Kvantummechanika A – gyakorlat
1. ZH

Megoldások

1. feladat – *Transzfermátrix formalizmus*

(5 pont)

Adott egy egydimenziós kvantummechanikai rendszer a következő potenciállal:

$$V(x) = \alpha\big[\delta(x-a) - \delta(x+a)\big] \ ,$$

ahol $\alpha > 0$.

1. Határozzuk meg a T transzmissziós és R reflexiós együtthatókat szórás esetén! (Ne felejtsük, hogy $T + R = 1$, tehát csak az egyiket kell kiszámolni!)
2. Hogyan kaphatók meg a kötött állapotok a szórási állapotokból? Írjuk fel az erre vonatkozó transzcendens egyenletet!

Segítség: a tanult transzfermátrixok az alábbiak (rendre a lépcsőpotenciál, a potenciált a-val eltoló és a Dirac-delta potenciál mátrixai):

$$\mathbf{T}(k_2, k_1) = \begin{pmatrix} 1 + \frac{k_1}{k_2} & 1 - \frac{k_1}{k_2} \\ 1 - \frac{k_1}{k_2} & 1 + \frac{k_1}{k_2} \end{pmatrix} \ , \ \mathbf{E}_a(k) = \begin{pmatrix} e^{-ika} & 0 \\ 0 & e^{ika} \end{pmatrix} \ , \ \mathbf{T}_\delta = \begin{pmatrix} 1 - i\beta/k & -i\beta/k \\ i\beta/k & 1 + i\beta/k \end{pmatrix} \ ,$$

ahol $\beta = m\alpha/\hbar^2$.

Megoldás:

A transzfermátrix (össze kell szorozni az 5 db 2×2-es mátrixot, melyekből három diagonális):

$$\begin{aligned}\mathbf{M}(k) &= \mathbf{E}_a(k)\mathbf{T}_\delta(\alpha, k)\mathbf{E}_{-a}(k)^2\mathbf{T}_\delta(-\alpha, k)\mathbf{E}_a(k) \\ &= \frac{1}{\hbar^4 k^2}\begin{pmatrix} \alpha^2 m^2(1 - e^{-4ika}) + \hbar^4 k^2 & -2\alpha m(i\alpha m + \hbar^2 k)\sin(2ak) \\ -2\alpha m(i\alpha m - \hbar^2 k)\sin(2ak) & \alpha^2 m^2(1 - e^{4ika}) + \hbar^4 k^2 \end{pmatrix} \ .\end{aligned}$$

Ez egy lehetséges megoldás, természetesen más formában is elfogadtam.

A transzmissziós együttható ($\det \mathbf{M} = 1$, és $R = 1 - T$):

$$T = \frac{\det \mathbf{M}}{|M_{22}|^2} = \left[\frac{2\alpha^2 m^2}{\hbar^2 k^2}\left(1 + \frac{\alpha^2 m^2}{\hbar^2 k^2}\right)\big(1 - \cos(4ka)\big) + 1\right]^{-1} \ .$$

Transzcendens egyenlet a szórási állapotokra: $k \to i\kappa$ és

$$M_{22}(i\kappa) = 0 \ .$$

2. feladat – *Háromállapotú rendszer*

(**7.5 pont**)

A szén-dioxid egy lineáris molekula (O-C-O), ami egy extra elektron befogásával negatív ionná tud válni. Ennek egyszerű modelljeként tegyük fel, hogy kölcsönhatás nélkül az elektron energiája E_O lenne, ha valamelyik szélső oxigénatomra tennénk rá, és E_C lenne, ha a középső szénatomra kerülne. Jelöljük ezeket az állapotokat $|B\rangle$-vel, $|K\rangle$-val és $|J\rangle$-vel, melyek rendre a bal oldali oxigénre, a középső szénre, és a jobb olali oxigénre lokalizált állapotot jelentik. A sajátenergiák azonban eltérnek E_O-től és E_C-től, mert az elektron átalagutazhat az oxigének és a szén között (a két oxigén közti közvetlen alagutazást elhanyagoljuk). Az átalagutazás valószínűségét a Δ mátrixelem határozza meg. Ekkor felírhatunk egy effektív háromállapotú rendszert, melynek Hamilton-operátora:

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} E_O & \Delta & 0 \\ \Delta & E_C & \Delta \\ 0 & \Delta & E_O \end{pmatrix} .$$

1. Határozzuk meg a rendszer sajátenergiáit E_O, E_C és Δ függvényében!
2. Legyen mostantól $E_O \approx E_C$. Írjuk fel ekkor a sajátvektorokat és a Hamilton-operátor projektorfelbontását!
3. Tegyük fel, hogy $t = 0$-ban az elektron a $|B\rangle$ állapotban van, vagyis a baloldali oxigénre van lokalizálva. Ez az állapot nem stacionárius. Mik a valószínűségei annak, hogy egy későbbi t időpontban $|B\rangle$, $|K\rangle$, illetve $|J\rangle$ állapotban mérjük? Vázoljuk fel ezeket a valószínűségeket az idő függvényében.

Megoldás:

A sajátenergiák meghatározásához meg kell oldanunk $\hat{H}$ sajátérték-problémáját. Tegyük 0-vá a karakterisztikus polinomot:

$$\det\big(\hat{H} - \lambda \mathbb{1}\big) = \begin{vmatrix} E_O - \lambda & \Delta & 0 \\ \Delta & E_C - \lambda & \Delta \\ 0 & \Delta & E_O - \lambda \end{vmatrix} = (E_O - \lambda)^2 (E_C - \lambda) - 2\Delta^2 (E_O - \lambda)$$
$$= (E_O - \lambda)\big[(E_O - \lambda)(E_C - \lambda) - 2\Delta^2\big] = 0 \, .$$

Ez alapján a sajátenergiák (felhasználva a másodfokú egyenlet megoldóképletét):

$$\lambda_1 = E_O; \, ,$$
$$\lambda_{2,3} = \frac{E_O + E_C \pm \sqrt{(E_O - E_C)^2 + 8\Delta^2}}{2} \, .$$

Ha feltesszük, hogy $E_O \approx E_C \equiv E$, akkor az energiák az alábbi egyszerű alakra módosulnak:

$$\lambda_1 = E \, ,$$
$$\lambda_{2,3} = E \pm \sqrt{2}\Delta \, .$$

Először határozzuk meg a $\mathbf{v}_1$ sajátvektort. A megoldandó egyenletrendszer

$$\big(\hat{H}-\lambda_1\mathbb{1}\big)\mathbf{v}_1=\begin{pmatrix}0 & \Delta & 0\\ \Delta & 0 & \Delta\\ 0 & \Delta & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a\\ b\\ c\end{pmatrix}=\mathbf{0}\ ,$$

ahonnan $b=0$ és $a=-c$, azaz a normált sajátvektor:

$$\mathbf{v}_1=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\ 0\\ -1\end{pmatrix}\ .$$

A $\mathbf{v}_2$ és a $\mathbf{v}_3$ sajátvektor megkereshető egyszerre. Az egyenletrendszer:

$$\big(\hat{H}-\lambda_{2,3}\mathbb{1}\big)\mathbf{v}_{2,3}=\begin{pmatrix}\mp\sqrt{2}\Delta & \Delta & 0\\ \Delta & \mp\sqrt{2}\Delta & \Delta\\ 0 & \Delta & \mp\sqrt{2}\Delta\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a\\ b\\ c\end{pmatrix}=\mathbf{0}\ ,$$

ahonnan $a=c$ és $\pm\sqrt{2}a=b$, így a normált sajátvektorok:

$$\mathbf{v}_{2,3}=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}1\\ \pm\sqrt{2}\\ 1\end{pmatrix}\ .$$

Leellenőrizhető, hogy a sajátvektorok ortogonálisak, ahogy egy hermitikus mátrix esetében el is várjuk. A prjektorfelbontás a sajátértékek és a sajátvektorok ismeretében:

$$\begin{aligned}\hat{H}=&\frac{E}{2}\begin{pmatrix}1 & 0 & -1\\ 0 & 0 & 0\\ -1 & 0 & 0\end{pmatrix}+\frac{E+\sqrt{2}\Delta}{4}\begin{pmatrix}1 & \sqrt{2} & 1\\ \sqrt{2} & 2 & \sqrt{2}\\ 1 & \sqrt{2} & 1\end{pmatrix}\\ &+\frac{E-\sqrt{2}\Delta}{4}\begin{pmatrix}1 & -\sqrt{2} & 1\\ -\sqrt{2} & 2 & -\sqrt{2}\\ 1 & -\sqrt{2} & 1\end{pmatrix}\ .\end{aligned}$$

Ha kezdetben az elektron a $\psi(t=0)=|B\rangle=(1,0,0)$ állapotban volt, és meg szeretnénk határozni, hogy milyen állapotban lesz tetszőleges idő elteltével, akkor az időfejlesztő operátort kell hattatnunk $|B\rangle$-re, azaz

$$\psi(t)=\hat{U}(t)|B\rangle=\exp\bigg(-i\frac{\hat{H}}{\hbar}t\bigg)|B\rangle\ .$$

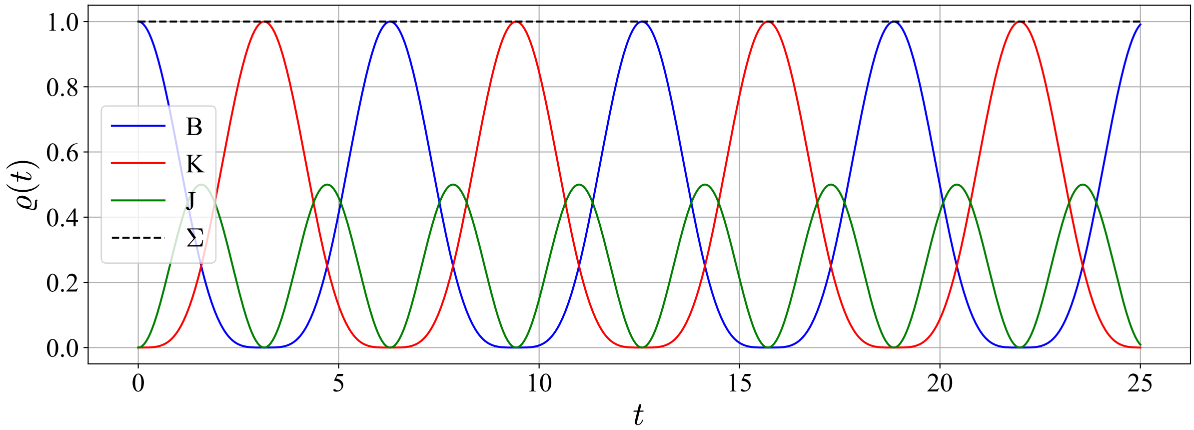
Ez a projektorfelbontás ismeretében egyszerűen megtehető:

$$\begin{aligned}\psi(t)&=\frac{e^{-iEt/\hbar}}{2}\begin{pmatrix}1\\ 0\\ -1\end{pmatrix}+\frac{e^{-i(E+\sqrt{2}\Delta)t/\hbar}}{4}\begin{pmatrix}1\\ \sqrt{2}\\ 1\end{pmatrix}+\frac{e^{-i(E-\sqrt{2}\Delta)t/\hbar}}{4}\begin{pmatrix}1\\ -\sqrt{2}\\ 1\end{pmatrix}\\ &=\frac{e^{-iEt/\hbar}}{2}\Bigg[\begin{pmatrix}1\\ 0\\ -1\end{pmatrix}+\frac{e^{-i\sqrt{2}\Delta t/\hbar}}{2}\begin{pmatrix}1\\ \sqrt{2}\\ 1\end{pmatrix}+\frac{e^{i\sqrt{2}\Delta t/\hbar}}{2}\begin{pmatrix}1\\ -\sqrt{2}\\ 1\end{pmatrix}\Bigg]\\ &=\frac{e^{-iEt/\hbar}}{2}\begin{pmatrix}\cos(\sqrt{2}\Delta t/\hbar)+1\\ -\sqrt{2}i\sin(\sqrt{2}\Delta t/\hbar)\\ \cos(\sqrt{2}\Delta t/\hbar)-1\end{pmatrix}\end{aligned}$$

A valószínűségsűrűséget megkaphatjuk mint $\varrho(t) = |\psi(t)|^2$, azaz

$$\varrho(t) = \frac{1}{4}\begin{pmatrix} \left(\cos(\sqrt{2}\Delta t/\hbar) + 1\right)^2 \\ 2\sin^2(\sqrt{2}\Delta t/\hbar) \\ \left(\cos(\sqrt{2}\Delta t/\hbar) - 1\right)^2 \end{pmatrix} .$$

A valószínűségsűrűségek időfejlődése az 1. ábrán látható.



1. ábra. A valószínűségek időfejlődése a ZH 2. feladatában. A B, K, J rendre a bal oldali oxigént, a szént és a jobb oldali oxigént jelöli. A Σ görbe az egyes sűrűségek össze.

3. feladat – *Impulzusmomentum sajátértékek × gömbfüggvények* (5 pont)

Egy részecskét leíró hullámfüggvény alakja:

$$\psi(x, y, z) = f(x^2 + y^2 + z^2)2[x^2 - y^2] .$$

Milyen $\hat{L}^2$ és $\hat{L}_z$ sajátértékekben és sajátállapotokban találhatjuk az elektront, és milyen valószínűségek tartoznak hozzájuk?

- *Tipp-1*: a helyvektor gömbi koordinátákban: $\mathbf{r} = r\big(\sin\vartheta\cos\varphi,\ \sin\vartheta\sin\varphi,\ \cos\vartheta\big)$.
- *Tipp-2*: hasznos $Y_l^m(\vartheta, \varphi)$ gömbfüggvények:

$$\begin{aligned}
l = 0: &\quad Y_0^0(\vartheta,\varphi) = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{1}{\pi}} \\
l = 1: &\quad Y_1^{\pm1}(\vartheta,\varphi) = \mp\frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{2\pi}}e^{\pm i\varphi}\sin\vartheta \qquad Y_1^0 = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{\pi}}\cos\vartheta \\
l = 2: &\quad Y_2^{\pm2}(\vartheta,\varphi) = \frac{1}{4}\sqrt{\frac{15}{2\pi}}e^{\pm 2i\varphi}\sin^2\vartheta \qquad Y_2^{\pm1}(\vartheta,\varphi) = \mp\frac{1}{2}\sqrt{\frac{15}{2\pi}}e^{\pm i\varphi}\sin\vartheta\cos\vartheta \\
&\quad Y_2^0(\vartheta,\varphi) = \frac{1}{4}\sqrt{\frac{5}{\pi}}(3\cos^2\vartheta - 1)
\end{aligned}$$

Megoldás:

Használjuk fel a gömbi koordinátákat és ismerjük fel egy konstans szorzó erejéig a gömbfüggvényeket!

$$\psi(x,y,z) = \underbrace{f(r^2)r^2}_{g(r)} 2\left[\sin^2\vartheta\cos^2\varphi \sin^2\vartheta\sin^2\varphi\right] = g(r)2\sin^2\vartheta\left[\cos^2\varphi - \sin^2\varphi\right]$$
$$= -g(r)2\sin^2\vartheta\cos(2\varphi) = -g(r)\sin^2\vartheta(e^{2i\varphi}+e^{-2i\varphi})$$
$$= -g(r)4\sqrt{\frac{2\pi}{15}}\left[Y_2^2(\vartheta,\varphi) + Y_2^{-2}(\vartheta,\varphi)\right] .$$

Látható, hogy a két gömbfüggvény azonos együtthatóval szerepel, és leolvasható, hogy csak $l=2$ értéket mérhetünk, illetve $m=\pm 2$-t fele-fele arányban megoszló valószínűséggel.

4. feladat – *Impulzusreprezentáció*

(**7.5 pont**)

Tekintsük a

$$\psi(x) = \begin{cases} A(x+a/2) & \text{, ha } -a/2 < x < 0 \\ -A(x-a/2) & \text{, ha } 0 < x < a/2 \\ 0 & \text{, egyébként} \end{cases}$$

egydimenziós hullámcsomagot.

1. Határozzuk meg az A normálási faktort, és számítsuk ki $\langle\hat{x}\rangle$ és $\langle\hat{x}^2\rangle$ várható értékeket!
2. Írjuk fel a hullámcsomag alakját impulzusreprezentációban!
3. Számítsuk ki a $\langle\hat{p}\rangle$ és $\langle\hat{p}^2\rangle$ várható értékeket, és végül a $\Delta x\Delta p$ mennyiséget! Nézzük meg, hogy teljesül-e a határozatlansági reláció!

Segítség:

$$\cos(2x) = 1 - 2\sin^2 x \ , \qquad \int\limits_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\, \frac{\sin^4(bx)}{x^2} = \frac{\pi}{2}|b| \ , \qquad \Delta z = \sqrt{\langle\hat{z}^2\rangle - \langle\hat{z}\rangle^2} \ .$$

Megoldás:

A normálási faktorhoz

$$1 = \int\limits_{-a/2}^{0} \mathrm{d}x\,|A|^2(x+a/2)^2 + \int\limits_{0}^{a/2} \mathrm{d}x\,|A|^2(x-a/2)^2$$
$$= |A|^2\left(\left[\frac{x^3}{3} + \frac{ax^2}{2} + \frac{a^2x}{4}\right]_{-a/2}^{0} + \left[\frac{x^3}{3} - \frac{ax^2}{2} + \frac{a^2x}{4}\right]_{0}^{a/2}\right) = |A|^2\frac{a^3}{12} \ ,$$

azaz $A = \sqrt{12/a^3}e^{i\alpha}$, és válasszuk az $\alpha = 0$ esetet. Az $\langle\hat{x}\rangle$ várható érték zérus lesz, mivel a $|\psi(x)|^2$ páros függvény, míg x páratlan függvény, így szimmetrikus intervallumon integrálva a kettő szorzatát (ami egy páratlan függvény lesz) azonosan 0-át kapunk. Az $\langle\hat{x}^2\rangle$ várható érték

$$
\begin{aligned}
\langle\hat{x}^2\rangle &= \int\limits_{-a/2}^{0} \mathrm{d}x\,|A|^2x^2(x+a/2)^2 + \int\limits_{0}^{a/2} \mathrm{d}x\,|A|^2x^2(x-a/2)^2 \\
&= \frac{12}{a^3}\left(\left[\frac{x^5}{5}+\frac{ax^4}{4}+\frac{a^2x^2}{12}\right]_{-a/2}^{0} + \left[\frac{x^5}{5}-\frac{ax^4}{4}+\frac{a^2x^3}{12}\right]_{0}^{a/2}\right) \\
&= \frac{3a^2}{4}\left(\frac{1}{5}-\frac{1}{2}+\frac{1}{3}\right) = \frac{a^2}{40}\,.
\end{aligned}
$$

A hullámfüggvény impulzusreprezentációban:

$$
\begin{aligned}
\psi(p) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int\limits_{-a/2}^{a/2}\mathrm{d}x\;\psi(x)e^{ipx/\hbar} \\
&= \frac{A}{\sqrt{2\pi\hbar}}\left(\int\limits_{-a/2}^{0}\mathrm{d}x\;xe^{ipx/\hbar} + \frac{a}{2}\int\limits_{-a/2}^{0}\mathrm{d}x\;e^{ipx/\hbar} - \int\limits_{0}^{a/2}\mathrm{d}x\;xe^{ipx/\hbar} + \frac{a}{2}\int\limits_{0}^{a/2}\mathrm{d}x\;e^{ipx/\hbar}\right) \\
&= \frac{A}{\sqrt{2\pi\hbar}}\Big(I_1(p)+I_2(p)-I_3(p)+I_4(p)\Big)\,,
\end{aligned}
$$

ahol (parciális integrálással)

$$
\begin{aligned}
I_1(p) &= -i\frac{\hbar a}{2p}e^{-ipa/2\hbar} + \frac{\hbar^2}{p^2}(1-e^{-ipa/2\hbar}) \\
I_2(p) &= -i\frac{\hbar a}{2p}(1-e^{-ipa/2\hbar}) \\
I_3(p) &= -i\frac{\hbar a}{2p}e^{ipa/2\hbar} - \frac{\hbar^2}{p^2}(1-e^{ipa/2\hbar}) \\
I_4(p) &= i\frac{\hbar a}{2p}(1-e^{ipa/2\hbar})
\end{aligned}
$$

így

$$
\psi(p) = \sqrt{\frac{12}{a^3 2\pi\hbar}}\frac{2\hbar^2}{p^2}\left[1-\cos\left(\frac{pa}{2\hbar}\right)\right] = \sqrt{\frac{96\hbar^3}{a^3\pi}}\frac{1}{p^2}\sin^2\left(\frac{pa}{4\hbar}\right)\,.
$$

A $\langle\hat{p}\rangle$ várható érték zérus, mivel páratlan függvényt integrálunk szimmetrikus tartományon. A $\langle\hat{p}^2\rangle$ várható érték (felhasználva az egyik segítséget)

$$
\langle\hat{p}^2\rangle = \frac{96\hbar^3}{a^3\pi}\int\limits_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}p\;\frac{\sin^4(pa/4\hbar)}{p^2} = \frac{96\hbar^3}{a^3\pi}\frac{\pi}{2}\frac{a}{4\hbar} = \frac{12\hbar^2}{a^2}\,.
$$

A koordináta és az impulzus operátor szórása

$$\Delta x = \sqrt{\langle \hat{x}^2 \rangle} = \frac{a}{2\sqrt{10}} \,, \qquad \Delta p = \sqrt{\langle \hat{p}^2 \rangle} = \frac{\sqrt{12}\hbar}{a} \,. \tag{1}$$

A kettő szorzata:

$$\Delta x \Delta p = \frac{\sqrt{12}}{\sqrt{10}} \frac{\hbar}{2} \approx 1.095 \frac{\hbar}{2} \geq \frac{\hbar}{2} \,,$$

azaz teljesül a határozatlansági reláció[1]. Sokan megpróbálták kiszámítani a $\langle \hat{p}^2 \rangle$ várható értéket korrdináta reprezentációban, aminek pontosan ugyanerre az eredményre kell, hogy vezessen. A hullámfüggvény első deriváltja:

$$\frac{\mathrm{d}\psi(x)}{\mathrm{d}x} = \begin{cases} A & , \text{ ha } -a/2 < x < 0 \\ -A & , \text{ ha } 0 < x < a/2 \\ 0 & , \text{ egyébként} \end{cases} \,,$$

azaz a derivált A-t ugrik $x = -a/2$-ben, $-2A$-t $x = 0$-ban és A-t $x = a/2$-ben. Ezt felírhatjuk Heaviside-féle lépcsőfüggvényekkel mint

$$\frac{\mathrm{d}\psi(x)}{\mathrm{d}x} = A\Theta(x + a/2) - 2A\Theta(x) + A\Theta(x - a/2) \,.$$

A második derivált pedig (felismerve, hogy a Heaviside-függvény deriváltja a Dirac-delta):

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi(x)}{\mathrm{d}x^2} = A\delta(x + a/2) - 2A\delta(x) + A\delta(x - a/2) \,.$$

Így

$$\begin{aligned} \langle \hat{p}^2 \rangle &= -\hbar^2 A \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x \; \psi^*(x) \big[\delta(x + a/2) - 2\delta(x) + \delta(x - a/2) \big] \\ &= -\hbar^2 A \Big[\psi^*(-a/2) - 2\psi^*(0) + \psi^*(a/2) \Big] = \hbar^2 |A|^2 a = \frac{12\hbar^2}{a^2} \,. \end{aligned}$$

[1] Itt bocsánatot kérek azoktók, akik megkérdezték, hogy itt most ugye nem teljesül a határozatlansági reláció. Nem gondoltam át rendesen (ezen sok pont így nem is múlt a feladatsor pontozásakor).