Kvantummechanika gyakorlat
(2012/13 őszi félév)

4. óra

<u>1. feladat</u>: Határozzuk meg a harmonikus oszcillátor $n = 0, 1, 2$ energia-sajátfüggvényét!

Megoldás: A harmonikus oszcillátor sajátfüggvényei a következő képletből kaphatóak meg:

$$\Psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \Big(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\Big)^{1/4} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} H_n\Big(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x\Big),$$

ahol a H_n függvények az ún. Hermite polinomok:

$$H_n(X) = (-1)^n e^{X^2} \frac{d^n}{dX^n}\Big(e^{-X^2}\Big).$$

Eszerint az első három Hermite polinom:

$$H_0(X) = 1, \qquad H_1(X) = 2X, \qquad H_2(X) = 4X^2 - 2.$$

Ezzel a keresett hullámfüggvények:

$$\Psi_0(x) = \Big(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\Big)^{1/4} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2},$$

$$\Psi_1(x) = \sqrt{2}\Big(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\Big)^{1/4} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x,$$

$$\Psi_2(x) = \frac{1}{\sqrt{2}}\Big(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\Big)^{1/4} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} \Big(\frac{2m\omega}{\hbar}x^2 - 1\Big).$$

Megjegyzés: észrevehető, hogy az n. sajátfüggvényben n-edfokú polinom szerepel.

<u>2. feladat</u>: Bizonyítsuk be, hogy a harmonikus oszcillátor tetszőleges energia-sajátfüggvényére a hely átlaga nulla!

Megoldás: A hely átlaga az n. sajátfüggvény esetében:

$$< \hat{x} >= \int_{-\infty}^{+\infty} dx \Psi_n^*(x) \hat{x} \Psi_n(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx x |\Psi_n(x)|^2.$$

Végezzük el a következő azonos átalakításokat:

$$< \hat{x} >= \int_{-\infty}^{+\infty} dx x |\Psi_n(x)|^2 = \int_{-\infty}^{0} dx x |\Psi_n(x)|^2 + \int_{0}^{+\infty} dx x |\Psi_n(x)|^2 = \int_{0}^{+\infty} x \Big(|\Psi_n(x)|^2 - |\Psi_n(-x)|^2\Big).$$

A következőkben belátjuk, hogy $|\Psi_n(x)|^2 = |\Psi_n(-x)|^2$, vagyis az integrál eredménye zérus. A sajátfüggvények kiszámítási módja:

$$\Psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}}\Big(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\Big)^{1/4} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} H_n\Big(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x\Big),$$

amely valós, tehát az abszolútérték mindenhonnan elhagyható. Láthatóan elegendő annyit megmuatni, hogy $H_n^2(X) = H_n^2(-X)$, ekkor automatikusan teljesül a bizonyítandó állítás. Ez viszont nyilvánvalóan igaz, mivel:

$$H_n(X) = (-1)^n e^{X^2}\frac{d^n}{dX^n}\Big(e^{-X^2}\Big),$$

$$H_n(-X) = (-1)^n e^{(-X)^2}\frac{d^n}{d(-X)^n}\Big(e^{-(-X)^2}\Big) = e^{X^2}\frac{d^n}{dX^n}\Big(e^{-X^2}\Big),$$

amiből az következik, hogy $H_n^2(X) = H_n^2(-X)$.

3. feladat: Legyen $\varphi_n(X) := e^{-X^2/2}H_n(X)$! Mutassuk meg, hogy a φ_n függvények merőlegesek egymásra, azaz $(\varphi_i, \varphi_j) = 0$, ha $i \neq j$!

Megoldás: Tegyük fel, hogy $j > i$ (ez az általánosság megszorítása nélkül megtehető). A skalárszorzat definíciója szerint:

$$(\varphi_i, \varphi_j) = \int_{-\infty}^{+\infty} dX e^{-X^2/2}H_i(X)e^{-X^2/2}H_j(X) = \int_{-\infty}^{+\infty} dX e^{-X^2}(-1)^i e^{X^2}\frac{d^i}{dX^i}(e^{-X^2})(-1)^j e^{X^2}\frac{d^j}{dX^j}(e^{-X^2}) =$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} dX (-1)^{i+j} e^{X^2}\frac{d^i}{dX^i}(e^{-X^2})\frac{d^j}{dX^j}(e^{-X^2}).$$

Az első feladat szerint

$$P_i(X) := e^{X^2}\frac{d^i}{dX^i}(e^{-X^2})$$

egy i-edfokú polinom.

$$(\varphi_i, \varphi_j) = \int_{-\infty}^{+\infty} dX (-1)^{i+j} P_i(X)\frac{d^j}{dX^j}(e^{-X^2}).$$

Hajtsunk végre egymás után i db. parciális integrálást (mivel $j > i$, ez megtehető) ! Vegyük észre, hogy kiintegrált rész minden esetben nulla, mivel az e^{-X^2} függvény és tetszőleges deriváltja a $\pm\infty$-ben zérus. Kapjuk, hogy:

$$(\varphi_i, \varphi_j) = \int_{-\infty}^{+\infty} dX (-1)^j \frac{d^i}{dX^i}P_i(X)\frac{d^{j-i}}{dX^{j-i}}(e^{-X^2}).$$

Ha az így kapott alakon egy újabb parciális integrálást hajtunk végre, akkor a $P_i(X)$ függvény $i+1$. deriváltja jelenik meg az integrandusban, ami zérus, vagyis (kihasználva, hogy a kiintegrált rész ismét nem ad járulékot) az egész integrál értéke nulla.

Megjegyzés: Ha $i = j$, akkor már nincs mód i db parciális integrálás után egy újabbat elvégezni, ezért ekkor nem nullát kapunk: megmutatható, hogy ekkor a skalárszorzat értéke $(\varphi_i, \varphi_i) = 2^i i!\sqrt{\pi}$.

<u>4. feladat</u>: Számítsuk ki a harmonikus oszcillátor első gerjesztett állapotában a hely szórását!

Megoldás: A szórás definíció szerint:

$$\sigma_x = \sqrt{<\hat{x}^2> - <\hat{x}>^2} = \sqrt{<\hat{x}^2>},$$

mivel a hely átlaga a 2. feladat szerint zérus. A hely négyzetének átlagára van tehát szükségünk:

$$<\hat{x}^2>= \int_{-\infty}^{+\infty} dx \Psi_1^*(x)\hat{x}^2\Psi_1(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx x^2 \Psi_1^2(x).$$

A hullámfüggvény valós, ezért az abszolútértéket ki sem kell írni. Beírva az 1. feladatban már meghatározott függvényt:

$$<\hat{x}^2>= 2\int_{-\infty}^{+\infty} dx \sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}} e^{-\frac{m\omega}{\hbar}x^2} \frac{m\omega}{\hbar} x^4.$$

Bevezetve a $X := \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x$ változót:

$$<\hat{x}^2>= \frac{2}{\sqrt{\pi}} \frac{\hbar}{m\omega} \int_{-\infty}^{+\infty} dX e^{-X^2} X^4.$$

Az integrál értéke: (melyet házi feladat ellenőrizni (HF1))

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dX e^{-X^2} X^4 = \frac{3}{4}\sqrt{\pi},$$

így

$$<\hat{x}^2>= \frac{3\hbar}{2m\omega},$$

vagyis a szórás

$$\sigma_x = \sqrt{\frac{3\hbar}{2m\omega}}.$$

Megjegyzés: a feladat megoldható lett volna a hullámfüggvény konkrét ismerete nélkül is, léptető-operátorok használatával. Tudjuk, hogy a hely és impulzus operátorok kifejezhetőek a léptető-operátorokkal:

$$\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\hat{a}^\dagger + \hat{a}), \qquad \hat{p} = i\sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}}(\hat{a}^\dagger - \hat{a}).$$

Használva az $\hat{x}$-re érvényes képletet, a szórás négyzete így is írható:

$$\sigma_x^2 =< \hat{x}^2 >= (\Psi_1, \hat{x}^2\Psi_1) = \frac{\hbar}{2m\omega}\Big(\Psi_1, (\hat{a}^\dagger + \hat{a})(\hat{a}^\dagger + \hat{a})\Psi_1\Big).$$

Ismerve a léptetőoperátorok

$$\hat{a}\Psi_n = \sqrt{n}\Psi_{n-1}, \qquad \hat{a}^\dagger\Psi_n = \sqrt{n+1}\Psi_{n+1}$$

hatását a sajátfüggvényeken, illetve alkalmazva az ortonormáltság $(\Psi_i, \Psi_j) = \delta_{ij}$ relációját, rövid számolás után kapjuk:

$$\sigma_x^2 = \frac{3\hbar}{2m\omega} \Rightarrow \sigma_x = \sqrt{\frac{3\hbar}{2m\omega}}.$$

HF2: Behelyettesíteni a léptetőoperátorokat és végigszámolni a szórást.