FYSA232 Kvanttimekaniikka I, osa B 13.01.2012

Tentti: 4 tehtävää, 4h

---

1. Tarkastellaan spinitöntä hiukkasta 3-ulotteisessa, pallosymmetrisessä, äärettömän korkeassa potentiaalilaatikossa

$$V(r) = \begin{cases} 0 & \text{kun} \quad r < a \\ \infty & \text{kun} \quad r \geq a. \end{cases}$$

Olkoon tunnettua, että systeemin stationäärinen Schrödingerin yhtälö separoituu yritteellä $\Psi(\mathbf{r}) = R(r)Y_{lm}(\theta, \varphi)$ ja että sen radiaalinen Schrödingerin yhtälö on

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}(r^2\frac{d}{dr}) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} + V(r) \right] R(r) = ER(r).$$

a) Laske kyseisen systeemin perustilan energia. *(3p)* [*Vihje:* $R(r) = \frac{u(r)}{r}$; $u(0) = 0$]

b) Millä todennäköisyydellä kyseinen hiukkanen löytyy alueesta, jossa $r \leq \frac{a}{2}$, $0 \leq \theta \leq \frac{\pi}{2}$ ja $0 \leq \varphi \leq \pi$, kun systeemi on perustilassaan? Tehtäväpaperin lopussa olevasta kaavakokoelmasta saattaa olla apua. *(3p)*

2. Tarkastellaan vetyatomia systeeminä, jossa elektronilla on spin, mutta jonka Hamiltonin operaattori $\hat{H}$ ei riipu spinistä. Kuten muistat, tällöin operaattoreilla $\hat{H}$, $\hat{\mathbf{L}}^2$, $\hat{\mathbf{S}}^2$, $\hat{L}_z$ ja $\hat{S}_z$ on yhteiset ominaistilat $|n\, l\, s\, m_l\, m_s\rangle_u$, jossa esiintyvät kyseisiin operaattoreihin liittyvät kvanttiluvut (ks. myös kaavakokoelma tehtäväpaperin lopussa). Kyseessä on samalla siis kytkemätön kanta ratapyörimismäärän ja spinpyörimismäärän suhteen.

a) Olkoon kyseinen systeemi nyt seuraavassa tilassa

$$|\Psi_1\rangle = \frac{3}{5}|n{=}3\, l{=}2\, s{=}\tfrac{1}{2}\, m_l{=}1\, m_s{=}{+}\tfrac{1}{2}\rangle_u + \frac{4}{5}|n{=}3\, l{=}2\, s{=}\tfrac{1}{2}\, m_l{=}1\, m_s{=}{-}\tfrac{1}{2}\rangle_u.$$

Mikä on S_z:n odotusarvo $\langle S_z \rangle$ tästä tilasta mitattuna? *(1p)*

b) Mikä on S_x:n odotusarvo yllä olevasta tilasta $|\Psi_1\rangle$ mitattuna? [*Vihje:* $\hat{S}_x = \frac{1}{2}(\hat{S}_+ + \hat{S}_-)$] *(2p)*

c) Entä mikä on yllä olevaa tilaa $|\Psi_1\rangle$ kuvaava spinoriaaltofunktio $\mathbf{x}$,spin -esityksessä? Anna vastaus vetytomin radiaalisten aaltofunktioiden ja harmonisten pallofunktioiden avulla. *(1p)*

d) Olkoon systeemi tilassa

$$|\Psi_2\rangle = |n{=}3\, l{=}2\, s{=}\tfrac{1}{2}\, m_l{=}1\, m_s{=}{-}\tfrac{1}{2}\rangle_u.$$

Kytketään nyt pyörimismäärät $\mathbf{L}$ ja $\mathbf{S}$ yhteen; kokonaispyörimismäärä on tällöin $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$. Mikä on kokonaispyörimismäärän neliön odotusarvo $\langle \mathbf{J}^2 \rangle$ mitattuna tilasta $|\Psi_2\rangle$? Hyödynnä oheista Clebsch-Gordan -kertoimien taulukkoa. [*Muista* puuttuvat neliöjuuret CG-taulukossa.] *(2p)*

Käännä!

3. Tarkastellaan 4-tilasysteemiä, jonka Hamiltonin operaattorin $\hat{H}_0$ matriisiesitys on

$$\mathbf{H_0} = \begin{pmatrix} E_1^{(0)} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & E_2^{(0)} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & E_3^{(0)} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & E_3^{(0)} \end{pmatrix}, \qquad E_1^{(0)} \ll E_2^{(0)} \ll E_3^{(0)}.$$

Lisätään systeemiin pieni häiriö, jota vastaavan operaattorin $g\hat{V}$ matriisiesitys on

$$g\mathbf{V} = \begin{pmatrix} g\epsilon & 3g\epsilon & 0 & \sqrt{2}g\epsilon \\ 3g\epsilon & 0 & g\epsilon & 0 \\ 0 & g\epsilon & 2g\epsilon & g\epsilon \\ \sqrt{2}g\epsilon & 0 & g\epsilon & -2g\epsilon \end{pmatrix}, \qquad |g| \ll 1, \quad |g\epsilon| \ll |E_1^{(0)}|.$$

Laske kyseisen häiriön aiheuttamat, häiriöteorian 1. kertaluvun mukaiset korjaukset systeemin ominaisenergioihin $E_1^{(0)}$, $E_2^{(0)}$ ja $E_3^{(0)}$. Piirrä saamiesi tulosten mukainen energiatasokaavio, josta selviää, miten ko. häiriö vaikuttaa $\hat{H}_0$:n ominaisenergioihin. Merkitse kuvaan tasojen energiat. *(6p)*

4. Laske variaatioperiaatteella arvio vetyatomin perustilan energialle. Käytä eksponentiaalista, pallosymmetristä yritettä

$$\psi(\mathbf{r}) = Ae^{-br},$$

missä b on variaatioparametri ja A on normitusvakio. Huomaathan, että kyseessä on 3-dimensioinen systeemi. Vetyatomin Hamiltonin operaattori paikkaesityksessä on

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - \frac{\hbar c\alpha}{r}$$

ja kaavakokoelmasta lienee jälleen apua. Laske lopuksi lukuarvo saamallesi energian arvolle, kun $\alpha = \frac{1}{137}$ ja $mc^2 = 511$ keV. Kommentoi saamaasi tulosta. *(6p)*

Hyödyllisiä (?) kaavoja, mihin tahansa tehtävään:

Pallokoordinaatteja ja pallofunktioita:

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}(r^2\frac{\partial}{\partial r}) - \frac{1}{\hbar^2 r^2}\hat{\mathbf{L}}^2 \qquad d^3r = r^2 dr d\Omega = r^2 dr \sin\theta d\theta d\varphi$$

$$\int d\Omega = \int_0^\pi d\theta \sin\theta \int_0^{2\pi} d\varphi = 4\pi$$

$$\hat{L}^2 Y_{lm}(\theta,\varphi) = \hbar^2 l(l+1) Y_{lm}(\theta,\varphi) \qquad \hat{L}_z Y_{lm}(\theta,\varphi) = \hbar m Y_{lm}(\theta,\varphi)$$

$$\hat{\mathbf{L}}^2 = -\hbar^2\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right] \qquad \int d\Omega\, Y^*_{l'm'}(\theta,\varphi) Y_{lm}(\theta,\varphi) = \delta_{ll'}\delta_{mm'}$$

$$Y_{00}(\theta,\varphi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \qquad Y_{10}(\theta,\varphi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta \qquad Y_{1,\pm1}(\theta,\varphi) = \mp\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta e^{\pm i\varphi}$$

Yleistetty pyörimismäärä:

$$[\hat{J}_i, \hat{J}_j] = i\hbar\sum_{k=1}^{3}\epsilon_{ijk}\hat{J}_k, \qquad [\hat{\mathbf{J}}^2, \hat{J}_i] = 0, \qquad \hat{\mathbf{J}}^2|j,m\rangle = \hbar^2 j(j+1)|j,m\rangle, \qquad \hat{J}_z|j,m\rangle = \hbar m|j,m\rangle$$

$$\hat{J}_\pm = \hat{J}_x \pm i\hat{J}_y \qquad \hat{J}_\pm|j,m\rangle = \hbar\sqrt{(j\mp m)(j\pm m+1)}|j,m\pm1\rangle$$

Integraaleja, trigonometriaa:

$$\int_0^\infty dx x^n e^{-ax} = \frac{n!}{a^{n+1}} \quad (n = 0,1,2,\dots),$$

$$\cos 2x = \cos^2 x - \sin^2 x = 2\cos^2 x - 1 = 1 - 2\sin^2 x \qquad \cos^2 x + \sin^2 x = 1$$

36. CLEBSCH-GORDAN COEFFICIENTS, SPHERICAL HARMONICS, AND d FUNCTIONS

Note: A square-root sign is to be understood over *every* coefficient, *e.g.*, for −8/15 read $-\sqrt{8/15}$.

Notation:

		J	J	...
		M	M	...
m_1	m_2			
m_1	m_2	Coefficients		
.	.			
.	.			

$$Y_1^0 = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta$$

$$Y_1^1 = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta\, e^{i\phi}$$

$$Y_2^0 = \sqrt{\frac{5}{4\pi}}\Big(\frac{3}{2}\cos^2\theta - \frac{1}{2}\Big)$$

$$Y_2^1 = -\sqrt{\frac{15}{8\pi}}\sin\theta\cos\theta\, e^{i\phi}$$

$$Y_2^2 = \frac{1}{4}\sqrt{\frac{15}{2\pi}}\sin^2\theta\, e^{2i\phi}$$

$$Y_\ell^{-m} = (-1)^m Y_\ell^{m*}$$

$$d^{\,\ell}_{m,0} = \sqrt{\frac{4\pi}{2\ell+1}}\, Y_\ell^m\, e^{-im\phi}$$

$$\langle j_1 j_2 m_1 m_2 | j_1 j_2 J M\rangle = (-1)^{J-j_1-j_2}\langle j_2 j_1 m_2 m_1 | j_2 j_1 J M\rangle$$

1/2×1/2

		1
		+1
+1/2	+1/2	1

		1	0
		0	0
+1/2	−1/2	1/2	1/2
−1/2	+1/2	1/2	−1/2

		1
		−1
−1/2	−1/2	1

1×1/2

		3/2
		+3/2
+1	+1/2	1

		3/2	1/2
		+1/2	+1/2
+1	−1/2	1/3	2/3
0	+1/2	2/3	−1/3

		3/2	1/2
		−1/2	−1/2
0	−1/2	2/3	1/3
−1	+1/2	1/3	−2/3

		3/2
		−3/2
−1	−1/2	1

2×1/2

		5/2
		+5/2
+2	+1/2	1

		5/2	3/2
		+3/2	+3/2
+2	−1/2	1/5	4/5
+1	+1/2	4/5	−1/5

		5/2	3/2
		+1/2	+1/2
+1	−1/2	2/5	3/5
0	+1/2	3/5	−2/5

		5/2	3/2
		−1/2	−1/2
0	−1/2	3/5	2/5
−1	+1/2	2/5	−3/5

		5/2	3/2
		−3/2	−3/2
−1	−1/2	4/5	1/5
−2	+1/2	1/5	−4/5

		5/2
		−5/2
−2	−1/2	1

3/2×1/2

		2
		+2
+3/2	+1/2	1

		2	1
		+1	+1
+3/2	−1/2	1/4	3/4
+1/2	+1/2	3/4	−1/4

		2	1
		0	0
+1/2	−1/2	1/2	1/2
−1/2	+1/2	1/2	−1/2

		2	1
		−1	−1
−1/2	−1/2	3/4	1/4
−3/2	+1/2	1/4	−3/4

		2
		−2
−3/2	−1/2	1

2×1

		3
		+3
+2	+1	1

		3	2
		+2	+2
+2	0	1/3	2/3
+1	+1	2/3	−1/3

		3	2	1
		+1	+1	+1
+2	−1	1/15	1/3	3/5
+1	0	8/15	1/6	−3/10
0	+1	2/5	−1/2	1/10

		3	2	1
		0	0	0
+1	−1	1/5	1/2	3/10
0	0	3/5	0	−2/5
−1	+1	1/5	−1/2	3/10

		3	2	1
		−1	−1	−1
0	−1	2/5	1/2	1/10
−1	0	8/15	−1/6	−3/10
−2	+1	1/15	−1/3	3/5

		3	2
		−2	−2
−1	−1	2/3	1/3
−2	0	1/3	−2/3

		3
		−3
−2	−1	1

1×1

		2
		+2
+1	+1	1

		2	1
		+1	+1
+1	0	1/2	1/2
0	+1	1/2	−1/2

		2	1	0
		0	0	0
+1	−1	1/6	1/2	1/3
0	0	2/3	0	−1/3
−1	+1	1/6	−1/2	1/3

		2	1
		−1	−1
0	−1	1/2	1/2
−1	0	1/2	−1/2

		2
		−2
−1	−1	1

3/2×1

		5/2
		+5/2
+3/2	+1	1

		5/2	3/2
		+3/2	+3/2
+3/2	0	2/5	3/5
+1/2	+1	3/5	−2/5

		5/2	3/2	1/2
		+1/2	+1/2	+1/2
+3/2	−1	1/10	2/5	1/2
+1/2	0	3/5	1/15	−1/3
−1/2	+1	3/10	−8/15	1/6

		5/2	3/2	1/2
		−1/2	−1/2	−1/2
+1/2	−1	3/10	8/15	1/6
−1/2	0	3/5	−1/15	−1/3
−3/2	+1	1/10	−2/5	1/2

		5/2	3/2
		−3/2	−3/2
−1/2	−1	3/5	2/5
−3/2	0	2/5	−3/5

		5/2
		−5/2
−3/2	−1	1

$$d^{\,j}_{m',m} = (-1)^{m-m'} d^{\,j}_{m,m'} = d^{\,j}_{-m,-m'}$$

2×3/2

		7/2
		+7/2
+2	+3/2	1

		7/2	5/2
		+5/2	+5/2
+2	+1/2	3/7	4/7
+1	+3/2	4/7	−3/7

		7/2	5/2	3/2
		+3/2	+3/2	+3/2
+2	−1/2	1/7	16/35	2/5
+1	+1/2	4/7	1/35	−2/5
0	+3/2	2/7	−18/35	1/5

		7/2	5/2	3/2	1/2
		+1/2	+1/2	+1/2	+1/2
+2	−3/2	1/35	6/35	2/5	2/5
+1	−1/2	12/35	5/14	0	−3/10
0	+1/2	18/35	−3/35	−1/5	1/5
−1	+3/2	4/35	−27/70	2/5	−1/10

		7/2	5/2	3/2	1/2
		−1/2	−1/2	−1/2	−1/2
+1	−3/2	4/35	27/70	2/5	1/10
0	−1/2	18/35	3/35	−1/5	−1/5
−1	+1/2	12/35	−5/14	0	3/10
−2	+3/2	1/35	−6/35	2/5	−2/5

		7/2	5/2	3/2
		−3/2	−3/2	−3/2
0	−3/2	2/7	18/35	1/5
−1	−1/2	4/7	−1/35	−2/5
−2	+1/2	1/7	−16/35	2/5

		7/2	5/2
		−5/2	−5/2
−1	−3/2	4/7	3/7
−2	−1/2	3/7	−4/7

		7/2
		−7/2
−2	−3/2	1

3/2×3/2

		3
		+3
+3/2	+3/2	1

		3	2
		+2	+2
+3/2	+1/2	1/2	1/2
+1/2	+3/2	1/2	−1/2

		3	2	1
		+1	+1	+1
+3/2	−1/2	1/5	1/2	3/10
+1/2	+1/2	3/5	0	−2/5
−1/2	+3/2	1/5	−1/2	3/10

		3	2	1	0
		0	0	0	0
+3/2	−3/2	1/20	1/4	9/20	1/4
+1/2	−1/2	9/20	1/4	−1/20	−1/4
−1/2	+1/2	9/20	−1/4	−1/20	1/4
−3/2	+3/2	1/20	−1/4	9/20	−1/4

		3	2	1
		−1	−1	−1
+1/2	−3/2	1/5	1/2	3/10
−1/2	−1/2	3/5	0	−2/5
−3/2	+1/2	1/5	−1/2	3/10

		3	2
		−2	−2
−1/2	−3/2	1/2	1/2
−3/2	−1/2	1/2	−1/2

		3
		−3
−3/2	−3/2	1

2×2

		4
		+4
+2	+2	1

		4	3
		+3	+3
+2	+1	1/2	1/2
+1	+2	1/2	−1/2

		4	3	2
		+2	+2	+2
+2	0	3/14	1/2	2/7
+1	+1	4/7	0	−3/7
0	+2	3/14	−1/2	2/7

		4	3	2	1
		+1	+1	+1	+1
+2	−1	1/14	3/10	3/7	1/5
+1	0	3/7	1/5	−1/14	−3/10
0	+1	3/7	−1/5	−1/14	3/10
−1	+2	1/14	−3/10	3/7	−1/5

		4	3	2	1	0
		0	0	0	0	0
+2	−2	1/70	1/10	2/7	2/5	1/5
+1	−1	8/35	2/5	1/14	−1/10	−1/5
0	0	18/35	0	−2/7	0	1/5
−1	+1	8/35	−2/5	1/14	1/10	−1/5
−2	+2	1/70	−1/10	2/7	−2/5	1/5

		4	3	2	1
		−1	−1	−1	−1
+1	−2	1/14	3/10	3/7	1/5
0	−1	3/7	1/5	−1/14	−3/10
−1	0	3/7	−1/5	−1/14	3/10
−2	+1	1/14	−3/10	3/7	−1/5

		4	3	2
		−2	−2	−2
0	−2	3/14	1/2	2/7
−1	−1	4/7	0	−3/7
−2	0	3/14	−1/2	2/7

		4	3
		−3	−3
−1	−2	1/2	1/2
−2	−1	1/2	−1/2

		4
		−4
−2	−2	1

$$d^{\,1}_{0,0} = \cos\theta \qquad d^{\,1/2}_{1/2,1/2} = \cos\frac{\theta}{2} \qquad d^{\,1/2}_{1/2,-1/2} = -\sin\frac{\theta}{2}$$

$$d^{\,1}_{1,1} = \frac{1+\cos\theta}{2} \qquad d^{\,1}_{1,0} = -\frac{\sin\theta}{\sqrt{2}} \qquad d^{\,1}_{1,-1} = \frac{1-\cos\theta}{2}$$

$$d^{\,3/2}_{3/2,3/2} = \frac{1+\cos\theta}{2}\cos\frac{\theta}{2}$$

$$d^{\,3/2}_{3/2,1/2} = -\sqrt{3}\,\frac{1+\cos\theta}{2}\sin\frac{\theta}{2}$$

$$d^{\,3/2}_{3/2,-1/2} = \sqrt{3}\,\frac{1-\cos\theta}{2}\cos\frac{\theta}{2}$$

$$d^{\,3/2}_{3/2,-3/2} = -\frac{1-\cos\theta}{2}\sin\frac{\theta}{2}$$

$$d^{\,3/2}_{1/2,1/2} = \frac{3\cos\theta-1}{2}\cos\frac{\theta}{2}$$

$$d^{\,3/2}_{1/2,-1/2} = -\frac{3\cos\theta+1}{2}\sin\frac{\theta}{2}$$

$$d^{\,2}_{2,2} = \Big(\frac{1+\cos\theta}{2}\Big)^2$$

$$d^{\,2}_{2,1} = -\frac{1+\cos\theta}{2}\sin\theta$$

$$d^{\,2}_{2,0} = \frac{\sqrt{6}}{4}\sin^2\theta$$

$$d^{\,2}_{2,-1} = -\frac{1-\cos\theta}{2}\sin\theta$$

$$d^{\,2}_{2,-2} = \Big(\frac{1-\cos\theta}{2}\Big)^2$$

$$d^{\,2}_{1,1} = \frac{1+\cos\theta}{2}(2\cos\theta-1)$$

$$d^{\,2}_{1,0} = -\sqrt{\frac{3}{2}}\sin\theta\cos\theta$$

$$d^{\,2}_{1,-1} = \frac{1-\cos\theta}{2}(2\cos\theta+1)$$

$$d^{\,2}_{0,0} = \Big(\frac{3}{2}\cos^2\theta - \frac{1}{2}\Big)$$

Figure 36.1: The sign convention is that of Wigner (*Group Theory*, Academic Press, New York, 1959), also used by Condon and Shortley (*The Theory of Atomic Spectra*, Cambridge Univ. Press, New York, 1953), Rose (*Elementary Theory of Angular Momentum*, Wiley, New York, 1957), and Cohen (*Tables of the Clebsch-Gordan Coefficients*, North American Rockwell Science Center, Thousand Oaks, Calif., 1974).