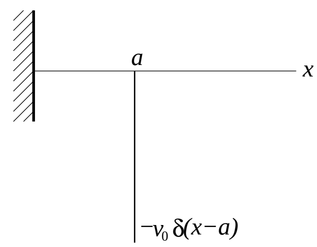
Kvantummechanika gyakorlat

1. zárthelyi megoldásai

1. feladat Egy m tömegű részecske csak az $x \geq 0$ félegyenesen tud mozogni. A potenciális energia

$$V(x) = -v_0\,\delta(x-a) \qquad (v_0 > 0, a > 0).$$



Az $x = 0$-nál lévő falnak speciális tulajdonságú. Hány kötött állapota van a rendszernek, ha

(a) a részecske „szereti” a falat (azaz a határfeltétel a falnál: $\Psi'(0) = 0$), ill. ha

(b) a részecske „nem szereti” a falat (azaz a határfeltétel a falnál: $\Psi(0) = 0$)?

(c) Ha mindkét esetben van legalább egy kötött állapot, akkor melyik esetben alacsonyabb az alapállapot energiája?

Megoldás:

Mivel a potenciál értéke a $x = \infty$-ben 0, ezért a kötött állapot enregiája $E < 0$ és a hullámfüggvény alakja:

$$\begin{aligned} \psi_I(x) &= Ae^{\kappa x} + Be^{-\kappa x} \quad , \, ha\; x < a \\ \psi_{II}(x) &= Ce^{\kappa x} + De^{-\kappa x} \quad , \, ha\; a < x \end{aligned}$$

ahol $\kappa = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(-E)}$.

Normálási feltételből következik, hogy $C = 0$, valamint az $x = a$ pontban felírhatjuk a hullámfüggvény folyotnosságát és derivált ugrását:

$$\psi_I(a) = \psi_{II}(a) \implies Ae^{\kappa a} + Be^{-\kappa a} = De^{-\kappa a}$$

$$\psi'_{II}(a) - \psi'_I(a) = -\frac{2mv_0}{\hbar^2}\psi_{II}(a) \implies -\kappa De^{-\kappa a} - \kappa\left(Ae^{\kappa a} - Be^{-\kappa a}\right) = -\frac{2mv_0}{\hbar^2}De^{-\kappa a}$$

A két egyenletet egymásba helyettesítve:

$$-\kappa\left(Ae^{\kappa a}+Be^{-\kappa a}\right)-\kappa\left(Ae^{\kappa a}-Be^{-\kappa a}\right)=-\frac{2mv_0}{\hbar^2}\left(Ae^{\kappa a}+Be^{-\kappa a}\right)$$

A következő lépésben ki kell használnunk az $x=0$-ban lévő határfeltételeket.

(a)

$$\Psi'(0)=0\Longrightarrow A=B$$

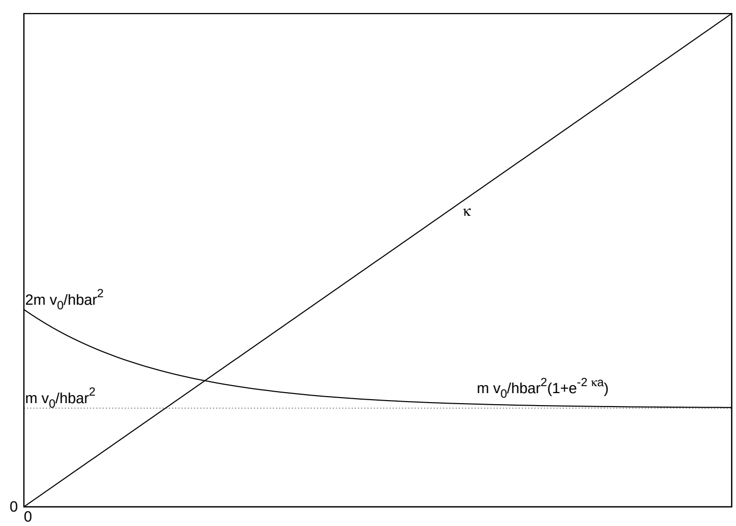
amivel a κ-ra vonatkozó egyenletünk a következőként alakul:

$$-\kappa\left(e^{\kappa a}+e^{-\kappa a}\right)-\kappa\left(e^{\kappa a}-e^{-\kappa a}\right)=-\frac{2mv_0}{\hbar^2}\left(e^{\kappa a}+e^{-\kappa a}\right)$$

kis átalakítás után:

$$\kappa=\frac{mv_0}{\hbar^2}\left(1+e^{-2\kappa a}\right)$$

Akkor létezik kötött állapotunk, ha van megoldása a fenti egyenletnek. Az egyenletet két oldalát tudjuk ábrázolni grafikusan. Mivel a jobb oldali függvény $x=0$-ban nagyobb, $x=\infty$-ben kisebb, ami között folytonosan megy át, ezért mindenképp metszi a bal oldal függvény.



(b)

$$\Psi(0)=0\Longrightarrow A=-B$$

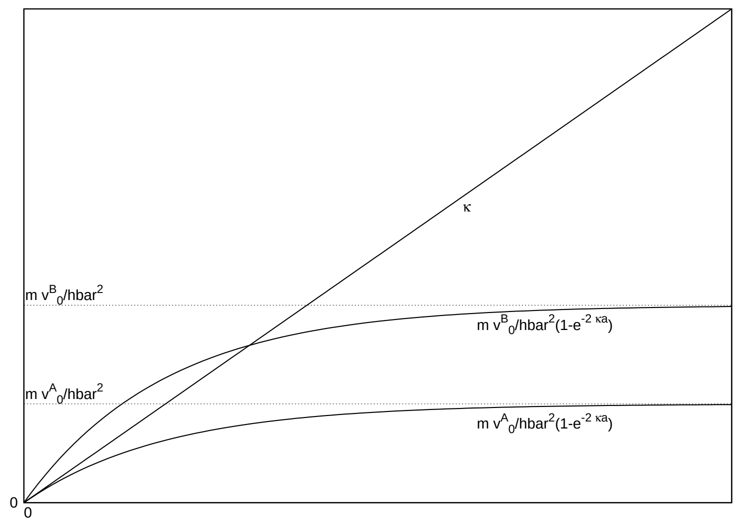
amivel a κ-ra vonatkozó egyenletünk a következőként alakul:

$$-\kappa\left(e^{\kappa a}-e^{-\kappa a}\right)-\kappa\left(e^{\kappa a}+e^{-\kappa a}\right)=-\frac{2mv_0}{\hbar^2}\left(e^{\kappa a}-e^{-\kappa a}\right)$$

kis átalakítás után:

$$\kappa=\frac{mv_0}{\hbar^2}\left(1-e^{-2\kappa a}\right)$$

Akkor létezik kötött állapotunk, ha van megoldása a fenti egyenletnek. Ebben az esetben nem olyan egyszerű meghatározni, hogy metszi-e egymást a két görbe, mert a jobb oldal is 0-ból indul, ezért csak akkor van metszete a két görbének, ha a jobb oldal meredekebben indul a lineárisnál. Ezt szemlélteti a lenti görbe.



Tehát a kötött állapot feltétele:

$$\boxed{\frac{2mv_0a}{\hbar^2} \geq 1}$$

(c) Az előző megoldásokban láthatjuk, hogy az (a) esetben a két görbe mindenképp $\kappa_a > \frac{mv_0}{\hbar^2}$ esetben metszik egymást, a (b) esetben pedig midenképp $\kappa_b < \frac{mv_0}{\hbar^2}$, vagyis $\kappa_b < \kappa_a$. Tudjuk, hogy $E = -\frac{\hbar^2}{2m}\kappa^2$, amiből következik, hogy:

$$\boxed{E_a < E_b}$$

2. feladat Számoljuk ki az 1D-s harmonikus oszcillátor energiasajátállapotaiban a $\Delta x \Delta p$ szorzatot!

Megoldás:

$$\Delta x = \sqrt{\langle \hat{x}^2 \rangle - \langle \hat{x} \rangle^2} \quad \Delta p = \sqrt{\langle \hat{p}^2 \rangle - \langle \hat{p} \rangle^2}$$

Az energiasajátállapotokat a szokásos módon $|n\rangle$ módon jelöljük, ahol $E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)$ és a léptetőoperátorok hatása rajta:

$$\begin{aligned} \hat{a}\,|n\rangle &= \sqrt{n}\,|n-1\rangle \\ \hat{a}^\dagger\,|n\rangle &= \sqrt{n+1}\,|n+1\rangle \end{aligned}$$

Felhasználva $\hat{x} = \sigma(\hat{a}^\dagger + \hat{a})$ és $\hat{p} = \frac{i\hbar}{2\sigma}(\hat{a}^\dagger - \hat{a})$ összefüggéseket a várhatóértékek könnyen kiszámíthatók:

$$\begin{aligned} \langle n|\,\hat{x}\,|n\rangle &= \langle n|\,\sigma(\hat{a}^\dagger + \hat{a})\,|n\rangle = 0 \\ \langle n|\,\hat{p}\,|n\rangle &= \langle n|\,\frac{i\hbar}{2\sigma}(\hat{a}^\dagger - \hat{a})\,|n\rangle = 0 \\ \langle n|\,\hat{x}^2\,|n\rangle &= \langle n|\,\sigma^2(\hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a} + \hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}\hat{a})\,|n\rangle = 0 + \sigma^2 n + \sigma^2\,(n+1) + 0 = \sigma^2\,(2n+1) \\ \langle n|\,\hat{p}^2\,|n\rangle &= \frac{-\hbar^2}{4\sigma^2}\,\langle n|\,(\hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger - \hat{a}^\dagger\hat{a} - \hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}\hat{a})\,|n\rangle = 0 + \frac{\hbar^2}{4\sigma^2}n + \frac{\hbar^2}{4\sigma^2}\,(n+1) + 0 = \frac{\hbar^2}{4\sigma^2}\,(2n+1) \end{aligned}$$

Az eredméyneket összerakva:

$$\boxed{\Delta x \Delta p = \frac{\hbar}{2}\,(2n+1) \geq \frac{\hbar}{2}}$$

3. feladat Számoljuk ki a Dirac-δ potenciál, valamint a véges mély potenciálgödör transzmissziós együtthatóját ($V_0 < 0$, $E > 0$)! Az utóbbit számoljuk ki a $V_0 \to -\infty$, $a \to 0$, $V_0 a = const.$ határátmenetben is! Milyen kapcsolatot lehet észrevenni?

Megoldás:

A transzfermátrixok ismertek mindkét esetben, amiből könnyű meghatározni a transzmissziós együtthatókat $t = \frac{1}{T_{22}}$:

$$t_\delta = \frac{1}{1 - \frac{m v_0 i}{\hbar^2 k}}$$

$$t_{gödör} = \frac{1}{\cos(k'a) - i\frac{k'^2+k^2}{2kk'}\sin(k'a)}$$

$k' = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E - V_0)}$, $k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}E}$. A határátmenetnél $V_0 a = -K$-t tartjuk fixen, ezért $k'a \sim \sqrt{V_0}a \to 0$ a határátmenetben. Ennek következménye, hogy $\cos(k'a) \to 1$.

A másik tagnál óvatosabban kell eljárnunk. A számlálóban $k'^2 + k^2 = -\frac{2m}{\hbar^2}V_0$ szerepel, a nevezőben $k' \sim \sqrt{V_0}$, amivel összességében egy $\sqrt{V_0}\sin\left(\sqrt{V}a\right)$ tagunk van, ami egy $0 \times \infty$ típusú. Legkönyebben úgy tudunk elbánni ezzel, ha bővítjük a törtet a-val, aminek következtében $\frac{\sin(k'a)}{k'a}$ tag jelenik meg, aminek határértéke $k'a \to 0$ határesetben 1. A maradék járulék nézni:

$$-i\frac{k'^2 + k^2}{2kk'}\sin(k'a) \to -i\frac{-2mV_0 a}{2\hbar^2 k} = -i\frac{mK}{\hbar^2 k}$$

így a transzmissziós együttható határértéke:

$$t_{gödör}^{határérték} = \frac{1}{1 - i\frac{mK}{\hbar^2 k}}$$

amit megvizsgálva láthatjuk, hogy egy $K = -V_0 a$ erősségű Dirac-δ transzmissziós együtthatójának felel meg.

4. feladat Hogy néz ki a hullámfüggvénye egy linerási potenciálban lévő részecskének? (Elég a koordinátatérbeli hullámfüggvény Fourier-előllítását megadni, érdemes impulzus-reprezentációban dolgozni!)

Megoldás:

Tekintsük az időfüggetlen Schrödinger-egyenletet lineráris potenciál esetében:

$$\hat{H}\left|\psi\right\rangle = \left[\frac{\hat{p}^2}{2m} + \alpha\hat{x}\right]\left|\psi\right\rangle = E\left|\psi\right\rangle$$

impulzusreprezentációban a következő alakot veszi az egyenlet:

$$\left[\frac{p^2}{2m} - \alpha\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial p}\right]\psi\left(p\right) = E\psi\left(p\right)$$

amiből egyszerű átrendezéssel kapjuk:

$$\frac{\partial}{\partial p}\psi\left(p\right) = \frac{i}{\hbar\alpha}\left(\frac{p^2}{2m} - E\right)\psi\left(p\right)$$

amit könnyen megoldhatunk:

$$\psi\left(p\right) = Ae^{\frac{i}{\hbar\alpha}\left(\frac{p^3}{6m} - Ep\right)}$$

ahol A normálási konstanst a határfeltételekből lehet meghatározni. A hullámfüggvény helyreprezentációs alakját Fourire-transzformációval kaphatjuk meg:

$$\boxed{\psi\left(x\right) = A\int\frac{\mathrm{d}p}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{\frac{i}{\hbar}px}e^{\frac{i}{\hbar\alpha}\left(\frac{p^3}{6m} - Ep\right)}}$$

5. feladat Számoljuk ki a harmonikus oszcillátor $\langle n| \left[\left(\hat{a}^\dagger\right)^3, \hat{a}\right] |m\rangle$ mátrixelemeit, majd ábrázoljuk a "végtelen mátrixot"!

Megoldás:

$\left[\left(\hat{a}^\dagger\right)^3, \hat{a}\right]$ kommuztátort könnyen kiszámolhatjuk a következő példa megoldásának ismeretében, vagy brute force is:

$$\begin{aligned}
\left[\left(\hat{a}^\dagger\right)^3, \hat{a}\right] &= \hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger\hat{a} - \hat{a}\hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger = \hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger\hat{a} - \hat{a}^\dagger\hat{a}\hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger - \hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger = \\
&= \hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger\hat{a} - \hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger\hat{a}\hat{a}^\dagger - 2\hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger = \\
&= \hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger\hat{a} - \hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger\hat{a} - 3\hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger = -3\hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger
\end{aligned}$$

Ennek az operátornak kell kiszámolnunk a mátrixelemeit:

$$-3\langle n| \hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger |m\rangle = -3\sqrt{m+1}\sqrt{m+2}\,\langle n|m+2\rangle = -3\sqrt{(m+1)(m+2)}\delta_{n,m+2}$$

Vagyis a mátrix:

$$\begin{pmatrix}
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\
-3\sqrt{2} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\
0 & -3\sqrt{6} & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\
0 & 0 & -3\sqrt{12} & 0 & 0 & 0 & \dots \\
0 & 0 & 0 & -3\sqrt{20} & 0 & 0 & \dots \\
\vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots
\end{pmatrix}$$

Nem szabad elfelejteni, hogy $n, m = 0, 1, 2, \dots$ értéket vehet fel.

+1. bónusz $\left[\left(\hat{a}^{\dagger}\right)^{n},\hat{a}\right]=?$

Megoldás:

A megoldáshoz elég a léptetőoperátorok kommutációs relációját felhasználni:

$$\left[\hat{a},\hat{a}^{\dagger}\right]=1$$

Számoljuk ki a kommutátort $n=1,2$ értékekre. $n=1$-re az eredmény triviális:

$$\left[\hat{a}^{\dagger},\hat{a}\right]=-1$$

$n=2$-re:

$$\left[\hat{a}^{\dagger}\hat{a}^{\dagger},\hat{a}\right]=\hat{a}^{\dagger}\hat{a}^{\dagger}\hat{a}-\hat{a}\hat{a}^{\dagger}\hat{a}^{\dagger}=\hat{a}^{\dagger}\hat{a}^{\dagger}\hat{a}-\hat{a}^{\dagger}\hat{a}\hat{a}^{\dagger}-\hat{a}^{\dagger}=\hat{a}^{\dagger}\hat{a}^{\dagger}\hat{a}-\hat{a}^{\dagger}\hat{a}^{\dagger}\hat{a}-2\hat{a}^{\dagger}=-2\hat{a}^{\dagger}$$

A számolásnál a kommutátor második tagjában elől szerepel $\hat{a}$, amit szépen végigkommutálunk az utolsó helyre. Minden egyes kommutálásnál egy $-\hat{a}^{\dagger}$ tagot szedünk fel, ezért innen sejthetjük, hogy mi lesz az általános megoldás:

$$\left[\left(\hat{a}^{\dagger}\right)^{n},\hat{a}\right]=-n\left(\hat{a}^{\dagger}\right)^{n-1}$$

Ezt induktíven tudjuk belátni. Tegyük fel, hogy teljesül $\left[\left(\hat{a}^{\dagger}\right)^{n-1},\hat{a}\right]=-\left(n-1\right)\left(\hat{a}^{\dagger}\right)^{n-2}$. Ekkor:

$$\begin{aligned}\left[\left(\hat{a}^{\dagger}\right)^{n},\hat{a}\right] &= \hat{a}^{\dagger}\left(\hat{a}^{\dagger}\right)^{n-1}\hat{a}-\hat{a}\hat{a}^{\dagger}\left(\hat{a}^{\dagger}\right)^{n-1}=\hat{a}^{\dagger}\left(\hat{a}^{\dagger}\right)^{n-1}\hat{a}-\hat{a}^{\dagger}\hat{a}\left(\hat{a}^{\dagger}\right)^{n-1}-\left(\hat{a}^{\dagger}\right)^{n-1}=\\ &= \hat{a}^{\dagger}\left[\left(\hat{a}^{\dagger}\right)^{n-1},\hat{a}\right]-\left(\hat{a}^{\dagger}\right)^{n-1}=\\ &= -\hat{a}^{\dagger}\left(n-1\right)\left(\hat{a}^{\dagger}\right)^{n-2}-\left(\hat{a}^{\dagger}\right)^{n-1}=-n\left(\hat{a}^{\dagger}\right)^{n-1}\end{aligned}$$

Ezzel beláttuk az állítást, hiszen $n=1$-re teljesül.