Kvantummechanika gyakorlat 2 **1. ZH** 2018. október 12.

Név: Neptun kód:

---

1. FELADAT **20 pont**

Tekintsünk egy harmonikus oszcillátort:

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega x^2 = \hbar\omega\left(a^+ a + \frac{1}{2}\right) ,$$

ahol $a = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{x}{x_0} + i\frac{p}{p_0}\right)$ a lefelé léptető és $a^+ = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{x}{x_0} - i\frac{p}{p_0}\right)$ a felfelé léptető operátor ($x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$, $p_0 = \sqrt{m\omega\hbar}$).

a) Mutassuk meg, hogy Heisenberg képben ($t_0 = 0$) a léptető operátorok:

$$a_H(t) = e^{-i\omega t}a \quad \text{és} \quad a_H^+(t) = e^{i\omega t}a^+ \; !$$

Segítség: A gyakorlathoz hasonlóan megoldhatjuk az $a_H(t)$ operátor differenciálegyenletét vagy használhatjuk a Baker–Campbell–Hausdorff formulát: $e^L A e^{-L} = A + [L,A] + \frac{1}{2!}[L,[L,A]] + \frac{1}{3!}[L,[L,[L,A]]]\ldots$

b) Legyen a rendszer $t = 0$ időpillanatban az $|\alpha\rangle$ koherens állapotban, amely az a lefelé léptető operátor sajátállapota:

$$a|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle \;\; (\alpha \in \mathbb{C}) \; .$$

Határozzuk meg a Heisenberg képben az x operátor várhatóértékének az időfüggését!

Megoldás:

a) Használjuk Heisenberg képben az operátorok mozgásegyenletét és az ismert $[H,a] = -\hbar\omega a$ összefüggést:

$$\frac{da_H(t)}{dt} = \frac{i}{\hbar}[H, a_H(t)] = \frac{i}{\hbar}e^{\frac{i}{\hbar}Ht}[H,a]\,e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}$$
$$= -i\omega\, e^{\frac{i}{\hbar}Ht}ae^{-\frac{i}{\hbar}Ht} = -i\omega a_H(t)$$

A megoldást kereshetjük az

$$a_H(t) = f(t)\,a$$

alakban, ahol $f(t)$ egy komplex értékű függvény és $f(0) = 1$. Ekkor

$$\frac{df(t)}{dt} = -i\omega f(t) \rightarrow f(t) = e^{-i\omega t}$$

tehát

$$a_H(t) = e^{-i\omega t}a\,.$$

Hasonló a bizonyítás a felfelé léptető operátor esetére is, illetve felhasználhatjuk, hogy a_H^+ az a_H operátor adjungáltja.

Másik lehetőségként használhatjuk a Baker-Campbell-Hausdorff kifejtést:

$$a_H = e^{\frac{i}{\hbar}Ht}ae^{-\frac{i}{\hbar}Ht} = a + \frac{i}{\hbar}t[H,a] + \frac{1}{2!}\left(\frac{i}{\hbar}t\right)^2[H,[H,a]] + \frac{1}{3!}\left(\frac{i}{\hbar}t\right)^3[H,[H,[H,a]]]\ldots$$

A $[H, a] = -\hbar\omega a$ felcserélési relációt alkalmazva:

$$\begin{aligned} a_H &= e^{\frac{i}{\hbar}Ht} a e^{-\frac{i}{\hbar}Ht} = a - i\omega t\, a + (-i\omega t)^2 \frac{1}{2!} a + (-i\omega t)^3 \frac{1}{3!} a \, \ldots \\ &= (1 - i\omega t \, + \frac{(-i\omega t)^2}{2!} + \frac{(-i\omega t)^3}{3!} \, \ldots) \, a = e^{-i\omega t} a \end{aligned}$$

b) Írjuk fel az x operátort a léptető operátorok segítségével:

$$x = \frac{x_0}{\sqrt{2}}(a + a^+)$$

A várhatóérték Heisenberg képben:

$$\langle\alpha| x_H(t) |\alpha\rangle = \frac{x_0}{\sqrt{2}} \langle\alpha| a_H(t) + a_H^+(t) |\alpha\rangle = \frac{x_0}{\sqrt{2}} \langle\alpha| (e^{-i\omega t} a + e^{i\omega t} a^+) |\alpha\rangle = \frac{x_0}{\sqrt{2}} (e^{-i\omega t}\alpha + e^{i\omega t}\alpha^*)$$

2. FELADAT **20 pont**

A hidrogénatom elektronja a $2p$ alhéjon ($n = 2$, $\ell = 1$) a

$$\psi(\vec{r}) = \sqrt{\frac{1}{2}} P_{21}(r) \left(|j = \frac{1}{2}, m_j = \frac{1}{2}\rangle + |j = \frac{1}{2}, m_j = -\frac{1}{2}\rangle \right)$$

állapotban tartózkodik, ahol j és m_j a $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$ teljes impulzusmomentum operátor kvantumszámai ($J^2|j\, m_j\rangle = \hbar^2 j(j+1)|j\, m_j\rangle$, $J_z|j\, m_j\rangle = \hbar m_j|j\, m_j\rangle$) és $P_{21}(r)$ a radiális hullámfüggvény. Számítsa ki ebben az állapotban az L_z operátor várhatóértékét és szórását!

Megoldás:

A $|j = \frac{1}{2}, m_j = \pm\frac{1}{2}\rangle$ állapotok meghatározásához a $|j = \frac{3}{2}, m_j = \frac{3}{2}\rangle = |11\rangle\, |\frac{1}{2}\frac{1}{2}\rangle$ állapotból indulunk ki, ahol $|11\rangle$ az L^2 és L_z operátorok, míg $|\frac{1}{2}\frac{1}{2}\rangle$ az S^2 és S_z operátorok közös normált sajátvektorai. Lefelé léptetéssel nyerjük a többi $|j = \frac{3}{2}, m_j\rangle$ sajátvektort:

$$J_-|\frac{3}{2}\frac{3}{2}\rangle = \sqrt{\frac{3}{2}\frac{5}{2} - \frac{3}{2}\frac{1}{2}}|\frac{3}{2}\frac{1}{2}\rangle = \sqrt{3}|\frac{3}{2}\frac{1}{2}\rangle$$

$$(L_- + S_-)|11\rangle|\frac{1}{2}\frac{1}{2}\rangle = \sqrt{1\cdot 2 - 1\cdot 0}\,|10\rangle|\frac{1}{2}\frac{1}{2}\rangle + \sqrt{\frac{1}{2}\frac{3}{2} - \frac{1}{2}\left(-\frac{1}{2}\right)}\,|11\rangle|\frac{1}{2} - \frac{1}{2}\rangle$$

$$= \sqrt{2}\,|10\rangle|\frac{1}{2}\frac{1}{2}\rangle + |11\rangle|\frac{1}{2} - \frac{1}{2}\rangle$$

$$\Downarrow$$

$$|\frac{3}{2}\frac{1}{2}\rangle = \sqrt{\frac{2}{3}}\,|10\rangle|\frac{1}{2}\frac{1}{2}\rangle + \sqrt{\frac{1}{3}}\,|11\rangle|\frac{1}{2} - \frac{1}{2}\rangle$$

$$J_-|\frac{3}{2}\frac{1}{2}\rangle = \sqrt{\frac{3}{2}\frac{5}{2} - \frac{1}{2}\left(-\frac{1}{2}\right)}|\frac{3}{2} - \frac{1}{2}\rangle = 2|\frac{3}{2} - \frac{1}{2}\rangle$$

$$(L_- + S_-)|10\rangle|\frac{1}{2}\frac{1}{2}\rangle = \sqrt{1\cdot 2 - 0\cdot(-1)}\,|1 - 1\rangle|\frac{1}{2}\frac{1}{2}\rangle + \sqrt{\frac{1}{2}\frac{3}{2} - \frac{1}{2}\left(-\frac{1}{2}\right)}\,|10\rangle|\frac{1}{2} - \frac{1}{2}\rangle$$

$$= \sqrt{2}\,|1 - 1\rangle|\frac{1}{2}\frac{1}{2}\rangle + |10\rangle|\frac{1}{2} - \frac{1}{2}\rangle$$

$$(L_- + S_-)|11\rangle|\frac{1}{2} - \frac{1}{2}\rangle = \sqrt{2}\,|10\rangle|\frac{1}{2} - \frac{1}{2}\rangle$$

$$(L_- + S_-)\left(\sqrt{\frac{2}{3}}\,|10\rangle|\frac{1}{2}\frac{1}{2}\rangle + \sqrt{\frac{1}{3}}\,|11\rangle|\frac{1}{2} - \frac{1}{2}\rangle\right) = \frac{2}{\sqrt{3}}\,|1 - 1\rangle|\frac{1}{2}\frac{1}{2}\rangle + 2\sqrt{\frac{2}{3}}\,|10\rangle|\frac{1}{2} - \frac{1}{2}\rangle$$

$$\Downarrow$$

$$|\frac{3}{2} - \frac{1}{2}\rangle = \sqrt{\frac{2}{3}}\,|10\rangle|\frac{1}{2} - \frac{1}{2}\rangle + \sqrt{\frac{1}{3}}\,|1 - 1\rangle|\frac{1}{2}\frac{1}{2}\rangle$$

és

$$J_-|\frac{3}{2} - \frac{1}{2}\rangle = \sqrt{\frac{3}{2}\frac{5}{2} - \left(-\frac{1}{2}\right)\left(-\frac{3}{2}\right)}|\frac{3}{2} - \frac{3}{2}\rangle = \sqrt{3}|\frac{3}{2} - \frac{3}{2}\rangle$$

$$(L_- + S_-)|10\rangle|\frac{1}{2} - \frac{1}{2}\rangle = \sqrt{2}\,|1 - 1\rangle|\frac{1}{2} - \frac{1}{2}\rangle$$

$$(L_- + S_-)|1 - 1\rangle|\frac{1}{2}\frac{1}{2}\rangle = |1 - 1\rangle|\frac{1}{2} - \frac{1}{2}\rangle$$

$$(L_- + S_-)\left(\sqrt{\frac{2}{3}}\,|10\rangle|\frac{1}{2} - \frac{1}{2}\rangle + \sqrt{\frac{1}{3}}\,|1 - 1\rangle|\frac{1}{2}\frac{1}{2}\rangle\right) = \sqrt{3}\,|1 - 1\rangle|\frac{1}{2} - \frac{1}{2}\rangle$$

$$\Downarrow$$

$$|\frac{3}{2}-\frac{3}{2}\rangle = |1-1\rangle\,|\frac{1}{2}-\frac{1}{2}\rangle$$

bár ez utóbbi sajátvektorra nem lesz szükségünk.
A keresett $|\frac{1}{2},\pm\frac{1}{2}\rangle$ állapotok ortogonálisak a fenti $|\frac{3}{2},\pm\frac{1}{2}\rangle$ állapotokra. ezért:

$$|\frac{1}{2}\frac{1}{2}\rangle = \sqrt{\frac{1}{3}}\,|10\rangle\,|\frac{1}{2}\frac{1}{2}\rangle - \sqrt{\frac{2}{3}}\,|11\rangle\,|\frac{1}{2}-\frac{1}{2}\rangle$$

és

$$|\frac{1}{2}-\frac{1}{2}\rangle = \sqrt{\frac{1}{3}}\,|10\rangle\,|\frac{1}{2}-\frac{1}{2}\rangle - \sqrt{\frac{2}{3}}\,|1-1\rangle\,|\frac{1}{2}\frac{1}{2}\rangle$$

A hullámfüggvény tehát:

$$\begin{aligned}|\psi\rangle &= \sqrt{\frac{1}{2}}P_{21}\left(r\right)\left(|\frac{1}{2}\frac{1}{2}\rangle + |\frac{1}{2}-\frac{1}{2}\rangle\right)\\ &= P_{21}\left(r\right)\left(\sqrt{\frac{1}{6}}\,|10\rangle\,|\frac{1}{2}\frac{1}{2}\rangle - \sqrt{\frac{1}{3}}\,|11\rangle\,|\frac{1}{2}-\frac{1}{2}\rangle + \sqrt{\frac{1}{6}}\,|10\rangle\,|\frac{1}{2}-\frac{1}{2}\rangle - \sqrt{\frac{1}{3}}\,|1-1\rangle\,|\frac{1}{2}\frac{1}{2}\rangle\right)\end{aligned}$$

Az L_z operátor várhatóértékének számításánál a normált radiális hullámfüggvénnyel nem kell törödnünk, valamint segítségünkre van az, hogy $|\psi\rangle$ hullámfüggvény négy ortonormált állapot szuperpozíciója, melyek mindegyike az L_z operátor sajátvektora:

$$\begin{aligned}\langle\psi|L_z|\psi\rangle &= \frac{1}{3}\langle 11|L_z|11\rangle + \frac{1}{3}\langle 1-1|L_z|1-1\rangle\\ &= \frac{1}{3}\left(\hbar-\hbar\right) = 0\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\langle\psi|L_z^2|\psi\rangle &= \frac{1}{3}\langle 11|L_z^2|11\rangle + \frac{1}{3}\langle 1-1|L_z^2|1-1\rangle\\ &= \frac{1}{3}\left(\hbar^2+\hbar^2\right) = \frac{2}{3}\hbar^2\end{aligned}$$

$$\Downarrow$$

$$\Delta L_z = \sqrt{\frac{2}{3}}\hbar$$

3. FELADAT **20 pont**

Számítsa ki Born közelítésben a differenciális hatáskeresztmetszetet az alábbi potenciálra:

$$V(\overrightarrow{r}) = V_0 \, e^{-\lambda r} \quad !$$

b) Mi a teljes hatáskeresztmetszet ebben a közelítésben? Teljesül-e az optikai tétel?

c) Mekkora a teljes hatáskeresztmetszet $k \ll \lambda$ határesetben, ahol k az elasztikusan szóródó részecske hullámszáma?

Segítség: A szórási amplitúdó gömbszimmetrikus potenciálra $f(q) = -\frac{2m}{q\hbar^2}\int_0^\infty dr' \, r' V(r') \sin qr'$, ahol $q = 2k \sin\frac{\vartheta}{2}$, valamint

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

Megoldás:

A feladatban megadott potenciált behelyettesítve:

$$f(q) = -\frac{2mV_0}{q\hbar^2}\int_0^\infty dr' \, r' e^{-\lambda r'} \sin qr'$$

A szinusz függvény felbontásával:

$$\begin{aligned} f(q) &= -\frac{mV_0}{iq\hbar^2}\int_0^\infty dr' \, r' e^{-\lambda r'} \left(e^{iqr'} - e^{-iqr'}\right) \\ &= -\frac{mV_0}{iq\hbar^2}\left(\int_0^\infty dr' \, r' e^{-(\lambda - iq)r'} - \int_0^\infty dr' \, r' e^{-(\lambda+iq)r'}\right) \end{aligned}$$

A fenti integrálokat parciális integrálással számíthatjuk ki:

$$\int_0^\infty dr' \, r' e^{-zr'} = \left[-\frac{r'}{z} e^{-zr'}\right]_0^\infty + \frac{1}{z}\int_0^\infty dr' e^{-zr'} = -\frac{1}{z^2}\left[e^{-zr}\right]_0^\infty = \frac{1}{z^2}$$

ahol felhasználtuk, hogy $\mathrm{Im}\, z > 0$. Innen

$$\begin{aligned} f(q) &= -\frac{mV_0}{iq\hbar^2}\left(\frac{1}{(\lambda - iq)^2} - \frac{1}{(\lambda + iq)^2}\right) \\ &= -\frac{mV_0}{iq\hbar^2}\left(\frac{1}{\lambda - iq} - \frac{1}{\lambda + iq}\right)\left(\frac{1}{\lambda - iq} + \frac{1}{\lambda + iq}\right) \\ &= -\frac{mV_0}{iq\hbar^2}\frac{2iq}{\lambda^2 + q^2}\frac{2\lambda}{\lambda^2 + q^2} = -\frac{4mV_0\lambda}{\hbar^2}\frac{1}{(\lambda^2 + q^2)^2} \end{aligned}$$

A differenciális hatáskeresztmetszet:

$$\sigma(q) = |f(q)|^2 = \frac{16m^2V_0^2\lambda^2}{\hbar^4}\frac{1}{(\lambda^2 + q^2)^4}$$

illetve a polárszög függvényében:

$$\sigma(\vartheta) = \frac{16m^2\lambda^2V_0^2}{\hbar^4\left(\lambda^2 + 2k^2 - 2k^2\cos\vartheta\right)^4}$$

A teljes hatáskeresztmetszet:

$$\sigma_{tot} = 2\pi\int_0^\pi \sigma(\vartheta)\sin\vartheta d\vartheta$$

$$\begin{aligned}
\sigma_{tot} &= \frac{32\pi m^2\lambda^2 V_0^2}{\hbar^4}\int_{-1}^{1}\frac{dx}{\left(\lambda^2+2k^2-2k^2x\right)^4}\\
&= \frac{32\pi m^2\lambda^2 V_0^2}{\hbar^4}\frac{1}{6k^2}\left[\frac{1}{\left(\lambda^2+2k^2-2k^2x\right)^3}\right]_{-1}^{1}\\
&= \frac{16\pi m^2\lambda^2 V_0^2}{3\hbar^4k^2}\left(\frac{1}{\lambda^6}-\frac{1}{\left(\lambda^2+4k^2\right)^3}\right)
\end{aligned}$$

A $\sigma_{tot}=\frac{4\pi}{k}\,\mathrm{Im}\, f\left(\vartheta=0\right)$ optikai tétel nyilvánvalóan nem teljesül, mivel a Born közelítésben gömbszimmetrikus potenciálra $f\left(\vartheta\right)$ valós.

A $\lambda \gg k$ határeset számításához célszerű az alábbi átalakításokat elvégezni:

$$\begin{aligned}
\sigma_{tot} &= \frac{16\pi m^2 V_0^2}{3\hbar^4k^2\lambda^4}\left(1-\frac{1}{\left(1+4\left(k/\lambda\right)^2\right)^3}\right)\\
&= \frac{16\pi m^2 V_0^2}{3\hbar^4k^2\lambda^4}\frac{64\left(k/\lambda\right)^6+48\left(k/\lambda\right)^4+12\left(k/\lambda\right)^2}{\left(1+4\left(k/\lambda\right)^2\right)^3}\\
&= \frac{64\pi m^2 V_0^2}{3\hbar^4\lambda^6}\frac{16\left(k/\lambda\right)^4+12\left(k/\lambda\right)^2+3}{\left(1+4\left(k/\lambda\right)^2\right)^3}
\end{aligned}$$

amiből:

$$\lim_{k/\lambda\to 0}\sigma_{tot}=\frac{64\pi m^2 V_0^2}{\hbar^4\lambda^6}$$