Atomfizika gyakorlófeladatok, 4. (utolsó) adag

Nagy Márton

2017. december

Néhány feladat, ami itt szerepel, már előkerült a gyakorlaton. Ismételjük át a következőket:

- Schrödinger-egyenlet egy dimenzióban: kötött és szórási állapotok, Dirac-delták kezelése, stb.
- Speciális megoldások: egy Dirac-delta völgy, két Dirac-delta egymástól véges távolságra, potenciálvölgy, áthaladás potenciálfalon
- Feles spin komponenseinek operátorai
- Tetszőleges irányú feles spin operátora, sajátértékei ($\pm\hbar/2$), sajátállapotai
- Két feles spin Hilbert-tere

Gyakorló számolások:

1. Legyen a potenciális energia két Dirac-delta egymástól a távolságra, az egyik pozitív, a másik negatív: $V(x){=}{-}\alpha\delta(x){+}\beta\delta(x{-}a)$. Keressünk kötött állapotokat! Mi a feltétele annak, hogy legyen legalább egy ilyen? (Jó tanács: vezessük be idejekorán az $y{=}\kappa a$ ismeretlent és az $\alpha'{\equiv}\frac{\hbar^2}{2m\alpha a}$, $\beta'{\equiv}\frac{\hbar^2}{2m\beta a}$ paramétereket!)
2. Legyen ismét két Dirac-delta a potenciál: $V(x){=}\alpha_1\delta(x){+}\alpha_2\delta(x{-}a)$ (lehet pozitív is, negatív is bármelyik). Balról beeső $E{>}0$ energiájú részecskéket vizsgálunk; mekkora részük halad át? (Jó tanács: vezessük be a $\beta_{1,2}{\equiv}\frac{m\alpha_{1,2}}{\hbar^2 k}$ paramétereket!)
3. Keressük meg az egydimenziós dobozba zárt részecske energiaszintjeit, azaz legyen $V(x)$ végtelen, ha $x{<}0$ vagy $x{>}a$, nulla közöttük, legyen az energia most $E{>}0$, és tegyük fel, hogy a hullámfüggvény a határon eltűnik!
4. Megkerestük az egy darab Dirac-delta „potenciálvölgyben”, azaz a $V(x) = -\alpha\delta(x)$ esetben megvalósuló kötött állapotokat: azt kaptuk, hogy pontosan egy darab van. Kövessük végig, hogy az órán megoldott a szélességű, V_0 mélységű potenciálgödör kötöttállapot-rendszere hogyan megy át ebbe, ahogy a potenciálgödörrel Dirac-deltához tartunk! Utóbbi azt jelenti, hogy egyszerre vesszük a $V_0{\to}\infty$ és $a{\to}0$ határátmeneteket, úgy, hogy közben $V_0 a \equiv \alpha$ konstans marad.

5. Konkrétan számoljunk végig néhány feles spines feladatot! Legyenek adottak az alábbi (nem feltétlenül egység–)vektorok:

$$\mathbf{v}_1 = \begin{pmatrix}1\\1\\1\end{pmatrix}, \quad \mathbf{v}_2 = \begin{pmatrix}1\\-1\\1\end{pmatrix}, \quad \mathbf{v}_3 = \begin{pmatrix}1\\0\\1\end{pmatrix}, \quad \mathbf{v}_4 = \begin{pmatrix}1\\1\\2\end{pmatrix}, \quad \mathbf{v}_5 = \begin{pmatrix}2\\1\\0\end{pmatrix}.$$

   Keressük meg az ilyen irányú spinmérések $+\hbar/2$-höz tartozó sajátállapotait!

6. Legyen pl. $\mathbf{v}_1$, $\mathbf{v}_5$ mint az előző feladatban, és legyen egy $\psi = A\Big((1{+}i)\left|\uparrow\right\rangle + (1{-}3i)\left|\downarrow\right\rangle\Big)$ spinállapot; mennyi a kijelölt irányú spinmérések várható értéke, ill. mennyi az ilyen irányban $+\hbar/2$ mérési eredmény valószínűsége?

7. Ellenőrizzük konkrétan le, hogy a kételektron-spinállapotok bázisvektorain hogyan hatnak az egyik és a másik elektron spinoperátorai!

8. (Ez az egyik gyakorlaton volt, a másikon nem; hosszabb számolás): bizonyítsuk be, hogy egy kételektron-spinállapothoz (azaz, ha $\psi{=}a\left|\uparrow\uparrow\right\rangle + b\left|\uparrow\downarrow\right\rangle + c\left|\downarrow\uparrow\right\rangle + d\left|\downarrow\downarrow\right\rangle$) pontosan akkor létezik olyan térbeli irány, amilyen irányban az egyik elektron spinjét megmérve biztosan $+\hbar/2$-t kapunk, ha az állapot „tiszta”, azaz két egyspin-állapot tenzorszorzata!
   Utóbbi feltétel ugye azt jelenti, hogy $\psi = \{\alpha_1\left|\uparrow_1\right\rangle + \beta_1\left|\downarrow_1\right\rangle\} \otimes \{\alpha_2\left|\uparrow_2\right\rangle + \beta_2\left|\downarrow_2\right\rangle\}$!

Útmutatások, megoldások, megjegyzések a feladatokhoz:

1. Az E energia negatív: $E{=}{-}|E|$, a Schrödinger-egyenlet ugyanaz mindhárom tartományban, a $\kappa \equiv \sqrt{\frac{2m|E|}{\hbar^2}}$ jelöléssel a megoldások (ahonnan már kihagytuk a nem megengedett exponenciálisan elszálló részeket), ill. az összeillesztési feltételek (a mondott módon bevezetve az $y{=}\kappa a$ ismeretlent és az $\alpha'{\equiv}\frac{\hbar^2}{2m\alpha a}$, $\beta'{\equiv}\frac{\hbar^2}{2m\beta a}$ paramétereket):

$$\begin{aligned} \psi_1 &= Ae^{\kappa x}, \\ \psi_1 &= Ce^{\kappa x} + De^{-\kappa x}, \\ \psi_3 &= Ge^{-\kappa x}, \end{aligned}, \qquad \begin{aligned} \psi_1(x{=}0) &= \psi_2(x{=}0), \\ -\tfrac{\hbar^2}{2m}\left(\psi_2'(x{=}0){-}\psi_1'(x{=}0)\right) &= \alpha\psi_1(x{=}0), \\ \psi_2(x{=}a) &= \psi_3(x{=}a), \\ -\tfrac{\hbar^2}{2m}\left(\psi_3'(x{=}a){-}\psi_2'(x{=}a)\right) &= -\beta\psi_3(x{=}a) \end{aligned},$$

   behelyettesítve és átírva mátrix-vektor alakba:

$$\begin{pmatrix} 1 & -1 & -1 & 0 \\ \alpha' y{-}1 & -\alpha' y & \alpha' y & 0 \\ 0 & e^y & e^{-y} & -1 \\ 0 & \beta' y e^y & -\beta' y e^{-y} & \beta' y{+}1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ C \\ D \\ Ge^{-y} \end{pmatrix} = 0.$$

   A determinánsnak el kell tűnnie, ebből az adódik, hogy $e^{-2y}{=}(1{-}2\alpha' y)(1{+}2\beta' y)$, a jobb oldal 1-ből -2 meredekséggel indul, a bal oldal 1-ből induló lefele nyitott parabola. Az $y = 0$ megoldás nem számít. Vagyis: nulla vagy egy megoldás van, aszerint, hogy $\alpha'{-}\beta'$ nagyobb-e, mint 1, vagy nem. (Ha $a\to 0$, ez éppen csak annyit ad, hogy a negatív delta legyen tényleg mélyebb, mint a magasabb"; egyébként $a>0$-ra kicsit szigorúbb a feltétel.)

2. Az előző feladathoz hasonlóan kell számolni, annyi, hogy most $E>0$, és a $k=\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$ hullámszámot kell bevezetni. Az adódik végül (a beeső, szabadon választott amplitúdót A-val, a visszaverődő és a továbbhaladó hullámok amplitúdóit B-vel ill. F-vel, a benti hullámokét C, D-vel jelölve, és a $\beta_{1,2}\equiv\frac{m\alpha_{1,2}}{\hbar^2 k}$ paramétereket bevezetve), hogy

$$\begin{array}{ll} C=(1-i\beta_1)A-i\beta_1 B, & Fe^{ika}=Ce^{ika}+De^{ika}, \\ D=i\beta_1 A+(1+i\beta_1)B, & (1+2i\beta_2)Fe^{ika}=Ce^{ika}-De^{ika} \end{array}, \quad \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \quad \frac{B}{A}=-\frac{i\beta_2(1-i\beta_1)e^{ika}+(1+i\beta_2)i\beta_1 e^{-ika}}{\beta_1\beta_2 e^{ika}+(1+i\beta_1)(1+i\beta_2)e^{-ika}}, \quad \frac{Fe^{ika}}{A}=\frac{1}{\beta_1\beta_2 e^{ika}+(1+i\beta_1)(1+i\beta_2)e^{-ika}} \quad \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \quad T=\frac{|F|^2}{|A|^2}=\frac{1}{1+\beta_1^2+\beta_2^2+2\beta_1^2\beta_2^2+2\beta_1\beta_2\left[(1-\beta_1\beta_2)\cos(2ka)+(\beta_1+\beta_2)\sin(2ka)\right]}.$$

Ha végigszámolja az ember $R=\frac{|B|^2}{|A|^2}$-et is, tényleg kijön, hogy $T+R=1$.

3. Az energiaszintek $E_n=\frac{\hbar^2}{2m}\frac{n^2\pi^2}{a^2}$-nek adódnak, ahol $n=1,2,3\ldots$ egész szám.

4. Itt végig kell csinálni; a grafikus megoldás során kapott kör sugara egyre kisebb lesz; csak az első görbeágat metszi át, és mivel az parabolikusan indul, tényleg kijön az energiaszintre is a Dirac-deltára kapott formula.

5. Általánosan is kiszámoltuk, hogy $\mathbf{n}$ irányú spinmérés sajátállapota micsoda. A jól normált megoldás: $\psi=\frac{1}{\sqrt{2v(v+v_z)}}\begin{pmatrix} v+v_z \\ v_x+iv_y\end{pmatrix}$. Ezekkel (de amúgy is) az alábbi eredményeket kapjuk a $\mathbf{v}_{1,2,3,4,5}$ irányú mérés $\psi_{1,2,3,4,5}$ sajátállapotaira:

$$\psi_1=\frac{1}{\sqrt{6+2\sqrt{3}}}\begin{pmatrix}\sqrt{3}+1\\ 1+i\end{pmatrix}, \quad \psi_2=\frac{1}{\sqrt{6+2\sqrt{3}}}\begin{pmatrix}\sqrt{3}+1\\ 1-i\end{pmatrix}, \quad \psi_3=\frac{1}{\sqrt{4+2\sqrt{2}}}\begin{pmatrix}\sqrt{2}+1\\ 1\end{pmatrix},$$

$$\psi_4=\frac{1}{\sqrt{12+4\sqrt{6}}}\begin{pmatrix}\sqrt{6}+2\\ 1+i\end{pmatrix}, \quad \psi_5=\frac{1}{\sqrt{10}}\begin{pmatrix}\sqrt{5}\\ 2+i\end{pmatrix}.$$

6. Az $\langle\hat{\mathbf{s}}\rangle$ várható értékekből pl. a $P_+ + P_- = 1$, $\frac{\hbar}{2}(P_+ - P_-)=\langle\hat{\mathbf{s}}\rangle$ egyenleteket megoldva kapjuk az olyan irányú (P_+) ill. az ellentétes irányú spinmérés (P_-) valószínűségeit, a várható értékeket pedig a szokásosan számolhatjuk.

7. Az alábbi táblázat leellenőrzéséről van szó:

$$\begin{array}{llll}
\hat\sigma_x^{(1)}\left|\uparrow\uparrow\right\rangle=\left|\downarrow\uparrow\right\rangle, & \hat\sigma_x^{(1)}\left|\uparrow\downarrow\right\rangle=\left|\downarrow\downarrow\right\rangle, & \hat\sigma_x^{(1)}\left|\downarrow\uparrow\right\rangle=\left|\uparrow\uparrow\right\rangle, & \hat\sigma_x^{(1)}\left|\downarrow\downarrow\right\rangle=\left|\uparrow\downarrow\right\rangle, \\
\hat\sigma_x^{(2)}\left|\uparrow\uparrow\right\rangle=\left|\uparrow\downarrow\right\rangle, & \hat\sigma_x^{(2)}\left|\uparrow\downarrow\right\rangle=\left|\uparrow\uparrow\right\rangle, & \hat\sigma_x^{(2)}\left|\downarrow\uparrow\right\rangle=\left|\downarrow\downarrow\right\rangle, & \hat\sigma_x^{(2)}\left|\downarrow\downarrow\right\rangle=\left|\downarrow\uparrow\right\rangle, \\
\hat\sigma_y^{(1)}\left|\uparrow\uparrow\right\rangle=i\left|\downarrow\uparrow\right\rangle, & \hat\sigma_y^{(1)}\left|\uparrow\downarrow\right\rangle=i\left|\downarrow\downarrow\right\rangle, & \hat\sigma_y^{(1)}\left|\downarrow\uparrow\right\rangle=-i\left|\uparrow\uparrow\right\rangle, & \hat\sigma_y^{(1)}\left|\downarrow\downarrow\right\rangle=-i\left|\uparrow\downarrow\right\rangle, \\
\hat\sigma_y^{(2)}\left|\uparrow\uparrow\right\rangle=i\left|\uparrow\downarrow\right\rangle, & \hat\sigma_y^{(2)}\left|\uparrow\downarrow\right\rangle=-i\left|\uparrow\uparrow\right\rangle, & \hat\sigma_y^{(2)}\left|\downarrow\uparrow\right\rangle=i\left|\downarrow\downarrow\right\rangle, & \hat\sigma_y^{(2)}\left|\downarrow\downarrow\right\rangle=-i\left|\downarrow\uparrow\right\rangle, \\
\hat\sigma_z^{(1)}\left|\uparrow\uparrow\right\rangle=\left|\uparrow\uparrow\right\rangle, & \hat\sigma_z^{(1)}\left|\uparrow\downarrow\right\rangle=\left|\uparrow\downarrow\right\rangle, & \hat\sigma_z^{(1)}\left|\downarrow\uparrow\right\rangle=-\left|\downarrow\uparrow\right\rangle, & \hat\sigma_z^{(1)}\left|\downarrow\downarrow\right\rangle=-\left|\downarrow\downarrow\right\rangle, \\
\hat\sigma_z^{(2)}\left|\uparrow\uparrow\right\rangle=\left|\uparrow\uparrow\right\rangle, & \hat\sigma_z^{(2)}\left|\uparrow\downarrow\right\rangle=-\left|\uparrow\downarrow\right\rangle, & \hat\sigma_z^{(2)}\left|\downarrow\uparrow\right\rangle=\left|\downarrow\uparrow\right\rangle, & \hat\sigma_z^{(2)}\left|\downarrow\downarrow\right\rangle=-\left|\downarrow\downarrow\right\rangle.
\end{array}$$

A bázisvektor „másik része” mindig békén marad.

8. Számoljuk ki először az első spin $\mathbf{n}$ irányú mérésének várható értékét! Az előző feladat táblázatában is felírt szabályokat kell alkalmazni, némi egyszerűsítéssel arra jutunk, hogy

$$\psi=a\left|\uparrow\uparrow\right\rangle+b\left|\uparrow\downarrow\right\rangle+c\left|\downarrow\uparrow\right\rangle+d\left|\downarrow\downarrow\right\rangle \quad\Rightarrow\quad \left\langle \hat s_{\mathbf{n}}^{(1)}\right\rangle_\psi=\left\langle\psi\right|\hat s_{\mathbf{n}}^{(1)}\psi\rangle=\frac{\hbar}{2}\times$$

$$\times\left\{n_x\left(a^*c+ac^*+b^*d+bd^*\right)+n_y\cdot i\left(ac^*-a^*c+bd^*-bd^*\right)+n_z\left(|a|^2+|b|^2-|c|^2-|d|^2\right)\right\}.$$

Itt is egy olyan kifejezés adódott, ahol az $\mathbf{n}$ vektor egy az együtthatók által meghatározott hármasvektorral van skalárszorozva. Ezen $\mathbf{m}$ vektor komponensei tehát:

$$m_x=a^*c+ac^*+b^*d+bd^*,\quad m_y=i\left(ac^*-a^*c+bd^*-bd^*\right),\quad m_z=|a|^2+|b|^2-|c|^2-|d|^2,$$

az ötlet, hogy számítsuk ki a vektor hosszát. Némi átalakítással arra jutunk, hogy

$$\mathbf{m}^2=(|a|^2+|b|^2+|c|^2+|d|^2)^2-4(ad-bc)(a^*d^*-b^*c^*).$$

Mivel $|a|^2+|b|^2+|c|^2+|d|^2=1$ (éppen ezért gyötörtük ide bele), ez az $\mathbf{m}^2$ csak akkor lehet 1, ha az a, b, c és d számokból álló mátrixra $ad-bc=0$, azaz a determinánsa nulla, ez pedig éppen akkor van, ha ő diadikus szorzat, ami tiszta állapotot jelent.