

2. välikoe: 4 tehtävää, 3h

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

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

Systeemin Hamiltonin operaattori on siis

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(r).$$

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

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

- a) Redusoi ko. systeemin radiaalinen Schrödingerin yhtälö yksiulotteisen liikkeen Schrödingerin yhtälöksi efektiivisessä potentiaalissa $V_{\text{eff}}(r)$ [Muistin virkistykseksi: $R(r) = \frac{u(r)}{r}$; $u(0) = 0$]. **Piirrä** $V_{\text{eff}}(r)$ tapauksissa $l = 0, 1, 2$.
- b) Laske a-kohdan tulostasi käyttäen systeemin perustilan energiaa.
- c) Mikä on systeemin perustilan täydellinen, normitettu aaltofunktio $\Psi(\mathbf{r})$?
2. Tarkastellaan vetyatomia spinittömänä systeeminä. Olkoon tunnettua, että ko. systeemin energian ominaistiloja $|nlm\rangle$ kuvaavat aaltofunktiot $\langle \mathbf{r} | nlm \rangle = \Psi_{nlm}(\mathbf{r}) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\Omega)$ ja että ominaisenergiat ovat $E_n = -\frac{\alpha^2}{2}\mu c^2 \frac{1}{n^2}$. Olkoon ko. systeemi nyt tilassa, jota kuvaa aaltofunktio

$$\Psi(\mathbf{r}) = \frac{1}{6} [4\Psi_{100}(\mathbf{r}) + 3\Psi_{211}(\mathbf{r}) - \Psi_{210}(\mathbf{r}) + \sqrt{10}\Psi_{21-1}(\mathbf{r})].$$

Käyttäen Diracin merkintää, paikkaesitykseen siirtymättä, laske vastaukset seuraaviin kysymyksiin [Vihje: kaavakokoelma saattaa olla hyödyksi]:

- a) Mikä on energian odotusarvo tästä tilasta mitattuna? Anna tulos yksiköissä $\alpha^2 \mu c^2$.
- b) Mikä on ratapyörimismäärän z -komponentin odotusarvo tästä tilasta mitattuna? Anna tulos yksiköissä $\hbar$.
- c) Mikä on ratapyörimismäärän x -komponentin odotusarvo tästä tilasta mitattuna? Anna tulos yksiköissä $\hbar$.

Käännä!

3. a) Mitä ovat Clebsch-Gordan -kertoimet (lyhyt, täsmällinen vastaus)? (1p)
 b) Tarkastellaan elektronin (spin- $\frac{1}{2}$ -hiukkanen) rata- ja spinpyörimismäärän kytkentää kokonaispyörimismääräksi $\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{L}} + \hat{\mathbf{S}}$. Olkoon elektroni tilassa, joka koostuu kahdesta kytkemättömän kannan tilasta seuraavasti:

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[|l=2, s=\frac{1}{2}, m_l=-1, m_s=+\frac{1}{2}\rangle_u + |l=1, s=\frac{1}{2}, m_l=+1, m_s=-\frac{1}{2}\rangle_u \right]$$

Mitataan kokonaispyörimismäärän neliö $\mathbf{J}^2$ ja z -komponentti J_z tästä tilasta samanaikaisesti. Mitkä kombinaatiot kvanttiluvuista j ja m voidaan saada ja millä todennäköisyyksillä? Hyödynnä oheista Clebsch-Gordan-kertoimien taulukkoa; muista neliöjuuret. (5p)

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

$$\mathbf{H}_0 = \begin{pmatrix} E_1^{(0)} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & E_2^{(0)} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & E_2^{(0)} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & E_2^{(0)} \end{pmatrix}, \quad E_1^{(0)} < E_2^{(0)}.$$

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

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

- a) Laske kyseisen häiriön aiheuttamat 1. ja 2. kertaluvun korjaukset systeemin perustilan energiaan ja lausu tulos muodossa $E_1 = E_1^{(0)} + gE_1^{(1)} + g^2E_1^{(2)} + \mathcal{O}(g^3)$. Muistin virkistykseksi:

$$E_n^{(2)} = \sum_{m \neq n} \frac{|\langle m | \hat{V} | n \rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}.$$

- b) Laske 1. kertaluvun korjaukset systeemin ominaisenergiaan $E_2^{(0)}$.

- c) Piirrä saamiesi tulosten mukainen energiatasokaavio, josta selviää, miten ko. häiriö vaikuttaa $\hat{H}_0$:n ominaisenergioihin. Merkitse energiat tasojen yhteyteen.

Hyödyllisiä (?) kaavoja, mihin tahansa tehtävään:

Pallokoordinaatteja ja pallofunktioita:

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{1}{\hbar^2 r^2} \hat{\mathbf{L}}^2 \quad d^3r = r^2 dr d\Omega = r^2 dr \sin \theta d\theta d\varphi \quad \int d\Omega = 4\pi$$

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

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

Yleistetty pyörimismäärä:

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

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

$$\text{Trigonometriaa:} \quad \cos 2x = \cos^2 x - \sin^2 x, \quad \cos^2 x + \sin^2 x = 1$$

35. 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
.	.	
.	.	

$$1/2 \times 1/2$$

1	0
+1/2 +1/2	1 0
+1/2 -1/2	1/2 1/2
-1/2 +1/2	1/2 -1/2
-1/2 -1/2	1

$$Y_0^0 = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta$$

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

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

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

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

$$2 \times 1/2$$

5/2	3/2
+5/2	1
+2 -1/2	1/5 4/5
+1 +1/2	4/5 -1/5

5/2	3/2
0 +1/2	2/5 3/5
0 -1/2	3/5 -2/5
-1 +1/2	2/5 -3/5
-1 -1/2	3/5 -4/5

$$3/2 \times 1/2$$

2	1
+3/2	1/2
+1/2	1/2
0	0
-1/2	1/2
-3/2	1/2

$$1 \times 1/2$$

3/2	1/2
+3/2	1
+1 -1/2	1/3 2/3
0 +1/2	2/3 -1/3
0 -1/2	1/3 -2/3
-1 +1/2	2/3 -1/3

$$2 \times 1$$

3	2
+3	1
+2 0	1/3 2/3
+1 +1	2/3 -1/3
0 +1	1/3 -2/3
-1 0	2/3 -1/3
-2 -1	1/3 -2/3

$$3/2 \times 1$$

5/2	3/2
+5/2	1
+3/2	1
+3/2 0	2/5 3/5
+1/2 +1	3/5 -2/5
0	0
-1/2 +1	2/5 -3/5
-3/2 0	3/5 -4/5
-3/2 -1	1/5 -4/5

$$1 \times 1$$

2	1
+2	1
+1 0	1/2 1/2
0 +1	1/2 -1/2
0 0	0
-1 0	1/2 -1/2
-2 -1	1/2 -1/2

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

$$d_{m',m}^j = (-1)^{m-m'} d_{m,m'}^j = d_{-m,-m'}^j$$

$$2 \times 3/2$$

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

3	2
+3/2	1
+3/2 +1/2	1/2 1/2
+1/2 +3/2	1/2 -1/2
0	0
-1/2 +3/2	1/2 1/2
-3/2 +1/2	1/2 -1/2

3	2
+3/2	1
+3/2 +1/2	1/2 1/2
+1/2 +3/2	1/2 -1/2
0	0
-1/2 +3/2	1/2 1/2
-3/2 +1/2	1/2 -1/2

3	2
+3/2	1
+3/2 +1/2	1/2 1/2
+1/2 +3/2	1/2 -1/2
0	0
-1/2 +3/2	1/2 1/2
-3/2 +1/2	1/2 -1/2

3	2
+3/2	1
+3/2 +1/2	1/2 1/2
+1/2 +3/2	1/2 -1/2
0	0
-1/2 +3/2	1/2 1/2
-3/2 +1/2	1/2 -1/2

3	2
+3/2	1
+3/2 +1/2	1/2 1/2
+1/2 +3/2	1/2 -1/2
0	0
-1/2 +3/2	1/2 1/2
-3/2 +1/2	1/2 -1/2

3	2
+3/2	1
+3/2 +1/2	1/2 1/2
+1/2 +3/2	1/2 -1/2
0	0
-1/2 +3/2	1/2 1/2
-3/2 +1/2	1/2 -1/2

$$2 \times 2$$

4	3
+4	1
+2 +1	1/2 1/2
+1 +2	1/2 -1/2
0 +2	0
-1 +2	1/2 -1/2
-2 +1	1/2 1/2

4	3
+4	1
+2 +1	1/2 1/2
+1 +2	1/2 -1/2
0 +2	0
-1 +2	1/2 -1/2
-2 +1	1/2 1/2

4	3
+4	1
+2 +1	1/2 1/2
+1 +2	1/2 -1/2
0 +2	0
-1 +2	1/2 -1/2
-2 +1	1/2 1/2

4	3
+4	1
+2 +1	1/2 1/2
+1 +2	1/2 -1/2
0 +2	0
-1 +2	1/2 -1/2
-2 +1	1/2 1/2

4	3
+4	1
+2 +1	1/2 1/2
+1 +2	1/2 -1/2
0 +2	0
-1 +2	1/2 -1/2
-2 +1	1/2 1/2

4	3
+4	1
+2 +1	1/2 1/2
+1 +2	1/2 -1/2
0 +2	0
-1 +2	1/2 -1/2
-2 +1	1/2 1/2

4	3
+4	1
+2 +1	1/2 1/2
+1 +2	1/2 -1/2
0 +2	0
-1 +2	1/2 -1/2
-2 +1	1/2 1/2

4	3
+4	1
+2 +1	1/2 1/2
+1 +2	1/2 -1/2
0 +2	0
-1 +2	1/2 -1/2
-2 +1	1/2 1/2

4	3
+4	1
+2 +1	1/2 1/2
+1 +2	1/2 -1/2
0 +2	0
-1 +2	1/2 -1/2
-2 +1	1/2 1/2

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

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

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

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

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

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

$$d_{2,2}^{3/2} = \left(\frac{1+\cos\theta}{2} \right)^2$$

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

$$d_{2,0}^{3/2} = \frac{\sqrt{6}}{4} \sin^2 \theta$$

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

$$d_{2,-2}^{3/2} = \left(\frac{1-\cos\theta}{2} \right)^2$$

$$d_{1,1}^{3/2} = \frac{1+\cos\theta}{2} (2\cos\theta-1)$$

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

$$d_{1,-1}^{3/2} = \frac{1-\cos\theta}{2} (2\cos\theta+1)$$

$$d_{1/2,1/2}^{1/2} = \cos \frac{\theta}{2}$$

$$d_{1/2,-1/2}^{1/2} = -\sin \frac{\theta}{2}$$

$$d_{1,1}^1 = \frac{1+\cos\theta}{2}$$

$$d_{1,0}^1 = -\frac{\sin\theta}{\sqrt{2}}$$

$$d_{1,-1}^1 = \frac{1-\cos\theta}{2}$$

$$d_{0,0}^2 = \left(\frac{3}{2} \cos^2 \theta - \frac{1}{2} \right)$$

Figure 35.1: 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). The coefficients here have been calculated using computer programs written independently by Cohen and at LBNL.