1. Egy z irányú homogén mágneses térbe helyezett feles spínű részecske Hamilton operátora a következő alakú:

$$H = H_0 \mathbb{1} - \frac{qB_z}{m} S_z$$

A rendszer alapállapotban van, amikor időben periódikusan változó x irányú homogén mágneses teret kapcsolunk be: $W(t) = -\frac{qB_x}{m} S_x \cos(\omega t)$.

a.) Írjuk fel a perturbációt kölcsönhatási képben!

b.) Határozzuk meg első rendben a $c_n(t)$ kifejtési együtthatókat és mutassuk meg, hogy az első rendű időfüggő perturbációszámítással megegyező eredményt kapunk!

Kölcsönhatási képben az időfüggő Schrödinger egyenlet:

$$i\hbar\partial_t |\psi\rangle_I = W_I(t)|\psi\rangle_I \ , \quad W_I(t) = e^{\frac{i}{\hbar}H_0 t} W_S e^{-\frac{i}{\hbar}H_0 t}$$

Vezessük be az $U(t, t_0)$ időfejlesztő operátort: $|\psi(t)\rangle_I = U(t, t_0)|\psi(t_0)\rangle_I$.

$$i\hbar\partial_t U(t, t_0)|\psi(t_0)\rangle_I = W_I(t)U(t, t_0)|\psi(t_0)\rangle_I$$

innen:

$$i\hbar\partial_t U(t, t_0) = W_I(t)U(t, t_0) \ , \quad U(t_0, t_0) = \mathbb{1}$$

$$i\hbar \int_{t_0}^{t} \partial_t U(t', t_0) dt' = \int_{t_0}^{t} W_I(t')U(t', t_0)dt'$$

$$i\hbar(U(t, t_0) - U(t_0, t_0)) = \int_{t_0}^{t} W_I(t')U(t', t_0)dt'$$

$$U(t, t_0) = \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^{t} W_I(t')U(t', t_0)dt'$$

$$U^{(0)}(t, t_0) = \mathbb{1} \ , \quad U^{(1)}(t, t_0) = \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^{t} W_I(t')dt' \ , \quad \ldots$$

Legyen a rendszer a t_0 pillanatban H_0 egy $|\varphi_i\rangle$ sajátállapotában. Ekkor $\psi(t) = \sum_n c_n(t)|\varphi_n\rangle = U(t, t_0)|\varphi_i\rangle$, innen $c_n(t) = \langle\varphi_n|U(t, t_0)|\varphi_i\rangle$.

$$c_n^{(1)} = \delta_{ni} - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^{t} \langle\varphi_n|W_I(t')|\varphi_n\rangle dt'$$

2. Határozzuk meg az alapállapotú hidrogén atom diamágneses szuszceptibilitását az időfüggetlen perturbáció számítás segítségével. Tételezzük fel, hogy a hidrogén atom energiáját az $E = E_0 + BM$ alakban kereshetjük. Ezek szerint az energia külső mágneses tér szerinti első deriváltja a mágneses momentum, a második deriváltja pedig a szuszceptibilitás.

Dolgozzunk szuimmetrikus mértékben:

$$\mathbf{A} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} -By \\ Bx \\ 0 \end{pmatrix}$$

A Hamilton operátor:

$$H = \frac{1}{2m}(\mathbf{p} - q\mathbf{A})^2 - \frac{ke^2}{r} = \frac{1}{2m}(p_x + \frac{1}{2}qBy)^2 + \frac{1}{2m}(p_y - \frac{1}{2}qBx)^2 \frac{p_y^2}{2m} - \frac{ke^2}{r}$$

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\left(\frac{\omega_L}{2}\right)^2(x^2+y^2) - \frac{\omega_L}{2}(xp_y - yp_x) - \frac{ke^2}{r}\ , \qquad \omega_L = \frac{qB}{m}$$
$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\left(\frac{\omega_L}{2}\right)^2(x^2+y^2) - \frac{\omega_L}{2}L_z - \frac{ke^2}{r}$$

Alapállapotban $l = 0$

$$H_0 = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} - \frac{ke^2}{r}\ , \qquad W = \frac{1}{2}m\left(\frac{\omega_L}{2}\right)^2(x^2+y^2)$$

Az alapállapoti hullámfüggvény: $\varphi_{100} = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}}e^{-\frac{r}{a_0}}$.

3. Harmonikus oszcillátor homogén mágneses térben:

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\left(\omega^2 + \left(\frac{\omega_L}{2}\right)^2\right)(x^2+y^2) + \frac{1}{2}\omega^2 z^2 - \frac{\omega_L}{2}L_z$$

Szeparáljuk le a z változókat. A maradékra:

$$H = \hbar\Omega(a_x^+a_x + a_y^+a_y + 1) + i\hbar\frac{\omega_L}{2}(a_x^+a_y - a_y^+a_x)\ , \quad \Omega^2 = (\omega^2 + \left(\frac{\omega_L}{2}\right)^2$$

Írjuk át a következő alakba:

$$H = \ (a_x^+ \quad a_y^+) \begin{pmatrix} \hbar\Omega & i\hbar\frac{\omega_L}{2} \\ -i\hbar\frac{\omega_L}{2} & \hbar\Omega \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_x \\ a_y \end{pmatrix} + \hbar\Omega$$

Diagonalizáljuk az előző mátrixot:

$$\begin{pmatrix} \hbar\Omega & i\hbar\frac{\omega_L}{2} \\ -i\hbar\frac{\omega_L}{2} & \hbar\Omega \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} \\ u_{21} & u_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} \\ u_{21} & u_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{\omega_1} & 0 \\ 0 & \tilde{\omega_2} \end{pmatrix}$$

Vezessünk be új léptető operátorokat:

$$\begin{pmatrix} \tilde{a}_1 \\ \tilde{a}_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} \\ u_{21} & u_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_x \\ a_y \end{pmatrix}$$

Az új léptető operátorokkal a Hamilton operátor:

$$H = \hbar\tilde{\omega}_1\tilde{a}_1^+\tilde{a}_1 + \hbar\tilde{\omega}_2\tilde{a}_2^+\tilde{a}_2 + \hbar\Omega$$

Az energia spektrum: $E_{nm} = n\hbar\tilde{\omega}_1 + m\hbar\tilde{\omega}_2 + \hbar\Omega$

Az időfüggetlen Schrödinger egyenlet:

$$i\hbar\partial_t|\psi\rangle = H|\psi\rangle$$

Mutassuk meg, hogy ha létezik az I hermitikus operátor, amelyre teljesül, hogy

$$i\hbar\partial_t I - [H, I] = 0$$

vagyis a teljes időderiváltja eltünik, akkor $I|\psi\rangle$ is kielégíti a Schrödinger egyenletet. Bizonyítsuk be, hogy az $I|\varphi_n\rangle = \lambda_n|\varphi_n\rangle$ esetén λ nem függ az időtől!