Kvantummechanika gyakorlo feladatok 1 - Megoldások

1. feladat: Az eltolás operátorának megtalálásával teljesen analóg módon fejtsük Taylor-sorba a hullámfüggvényt a 3. változójában:

$$\psi(r,\theta,\varphi+\varphi_0)=\psi(r,\theta,\varphi)+\frac{\partial\psi(r,\theta,\varphi)}{\partial\varphi}\varphi_0+\frac{1}{2!}\frac{\partial^2\psi(r,\theta,\varphi)}{\partial\varphi^2}\varphi_0^2+\frac{1}{3!}\frac{\partial^3\psi(r,\theta,\varphi)}{\partial\varphi^3}\varphi_0^3+...$$

Tudjuk, hogy az impulzusmomentum z komponensének operátora

$$\hat{L}_z=\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\varphi},$$

így

$$\psi(r,\theta,\varphi+\varphi_0)=\psi(r,\theta,\varphi)+\frac{i}{\hbar}\hat{L}_z\psi(r,\theta,\varphi)\cdot\varphi_0+\frac{1}{2!}\Big(\frac{i}{\hbar}\hat{L}_z\Big)^2\psi(r,\theta,\varphi)\cdot\varphi_0^2+\frac{1}{3!}\Big(\frac{i}{\hbar}\hat{L}_z\Big)^3\psi(r,\theta,\varphi)\cdot\varphi_0^3+...$$

Kiemeljük jobb oldalon a $\psi(r,\theta,\varphi)$ függvényt:

$$\psi(r,\theta,\varphi+\varphi_0)=\Big(1+\frac{i}{\hbar}\hat{L}_z\cdot\varphi_0+\frac{1}{2!}\Big(\frac{i}{\hbar}\hat{L}_z\Big)^2\cdot\varphi_0^2+\frac{1}{3!}\Big(\frac{i}{\hbar}\hat{L}_z\Big)^3\cdot\varphi_0^3+...\Big)\psi(r,\theta,\varphi).$$

Felismerhetjük az exponenciális függvény definícióját:

$$\psi(r,\theta,\varphi+\varphi_0)=e^{i\frac{\hat{L}_z}{\hbar}\varphi_0}\psi(r,\theta,\varphi),$$

vagyis

$$\hat{U}_{\varphi_0}=e^{i\frac{\hat{L}_z}{\hbar}\varphi_0}.$$

2. feladat: Ki kell számolni az impulzus sajátfüggvények szerinti kifejtési együttható-függvényt (a hullámfüggvény Fourier transzformáltját), ennek abszolútérték-négyzete adja az impulzus valószínűségsűrűségét.

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

$$=\frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{\pi}}\int_{0}^{1}xe^{ikx}dx+\frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{\pi}}\int_{0}^{1}xe^{-ikx}dx=\sqrt{\frac{3}{\pi}}\int_{0}^{1}x\cos(kx)dx.$$

Parciális integrálást alkalmazva:

$$\tilde{\psi}(k)=\sqrt{\frac{3}{\pi}}\int_{0}^{1}x\frac{1}{k}\frac{d}{dx}\sin(kx)dx=\sqrt{\frac{3}{\pi}}\frac{\sin k}{k}-\sqrt{\frac{3}{\pi}}\int_{0}^{1}\sin(kx)dx=\sqrt{\frac{3}{\pi}}\frac{\sin k}{k}+\sqrt{\frac{3}{\pi}}\frac{\cos k-1}{k^2}.$$

Összevonás után:

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

A keresett valószínűség (a valószínűségsűrűség definíciója szerint):

$$P_{[0,\Delta k]} = |\tilde{\psi}(0)|^2 \Delta k,$$

vagyis szükség van a $\tilde{\psi}(k)$ függvény $k = 0$ helyen felvett értékére. Ezen a helyen a kifejezés számlálója és nevezője is nulla, ezért határértéket kell venni. Alkalmazzuk a L'Hospital szabályt:

$$\lim_{k\to 0} \tilde{\psi}(k) = \sqrt{\frac{3}{\pi}} \frac{(k \sin k + \cos k - 1)'}{(k^2)'}\Big|_{k=0} = \sqrt{\frac{3}{\pi}} \frac{\sin k + k \cos k - \sin k}{2k}\Big|_{k=0} = \sqrt{\frac{3}{\pi}} \frac{\cos k}{2}\Big|_{k=0} = \sqrt{\frac{3}{\pi}} \cdot \frac{1}{2}.$$

Vagyis a keresett valószínűség:

$$P_{[0,\Delta k]} = \frac{3}{4\pi} \Delta k.$$

3. feladat: A z paraméterrel jellemzett koherens állapot

$$\varphi_z(x) = e^{z\hat{a}^\dagger - z^* \hat{a}} \Psi_0(x).$$

Ha z valós, akkor $z = z^*$, így

$$\varphi_z(x) = e^{z(\hat{a}^\dagger - \hat{a})} \Psi_0(x).$$

Tudjuk, hogy az impulzus operátor a következőképpen fejezhető ki a léptetőoperátorokkal:

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

vagyis a koherens állapot kifejezésében szereplő exponenciális függvény argumentumában megjelenik az impulzus operátor:

$$\varphi_z(x) = e^{-i\hat{p}z\sqrt{2/\hbar m\omega}} \Psi_0(x).$$

Kicsit átalakítva:

$$\varphi_z(x) = e^{-i\frac{\hat{p}}{\hbar} z\sqrt{2\hbar/m\omega}} \Psi_0(x),$$

ami

$$\varphi_z(x) = e^{i\frac{\hat{p}}{\hbar} x_0} \Psi_0(x) = \Psi_0(x + x_0)$$

alakú, vagyis egy valós paraméterrel jellemzett koherens állapot valóban a harmonikus oszcillátor alapállapoti hullámfüggvényének eltoltja. Az eltolás x_0 paraméteréről leolvasható, hogy értéke

$$x_0 = -z\sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}}.$$

4. feladat: A feltétel szerint a pertület z komponensének sajátfüggvényei szerinti kifejtésben csak 3 tag van:

$$\Psi = \sum_i c_i \Psi_i = c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2 + c_3\Psi_3.$$

Mivel a kifejtési együtthatók abszolútértéknégyzete maga a mérési valószínűség és a három érték azonos valószínűséggel mérhető, ezért:

$$P_\hbar = \frac{1}{3} \qquad \Longrightarrow \qquad c_1 = \sqrt{\frac{1}{3}} e^{i\alpha_1},$$

$$P_{4\hbar} = \frac{1}{3} \qquad \Longrightarrow \qquad c_2 = \sqrt{\frac{1}{3}} e^{i\alpha_2},$$

$$P_{7\hbar} = \frac{1}{3} \qquad \Longrightarrow \qquad c_3 = \sqrt{\frac{1}{3}} e^{i\alpha_3},$$

ahol $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$ tetszőleges szögek. A hullámfüggvény ezzel és a 2. óra 1. feladatában felírt eredménnyel:

$$\Psi(r,\theta,\phi) = f(r,\theta)\Big[\sqrt{\frac{1}{3}} e^{i\alpha_1} e^{i\phi} + \sqrt{\frac{1}{3}} e^{i\alpha_2} e^{4i\phi} + \sqrt{\frac{1}{3}} e^{i\alpha_3} e^{7i\phi}\Big].$$

5. feladat: Alakítsuk át a hullámfüggvényt:

$$\psi(x) = A \sin\left(\frac{4\pi}{d}x\right)\cos\left(\frac{4\pi}{d}x\right) = \frac{A}{2}\sin\left(\frac{8\pi}{d}x\right)$$

Ahol felhasználtuk, hogy $\sin\Big(2x\Big) = 2\sin\Big(x\Big)\cos\Big(x\Big)$. Ha fizikai állapotról van szó, akkor A a normálásból:

$$\|\psi\| = \int_0^d \psi^*(x)\psi(x)dx = \int_0^d \frac{|A|^2}{4}\sin^2\left(\frac{8\pi}{d}x\right)dx = \frac{|A|^2}{4}\int_0^d \frac{1}{2} - \frac{1}{2}\cos\left(\frac{16\pi}{d}x\right)dx =$$

$$= \frac{|A|^2}{4}\left(\int_0^d \frac{1}{2}dx - \int_0^d \frac{1}{2}\cos\left(\frac{16\pi}{d}x\right)dx\right) = \frac{|A|^2 d}{8} - \frac{|A|^2}{8}\left[\sin\left(\frac{16\pi}{d}x\right)\right]_0^d = \frac{|A|^2 d}{8}$$

$$\frac{|A|^2 d}{8} = 1 \Longrightarrow A = \sqrt{\frac{8}{d}}.$$

Az impulzus momentum sajátfüggvények szerinti kifejtés (ahol fehasználjuk az 1.óra 2. feladatának eredményeit):

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

A c_n együtthatók kiszámításának módja:

$$c_n = (\psi_n, \psi) = \frac{A}{2\sqrt{d}}\int_0^d e^{-i\frac{2\pi n}{d}x}\sin\left(\frac{8\pi}{d}x\right)dx = \frac{A}{4i\sqrt{d}}\int_0^d e^{-i\frac{2\pi n}{d}x}\left(e^{i\frac{8\pi}{d}x} - e^{-i\frac{8\pi}{d}x}\right)dx$$

1. tag: $\frac{A}{4i\sqrt{d}}\int_0^d e^{i\frac{8\pi}{d}x-i\frac{2\pi n}{d}x}dx = \frac{A}{4i\sqrt{d}}\int_0^d e^{i\frac{2\pi(4-n)}{d}x}dx = \frac{A}{4i\sqrt{d}}\left[\frac{e^{i\frac{2\pi(4-n)}{d}x}}{i\frac{2\pi(4-n)}{d}}\right]_0^d = \frac{A}{4i}\sqrt{d}\frac{e^{i2\pi(4-n)}-1}{i2\pi(4-n)} =$
$= \frac{A}{4i}\sqrt{d}\frac{\cos(2\pi(4-n))+i\sin(2\pi(4-n))-1}{i2\pi(4-n)} = \frac{A}{4i}\sqrt{d}\frac{i\sin(2\pi(4-n))}{i2\pi(4-n)} = \frac{A}{4i}\sqrt{d}\delta_{n,4}$

2. tag: $-\frac{A}{4i\sqrt{d}}\int_0^d e^{-i\frac{8\pi}{d}x-i\frac{2\pi n}{d}x}dx = -\frac{A}{4i\sqrt{d}}\int_0^d e^{-i\frac{2\pi(4+n)}{d}x}dx = -\frac{A}{4i\sqrt{d}}\left[\frac{e^{-i\frac{2\pi(4+n)}{d}x}}{-i\frac{2\pi(4+n)}{d}}\right]_0^d = -\frac{A}{4i}\sqrt{d}\frac{e^{-i2\pi(4+n)}-1}{-i2\pi(4+n)} =$
$= \frac{A}{4i}\sqrt{d}\frac{\cos(-2\pi(4+n))+i\sin(-2\pi(4+n))-1}{i2\pi(4+n)} = \frac{A}{4i}\sqrt{d}\frac{i\sin(-2\pi(4+n))}{i2\pi(4+n)} = -\frac{A}{4i}\sqrt{d}\frac{i\sin(2\pi(4+n))}{i2\pi(4+n)} = -\frac{A}{4i}\sqrt{d}\delta_{n,-4}$

Tehát c_n-nek két tagja van:$c_n = \frac{A}{4i}\sqrt{d}\delta_{n,4} - \frac{A}{4i}\sqrt{d}\delta_{n,-4}$. Ezzel a hullámfüggvény:

$$\psi = \sum_n c_n\psi_n = \frac{1}{\sqrt{d}}\sum_n c_n e^{i\frac{2\pi n}{d}x} = \frac{A\sqrt{d}}{4i\sqrt{d}}\sum_n \left(\delta_{n,4}-\delta_{n,-4}\right)e^{i\frac{2\pi n}{d}x}$$

A-t beírva:

$$\psi = \frac{1}{4i}\sqrt{\frac{8}{d}}\sum_n \left(\delta_{n,4}-\delta_{n,-4}\right)e^{i\frac{2\pi n}{d}x} = \frac{1}{i\sqrt{2d}}\sum_n \left(\delta_{n,4}-\delta_{n,-4}\right)e^{i\frac{2\pi n}{d}x}$$

<u>6. feladat</u>: **a.,** $\left[\hat{a},\hat{H}\right] = \left[\hat{a},\hbar\omega\left(\hat{a}^\dagger\hat{a}+\frac{1}{2}\right)\right] = \hbar\omega\left(\hat{a}\left(\hat{a}^\dagger\hat{a}+\frac{1}{2}\right)-\left(\hat{a}^\dagger\hat{a}+\frac{1}{2}\right)\hat{a}\right) =$
$= \hbar\omega\left(\hat{a}\hat{a}^\dagger\hat{a}+\frac{1}{2}\hat{a}-\hat{a}^\dagger\hat{a}\hat{a}-\frac{1}{2}\hat{a}\right) = \hbar\omega\left(\hat{a}\hat{a}^\dagger\hat{a}-\hat{a}^\dagger\hat{a}\hat{a}\right) = \hbar\omega\left(\left(\hat{a}\hat{a}^\dagger-\hat{a}^\dagger\hat{a}\right)\hat{a}\right) = \hbar\omega\left(\left[\hat{a},\hat{a}^\dagger\right]\hat{a}\right) = \hbar\omega\hat{a}$

b., $e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\hat{a}e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} = \hat{a}e^{-i\omega t}$
A második e-ad tagot sorbafejtjük:

$$e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\hat{a}\left(-1-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t-\frac{1}{2}\left(\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right)^2-...\right) = \hat{a}e^{-i\omega t}$$

Ha beírjuk mindenhova az $\left[\hat{a},\hat{H}\right] = \hbar\omega\hat{a}$ kommutátort és rendezzük az egyenletet, akkor azt kapjuk, hogy:

$$\hat{a}\left(-1-i\omega t-\frac{1}{2}\left(i\omega t\right)^2...\right) = \hat{a}e^{-i\omega t}$$

Látható, hogy a kapott kifejezés az exponenciális függvény definíciója, így az egyenlőség teljesül.

c., Koherens állapot, vagyis be kell látni, hogy ha az alapállapot $(\Psi(0,x))$ $\hat{a}$ sajátfüggvénye, akkor $\Psi(t,x) \equiv e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\Psi(0,x)$ is $\hat{a}$ sajátfüggvénye, vagyis ha a sajátérték egyenlet $\Psi(0,x)$-ra

$$\hat{a}\Psi(0,x) = z\Psi(0,x)$$

ahol $z=0$, akkor

$$\hat{a}\Psi(t,x) = \hat{a}e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\Psi(0,x)$$

is teljesül. Felhasználva az előzőekben felírt sorfejtést és kommutátort:

$$\hat{a}\Psi(t,x) = \hat{a}e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\Psi(0,x) = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\hat{a}\Psi(0,x) + \hat{a}e^{-i\omega t}\Psi(0,x)$$

Felhasználva, hogy $e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\hat{a}\Psi(0,x) = 0$, az egyenlet a következőképp alakul:

$$\hat{a}e^{-i\omega t}\Psi(0,x) = ze^{-i\omega t}\Psi(0,x)$$

A konstansokat átrendezhetjük, így a kiindulási sajátértékegyenletet kapjuk vissza.

<u>7. feladat</u>: A második feladat megoldásához hasonló a megoldás menete, de itt most ,,vissza-fele" Fourier-transzformációt alkalmazunk.

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

$$= \frac{1}{2\sqrt{\pi}}\int_{-1}^{0}e^{-ikx}dk + \frac{1}{2\sqrt{\pi}}\int_{0}^{1}e^{-ikx}dk = \frac{1}{2\sqrt{\pi}}\int_{0}^{1}e^{ikx}dk + \frac{1}{2\sqrt{\pi}}\int_{0}^{1}e^{-ikx}dk =$$

$$= -\frac{1}{\sqrt{\pi}}\int_{0}^{1}\frac{e^{ikx}-e^{-ikx}}{2}dk = -\frac{1}{\sqrt{\pi}}\int_{0}^{1}\cos(kx)dk = -\frac{1}{\sqrt{\pi}}\left[\sin(kx)\right]_0^1 = -\frac{1}{\sqrt{\pi}}\sin(x)$$