Kvantummechanika ZH 2 A (2012.12.10.)

1. a) Tekintsük a következő $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1$ Hamilton operátorral rendelkező anharmonikus oszcillátort:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 \hat{x}^2 + \lambda \hat{x}\hat{p},$$

ahol jobb oldal utolsó tagját tekintsük $\hat{H}_1$ perturbációnak. Mekkora az n. energiaszint korrekciója első közelítésben? *[3 pont]*

Megoldás:
Tudjuk, hogy a hely és impulzus operátorok kifejezhetőek a léptető-operátorokkal:

$$\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\hat{a}^\dagger + \hat{a}), \qquad \hat{p} = i\sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}}(\hat{a}^\dagger - \hat{a}).$$

Ekkor a perturbáció:

$$\hat{H}_1 = \lambda\hat{x}\hat{p} = \lambda i\hbar\frac{1}{2}(\hat{a}^\dagger + \hat{a})(\hat{a}^\dagger - \hat{a}) =$$

$$= \lambda i\hbar\frac{1}{2}(\hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger - \hat{a}^\dagger\hat{a} + \hat{a}\hat{a}^\dagger - \hat{a}\hat{a}) \rightarrow \lambda i\hbar\frac{1}{2}(\hat{a}\hat{a}^\dagger - \hat{a}^\dagger\hat{a}) = \lambda i\hbar\frac{1}{2}$$

mivel csak azok a tagok adnak járulékot, melyekben ugyanannyi a felfele és lefele léptető operátorok száma, továbbá tudjuk, hogy $\left[\hat{a}, \hat{a}^\dagger\right] = 1$.
Ezzel meg is kaptuk az n. energiaszint korrekcióját: $\Delta E_n = \left(\Psi_n^{(0)}, \hat{H}_1\Psi_n^{(0)}\right) = \lambda i\hbar\frac{1}{2}$

b) Oldjuk meg az előző feladatot $\hat{H}_1 = \lambda_1\hat{a}\hat{a}\hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger\hat{a}\hat{a}^\dagger + \lambda_2\hat{a}\hat{a}^\dagger\hat{a}$ perturbáció esetén is! *[3 pont]*

Megoldás:
Tudjuk, hogy csak azok a tagok adnak járulékot, melyekben ugyanannyi a felfele és lefele léptető operátorok száma - így csak az első tag ad járulékot. Felhasználva a léptető operátorok hatását a sajátfüggvényen:

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

$$\Delta E_n = \left(\Psi_n^{(0)}, \hat{H}_1\Psi_n^{(0)}\right) = \lambda_1 (n+1)^2 (n+2)$$

2. Mi lesz a hidrogénatom teljes energiája az $n = 2, l = 1$ kvantumszámokkal jellemzett állapotaiban a perturbációszámítás szerint legalacsonyabb rendben, ha a szokásos Coulomb-potenciálon kívül additívan egy $H_I = C/r^2$ tag is megjelenik az energia kifejezésében? *[4 pont]*
(Megjegyzés: $u_{21} = (1/2a_0)^{3/2}\frac{1}{a_0\sqrt{3}}$.)

Megoldás:
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):

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

Az energia korrekciója első közelítésben:

$$\Delta E = \left(\Psi_{21m}, \frac{C}{r^2}\Psi_{21m}\right) = \int dV \Psi_{21m}^* \frac{C}{r^2}\Psi_{21m}.$$

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

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

A gömbfüggvényekre vett szögintegrál az ortonormáltság miatt éppen 1, a radiális integrál pedig az $\tilde{r} = r/a_0$ új változó bevezetésével végezhető el, felhasználva, hogy $\int_0^\infty x^n e^{-x} dx = n!$:

$$\Delta E = \frac{C}{24a_0^2} \int_0^\infty d\tilde{r} \tilde{r}^2 e^{-\tilde{r}} = \frac{C}{24a_0^2} 2! = \frac{C}{12a_0^2}$$

3. Adjuk meg az összes állapotát annak a hidrogénatomnak, melyben L^2-re $12\hbar^2$-t, L_z-re $\hbar$-t mérhetünk, és melyben az atom legfeljebb az ötödik gerjesztett állapotában van! *[4 pont]*

Megoldás:
Mivel $L^2 = \hbar^2 l(l+1) = 12\hbar^2$, ezért $l = 3$. Valamint $L_z = m\hbar = \hbar$, ezért $m = 1$. A feladatból pedig tudjuk, hogy $n \leqq 5$. Így a lehetséges hullámfüggvények:

$$\psi_{431}(r, \theta, \varphi) = r^3 u_{43}(r) e^{-\frac{r}{4a_0}} Y_3^1(\theta, \varphi)$$
$$\psi_{531}(r, \theta, \varphi) = r^3 u_{53}(r) e^{-\frac{r}{5a_0}} Y_3^1(\theta, \varphi)$$

A megoldás ezek a hullámfüggvények, illetve ezek tetszőleges lineárkombinációja.

4. Milyen értékeket mérhetünk a perdület hossznégyzetére és a z-komponensére a

$$\psi(r, \theta, \varphi) = R(r) \cdot \left(2\sin\theta\cos\varphi - \frac{1}{2}\sin^2\theta + 2\cos\theta + 42\right)$$

fizikai állapotban? *[6 pont]*

Megoldás:

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

$$\psi(r,\theta,\varphi) = R(r)\cdot\left[2\sin\theta\cos\varphi - \frac{1}{2}\sin^2\theta + 2\cos\theta + 42\right] =$$

$$= R(r)\cdot\left[\sin\theta\cdot e^{2i\varphi} + \sin\theta\cdot e^{-2i\varphi} + \frac{1}{2}\cos^2\theta - \frac{1}{2} + 2\cos\theta + 42\right].$$

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

$$\psi(r,\theta,\varphi) = R(r)\cdot\left[A\cdot Y_1^1 + B\cdot Y_1^{-1} + C\cdot Y_2^0 + D\cdot Y_1^0 + E\cdot Y_0^0\right].$$

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

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

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

Kvantummechanika ZH 2 B (2012.12.10.)

1. a) Tekintsük a következő $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1$ Hamilton operátorral rendelkező anharmonikus oszcillátort:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2 + \lambda\hat{p}\hat{x},$$

ahol jobb oldal utolsó tagját tekintsük $\hat{H}_1$ perturbációnak. Mekkora az n. energiaszint korrekciója első közelítésben? *[3 pont]*

Megoldás:
Tudjuk, hogy a hely és impulzus operátorok kifejezhetőek a léptető-operátorokkal:

$$\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\hat{a}^\dagger + \hat{a}), \qquad \hat{p} = i\sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}}(\hat{a}^\dagger - \hat{a}).$$

Ekkor a perturbáció:

$$\hat{H}_1 = \lambda\hat{p}\hat{x} = \lambda i\hbar\frac{1}{2}(\hat{a}^\dagger - \hat{a})(\hat{a}^\dagger + \hat{a}) =$$

$$= \lambda i\hbar\frac{1}{2}(\hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a} - \hat{a}\hat{a}^\dagger - \hat{a}\hat{a}) \to \lambda i\hbar\frac{1}{2}(\hat{a}^\dagger\hat{a} - \hat{a}\hat{a}^\dagger) = -\lambda i\hbar\frac{1}{2}$$

mivel csak azok a tagok adnak járulékot, melyekben ugyanannyi a felfele és lefele léptető operátorok száma, tovább tudjuk, hogy $\left[\hat{a}, \hat{a}^\dagger\right] = 1$.
Ezzel meg is kaptuk az n. energiaszint korrekcióját: $\Delta E_n = \left(\Psi_n^{(0)}, \hat{H}_1\Psi_n^{(0)}\right) = -\lambda i\hbar\frac{1}{2}$

b) Oldjuk meg az előző feladatot $\hat{H}_1 = \lambda_1\hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger\hat{a}\hat{a}\hat{a}^\dagger\hat{a} + \lambda_2\hat{a}^\dagger\hat{a}\hat{a}^\dagger$ perturbáció esetén is! *[3 pont]*

Megoldás:
Tudjuk, hogy csak azok a tagok adnak járulékot, melyekben ugyanannyi a felfele és lefele léptető operátorok száma - így csak az első tag ad járulékot. Felhasználva a léptető operátorok hatását a sajátfüggvényen:

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

$$\Delta E_n = \left(\Psi_n^{(0)}, \hat{H}_1\Psi_n^{(0)}\right) = \lambda_1\left(n^3 - n^2\right)$$

2. Mi lesz a hidrogénatom teljes energiája az $n = 2, l = 1$ kvantumszámokkal jellemzett állapotaiban a perturbációszámítás szerint legalacsonyabb rendben, ha a szokásos Coulomb-potenciálon kívül additívan egy $H_I = C/r^2$ tag is megjelenik az energia kifejezésében? *[4 pont]*
(Megjegyzés: $u_{21} = (1/2a_0)^{3/2}\frac{1}{a_0\sqrt{3}}$.)

Megoldás:
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):

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

Az energia korrekciója első közelítésben:

$$\Delta E = \left(\Psi_{21m}, \frac{C}{r^2}\Psi_{21m}\right) = \int dV \Psi_{21m}^* \frac{C}{r^2}\Psi_{21m}.$$

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

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

A gömbfüggvényekre vett szögintegrál az ortonormáltság miatt éppen 1, a radiális integrál pedig az $\tilde{r} = r/a_0$ új változó bevezetésével végezhető el, felhasználva, hogy $\int_0^\infty x^n e^{-x} dx = n!$:

$$\Delta E = \frac{C}{24a_0^2} \int_0^\infty d\tilde{r} \tilde{r}^2 e^{-\tilde{r}} = \frac{C}{24a_0^2} 2! = \frac{C}{12a_0^2}$$

3. Adjuk meg az összes állapotát annak a hidrogénatomnak, melyben L^2-re $20\hbar^2$-t, L_z-re 0-t mérhetünk, és melyben az atom legfeljebb a hatodik gerjesztett állapotában van! *[4 pont]*

Megoldás:
Mivel $L^2 = \hbar^2 l(l+1) = 20\hbar^2$, ezért $l = 4$. Valamint $L_z = m\hbar = 0$, ezért $m = 0$. A feladatból pedig tudjuk, hogy $n \leqq 6$. Így a lehetséges hullámfüggvények:

$$\psi_{540}(r, \theta, \varphi) = r^4 u_{54}(r) e^{-\frac{r}{5a_0}} Y_4^0(\theta, \varphi)$$
$$\psi_{640}(r, \theta, \varphi) = r^4 u_{64}(r) e^{-\frac{r}{6a_0}} Y_4^0(\theta, \varphi)$$

A megoldás ezek a hullámfüggvények, illetve ezek tetszőleges lineárkombinációja.

4. Milyen értékeket mérhetünk a perdület hossznégyzetére és a z-komponensére a

$$\psi(r, \theta, \varphi) = R(r) \cdot \left(2\cos\theta - \frac{1}{2}\sin^2\theta + 2\sin\theta\cos\varphi + 42\right)$$

fizikai állapotban? *[6 pont]*

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

$$\psi(r, \theta, \varphi) = R(r) \cdot \left[2\sin\theta\cos\varphi - \frac{1}{2}\sin^2\theta + 2\cos\theta + 42\right] =$$

$$= R(r) \cdot \left[\sin\theta \cdot e^{2i\varphi} + \sin\theta \cdot e^{-2i\varphi} + \frac{1}{2}\cos^2\theta - \frac{1}{2} + 2\cos\theta + 42 \right].$$

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

$$\psi(r,\theta,\varphi) = R(r) \cdot \left[A \cdot Y_1^1 + B \cdot Y_1^{-1} + C \cdot Y_2^0 + D \cdot Y_1^0 + E \cdot Y_0^0 \right].$$

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

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

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