Kvantummechanika gyakorlat
(2012/13 őszi félév)

1. óra

1. feladat: Mutassuk meg, hogy az $\hat{A}$ operátor átlagos értéke ψ kvantumállapotban $(\psi, \hat{A}\psi)$!

Megoldás: Definíció szerint az átlag:

$$< \hat{A} >= \sum_j \lambda_j |d_j|^2,$$

ahol λ_j az A fizikai mennyiségre mérhető lehetséges értékek és $|d_j|^2$ az ezekhez a mérésekhez tartozó egyes valószínűségek (vagyis d_j az $\hat{A}$ sajátfüggvényei szerinti kifejtési együtthatók). Alkalmazva a sajátfüggvények szerinti kifejtést és a skalárszorzat linearitását:

$$(\psi, \hat{A}\psi) = \Big(\sum_j d_j\varphi_j, \hat{A}\sum_k d_k\varphi_k\Big) = \Big(\sum_j d_j\varphi_j, \sum_k d_k\hat{A}\varphi_k\Big) = \Big(\sum_j d_j\varphi_j, \sum_k d_k\lambda_k\varphi_k\Big) =$$

$$= \sum_j\sum_k (d_j\varphi_j, d_k\lambda_k\varphi_k) = \sum_j\sum_k d_j^*\lambda_k d_k(\varphi_j, \varphi_k).$$

Mivel a φ_j sajátfüggvények ortogonálisak:

$$(\psi, \hat{A}\psi) = \sum_j\sum_k d_j^*\lambda_k d_k\delta_{jk} = \sum_j |d_j|^2\lambda_j =< \hat{A} > .$$

2. feladat: Határozzuk meg 1 dimenzióban az impulzus operátor sajátértékeit és sajátfüggvényeit periodikus határfeltétel mellett $(\psi[x+d] = \psi[x])$!

Megoldás: Mivel $\hat{p} = \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}$, ezért a következő sajátértékfeladatot kell megoldani:

$$\frac{\hbar}{i}\frac{d\psi}{dx} = p\psi.$$

A differenciálegyenlet általános megoldása:

$$\psi(x) = A \cdot e^{\frac{i}{\hbar}px},$$

ahol A konstans. A periodikus határfeltétel szerint teljesülnie kell:

$$A \cdot e^{\frac{i}{\hbar}p(x+d)} = A \cdot e^{\frac{i}{\hbar}px} \Longrightarrow e^{\frac{i}{\hbar}pd} = 1,$$

amiből következik, hogy a sajátérték nem tetszőleges:

$$p_m = \frac{2\pi m}{d}\hbar,$$

ahol m egy egész szám. Az A konstanst abból kapjuk, hogy a hullámfüggvények abszolútértéknégyzete integrálja 1 kell legyen (normálás). Mivel d szélességű „világunk" van, az integrálás határait is eszerint kell megválasztani. Az m. sajátértékhez tartozó hullámfüggvényt ψ_m-mel jelölve:

$$\int_0^d \psi_m^*(x)\psi_m(x)dx = \int_0^d |A|^2 dx = 1 \Longrightarrow A = \frac{1}{\sqrt{d}}.$$

Vagyis a lehetséges sajátfüggvények és sajátértékek:

$$\psi_m(x) = \frac{1}{\sqrt{d}} e^{i\frac{2\pi m}{d}x}, \qquad p_m = \frac{2\pi m}{d}\hbar.$$

1. Megjegyzés: könnyen látható, hogy ezek a sajátfüggvények ortonormáltak, azaz $(\psi_m, \psi_n) = \delta_{nm}$.
HF1: Ez utóbbit lássuk be!
2. Megjegyzés: a teljes térben érvényes (nincs határfeltétel) sajátfüggvények nem normálható állapotok (nemfizikaiak), a sajátértékek ekkor tetszőlegesek.

3. feladat: Határozzuk meg periodikus határfeltétel mellett a $\psi(x) = A{\cdot}\sin^2(\frac{2\pi}{d}x)$ hullámfüggvény impulzus sajátfüggvények szerinti kifejtési együtthatóit!

Megoldás: Kiszámítható, hogy a normálás miatt $A = \sqrt{\frac{8}{3d}}$ kell legyen. HF2: Ellenőrizzük!
A sajátfüggvények szerinti kifejtés:

$$\psi = \sum_n c_n \psi_n = \frac{1}{\sqrt{d}} \sum_{n=-\infty}^{n=+\infty} c_n e^{i\frac{2\pi n}{d}x}.$$

A c_n együtthatók kiszámításának módja:

$$c_n^* = (\psi, \psi_n) = \frac{A}{\sqrt{d}} \int_0^d \sin^2\left(\frac{2\pi}{d}x\right) e^{i\frac{2\pi m}{d}x} dx = \frac{A}{2\sqrt{d}} \int_0^d \left[1 - \cos\left(\frac{4\pi}{d}x\right)\right] e^{i\frac{2\pi m}{d}x} dx.$$

Az első tag számítása:

$$\frac{A}{2\sqrt{d}} \int_0^d e^{i\frac{2\pi m}{d}x} dx = \frac{A}{2\sqrt{d}} \left[\frac{e^{i\frac{2\pi m}{d}x}}{i\frac{2\pi m}{d}}\right]_0^d = \frac{A}{2}\sqrt{d} \cdot \delta_{m,0} = c_n^* = c_n.$$

A második tag számítása (kihasználva a sajátfüggvények ortonormalitását):

$$-\frac{A}{2\sqrt{d}} \int_0^d \cos\left(\frac{4\pi}{d}x\right) e^{i\frac{2\pi m}{d}x} dx = -\frac{A}{4\sqrt{d}} \int_0^d \left(e^{i\frac{4\pi}{d}x} + e^{-i\frac{4\pi}{d}x}\right) e^{i\frac{2\pi m}{d}x} dx =$$

$$-\frac{A\sqrt{d}}{4} \int_0^d \psi_{-2}^*(x)\psi_m(x)dx - \frac{A\sqrt{d}}{4} \int_0^d \psi_2^*(x)\psi_m(x)dx = -\frac{A}{4}\sqrt{d} \cdot \delta_{m,-2} - \frac{A}{4}\sqrt{d} \cdot \delta_{m,2}.$$

Megjegyzés: $\psi_m(x) = \frac{1}{\sqrt{d}} e^{i\frac{2\pi m}{d}x}$ kifejezést a második sornál e-adra rendezve helyettesítettük be!

Vagyis a kifejtési együtthatók közül csak 3 nem nulla:

$$c_m = \frac{A}{2}\sqrt{d}\delta_{m,0} - \frac{A}{4}\sqrt{d} \cdot \delta_{m,-2} - \frac{A}{4}\sqrt{d} \cdot \delta_{m,2}.$$

Behelyettesítve A értékét:

$$c_m = \sqrt{\frac{2}{3}} \cdot \delta_{m,0} - \frac{1}{\sqrt{6}}\delta_{-2,m} - \frac{1}{\sqrt{6}}\delta_{2,m}.$$

Megjegyzés: $\sum_i |c_i|^2 = 1$ teljesül, ahogy ennek lennie kell. HF3: Ellenőrizzük ez utóbbi egyenletet!

Bonus HF4: Lássuk be, hogy $e^{-iH} = U$ egy unitér operátor!