Kvantummechanika 2 gyakorlat **2. ZH** 2018. november 28.

Név: Neptun kód:

---

1. FELADAT **20 pont**

Egy y tengely mentén oszcillátorpotenciálban mozgó töltött reszecskét z-irányú homogén mágneses és y irányú homogén elektromos térbe helyezünk:

$$H = \frac{(\vec{p} - q\vec{A})^2}{2m} + \frac{m\omega_0^2}{2}y^2 - q\mathcal{E}y\ .$$

a) $\vec{A} = (-By, 0, 0)$ aszimmetrikus mértéket használva az impulzus operátor mely komponensei cserélhetőek fel a Hamilton-operátorral? Milyen alakban keressük a sajátállapotokat?

b) Határozzuk meg a rendszer energiaspektrumát!

Megoldás:

a)

$$H = \frac{(p_x + qBy)^2}{2m} + \frac{p_z^2}{2m} + \frac{p_y^2}{2m} + \frac{m\omega_0^2}{2}y^2 - q\mathcal{E}y$$

$$[H, p_x] = [H, p_z] = 0$$

$$\psi(x, y, z) = e^{ik_x x} e^{ik_z z} \varphi(y)$$

b)

$$H = \frac{(-i\hbar\partial_x + qBy)^2}{2m} - \frac{\hbar^2\partial_z^2}{2m} - \frac{\hbar^2\partial_y^2}{2m} + \frac{m\omega_0^2}{2}y^2 - q\mathcal{E}y$$

$$\left(\frac{(\hbar k_x + qBy)^2}{2m} + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} - \frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dy^2} + \frac{m\omega_0^2}{2}y^2 - q\mathcal{E}y\right)\varphi(y) = E\varphi(y)$$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dy^2} + \left(\frac{q^2B^2}{2m} + \frac{m\omega_0^2}{2}\right)y^2 + \left(\frac{\hbar k_x qB}{m} - q\mathcal{E}\right)y\right)\varphi(y) = E'\varphi(y)$$

$$E' = E - \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m} - \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m}$$

$$\left(\frac{q^2B^2}{2m} + \frac{m\omega_0^2}{2}\right)y^2 + \left(\frac{\hbar k_x qB}{m} - q\mathcal{E}\right)y = \frac{m\omega^2}{2}y^2 - q\mathcal{E}'y$$

$$= \frac{m\omega^2}{2}(y - y_0)^2 - \varepsilon$$

$$\frac{m\omega^2}{2} = \frac{B^2}{2m} + \frac{m\omega_0^2}{2} \to \omega = \sqrt{\omega_0^2 + \frac{q^2B^2}{m^2}}$$

$$\mathcal{E}' = \mathcal{E} - \frac{\hbar k_x B}{m}$$

$$y_0 = \frac{q\mathcal{E}'}{m\omega^2}$$

$$\varepsilon = \frac{m\omega^2 y_0^2}{2} = \frac{q^2\mathcal{E}'^2}{2m\omega^2} = \frac{q^2}{2m\omega^2}\left(\mathcal{E} - \frac{\hbar k_x B}{m}\right)^2$$

$$= \frac{q^2\left(\mathcal{E} - \frac{\hbar k_x B}{m}\right)^2}{4\left(\frac{B^2}{2m} + \frac{m\omega_0^2}{2}\right)}$$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dy^2}+\frac{m\omega^2}{2}\left(y-y_0\right)^2\right)\varphi\left(y\right)=\left(E'+\varepsilon\right)\varphi\left(y\right)$$

$$\tilde{y}=y-y_0$$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{d\tilde{y}^2}+\frac{m\omega^2}{2}\tilde{y}^2\right)\varphi\left(\tilde{y}\right)=\left(E'+\varepsilon\right)\varphi\left(\tilde{y}\right)$$

$$E'+\varepsilon=\hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)$$

$$E=\hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)+\frac{\hbar^2k_x^2}{2m}+\frac{\hbar^2k_z^2}{2m}+\frac{q^2\left(\mathcal{E}-\frac{\hbar k_xB}{m}\right)^2}{4\left(\frac{B^2}{2m}+\frac{m\omega_0^2}{2}\right)}$$

2. FELADAT **(15 pont)**

Elfelejtettük, hogy a hullámfüggvény $\psi' = \psi e^{iC\Lambda}$ alakú mértéktranszformációjában (Λ a mérték-függvény) mi a C konstans értéke. Határozzuk meg a C konstanst úgy, hogy a

$$\vec{j} = \frac{\hbar}{2mi}\left(\psi^*\vec{\nabla}\psi - \psi\vec{\nabla}\psi^*\right) - \frac{q}{m}\vec{A}\psi^*\psi$$

valószínűségi áramsűrűség invariáns legyen a mértéktranszformációra!

Megoldás:

$$C \in \mathbb{R}$$

$$\begin{aligned}
\vec{j}' &= \frac{\hbar}{2mi}\left(\psi'^*\vec{\nabla}\psi' - \psi'\vec{\nabla}\psi'^*\right) - \frac{q}{m}\left(\vec{A} + \vec{\nabla}\Lambda\right)\psi'^*\psi' \\
&= \frac{\hbar}{2mi}\left(\psi^*\vec{\nabla}\psi - \psi\vec{\nabla}\psi^*\right) + \frac{\hbar}{2mi}\left(2iC\right)\psi^*\psi - \frac{q}{m}\left(\vec{A} + \vec{\nabla}\Lambda\right)\psi^*\psi \\
&= \vec{j} + \left(\frac{\hbar C}{m} - \frac{q}{m}\right)\psi^*\psi
\end{aligned}$$

$$C = \frac{q}{\hbar} \rightarrow \psi' = \psi e^{i\frac{q}{\hbar}\Lambda}$$

3. FELADAT **(25 pont)**

A hidrogénatom spektrumának finomszerkezetéért a spin-pálya kölcsönhatás a felelős, amelyet egy $H_{\mathrm{sp}} = \lambda \vec{L}\,\vec{S}$ taggal írhatunk le a Hamilton-operátorban, ahol λ konstans.

a) Bizonyítsa be, hogy a $\vec{J} = \vec{L}+\vec{S}$ teljes impulzusmomentum operátor komponensei felcserélhetők a Hamilton-operátorral!

b) Hogyan hasadnak fel a második főhéj ($n = 2$) állapotai a spin-pálya kölcsönhatás miatt a perturbációszámítás első rendjében? Adja meg az energiaszintek felhasadásának mértékeit is!

Megoldás:

a)

$$H = \underbrace{\frac{p^2}{2m} + V\left(r\right)}_{H_0} + \lambda \vec{L}\,\vec{S}$$

$$[H, L_i] = [H_0, L_i] + [\lambda \vec{L}\,\vec{S}, L_i]$$

$$[H_0, L_i] = 0$$

$$\begin{aligned}[\lambda \vec{L}\,\vec{S}, L_i] &= \lambda\,[L_j S_j, L_i] = \lambda\,[L_j, L_i]\,S_j + \lambda L_j \underbrace{[S_j, L_i]}_{=0} \\ &= \lambda \varepsilon_{jik} L_k S_j = \lambda(\vec{L} \times \vec{S})_i\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}[\lambda \vec{L}\,\vec{S}, S_i] &= \lambda\,[L_j S_j, S_i] = \lambda \underbrace{[L_j, S_i]}_{=0} S_j + \lambda L_j\,[S_j, S_i] \\ &= \lambda \varepsilon_{jik} L_j S_k = -\lambda \varepsilon_{ijk} L_j S_k = -\lambda(\vec{L} \times \vec{S})_i \\ [\lambda \vec{L}\,\vec{S}, J_i] &= [\lambda \vec{L}\,\vec{S}, L_i + S_i] = 0\end{aligned}$$

b)

$$H_0 \psi_{n,l,m_l,m_s} = E_n^0 \psi_{n,l,m_l,m_s}$$

$$\psi_{n,l,m_l,m_s}\left(\vec{r}\right) = P_{nl}\left(r\right) Y_l^{m_l}\left(\vartheta, \varphi\right) \chi_s$$

$$\begin{aligned}L^2 \psi_{n,l,m_l,m_s} &= \hbar^2 l\left(l+1\right) \psi_{n,l,m_l,m_s} \\ S^2 \psi_{n,l,m_l,m_s} &= \hbar^2 \frac{1}{2}\left(\frac{1}{2}+1\right) \psi_{n,l,m_l,m_s} = \frac{3\hbar^2}{4} \psi_{n,l,m_l,m_s}\end{aligned}$$

$$H = H_0 + W$$

$$W = \lambda \vec{L}\,\vec{S} = \frac{\lambda}{2}\left(J^2 - L^2 - S^2\right)$$

Célszerű áttérni a J^2 és J_z operátorok sajátfüggvényeire

$$\psi'_{n,l,j,m_j} = \sum_{m_l,m_s} C\left(j, m_j | l, m_l; \frac{1}{2} m_s\right) \psi_{n,l,m_l,m_s}$$

ahol

$$j = l \pm \frac{1}{2}$$

és továbbra is fennáll, hogy

$$H_0\psi'_{n,l,j,m_j} = E_n^0\psi'_{n,l,j,m_j}$$

A nyolcszorosan degenerált $n = 2$ alhéj sajátállapotainak impulzusmomentum kvantumszámai:

$$l = 0 \quad j = \frac{1}{2} \quad m_j = \pm\frac{1}{2}$$

$$l = 1 \quad \begin{cases} j = \frac{1}{2} & m_j = \pm\frac{1}{2} \\ j = \frac{3}{2} & m_j = \pm\frac{1}{2}, \pm\frac{3}{2} \end{cases}$$

A perturbáló operátor hatása sajátállapotokra:

$$W\psi'_{n,l,j,m_j} = \frac{\lambda}{2}\left(J^2 - L^2 - S^2\right)\psi'_{n,l,j,m_j} = \frac{\lambda\hbar^2}{2}\left(j\,(j+1) - l\,(l+1) - \frac{3}{4}\right)\psi'_{n,l,j,m_j}$$

tehát W mátrixa diagonális:

$$\langle n, l', j', m_j'|W|n, l, j, m_j\rangle = \delta_{ll'}\delta_{jj'}\delta_{m_j m_{j'}}\frac{\lambda\hbar^2}{2}\left(j\,(j+1) - l\,(l+1) - \frac{3}{4}\right)$$

$n = 2$ esetében a diagonális mátrixelemek:

$$\langle n, 0, \frac{1}{2}, m_j|W|n, 0, \frac{1}{2}, m_j\rangle = 0$$

$$\langle n, 1, \frac{1}{2}, m_j|W|n, 1, \frac{1}{2}, m_j\rangle = -\lambda\hbar^2$$

$$\langle n, 1, \frac{3}{2}, m_j|W|n, 1, \frac{3}{2}, m_j\rangle = \frac{\lambda\hbar^2}{2}\left(\frac{3}{2}\frac{5}{2} - 2 - \frac{3}{4}\right) = \frac{\lambda\hbar^2}{2}$$

A perturbációszámítás első rendjében az $n = 2$ nívó három szintre hasad fel:

$$E_{2,0,\frac{1}{2},m_j} = E_2^0 \quad \left(m_j = \pm\frac{1}{2}\right)$$

$$E_{2,1,\frac{1}{2},m_j} = E_2^0 - \lambda\hbar^2 \quad \left(m_j = \pm\frac{1}{2}\right)$$

$$E_{2,1,\frac{3}{2},m_j} = E_2^0 + \frac{\lambda\hbar^2}{2} \quad \left(m_j = \pm\frac{1}{2}, \pm\frac{3}{2}\right)$$