqr)dr = \frac{2}{a_0q}\frac{1}{2i}\int_0^{\infty}\left(e^{-(\frac{1}{r_0}-iq)r} - e^{-(\frac{1}{r_0}+iq)r}\right)dr \\ &= \frac{1}{ia_0q}\frac{1}{\frac{1}{r_0}-iq} - \frac{1}{\frac{1}{r_0}+iq)r} = \frac{2}{a_0}\frac{r_0^2}{1+q^2r_0^2}\ ,\end{aligned}$$

ahol $a_0 = \frac{\hbar^2}{mke^2}$. A differenciális hatáskeresztmetszet a szórási amplitúdó négyzete lesz.

2. **A kölcsönhatási kép és az időfüggő perturbáció számítás kapcsolata**

   Egy hidrogén atomot z irányú homogén mágneses térbe helyezünk:

$$H = H_H - \mu_B \sigma_z B_z = \begin{pmatrix} H_H - \mu_B B_z & 0 \\ 0 & H_H + \mu_B B_z \end{pmatrix}$$

   A rendszer alapállapotban van, amikor egy

$$V(t) = \frac{\mu_B}{2\hbar} S_x B_x \sin(\omega t)$$

   időfüggő perturbációt kapcsolunk be. Milyen valószínűseggel lesz t idő múlva a rendszer gerjesztett állapotban?

HF: Gyakorlati példa befejezése.