Kvantummechanika gyakorlat
2. zárthelyi megoldásai

1. Határozd meg egy a oldalú kockába zárt részecske alap és első gerjesztett állapotainak energiakorrekcióit a következő perturbáció hatására:

$$W(x) = a^3 V_0 \delta(x - \frac{a}{4})\delta(y - \frac{a}{2})\delta(z - \frac{3a}{4})!$$

Megoldás:

Ismertek a dobozba zárt részecske sajátáálapotai és sajátértékei:

$$\begin{aligned}
\psi_{nlk}(x,y,z) &= \sqrt{\frac{2}{a}}^3 \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)\sin\left(\frac{l\pi}{a}y\right)\sin\left(\frac{k\pi}{a}z\right) \qquad n,l,k = 1,2,\ldots \\
E^{(0)}_{nlm} &= \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}\left(n^2 + l^2 + k^2\right)
\end{aligned}$$

A rendszer alapállapota a perturbáció előtt:

$$\begin{aligned}
\psi_0 = \psi_{111}(x,y,z) &= \sqrt{\frac{2}{a}}^3 \sin\left(\frac{\pi}{a}x\right)\sin\left(\frac{\pi}{a}y\right)\sin\left(\frac{\pi}{a}z\right) \\
E^{(0)}_{111} &= \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}3
\end{aligned}$$

A hozzá tartozó elsőrendű energiakorrekció:

$$\begin{aligned}
E^{(1)}_{111} &= \langle 111|\, W\, |111\rangle = \int_0^a \mathrm{d}x \int_0^a \mathrm{d}y \int_0^a \mathrm{d}z \frac{8}{a^3}\sin^2\left(\frac{\pi}{a}x\right)\sin^2\left(\frac{\pi}{a}y\right)\sin^2\left(\frac{\pi}{a}z\right) \times \\
&\quad \times a^3 V_0 \delta(x - \frac{a}{4})\delta(y - \frac{a}{2})\delta(z - \frac{3a}{4}) = \\
&= 8V_0 \sin^2\left(\frac{\pi}{a}\frac{a}{4}\right)\sin^2\left(\frac{\pi}{a}\frac{a}{2}\right)\sin^2\left(\frac{\pi}{a}\frac{3a}{4}\right) = 2V_0
\end{aligned}$$

A komplex konjugálással most nem kellett foglalkoznunk, mert valósak a hullámfügg-vények.

Az első gerjesztett állapot azt az állapotot jelöli, aminek energiája legközelebb van az alapállapotéhoz. Jelen esetben ez egy háromszorosan degenerált altér. Az altérbe tartozó perturbáció előtti hullámfüggvények:

$$\begin{aligned}
\psi_1 = \psi_{112}(x,y,z) &= \sqrt{\frac{2}{a}}^3 \sin\left(\frac{\pi}{a}x\right)\sin\left(\frac{\pi}{a}y\right)\sin\left(\frac{2\pi}{a}z\right) \\
\psi_2 = \psi_{121}(x,y,z) &= \sqrt{\frac{2}{a}}^3 \sin\left(\frac{\pi}{a}x\right)\sin\left(\frac{2\pi}{a}y\right)\sin\left(\frac{\pi}{a}z\right) \\
\psi_3 = \psi_{211}(x,y,z) &= \sqrt{\frac{2}{a}}^3 \sin\left(\frac{2\pi}{a}x\right)\sin\left(\frac{\pi}{a}y\right)\sin\left(\frac{\pi}{a}z\right)
\end{aligned}$$

a hozzájuk tartozó perturbálás előtti energia:

$$E^{(0)}_{112} = \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}6$$

Degenerált perturbációszámításhoz ki kell számolnunk a a perturbáló operátor mátrix-elemeit ezen az altéren,

$$W_{ij} = \langle i|\, W \,|j\rangle = \int_0^a \mathrm{d}x \int_0^a \mathrm{d}y \int_0^a \mathrm{d}z \psi_i(x,y,z)\, W(x,y,z)\, \psi_j(x,y,z)$$

$$\begin{aligned}
W_{11} &= 8V_0 \sin^2\left(\frac{\pi}{a}\frac{a}{4}\right)\sin^2\left(\frac{\pi}{a}\frac{a}{2}\right)\sin^2\left(\frac{2\pi}{a}\frac{3a}{4}\right) = 4V_0 \\
W_{22} &= 8V_0 \sin^2\left(\frac{\pi}{a}\frac{a}{4}\right)\sin^2\left(\frac{2\pi}{a}\frac{a}{2}\right)\sin^2\left(\frac{\pi}{a}\frac{3a}{4}\right) = 0 \\
W_{33} &= 8V_0 \sin^2\left(\frac{2\pi}{a}\frac{a}{4}\right)\sin^2\left(\frac{\pi}{a}\frac{a}{2}\right)\sin^2\left(\frac{\pi}{a}\frac{3a}{4}\right) = 4V_0 \\
W_{12} &= W_{21} = 8V_0 \sin^2\left(\frac{\pi}{a}\frac{a}{4}\right)\sin\left(\frac{2\pi}{a}\frac{a}{2}\right)\sin\left(\frac{\pi}{a}\frac{a}{2}\right)\sin\left(\frac{\pi}{a}\frac{3a}{4}\right)\sin\left(\frac{2\pi}{a}\frac{3a}{4}\right) = 0 \\
W_{13} &= W_{31} = 8V_0 \sin\left(\frac{\pi}{a}\frac{a}{4}\right)\sin\left(\frac{2\pi}{a}\frac{a}{4}\right)\sin^2\left(\frac{\pi}{a}\frac{a}{2}\right)\sin\left(\frac{\pi}{a}\frac{3a}{4}\right)\sin\left(\frac{2\pi}{a}\frac{3a}{4}\right) = -4V_0 \\
W_{23} &= W_{32} = 8V_0 \sin\left(\frac{\pi}{a}\frac{a}{4}\right)\sin\left(\frac{2\pi}{a}\frac{a}{4}\right)\sin\left(\frac{2\pi}{a}\frac{a}{2}\right)\sin\left(\frac{\pi}{a}\frac{a}{2}\right)\sin^2\left(\frac{\pi}{a}\frac{3a}{4}\right) = 0
\end{aligned}$$

$$W = \begin{pmatrix} 4V_0 & 0 & -4V_0 \\ 0 & 0 & 0 \\ -4V_0 & 0 & 4V_0 \end{pmatrix}$$

Ennek a mátrixnak könnyen meghatározhatók a sajátvektorai és sajátirányai, aminek határása a perturbált energiaszintek:

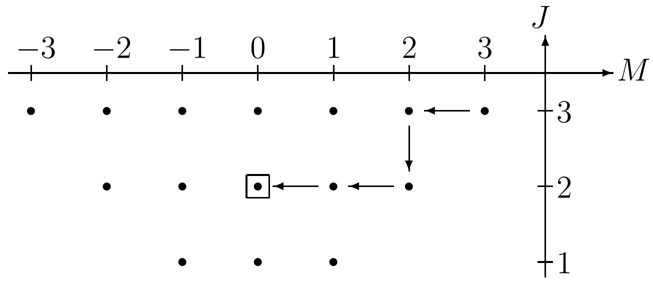
$$\begin{aligned}
\phi_1 &= \frac{\psi_1+\psi_3}{\sqrt{2}} \quad E_1 = \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}6 \\
\phi_2 &= \psi_2 \quad E_2 = \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}6 \\
\phi_3 &= \frac{\psi_1-\psi_3}{\sqrt{2}} \quad E_3 = \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}6 + 8V_0
\end{aligned}$$

2. Vizsgáljuk a $j_1 = 1$ és $j_2 = 2$ spinek szorzatából adódó rendszert. Legyen a rendszerünk olyan állapotban, hogy a teljes spine 2 és a spin z irányú vetülete 0. Milyen értéket vehet fel ilyenkor az 1. részecske spinjének z vetülete, és milyen valószínűségekkel? (10 pont)

Megoldás:

$$\mathcal{H}^{j_1=1} \otimes \mathcal{H}^{j_1=2} = \mathcal{H}^{j=0} \oplus \mathcal{H}^{j=1} \oplus \mathcal{H}^{j=2}$$

A sajátállapotokat jelelmző súlyábra:



A feladat alapján meghatározni kívánt állapot be van keretezve, és nyilak jelzik az utat, ahogyan a legegyszerűbben juthatunk el hozzá. A vízszintes nyilak $\hat{J}_-$ hattatást jelölnke, a függőleges nyíl pedig merőleges állítást.

A következőkben $|JM\rangle_\bullet$ fogja jelölni a teljes rendszer sajátállapotait a megfelelő sajátértékekkel

A kiindulási állapotot könnyű mghatározni:

$$\boxed{|33\rangle_\bullet = |11\rangle \otimes |22\rangle}$$

Erre hattatva $\hat{J}_-$-t:

$$\sqrt{6}\,|32\rangle_\bullet = \sqrt{2}\,|10\rangle \otimes |22\rangle + \sqrt{4}\,|11\rangle \otimes |21\rangle \Rightarrow \boxed{|32\rangle_\bullet = \sqrt{\frac{1}{3}}\,|10\rangle \otimes |22\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}}\,|11\rangle \otimes |21\rangle}$$

Erről látjuk, hogy normált állapot. A merőleges állítás könnyű ebben a kettő dimenziós altérben:

$$\boxed{|22\rangle_\bullet = \sqrt{\frac{2}{3}}\,|10\rangle \otimes |22\rangle - \sqrt{\frac{1}{3}}\,|11\rangle \otimes |21\rangle}$$

Ismét hattatva $\hat{J}_-$-t:

$$2\left|21\right\rangle_{\bullet}=\sqrt{\frac{2}{3}}\sqrt{2}\left|1-1\right\rangle\otimes\left|22\right\rangle+\sqrt{\frac{2}{3}}2\left|10\right\rangle\otimes\left|21\right\rangle-\sqrt{\frac{1}{3}}\sqrt{2}\left|10\right\rangle\otimes\left|21\right\rangle-\sqrt{\frac{1}{3}}\sqrt{6}\left|11\right\rangle\otimes\left|20\right\rangle$$

$$\Rightarrow \boxed{\left|21\right\rangle_{\bullet}=\sqrt{\frac{2}{6}}\left|1-1\right\rangle\otimes\left|22\right\rangle+\sqrt{\frac{1}{6}}\left|10\right\rangle\otimes\left|21\right\rangle-\sqrt{\frac{3}{6}}\left|11\right\rangle\otimes\left|20\right\rangle}$$

Innen már csak egyszer kell hattatnunk $\hat{J}_{-}$-t:

$$\sqrt{6}\left|20\right\rangle_{\bullet}=0+\sqrt{\frac{2}{6}}2\left|1-1\right\rangle\otimes\left|21\right\rangle+\sqrt{\frac{1}{6}}\sqrt{2}\left|1-1\right\rangle\otimes\left|21\right\rangle+\sqrt{\frac{1}{6}}\sqrt{6}\left|10\right\rangle\otimes\left|20\right\rangle-$$

$$-\sqrt{\frac{3}{6}}\sqrt{2}\left|10\right\rangle\otimes\left|20\right\rangle-\sqrt{\frac{3}{6}}\sqrt{6}\left|11\right\rangle\otimes\left|2-1\right\rangle=$$

$$\Rightarrow \boxed{\left|20\right\rangle_{\bullet}=\sqrt{\frac{1}{2}}\left|1-1\right\rangle\otimes\left|21\right\rangle-\sqrt{\frac{1}{2}}\left|11\right\rangle\otimes\left|2-1\right\rangle}$$

Ez is normált állapot, és leolvashatjuk, hogy az 1. részecske spinjének z komponense 1 és -1 értékeket vehet fel, és mindkettőt $\frac{1}{2}$ valószínűséggel.

3. Vizsgáljunk két feles spinből álló rendszert, aminek a következő a Hamilton-operátora:

$$\hat{H} = \hbar \frac{\left(\underline{\sigma}^{(1)}\underline{\sigma}^{(2)}\right) r^2 - 2\left(\underline{\sigma}^{(1)}\underline{r}\right)\left(\underline{\sigma}^{(2)}\underline{r}\right)}{r^5},$$

ahol $\underline{r} = (d, 0, 0)$ vektor. Határozzuk meg a rendszer energiasajátállapotait és energiasajátértékeit! (Figyelem, nem a szinglett-triplett bázis a megoldás!) (10 pont)

Megoldás:

Behelyettesítve az irányvektort, kapjuk a konkrét Hamilton-operátort:

$$\hat{H} = \frac{\hbar}{d^3}\left[-\sigma_x \otimes \sigma_x + \sigma_y \otimes \sigma_y + \sigma_z \otimes \sigma_z\right]$$

Az operátorok hatását könnyne kiszámolhatjuk a direktszorzat bázison:

$$\begin{array}{ccc}
\sigma_x\sigma_x \left|\uparrow\uparrow\right\rangle = \left|\downarrow\downarrow\right\rangle & \sigma_y\sigma_y \left|\uparrow\uparrow\right\rangle = -\left|\downarrow\downarrow\right\rangle & \sigma_z\sigma_z \left|\uparrow\uparrow\right\rangle = \left|\uparrow\uparrow\right\rangle \\
\sigma_x\sigma_x \left|\uparrow\downarrow\right\rangle = \left|\downarrow\uparrow\right\rangle & \sigma_y\sigma_y \left|\uparrow\downarrow\right\rangle = \left|\downarrow\uparrow\right\rangle & \sigma_z\sigma_z \left|\uparrow\downarrow\right\rangle = -\left|\uparrow\downarrow\right\rangle \\
\sigma_x\sigma_x \left|\downarrow\uparrow\right\rangle = \left|\uparrow\downarrow\right\rangle & \sigma_y\sigma_y \left|\downarrow\uparrow\right\rangle = \left|\uparrow\downarrow\right\rangle & \sigma_z\sigma_z \left|\downarrow\uparrow\right\rangle = -\left|\downarrow\uparrow\right\rangle \\
\sigma_x\sigma_x \left|\downarrow\downarrow\right\rangle = \left|\uparrow\uparrow\right\rangle & \sigma_y\sigma_y \left|\downarrow\downarrow\right\rangle = -\left|\uparrow\uparrow\right\rangle & \sigma_z\sigma_z \left|\downarrow\downarrow\right\rangle = \left|\downarrow\downarrow\right\rangle
\end{array}$$

Ezek alapján könnyen felírhatjuk $\hat{H}$-t a direktszorzat bázisban a szokásos bázissorrendet véve:

$$\hat{H} = \frac{\hbar}{d^3}\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & -2 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ -2 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Ahhoz, hogy megkapjuk a sajátértékeket és sajátvektorokat, diagonalizálnunk kell a mátrixot. Szerencsére csak az 1. és 4. vektor áltatl kifeszített altéren belül nem diagonálid a mátrix, ezért elég arra az eltérre szorítkoznunk.

A

$$\begin{pmatrix} 1 & -2 \\ -2 & 1 \end{pmatrix}$$

mátrix sajátértékei és sajátvektorai:

$$\begin{array}{cc}
\lambda_1 = -1 & v_1 = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \\
\lambda_1 = 3 & v_1 = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}
\end{array}$$

Ezek alapján a rendszer sajátállapotai és sajátenergiái:

$$\begin{array}{cc}
\left|1\right\rangle = \frac{\left|\uparrow\uparrow\right\rangle + \left|\downarrow\downarrow\right\rangle}{\sqrt{2}} & E_1 = -\frac{\hbar}{d^3} \\
\left|2\right\rangle = \left|\uparrow\downarrow\right\rangle & E_2 = -\frac{\hbar}{d^3} \\
\left|3\right\rangle = \left|\downarrow\uparrow\right\rangle & E_3 = -\frac{\hbar}{d^3} \\
\left|1\right\rangle = \frac{\left|\uparrow\uparrow\right\rangle - \left|\downarrow\downarrow\right\rangle}{\sqrt{2}} & E_4 = 3\frac{\hbar}{d^3}
\end{array}$$