Kvantummechanika gyakorlat
(2012/13 őszi félév)

3. óra

1. feladat: Határozzuk meg 1 térdimenzióban (végtelen térben) az impulzus valószínűségsűrűségét a

$$\Psi(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{3}{2}}(1+x), & -1 < x < 0 \\ \sqrt{\frac{3}{2}}(1-x), & 0 < x < 1 \\ 0, & |x| \geq 1 \end{cases}$$

kvantumállapotban!

Megoldás: Kiszámítható, hogy $\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x)|^2 dx = 1$, vagyis a hullámfüggvény megfelelően normált. HF1: Ellenőrizzük a normát!

Végtelen térben (nincs határfeltétel) az impulzus sajátértékek tetszőlegesek, a sajátfüggvé-nyek $\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{ikx}$ síkhullámok ($\hbar = 1$ egységrendszerben). Az ezen sajátfüggvények szerinti kifejtés diszkrét összeg helyett ilyenkor egy integrállal adható meg:

$$\Psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{\Psi}(k) e^{ikx} dk,$$

ahol $\tilde{\Psi}(k)$ a kifejtési együttható-függvény, melynek abszolútérték négyzete az impulzus valószínűségsűrűsége. Utóbbinak kiszámítása a

$$\tilde{\Psi}(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi(x) e^{-ikx} dx$$

képlettel történik. Jelen esetben:

$$\tilde{\Psi}(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-1}^{1} \Psi(x) e^{-ikx} dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-1}^{0} (1+x)\sqrt{\frac{3}{2}} e^{-ikx} dx + \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{0}^{1} (1-x)\sqrt{\frac{3}{2}} e^{-ikx} dx.$$

Az első tagban áttérünk a $(-x)$ szerinti integrálásra, majd összevonás után:

$$\tilde{\Psi}(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{0}^{1} (1-x)\sqrt{\frac{3}{2}} e^{ikx} dx + \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{0}^{1} (1-x)\sqrt{\frac{3}{2}} e^{-ikx} dx =$$

$$= \frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{\pi}} \int_{0}^{1} (1-x) 2\cos(kx) dx = \sqrt{\frac{3}{\pi}} \Big[\int_{0}^{1} \cos(kx) dx - \int_{0}^{1} x\cos(kx) dx \Big].$$

Az első tag:

$$\sqrt{\frac{3}{\pi}} \int_{0}^{1} \cos(kx) dx = \sqrt{\frac{3}{\pi}} \Big[\frac{1}{k} \sin(kx) \Big]_{0}^{1} = \sqrt{\frac{3}{\pi}} \frac{1}{k} \sin k.$$

A második tag (parciális integrálást alkalmazva):

$$-\sqrt{\frac{3}{\pi}}\int_0^1 x\cos(kx)dx = -\sqrt{\frac{3}{\pi}}\int_0^1 x\frac{d}{dx}\Big[\frac{1}{k}\sin(kx)\Big]dx =$$

$$-\sqrt{\frac{3}{\pi}}\Big(-\int_0^1 \frac{1}{k}\sin(kx)dx + \Big[\frac{x}{k}\sin(kx)\Big]_0^1\Big) = -\sqrt{\frac{3}{\pi}}\frac{1}{k}\sin k - \sqrt{\frac{3}{\pi}}\frac{1}{k^2}\Big[\cos(kx)\Big]_0^1 =$$

$$= -\sqrt{\frac{3}{\pi}}\frac{1}{k}\sin k + \sqrt{\frac{3}{\pi}}\frac{1}{k^2}(1-\cos k).$$

A két tag összege megadja $\tilde{\Psi}(k)$-t, az impulzus valószínűségsűrűsége pedig

$$|\tilde{\Psi}(k)|^2 = \frac{3}{\pi}\frac{1}{k^4}(1-\cos k)^2.$$

Megjegyzés: megmutatható, hogy $\int_{-\infty}^{+\infty}|\tilde{\Psi}(k)|^2dk = 1$, ahogy annak lennie kell. HF2: Ellenőrizzük ezt!

2. feladat: Határozzuk meg a hely operátor sajátértékeit és sajátfüggvényeit (1 dimenzióban történő mozgásra)!

Megoldás: A sajátértékek tetszőleges valós számok, mert egy szabadon mozgó részecske helye akármilyen értéket fel kell, hogy tudjon venni. Legyen egy sajátérték x_0, a hozzá tartozó sajátfüggvényt jelölje $\psi_{x_0}(x)$! A sajátértékegyenlet:

$$\hat{x}\psi_{x_0}(x) = x_0\psi_{x_0}(x).$$

Tudjuk, hogy a hely operátora a hullámfüggvény argumentumával való szorzás művelete ($\hat{x} = x\cdot$), ezért kapjuk:

$$x\psi_{x_0}(x) = x_0\psi_{x_0}(x).$$

Ez az egyenlet csak egyetlen függvényre tud teljesülni (konstans szorzótól eltekintve):

$$\psi_{x_0}(x) = \delta(x-x_0).$$

A konstans szorzónak nincs jelentősege, mert ezen sajátfüggvények is (az impulzus sajátfüggvényekhez hasonlóan) nem normálható (nem fizikai) állapotot írnak le.

Megjegyzés: Az impulzus sajátfüggvényeknél látottakkal analóg módon most is érvényes, hogy tetszőleges hullámfüggvény kifejthető a hely sajátfüggvényei szerint:

$$\psi(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} c(x_0)\psi_{x_0}(x)dx_0.$$

Beírva $\psi_{x_0}(x)$ kifejezését, az integrál azonnal el is végezhető:

$$\psi(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} c(x_0)\delta(x-x_0)dx_0 = c(x),$$

vagyis a hullámfüggvény nem más, mint a hely sajátállapotai szerinti kifejtési együttható-függvény.