Kvantumfizika gyakorlófeladatok

NM

2015. december 1.

Feladatok:

Egydimenziós Schrödinger-egyenlet, lépcsős potenciálok

1. Oldjuk meg az egydimenziós Schrödinger-egyenletet abban az esetben, amikor a $V(x)$ potenciális energia a hely függvényében a következő:

$$V(x) = \begin{cases} 0, & \text{ha} \quad x < 0, \\ V_0, & \text{ha} \quad x > 0. \end{cases}$$

Tekintsük balról beeső $E > V_0$ energiájú részecskék áramát! Hanyad részük halad tovább a $+\infty$ irányba, és hanyad részük verődik vissza[1]?

2. * Az órán látottak mintájára számoljuk végig a derékszögű potenciálgát esetén kapott áthaladási és visszaverési valószínűséget, ha a részecske energiája nagyobb, mint a potenciálgát[2]! Azaz: oldjuk meg az egydimenziós Schrödinger-egyenletet balról beeső $E > V_0$ energiájú részecskékre, ha a $V(x)$ potenciális energia a hely függvényében

$$V(x) = \begin{cases} 0, & \text{ha} \quad x < 0, \\ V_0, & \text{ha} \quad 0 < x < a, \\ 0, & \text{ha} \quad x > a. \end{cases}$$

Ellenőrizzük megint csak, hogy a továbbhaladás és a visszaverődés valószínűségének összege egy!

3. Oldjuk meg az egydimenziós Schrödinger-egyenletet a Dirac-delta alakú potenciálban: legyen a potenciális energia $V(x) = -\alpha\delta(x)$, ahol $\alpha > 0$! Kialakul-e kötött (azaz $E < 0$ energiájú) állapot? Ha igen, mekkora lehet E? Ne feledjük: a hullámfüggvénynek kötött állapotban normáltnak kell lennie. Másrészt a Dirac-delta potenciálokban a hullámfüggvénynek „törése” lesz, aminek nagyságát az órán megbeszéltek alapján kell kigondolni.

4. Most legyen olyan a potenciál, hogy *két* egyforma „erősségű” Dirac-delta alakú völgy van, azaz legyen $V(x) = -\alpha\delta(x) - \alpha\delta(x-a)$! (Tehát a Dirac-delták 0-ban és a-ban, egymástól a távolságra vannak.) Kötött (azaz: $E < 0$) energiájú állapotokat keresünk.
   - Írjuk fel az összeillesztésből adódó egyenleteket!
   - ** Oldjuk is meg az energia-sajátértékre vonatkozó egyenletet! Itt megint csak grafikus eljárást kell keresni, de azért számos kérdésre ezzel is választ tudunk adni. Például: Kialakul-e kötött (azaz $E < 0$ energiájú) állapot? Jó tanács: érdemes a κ-t a szokásos módon bevezetni, majd a dimenziótlan $x = \kappa a$ ismeretlenre áttérni, illetve a szintén dimenziótlan (ellenőrizzük le, hogy tényleg az!) $\lambda = \frac{m\alpha a}{\hbar^2}$ paramétert használni. Helyes válasz: egy vagy kettő energia-sajátérték van, attól függően, hogy λ nagyobb-e, vagy nem, mint 1.

[1] Ellenőrizzük, hogy az eredmény tényleg teljesíti józan elvárásunkat: a továbbhaladás és a visszaverődés valószínűségének összege egy. Vigyázat: nem elég az amplitúdók négyzeteit tekinteni, ki kell számolni magát a j áramsűrűséget is, amibe még bejön az impulzus értéke, ami más a két térrészben!

[2] Ilyenkor tehát klasszikusan is átmehetne; abban, hogy átmegy, semmi szokatlan nincs. Ami szokatlan, hogy visszaverődik valamennyi.

5. Írjuk fel az összeillesztésekből adódó egyenleteket (nem kell megoldani őket!!!), ha balról $E > 0$ energiájú részecskék beesését tekintjük, és a Schrödinger-egyenletben szereplő $V(x)$ potenciál a következő:

$$V(x) = \begin{cases} 0, & \text{ha} \quad x < -b, \\ V_0, & \text{ha} \quad -b < x < -a, \\ 0, & \text{ha} \quad -a < x < a, \\ V_0, & \text{ha} \quad a < x < b, \\ 0, & \text{ha} \quad x > a, \end{cases}$$

ahol a és b pozitív hosszúságdimenziójú állandók, $a < b$. (A potenciál tehát két V_0 magasságú fal).

6. Írjuk fel az összeillesztésekből adódó egyenleteket kötött ($E < 0$ energiájú) állapotokra (nem kell megoldani őket!!!), ha a Schrödinger-egyenletben szereplő potenciál a következő: $V(x) = V_1(x) + \alpha\delta(x)$, ahol

$$V_1(x) = \begin{cases} 0, & \text{ha} \quad x < -a, \\ -V_0, & \text{ha} \quad -a < x < a, \\ 0, & \text{ha} \quad x > a, \end{cases}$$

azaz a derékszörű potenciálvölgy közepén egy Dirac-delta csúcs ül! Az α itt is megfelelő (milyen?) dimenzójú állandó. A V_0 energia dimenziójú, a pedig hosszúság dimenziójú állandó.

7. Térjünk kicsit vissza az órán látott derékszögű potenciálvölgy kötött állapotainak kérdésére! Itt ugye tehát

$$V(x) = \begin{cases} 0, & \text{ha} \quad x < 0, \\ -V_0, & \text{ha} \quad 0 < x < a, \\ 0, & \text{ha} \quad x > a, \end{cases}$$

   - ** Láttunk egy grafikus eljárást arra, hogy hogyan kell meghatározni az energia-sajátértékeket. Idézzük fel ezt! Ezután tekintsük azt ismeretlennek, hogy mennyivel van egy adott energia-sajátérték a $-V_0$ alapszint felett! (Vagyis: számítsuk az energiát most a potenciálvölgy aljától!) Ekkor minden energia-sajátérték pozitív lesz. Tegyük fel azt a kérdést, hogy mihez tart az első, második, stb. első néhány (határesetben az összes) energia-sajátérték, ha a potenciálvölgy V_0 mélységével (azaz most: a két kétoldai „fal" magasságával) ∞-hez tartunk! A grafikus eljárásból látszik majd, hogy egyszerű, analitikus eredményt kapunk az E értékekre ebben a határesetben.
   - Fel szokták tenni a „dobozba zárt" részecske kérdését is, vagyis amikor a potenciál

$$V(x) = \begin{cases} \infty, & \text{ha} \quad x < 0, \\ 0, & \text{ha} \quad 0 < x < a, \\ \infty, & \text{ha} \quad x > a, \end{cases}$$

     A $V = \infty$-t úgy kell itt érteni, hogy oda a részecske aztán *tényleg* nem hatolhat be, ott a hullámfüggvénye azonosan nulla. Fel szokás viszont tenni valamiért itt is, hogy a hullámfüggvény folytonos. Lássuk be, hogy ha azt is kikötnénk ezek után, hogy a deriváltja is folytonos, akkor már nem kapunk megoldást! Mit kapunk akkor megoldásnak, ha megengedjük, hogy ψ deriváltjában ugrás (azaz: ψ-ben törés) legyen a határokon (ami akármekkora lehet, semmilyen feltétel nem vonatkozik rá)? Visszakapjuk-e az előző pontban határesettel kapott lehetőségeket?

Kommutátorok, operátorok

8. Számítsuk ki (hozzuk egyszerűbb alakra) a következő kommutátorokat, ($\hat{x}$ és $\hat{p}$ a koordináta– és impulzusoperátor, a $V(\hat{x})$ operátor, csakúgy, mint a Schrödinger-egyenletben, a $V(x)$ függvénnyel való szorzás operátora):

$$\left[\hat{x}^2, \hat{p}\right] = ? \quad [\hat{x}\hat{p}, \hat{p}] = ? \quad \left[\hat{p}^2, \hat{x}^2\right] = ? \quad [\hat{p}, V(\hat{x})] = ?$$

Segítség: az első háromnál lehet az órán látott $\left[\hat{A}\hat{B}, \hat{C}\right]$ típusú összefüggéssel számolni, az utolsónál pedig nézzük meg, hogy konkrétan hogyan hat ez a kommutátor egy $\psi(x)$ függvényre (mint ahogyan a $[\hat{p}, \hat{x}] = -i\hbar\hat{I}$ belátásánál tettük)!

9. Az órán látottak mintájára fejezzük ki az $\left[\hat{A}\hat{B}, \hat{C}\hat{D}\right]$ kommutátort egyszerűbben, úgy, hogy az egyes operátorok „egyenkénti” kommutátorait használjuk[3]!

Harmonikus oszcillátor

10. Számítsuk ki a következő mátrixelemeket (a $|\psi_n\rangle$-ek a harmonikus oszcillátor energia-sajátállapotai, $\hat{x}$ és $\hat{p}$ mint fent, $\hat{a}$ és $\hat{a}^+$ az eltüntető– és keltőoperátor):

$$\left\langle\psi_n\right| \hat{a}^+ \left|\psi_m\right\rangle =? \quad \langle\psi_n| \hat{a} |\psi_m\rangle =? \quad \left\langle\psi_n\right| \hat{a}^+\hat{a}^+ \left|\psi_m\right\rangle =? \quad \langle\psi_n| \hat{a}\hat{a} |\psi_m\rangle =?$$

$$\langle\psi_n| \hat{x} |\psi_m\rangle =? \quad \langle\psi_n| \hat{p} |\psi_m\rangle =? \quad \left\langle\psi_n\right| \hat{x}^2 \left|\psi_m\right\rangle =? \quad \left\langle\psi_n\right| \hat{p}^2 \left|\psi_m\right\rangle =?$$

Ezek alapján mekkora a koordináta, a koordináta-négyzet, az impulzus, az impulzusnégyzet várható értéke egy adott $|\psi_n\rangle$ energia-sajátállapotban

11. Legyen a harmonikus oszcillátorunk állapota a következő:

$$|\psi\rangle = A\left\{(1+2i)\,|\psi_n\rangle + (1+i)\,|\psi_{n-1}\rangle\right\}.$$

Mekkora legyen A értéke (vegyük valósnak!), hogy az állapot normált legyen? Mi ebben az állapotban a koordináta, a koordináta-négyzet, az impulzus, az impulzusnégyzet, az energia várható értéke[4]? Ellenőrizzük, hogy tényleg valós számok jöttek-e ki!

Feles spin

12. A Pauli-mátrixok ugye a következők:

$$\hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Lássuk be a következő algebrai tulajdonságaikat!

- Mindegyik hermitikus, nulla nyomú. Továbbá: minden hermitikus nulla nyomú 2×2-es mátrix kifejezhető a lineáris kombinációjukként. (A komponenseket, később világossá váló okok miatt, egy vektor komponenseinek is tekinthetjük: tehát, ha $\hat{H}$ ilyen mátrix, akkor felírható $\hat{H} = v_x\sigma_x + v_y\sigma_y + v_z\sigma_z \equiv v_k\sigma_k$ alakban.)
- Két Pauli-mátrix szorzata: $\sigma_k\sigma_l = i\epsilon_{klm}\sigma_m + \delta_{kl}I$, ahol I itt a 2×2-es egységmátrix. Ez alapján: ha adott egy hermitikus nulla nyomú 2×2-es $\hat{H}$ mátrix, akkor az előzőek szerint neki megfelelő $\mathbf{v}$ vektor komponenseit így tudjuk meghatározni: $v_k = \mathrm{Tr}\left\{\hat{H}\sigma_k\right\}$. Továbbá: két ilyen hermitikus mátrix szorzata: $\hat{A} = \mathbf{a}_k\sigma_k$, $\hat{B} = \mathbf{b}_k\sigma_k$, akkor $\hat{A}\hat{B} = \mathbf{ab}I + i\left(\mathbf{a}\times\mathbf{b}\right)_k\sigma_k$.
- A Pauli-mátrixok kommutátorait is kiszámíthatjuk. Állítás:

$$\left[\frac{\sigma_k}{2}, \frac{\sigma_l}{2}\right] = i\epsilon_{klm}\frac{\sigma_m}{2}.$$

13. Normáljuk a következő feles spinű állapotokat (azaz határozzuk meg az A, B, C, stb. állandókat úgy, hogy az állapot egyre legyen normált), majd határozzuk meg az adott állapotban az x, y és z irányú spin-operátor várható értékét:

$$A\begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}, \quad B\begin{pmatrix} 1+i \\ \sqrt{2} \end{pmatrix}, \quad C\begin{pmatrix} 1/3 \\ i/3 \end{pmatrix}, \quad D\begin{pmatrix} i/3 \\ 2 \end{pmatrix}$$

[3] Többféle helyes megoldás (azaz: átírás) is létezik.
[4] Megjegyzés: hasonló feladatból ki lehet találni végtelen sokat, ide csak ezt az egyet írtam le.

14. Normáljuk a következő feles spinű állapotokat (azaz határozzuk meg az A, B, C, stb. állandókat úgy, hogy az állapot egyre legyen normált), majd határozzuk meg az adott állapotban, hogy mekkora valószínűséggel mérünk az $\mathbf{n}$ irányban történő spin-méréssel abba az irányba mutató spint:

$$A\begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}, \quad B\begin{pmatrix} i \\ \sqrt{3} \end{pmatrix}, \quad C\begin{pmatrix} \frac{1+i}{2} \\ \sqrt{2}i \\ \frac{i}{2} \end{pmatrix},$$

és legyen

$$n_x = \frac{1}{\sqrt{3}}, \quad n_y = \frac{1}{\sqrt{3}}, \quad n_z = \frac{1}{\sqrt{3}},$$

vagy másik példaként, legyen

$$n_x = \frac{1}{\sqrt{2}}, \quad n_y = \frac{1}{\sqrt{2}}, \quad n_z = 0.$$

15. Oldjuk meg általánosan is az előzőt: egy általános $|\psi\rangle$ spinállapotban milyen az $\mathbf{n}$ irányban történő spinmérés várható értéke? Mennyi az $\mathbf{n}$ irányban „fel”, és az $\mathbf{n}$ irányban „le” eredmények valószínűségei? Segítség: paraméterezzük az egységvektort gömbi koordinátákkal, a spinállapot pedig legyen $|\psi\rangle = \alpha\,|\uparrow\rangle + \beta\,|\downarrow\rangle$, és az α és β-ra ugye igaz, hogy $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$, paraméterezzük őket kényelmesen!

16. Keressük meg az általános $\mathbf{n}$ irányban történő spinmérés sajátállapotait, mint mindig, most is a z irányú spinmérés sajátállapotainak (a $|\uparrow\rangle$ és a $|\downarrow\rangle$ állapotok) lineárkombinációjaként! Azaz: keressünk olyan $|\psi\rangle = \alpha\,|\uparrow\rangle + \beta\,|\downarrow\rangle$ vektorokat, amelyek sajátállapotai az $\mathbf{n}$ irányú spinmérésnek! Segítség: paraméterezzük az egységvektort gömbi koordinátákkal! Ne feledkezzünk meg a normálásról!

17. Ismételjük meg az előző feladat levezetését úgy, hogy $\mathbf{n}$-et *nem* gömbi koordinátákban vesszük fel! Miután megkerestük az $\mathbf{n}$ irányú spinmérés $+\frac{\hbar}{2}$-höz tartozó sajátállapotát, vegyünk fel egy *másik* egységvektort, $\mathbf{m}$-et, és tegyük fel a kérdést: mekkora az előző állapotban az $\mathbf{m}$ irányú spinmérés várható értéke[5]?

[5] És válaszoljuk is meg! :D Egyszerű eredményt kell kapnunk.