Kvantummechanika A – gyakorlat
3. gyakorlat

Schrödinger-egyenlet, potenciálok és kötött állapotok

1. feladat

Az egydimenziós impulzusoperátor milyen Hilbert-altéren lesz hermitikus?

Vegyük az $[a, b]$ intervallumon **négyzetesen integrálható függvények Hilbert-terét**: $\mathcal{L}_2(a, b)$. Az impulzus operátor szokásos alakja $\hat{p} = -i\hbar\partial_x$, és arra vagyunk kíváncsiak, hogy a $\hat{p}^\dagger = \hat{p}$ egyenlőség az $\mathcal{L}_2(a, b)$ milyen alterén teljesül. Tudjuk, hogy a skalárszorzat $\mathcal{L}_2(a, b)$-n

$$\langle f|g\rangle = \int_a^b \mathrm{d}x\ f^*(x)g(x)$$

alakban írható. Ekkor

$$\langle f|\hat{p}g\rangle = -i\hbar \int_a^b \mathrm{d}x\ f^*(x)g'(x)\ ,$$

$$\langle \hat{p}f|g\rangle = i\hbar \int_a^b \mathrm{d}x\ f^{*\prime}(x)g(x)\ .$$

Ha $\hat{p}$ hermitikus, akkor a fenti két skalárszorzat egyenlő. Parciálisan integráljunk az első skalárszorzatban:

$$\langle f|\hat{p}g\rangle = -i\hbar\left[\big[f^*(x)g(x)\big]_a^b - \int_a^b \mathrm{d}x\ f^{*\prime}(x)g(x)\right] = \text{határtag} + \langle \hat{p}f|g\rangle\ .$$

Látható, hogy ha a határtag elhagyható (azaz pl. az $f(a) = g(a) = f(b) = g(b) = 0$ megkötéssel kapjuk meg az $\mathcal{L}_2(a, b)$ megfelelő alterét), akkor valóban teljesül, hogy $\hat{p}^\dagger = \hat{p}$.

2. feladat

Vizsgáljuk meg, hogy az egydimenziós Hamilton-operátor sajátfüggvényei is degeneráltak-e degenerált energia sajátérték esetén!

Írjuk fel az egydimenziós **Schrödinger-egyenlet**et $\psi_1(x) \neq \psi_2(x)$ hullámfüggvényekkel ($\psi_1, \psi_2 \in \mathcal{L}_2$) úgy, hogy $E_1 = E_2 = E$, azaz a két különböző hullámfüggvényhez ugyanaz az energia tartozik.

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi_1''(x) + V(x)\psi_1(x) = E\psi_1(x)\ ,$$
$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi_2''(x) + V(x)\psi_2(x) = E\psi_2(x)\ .$$

Szorozzuk meg a ψ_1-re vonatkozó egyenletet ψ_2-vel, a ψ_2-re vonatkozót pedig ψ_1-gyel, majd vonjuk ki az egyik egyenletet a másikból! Ekkor

$$\psi_1''(x)\psi_2(x) - \psi_2''(x)\psi_1(x) = 0 \ .$$

Észrevehetjük, hogy ez éppen azt jelenti, hogy

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left[\psi_1'(x)\psi_2(x) - \psi_2'(x)\psi_1(x)\right] = 0 \qquad \Longrightarrow \qquad \psi_1'(x)\psi_2(x) - \psi_2'(x)\psi_1(x) = \text{állandó} \ .$$

Ennek tetszőleges x-re teljesülnie kell. Mivel a hullámfüggvényeink négyzetesen integrálható függvények, így jó lenne, ha a végtelenben eltűnnének, azaz $\psi_{1,2}(x \to \pm\infty) \to 0$. Továbbá annak is örülnénk, ha egy hullámfüggvényre hattatva a $\hat{p}$ operátort nem lépnénk ki az $\mathcal{L}_2$-ből, ennélfogva a hullámfüggvények deriváltja is tűnjön el a végtelenben: $\psi_{1,2}'(x \to \pm\infty) \to 0$. Ez alapján a fenti állandó csakis 0 lehet, így

$$\begin{aligned}
\psi_1'(x)\psi_2(x) &= \psi_2'(x)\psi_1(x) \\
\frac{\psi_1'(x)}{\psi_1(x)} &= \frac{\psi_2'(x)}{\psi_2(x)} \\
\int \frac{1}{\psi_1}\frac{\mathrm{d}\psi_1}{\mathrm{d}x}\mathrm{d}x &= \int \frac{1}{\psi_2}\frac{\mathrm{d}\psi_2}{\mathrm{d}x}\mathrm{d}x \\
\ln\psi_1 &= \ln\psi_2 + \ln\alpha \\
\psi_1(x) &= \alpha\psi_2(x)
\end{aligned}$$

ahol $\ln\alpha$ egy integrálási konstans. Látható, hogy degenerált energia esetén a két hullámfüggvény csak egy α faktorban különbözhet. A $\psi_1(x)$ és $\psi_2(x)$ normáltsága miatt azonban $|\alpha| = 1$, azaz $\alpha = e^{i\varphi}$, ennélfogva azt mondhatjuk, hogy két hullámfüggvény ekvivalensnek tekinthető, ha csak egy komplex fázisban különböznek[1].

3. feladat

Számítsuk ki a koordináta és az impulzus operátorok kommutátorát!

Az ilyen feladatokat legegyszerűbben úgy számíthatjuk ki, hogy ha hattatjuk a kommutátort valamilyen $f(x)$ próbafüggvényre.

$$\begin{aligned}
[\hat{x},\hat{p}]f(x) &= \hat{x}\hat{p}f(x) - \hat{p}\hat{x}f(x) = \hat{x}(-i\hbar)f'(x) + i\hbar\partial_x\big(xf(x)\big) \\
&= \cancel{-i\hbar x f'(x)} + i\hbar f(x) + \cancel{i\hbar x f'(x)} = i\hbar f(x) \ ,
\end{aligned}$$

azaz $[\hat{x},\hat{p}] = i\hbar\mathbf{1}$.

Kötött állapotok véges potenciálgödör esetén

Az alábbi feladatok nem feltétlenül szükségesek a véges potenciálgödör problémájának megoldásához és a kötött állapotok megtalálásához, azonban látni fogjuk, hogy felhasználva az végeredményeiket a feladat és a számolások részletei lényegesen leegyszerűsödnek.

[1]A későbbiekben előadáson hallani fogunk a Hilbert-téren definiálható *sugarakról*, itt most éppen őket értük tetten.

4. feladat

Konstans potenciál mellett határozzuk meg a kötött és szórásállapotok hullámfüggvényeit!

A Schrödinger-egyenlet konstans $V(x) = V_0$ potenciál mellett:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x) + V_0\psi(x) = E\psi(x) \; .$$

Ekkor két esetet különböztethetünk meg: ha $E > V_0$, akkor **szórásállapot**ról, míg ha $E < V_0$, akkor **kötött állapot**ról beszélhetünk. Kezdjük az előbbivel:

- ha $E > V_0$, akkor átrendezhetjük a Schrödinger-egyenletet mint

  $$\psi''(x) = -\frac{2m}{\hbar^2}(E - V_0)\psi(x) = -k^2\psi(x) \; ,$$

  ahol $k^2 = 2m(E - V_0)/\hbar^2 > 0$ pozitív mennyiség írható fel. Ekkor a megoldandó differenciálegyenletben felismerhető a harmonikus oszcillátor egyenlete, azaz az általános szórásállapot hullámfüggvénye

  $$\psi(x) = A\cos(kx) + B\sin(kx) \; .$$

- Ha $E < V_0$, akkor az előbbi esethez hasonlóan a Schrödinger-egyenletet felírhatjuk mint

  $$\psi''(x) = -\frac{2m}{\hbar^2}(E - V_0)\psi(x) = \frac{2}{\hbar^2}(V_0 - E)\psi(x) = \kappa^2\psi(x) \; ,$$

  ahol $\kappa^2 = 2m(V_0 - E)/\hbar^2 > 0$ pozitív mennyiség definiálható. A kötött állapot hullámfüggvénye (a differenciálegyenlet a harmonikus oszcillátor egyenletével teljesen analóg módon oldható meg)

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

5. feladat

Hogyan viselkedik a hullámfüggvény $\psi'(x)$ deriváltja az $x = x_0$ pontban, ha a potenciál véges nagyot ugrik x_0-ban?

A $\psi(x)$ hullámfüggvény legyen folytonos. A potenciál legyen

$$V(x) = \begin{cases} V_0 \; , & \text{ha } x < x_0 \\ V_1 \; , & \text{ha } x \geq x_0 \end{cases} \; .$$

A Schrödinger-egyenletet fel tudjuk írni mint

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

Integráljuk a Schrödinger-egyenletet az x_0 körül valamilyen $\varepsilon \ll 1$ sugarú tartományon:

$$\int\limits_{x_0-\varepsilon}^{x_0+\varepsilon} \mathrm{d}x\ \psi''(x) = \frac{2m}{\hbar^2} \int\limits_{x_0-\varepsilon}^{x_0+\varepsilon} \mathrm{d}x\ \big[V(x) - E\big]\psi(x)$$

$$\psi'(x_0+\varepsilon) - \psi'(x_0-\varepsilon) = \frac{2m}{\hbar^2}\big[I_1 + I_2\big]$$

A bal oldalon az $\varepsilon \to 0$ limeszben éppen a $\psi'(x)$ ugrását kapjuk x_0 helyen. A két integrál

$$I_1 = (V_0 - E) \int\limits_{x_0-\varepsilon}^{x_0} \mathrm{d}x\ \psi(x) = \varepsilon(V_0 - E)\psi(x_0)$$

$$I_2 = (V_1 - E) \int\limits_{x_0}^{x_0+\varepsilon} \mathrm{d}x\ \psi(x) = \varepsilon(V_1 - E)\psi(x_0)$$

Látható, hogy ha $\varepsilon \to 0$, akkor mindkét integrál 0-hoz tart, azaz a hullámfüggvény deriváltjának x_0-beli ugrása is 0-hoz tart, így beláttuk, hogy $\psi'(x)$ folytonos marad, ha a potenciál véges nagyot ugrik.

6. feladat

Keressük meg a paritásoperátor sajátfüggvényeit!

Vegyünk valamilyen $[-a, a]$ szimmetrikus intervallumot, és legyen paritásoperátor hatása valamilyen függvényre $\hat{P}\ :\ f(x) \to f(-x)$. Ha $f(x)$ sajátfüggvénye $\hat{P}$-nek, akkor

$$\hat{P}f(x) = f(-x) = \lambda f(x)\ ,$$

ahol λ lesz $\hat{P}$ sajátértéke. Ha kétszer hattatjuk $\hat{P}$-t egymás után $f(x)$-re, akkor

$$\hat{P}\hat{P}f(x) = f(x) = \lambda^2 f(x)\ ,$$

ahonnan látjuk, hogy $\lambda = \pm 1$, azaz

$$\hat{P}f(x) = \begin{cases} f(-x) = f(x) \\ f(-x) = -f(x) \end{cases} ,$$

így a $\hat{P}$ paritásoperátor sajátfüggvényei a tisztán páros vagy a tisztán páratlan függvények lehetnek.

7. feladat

Mutassuk meg, hogy ha két operátor kommutál egymással, akkor létezik közös sajátfüggvény rendszerük!

Legyen $\hat{A}, \hat{B}$ valamilyen Hilbert-térre ható egymással kommutáló operátor, azaz $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$. Írjuk fel az $\hat{A}$ operátor sajátérték-egyenletét mint

$$\hat{A}|\alpha\rangle = a|\alpha\rangle\ ,$$

ahol $|\alpha\rangle$ jelölje a sajátfüggvényt (sajátvektort) és a az (egyelőre) nem-degenerált sajátértéket. Hattassuk $\hat{B}$-t a sajátérték-egyenletre balról és használjuk ki, hogy $\hat{A}$ és $\hat{B}$ kommutál:

$$\hat{B}\hat{A}|\alpha\rangle = a\hat{B}|\alpha\rangle = \hat{A}\hat{B}|\alpha\rangle \ ,$$

ahol észrevehetjük, hogy $\hat{B}|\alpha\rangle$ is sajátfüggvénye lesz $\hat{A}$-nak ugyanolyan a sajátértékkel. Ez nem-degenerált sajátérték esetén azt fogja jelenteni, hogy $\hat{B}|\alpha\rangle$ és $|\alpha\rangle$ között csak lineáris kapcsolat lehet, azaz

$$\hat{B}|\alpha\rangle = b|\alpha\rangle \ ,$$

ami éppen egy sajátérték-egyenlet $\hat{B}$-re $|\alpha\rangle$ sajátfüggvénnyel és b sajátértékkel, azaz beláttuk, hogy $\hat{A}$-nak és $\hat{B}$-nek közös sajátfüggvényei lesznek (de sajátértékeik továbbra is eltérhetnek).

Előfordulhat, hogy az a sajátérték n-szeresen degenerált. Ekkor (ld. az első gyakorlatot vagy az első házi feladatot) egy n-dimenziós sajátalteret kapunk, ahonnan ki kell választanunk n db lineárisan független $|\alpha_i\rangle$ vektort ($i = 1, \ldots, n$). Ezek után a korábbiakkal analóg számolással megmutathatjuk, hogy $|\alpha_i\rangle$ és $\hat{B}|\alpha_i\rangle$ ugyanazt az alteret feszíti ki és létezik majd egy olyan lineáris transzformáció, hogy $\sum_j U_{ij}|\alpha_j\rangle = \hat{B}|\alpha_i\rangle$.

8. feladat

Keressük meg véges mélységű potenciálgödörben a kötött állapotok energiaszintjeit!

Véges potenciálgödör esetén a potenciál felírható mint

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

Kötött állapotok esetén $E < V_0$, azaz klasszikusan nem tudunk kijönni a gödörből. Definiáljuk az alábbi hasznos mennyiségeket (ld. 3. feladat):

$$k^2 = \frac{2m}{\hbar^2}E \ , \qquad q^2 = \frac{2m}{\hbar^2}V_0 \ , \qquad \kappa^2 = q^2 - k^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E) \ .$$

Osszuk fel $V(x)$ változása szerint három tartományra az x-tengelyt. Az 1. és 3. tartományban $E < V(x)$, míg a 2.-ban $E > V(x)$. A 3. feladat alapján ekkor a hullámfüggvények az egyes tartományokban (általános esetben)

$$\begin{aligned} \psi_1(x) &= Ae^{\kappa x} + Be^{-\kappa x} \\ \psi_2(x) &= C\cos(kx) + D\sin(kx) \\ \psi_3(x) &= Ee^{\kappa x} + Fe^{-\kappa x} \end{aligned}$$

Vegyük észre, hogy ha normált megoldásokat szeretnénk kapni, akkor $B = E = 0$ feltételt teljesítenünk kell. Ellenkező esetben esetben $\psi_1(x \to -\infty)$ és $\psi_3(x \to \infty)$ végtelen nagy járulékokat adnának.

Mielőtt folytatnánk a számolást, vegyünk észre, hogy a potenciál páros függvénye x-nek, azaz kommutálni fog a paritásoperátorral, és ebből kifolyólag $[\hat{H}, \hat{P}] = 0$ kommutáció is teljesülni fog (ld. 5. feladat). A kommutáció következtében $\hat{H}$-nak és $\hat{P}$-nek közös sajátfüggvény rendszere lesz (ld. 6. feladat), tehát a véges potenciálgödör problémájának hullámfüggvényeit kereshetjük a tisztán páros vagy a tisztán páratlan függvények között[2]. Kezdjük a páros esettel!

Páros esetben $A = F$ és nincs $\propto \sin(kx)$ tag, azaz

$$\begin{aligned} \psi_1(x) &= Ae^{\kappa x} \\ \psi_2(x) &= C\cos(kx) \\ \psi_3(x) &= Ae^{-\kappa x} \end{aligned}$$

Illesztenünk kell a megoldásokat a tartományok határain (de most elegendő csak az egyik oldalon kiszámolnunk ezt). A hullámfüggvény folytonos lesz $(-a)$-ban, így

$$\begin{aligned} \psi_1(-a) &= \psi_2(-a) \\ Ae^{-\kappa x} &= C\cos(-ka) = C\cos(ka) \end{aligned}$$

Ezen felül a hullámfüggvény deriváltja is folytonos, ha a potenciál csak véges nagyot ugrik (ld. 4. feladat), így

$$\begin{aligned} \psi_1'(-a) &= \psi_2'(-a) \\ \kappa Ae^{-\kappa x} &= -kC\sin(-ka) = kC\sin(ka) \end{aligned}$$

Osszuk el a deriváltra vonatkozó egyenletet a hullámfüggvényre vonatkozóval:

$$\begin{aligned} \kappa &= k\mathrm{tg}(ka) \\ \frac{\kappa}{k} &= \frac{\sqrt{q^2 - k^2}}{k} = \sqrt{\frac{q^2a^2}{k^2a^2} - 1} = \mathrm{tg}(ka) \\ \sqrt{\frac{z_0^2}{z^2} - 1} &= \mathrm{tg}(z) \end{aligned}$$

Ez egy transzcendens egyenlet $z = ka$-ra valamilyen $z_0 = qa$ konstans paraméter mellett.

Páratlan esetben hasonlóan járhatunk el. Ekkor $A = -F$ és nincs $\propto \cos(kx)$ tag, azaz

$$\begin{aligned} \psi_1(x) &= Ae^{\kappa x} \\ \psi_2(x) &= D\sin(kx) \\ \psi_3(x) &= -Ae^{-\kappa x} \end{aligned}$$

Az illesztés ekkor a hullámfüggvény folytonosságából adódóan

$$\begin{aligned} \psi_1(-a) &= \psi_2(-a) \\ Ae^{-\kappa a} &= D\sin(-ka) = -D\sin(ka) \end{aligned}$$

[2] Általánosan igaz a legtöbb fizikai számolásban, hogy érdemes megkeresni a Hamilton-operátor lehető legtöbb szimmetriáját, mert az esetek többségében ez lényegesen leegyszerűsítheti a számolást.

és a hullámfüggvény deriváltjának folytonosságából

$$\begin{aligned}\psi_1'(-a) &= \psi_2'(-a) \\ \kappa A e^{-\kappa a} &= kD\cos(-ka) = kD\cos(ka)\end{aligned}$$

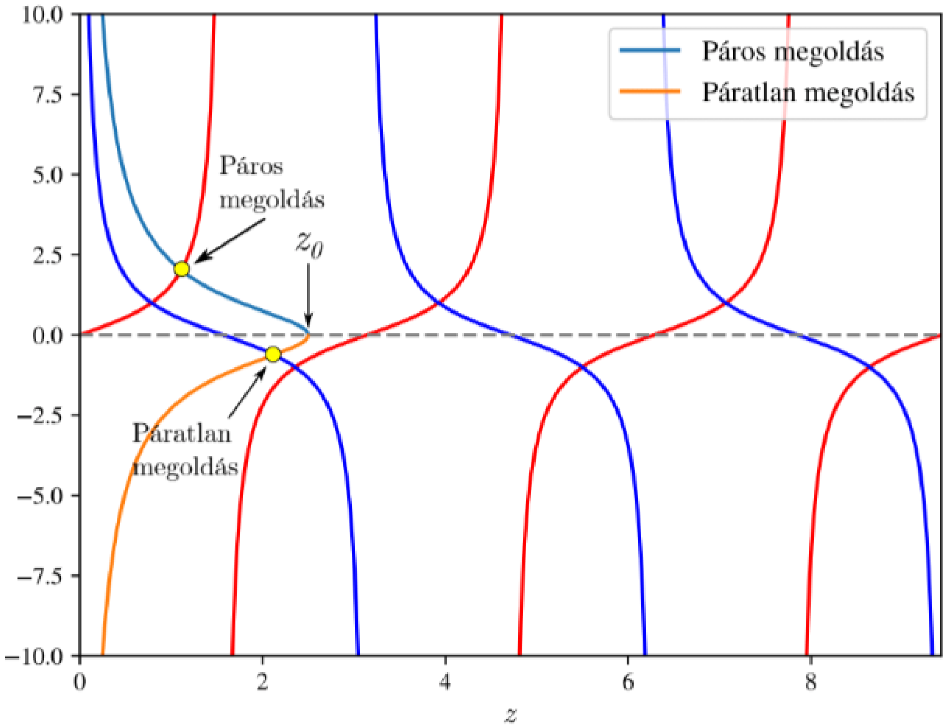
Újra osszuk el a kapott két egyenletet, majd vezessük be a $z = ka$ és $z_0 = qa$ mennyiségeket. A transzcendens egyenlet az energia sajátértékekre a páratlan esetben:

$$-\sqrt{\frac{z_0^2}{z^2} - 1} = \operatorname{ctg}(z)\ .$$

A transzcendens egyenleteket megoldhatjuk numerikusan vagy grafikusan. Utóbbi az 1. ábrán látható.

Általánosan azt mondhatjuk, hogy legalább 1 db páros megoldás mindig van, illetve egészen addig nincs páratlan megoldás, míg $z_0 < \pi/2$. A z_0 paraméter növelésével – azaz a potenciálgödör mélyítésével – egyre több megoldást kapunk (párost és páratlant felváltva).

Nagyon fontos, hogy – a klasszikus esettel ellentétben – a $2a$ széles potenciálgödrön kívül is nem-zérus valószínűséggel találhatjuk meg a részecskét, amit a hullámfüggvény leír $|\psi_1(x)|^2 \neq 0$ és $|\psi_3(x)|^2 \neq 0$.



1. ábra. A véges potenciálgödör energiaszintjeire kapható páros és páratlan megoldások grafikusan ábrázolva adott z_0, azaz adott mély potenciálgödör esetén.