Szabó Vencel HGACP9

4.) A függvény akkor lesz négyzetesen integrálható, ha

$$\int_0^1 dx \; |f(x)|^2 < \infty \qquad f(x) = x^{v}$$

$$\int_0^1 dx \; x^{2v} = \frac{x^{2v+1}}{2v+1}\Big|_0^1$$

$0^{v} = 0$ $\quad 1^{v} = 1$ minden v-re $\dfrac{1}{2v+1}$-et kell vizsgálni.

$2v+1 > 0$ esetén kapunk majd értelmezhető eredményt (függvény abszolút értékével a négyzetét vizsgáljuk).

$v > -\frac{1}{2}$ esetén négyzetesen integrálható lesz a függvény.

A $v = \frac{1}{2}$ esetben az integrál:

$$\int_0^1 \left(x^{\frac{1}{2}}\right)^2 dx = \int_0^1 dx \; x = x^2\Big|_0^1 = 1$$

$v = \frac{1}{2}$ esetén a függvény eleme lesz a Hilbert-térnek.

$$g(x) = x \cdot f(x) = x \cdot x^{v} = x^{v+1}$$

$$\int_0^1 dx \, (x^{v+1})^2 < \infty \qquad \int_0^1 dx \, x^{2v+2} = \frac{x^{2v+3}}{2v+3}\Big|_0^1$$

A számláló megint 1 lesz.

$$2v+3>0 \qquad v>-\frac{3}{2}$$

$x=\frac{1}{2}$ esetén az integrál;

$$\int_0^1 dx \, (x^{\frac{3}{2}})^2 = \int_0^1 dx \, x^3 = \frac{x^4}{4}\Big|_0^1 = \frac{1}{4}$$

Vagyis $g(x)$ eleme a Hilbert-térnek.

$$h(x) = \frac{df(x)}{dx} = v x^{v-1} \qquad v=\frac{1}{2} \text{ esetén } \frac{1}{2}x^{-\frac{1}{2}}$$

Az integrált elvégezve;

$$\int_0^1 dx \left(\frac{1}{2}x^{-\frac{1}{2}}\right)^2 = \int_0^1 dx \, \frac{1}{4}x^{-1} = \int_0^1 \frac{1}{4x} \, dx$$

Ez a függvény 0-ban elszáll a végtelenbe, így az integrál nem konvergál.

3-as feladat

$$\langle p \rangle = m \frac{d\langle x \rangle}{dt} = m \frac{d}{dt} \int_{-\infty}^{\infty} x |\psi|^2 \, dx =$$

$$m \int_{-\infty}^{\infty} x \frac{\partial |\psi|^2}{\partial t} dx$$

Legyen most $\frac{\partial |\psi|^2}{\partial t} = - \frac{\partial j}{\partial x}$

$$\langle p \rangle = -m \int_{-\infty}^{\infty} x \frac{\partial j}{\partial x} dx = m \int_{-\infty}^{\infty} j \, dx$$

$$\langle p \rangle = -\frac{i\hbar}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} - \frac{\partial \psi^*}{\partial x} \psi \right) dx =$$

$$-i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} \, dx$$

A szorzatfüggvény integrálását kihasználva;

$$\frac{d\langle p\rangle}{dt} = -i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{\partial \psi^*}{\partial t} \frac{\partial \psi}{\partial x} + \psi^* \frac{\partial^2 \psi}{\partial t \partial x} \right) dx$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} \left[\left(i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} \right)^* \frac{\partial \psi}{\partial x} + \frac{\partial \psi^*}{\partial x} \left(i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} \right) \right] dx$$

A Schrödinger-egyenletből behelyettesítve;

$$\frac{d\langle p\rangle}{dt} = \int_{-\infty}^{\infty} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial \psi^*}{\partial x} \frac{\partial \psi}{\partial x} \right) + V(x) \frac{\partial |\psi|^2}{\partial x} \right] dx$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} V(x) \frac{\partial |\psi|^2}{\partial x} dx$$

$$\frac{d\langle p\rangle}{dt} = -\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dU}{dx} |\psi|^2 dx = -\left\langle \frac{dU}{dx} \right\rangle$$

$$\frac{d\langle p\rangle}{dt} = -\left\langle \frac{dU}{dx} \right\rangle$$

Az egyenlet nagyon hasonló alakot ölt Newton II. egyenletéhez (ez a kvantummechanikában nem teljesül, az Ehrenfest-tétel helyettesíti.

1-es feladat

$$U(x) = -a\,\delta(x)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x) + U(x)\,\psi(x) = E\,\psi(x)$$

$$\psi''(x) = \frac{2m}{\hbar^2}U(x)\,\psi(x) - \frac{2m}{\hbar^2}E\,\psi(x)$$

A potenciál 0-ban végtelen, így $-\varepsilon$-tól ε-ig kell integrálnunk.

$$\int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} dx\,\psi''(x) = \frac{2m}{\hbar^2}\int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} -\alpha\,\delta(x)\,\psi(x)$$

$$-\frac{2m}{\hbar^2}E\int_{-\varepsilon}^{\varepsilon}\psi(x)\,dx$$

A deriváltfüggvények ugrása lesz 0-ban.

$$\psi'(\varepsilon) - \psi'(-\varepsilon) = \frac{2m}{\hbar^2}\left[I_1 + I_2\right]$$

$$I_1 = \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} dx \; -\alpha\, \delta(x)\, \psi(x) = -\alpha\, \psi(0)$$

$$I_2 = \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} dx \; \psi(x)\, dx = \psi(0) \cdot 2\varepsilon$$

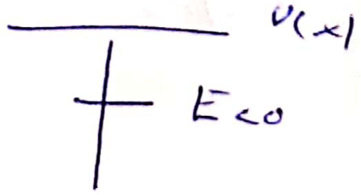
↳ a függvény alatti terület téglalap-módszerrel

$$\psi'(\varepsilon) - \psi'(-\varepsilon) = \frac{2m}{\hbar^2}\left(-\alpha\, \psi(0) + \psi(0)\, 2\varepsilon\right)$$

Ha $\varepsilon \to 0$ $\quad \psi(0) \cdot 2\varepsilon \to 0$

A derivált ugrása $\quad -\frac{2m}{\hbar^2}\, \alpha\, \psi(0)$

0-ban elválasztva két részre osztom a teret



A potenciál mindkét térfélen 0, így $U(x)$ eltűnik.

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x) = E\psi(x)$$

Mindkét térfélre $E<0$ így

$$\psi''(x) = -\frac{2m}{\hbar^2}E\psi(x)$$

$E<0$ így ez egy pozitív kifejezés

$$\psi''(x) = \frac{-2m}{\hbar^2}E\psi(x)$$

Legyen $\kappa = \sqrt{-\frac{2m}{\hbar^2}E}$

Keressük e-ados alakban a megoldást:

$$\psi''(x) = \kappa^2\psi(x)$$

Keressük e-ados alakban a megoldást:

$$\psi(x) = Ae^{\kappa x} + Be^{-\kappa x}$$

$$\psi(x) = Ce^{\kappa x} + De^{-\kappa x}$$

A függvények normálhatónak kell lennie, így $B = C = 0$

A keresett függvények így;

$$\psi(x) = A e^{\varkappa x}$$ a negatív térfélre

$$\psi(x) = B e^{-\varkappa x}$$ a pozitív térfélre

0-ban is folytonos, így $A = B = \gamma$

$$\psi(x) = \begin{cases} \gamma e^{\varkappa x} & \text{ha } x < 0 \\ \gamma e^{-\varkappa x} & \text{ha } x > 0 \end{cases}$$

$$\psi_1'(x) = \varkappa \cdot \gamma e^{\varkappa x}$$

$$\psi_2'(x) = -\varkappa \gamma e^{-\varkappa x}$$

Az ugrás így $2\varkappa\gamma$

A deriváltak ugrása megegyezik;

$$2\varkappa\gamma = \frac{-2m}{\hbar^2} \alpha \psi(0)$$

$$\varkappa = \frac{-m}{\hbar^2} \alpha$$

$$\sqrt{-\frac{2m}{\hbar^2} E} = -\frac{m\alpha}{\hbar^2}$$

$$\sqrt{\frac{-2mE}{\hbar^2}} = -\frac{m\alpha}{\hbar^2}$$

$$\frac{-2mE}{\hbar^2} = \frac{m\alpha^2}{\hbar^4} \qquad \frac{-2\hbar^2 E}{m} = \alpha^2$$

$$\alpha = \sqrt{\frac{-2\hbar^2}{m}E} \qquad E = \frac{\alpha^2 m}{-2\hbar^2}$$

γ meghatározása;

$$\int_{-\infty}^{0} \gamma^2 e^{2\kappa x}\,dx = \gamma^2 \left[\frac{e^{2\kappa a}}{2\kappa}\right]_{-\infty}^{0} = \frac{\gamma^2}{2\kappa}$$

A feltétel, hogy a teljes integrál 1 legyen.

$$\frac{\gamma^2}{\kappa} = 1 \qquad \gamma = \sqrt{\kappa} = \sqrt{\frac{m}{\hbar^2}\alpha}$$

$$\psi(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{m\alpha}{\hbar^2}}\, e^{\kappa x} \\ \sqrt{\frac{m\alpha}{\hbar^2}}\, e^{-\kappa x} \end{cases} \qquad \kappa = \sqrt{\frac{-2mE}{\hbar^2}} \qquad E = \frac{-m}{2\hbar^2}\alpha^2$$

2-es feladat

(10.)

$$\langle \psi | \hat{A} \psi \rangle = \int \psi^*(x) A \psi(x) dx$$

Az integrálok kiszámítása;

$$\langle x \rangle = \int_0^a x \, |\psi_n(x)|^2 \, dx$$

$$\langle x^2 \rangle = x^2 \, |\psi_n(x)|^2 \, dx$$

Ezek segítségével

$$\sigma_x^2 = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2$$

$$\sigma_x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2}$$

$$\langle x \rangle = \int_0^a x \, |\psi_n(x)|^2 \, dx$$

$$\langle x \rangle = \int_0^a x \, \left| \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a} x\right) \right|^2 dx$$

$$\langle x \rangle = \int_0^a x \, \frac{2}{a} \sin^2\left(\frac{n\pi}{a} x\right) dx$$

$$\sin^2(z) = \frac{1-\cos(z)}{2}$$

Az integrál a következő alakba írható:

$$\frac{2}{a}\int_0^a x \cdot \left(\frac{1-\cos\left(\frac{2n\pi}{a}x\right)}{2}\right)dx =$$

$$\frac{2}{a}\int_0^a \frac{1}{2}x\,dx - \int_0^a \frac{x}{a}\cos\left(\frac{2n\pi}{a}x\right)dx$$

$$\frac{2}{a}\int_0^a \frac{1}{2}x\,dx = \frac{2}{a}\left[\frac{1}{4}x^2\right]_0^a = \frac{2}{a}\,\frac{1}{4}a^2 = \frac{1}{4}a$$

$$\int_0^a \frac{x}{a}\cos\left(\frac{2n\pi}{a}x\right) = \frac{a\left(2n\pi\,\overset{0}{\sin(2n\pi)} + \cos(2n\pi) - 1\right)}{4\pi^2 n^2}$$

$$= \frac{a(1-1)}{4\pi^2 n^2} = 0$$

Így a teljes integrál értéke $\frac{1}{4}a$ lesz.

(12.)

$$\langle x^2 \rangle = \int_0^a x^2 \cdot \frac{2}{a} \sin^2\left(\frac{n\pi x}{a}\right) dx =$$

$$\int_0^a x^2 \frac{1-\cos\left(\frac{2n\pi x}{a}\right)}{a} dx =$$

$$\int_0^a \frac{x^2}{a} dx - \int_0^a x^2 \frac{\cos\left(\frac{2n\pi x}{a}\right)}{a} dx$$

$$\int_0^a \frac{x^2}{a} dx = \left[\frac{x^3}{3a}\right]_0^a = \frac{a^2}{3}$$

$$\int_0^a \frac{x^2 \cos\left(\frac{2n\pi x}{a}\right)}{a} dx =$$

$$\frac{a^2\left(\left(2\pi^2 n^2 - 1\right)\sin(2n\pi) + 2n\pi\cos(2n\pi)\right)}{4\pi^3 n^3}$$

$$= \frac{a^2 (2n\pi)}{4\pi^3 n^3} = \frac{a^3\, 2\pi}{4\pi^3 n^2} = \frac{a^2}{2\pi^2 n^2}$$

Az integrál eredménye így $\frac{a^2}{3} - \frac{a^2}{2n^2\pi^2}$

$$\langle p\rangle = \int_0^a \psi^*(x) \left(-i\hbar \frac{d}{dx}\right) \psi(x)\, dx$$

$$\langle p\rangle = -i\hbar \int_0^a \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \frac{d}{dx} \cdot \left(\sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right)\right) dx$$

$$\sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \frac{d}{dx} = \sqrt{\frac{2}{a}}\, \frac{n\pi}{a} \cos\left(\frac{n\pi x}{a}\right)$$

Az integrál így a következő lesz;

$$\langle p\rangle = -i\hbar \int_0^a \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \sqrt{\frac{2}{a}}\, \frac{n\pi}{a} \cos\left(\frac{n\pi x}{a}\right) dx$$

$$= -i\hbar \, \frac{2}{a} \, \frac{n\pi}{a} \int_0^a \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \cos\left(\frac{n\pi x}{a}\right) dx$$

$$= -i\hbar \, \frac{2}{a} \, \frac{n\pi}{a} \left(\frac{a \cdot \sin^2(2n\pi)}{4\pi n} \right) = 0$$

Jigy $\langle p \rangle = 0$

$$\langle p^2 \rangle = \int_0^a \psi^*(x) \, \hat{p}^2 \, \psi(x) \, dx$$

$$\hat{p}^2 = -\hbar^2 \frac{d^2}{dx^2}$$

$$\langle p^2 \rangle = \int_0^a \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \left(-\hbar^2 \frac{d^2}{dx^2}\right) \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) dx$$

$$= -\frac{2}{a} \int_0^a (-\hbar^2) \left(\frac{n\pi}{a}\right)^2 \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) dx$$

$$= \frac{2}{a} \, \frac{n^2 \pi^2}{a^2} \, \hbar^2 \int_0^a \sin^2\left(\frac{n\pi x}{a}\right) dx$$

$$\sin^2\left(\frac{n\pi x}{a}\right) = \frac{1 - \cos\left(\frac{2n\pi x}{a}\right)}{2}$$

$$\int_0^a \frac{1}{2} \, dx = \frac{a}{2}$$

15.

$$\int_0^a \frac{\cos\left(\frac{2n\pi x}{a}\right)}{2} = \frac{a \cdot \sin(2n\pi)}{4\pi n} = 0$$

Így $\langle p^2 \rangle = \frac{2}{a} \frac{n^2\pi^2}{a^2} \hbar \frac{a}{2} = \frac{n^2\pi^2}{a^2} \hbar^2$

$$\sigma_x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2} = \sqrt{\frac{a^2}{3} - \frac{1}{16}a^2} = a \cdot \frac{\sqrt{39}}{12}$$

$$\sigma_p = \sqrt{\langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2} = \sqrt{\frac{n^2\pi^2\hbar^2}{a^2} - 0} = \frac{n\pi\hbar}{a}$$

A határozatlansági reláció:

$$\sigma_x \sigma_p \geq \frac{\hbar}{2}$$

$$a \cdot \frac{\sqrt{39}}{12} \cdot \frac{n\pi\hbar}{a} \geq \frac{\hbar}{2}$$

$$\frac{\sqrt{39}}{12} n\pi \geq \frac{1}{2} \qquad \frac{\sqrt{39}}{6} n\pi \geq 1$$

$n \in \mathbb{Z}^+$ így a határozatlansági reláció teljesül.