

Kvantummechanika A – gyakorlat

5. gyakorlat

Koordináta és impulzus reprezentáció, kétállapotú rendszerek, 3-dimenziós problémák

Koordináta- és impulzusreprezentáció

Az alábbiakban azt vizsgáljuk, hogy az \hat{x} és \hat{p} operátorok sajátfüggvényei hogyan írhatók fel az ún. koordináta- és impulzusreprezentációkban. Koordinátareprezentációban egy operátor sajátfüggvényei valamilyen x -függő függvények lesznek: írjuk fel ezeket először a \hat{p} impulzus operátor esetében:

$$\hat{p}\varphi_q(x) = -i\hbar\partial_x\varphi_q(x) = q\varphi_q(x) ,$$

ahol $\varphi_q(x)$ az impulzus sajátfüggvény valamilyen q sajátértékkel. Az első egyenlőségnél egyszerűen beírtuk a impulzus operátor tanult alakját, míg a másodikonál felhasználtuk, hogy az operátor felveszi a sajátértékét, ha hattatjuk a sajátfüggvényére. Ez alapján egy elsőrendű differenciálegyenletet kapunk $\varphi_q(x)$ -re, melynek megoldása

$$\varphi_q(x) = Ae^{-\frac{i}{\hbar}qx} .$$

ahol $A = e^{i\phi}/\sqrt{2\pi\hbar}$ a sajátfüggvény normáltaságából. Egyszerűen megmutatható, hogy a sajátfüggvények ortonormált rendszer alkotnak:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \varphi_p^*(x)\varphi_q(x) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{\frac{i}{\hbar}(p-q)x} = \frac{2\pi}{2\pi\hbar} \delta\left(\frac{p-q}{\hbar}\right) = \delta(p-q) ,$$

ahol felismertük a Dirac-deltát és felhasználtuk, hogy $\delta(\alpha x) = \delta(x)/|\alpha|$. Analóg módon írjuk fel az \hat{x} koordináta operátor sajátérték-egyenletét mint

$$\hat{x}\varphi_y(x) = x\varphi_y(x) = y\varphi_y(x) ,$$

ahol kihasználtuk, hogy \hat{x} hatása az x -szel való szorzás, továbbá azt is tudjuk, hogy felveszi az y sajátértékét, ha hattatjuk a $\varphi_y(x)$ sajátfüggvényére. A fentiek alapján

$$(x-y)\varphi_y(x) = 0 \quad \implies \quad \varphi_y(x) = \delta(x-y) .$$

Az ortonormáltság ekkor is teljesül:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \varphi_y^*(x)\varphi_{y'}(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \delta(x-y)\delta(x-y') = \delta(y-y') .$$

Összeségében koordinátareprezentációban

$$\varphi_q(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{-\frac{i}{\hbar}qx} , \quad \text{és} \quad \varphi_y(x) = \delta(x-y) ,$$

és

$$\hat{p} = -i\hbar\partial_x, \quad \text{és} \quad \hat{x} = x.$$

Kérdés, hogy hogyan térünk át koordinátareprezentációból impulzusreprezentációba, azaz amikor a sajátfüggvények x helyett p -től függenek. A válasz, hogy Fourier-transzformációval¹², azaz az impulzus sajátfüggvény

$$\varphi_q(p) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \varphi_p^*(x) \varphi_q(x) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{\frac{i}{\hbar}(p-q)x} = \delta(p-q)$$

és a koordináta sajátfüggvény

$$\varphi_y(p) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \varphi_p^*(x) \varphi_y(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{\frac{i}{\hbar}px} \delta(x-y) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{i}{\hbar}py} = \varphi_p^*(y).$$

Írjuk fel az impulzus operátor hatását az impulzusreprezentációban felírt impulzus sajátfüggvényre:

$$\hat{p}\varphi_q(p) = q\varphi_q(p) = q\delta(q-p) = p\delta(p-q),$$

ahol az utolsó egyenlőség a Dirac-delta miatt írható fel. Ebből láthatjuk, hogy az impulzus operátor hatása impulzusreprezentációban a p -vel való szorzás lesz. A koordináta operátor hatása impulzusreprezentációban:

$$\hat{x}\varphi_y(p) = yp_y(p) = \frac{y}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{i}{\hbar}py} = i\hbar\partial_p\varphi_y(p).$$

Látható, hogy az impulzusreprezentációban x és p „szerepet cseréltek”, azaz

$$\varphi_q(p) = \delta(p-q), \quad \text{és} \quad \varphi_y(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{i}{\hbar}py},$$

és

$$\hat{p} = p, \quad \text{és} \quad \hat{x} = i\hbar\partial_p.$$

Kétállapotú rendszerek

Az alábbiakban vizsgáljunk egy olyan kétállapotú rendszert, ahol a Hamilton-operátor legyen

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} 0 & V \\ V & 0 \end{pmatrix},$$

ahol $V \in \mathbb{R}$. Egyből látható, hogy a Hamilton-operátor hermitikussága teljesül. Azt szeretnénk megtudni, hogy mi lesz egy

$$|\Psi(t=0)\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

¹Ez ismerős *Elektrodinamika* lehet óráról, amikor pl. t idő- és ω frekvencia terek között írunk fel transzformációt.

²Ez nekünk most éppen olyan lesz, mintha skalárisan szoroznánk $\varphi_p(x)$ -szel.

kezdőállapot időfejlődése. Előadásról tudjuk, hogy egy állapot időfejlődését az ún. $\hat{U}(t)$ időfejllesztő operátor segítségével adhatjuk meg mint

$$\hat{U}(t)|\Psi(0)\rangle = |\Psi(t)\rangle, \quad \text{ahol} \quad \hat{U}(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}.$$

Ha exponencializálni szeretnénk a \hat{H} Hamilton-operátort, akkor érdemes ismernünk a sajátértékeit és sajátállapotait. Az időfüggetlen Schrödinger-egyenlet

$$\hat{H}|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle,$$

ahonnan az energia sajátértékek megkereshetők, ha zérussá tesszük \hat{H} karakterisztikus polinomját, azaz

$$\det[\hat{H} - E\hat{1}] = \begin{vmatrix} -E & V \\ V & -E \end{vmatrix} = E^2 - V^2 \stackrel{!}{=} 0,$$

ahonnan $E_{1,2} = E_{\pm} = \pm V$ a két sajátértékünk. A két sajátvektort keressük meg egyszerre:

$$(\hat{H} - E\hat{1})|\Psi_{\pm}\rangle = (\hat{H} \mp V\hat{1})|\Psi_{\pm}\rangle = |0\rangle.$$

Expliciten

$$\begin{pmatrix} \mp V & V \\ V & \mp V \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix},$$

ahonnan $a = \pm b$, így a normált sajátvektorok

$$|\Psi_{\pm}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \pm 1 \end{pmatrix}.$$

Egyszerűen leellenőrizhető, hogy $\langle\Psi_{\pm}|\Psi_{\pm}\rangle = 1$ és $\langle\Psi_{\pm}|\Psi_{\mp}\rangle = 0$. A fentiek ismeretében már felírhatjuk a Hamilton-operátor projektorfelbontását:

$$\hat{H} = E_+|\Psi_+\rangle\langle\Psi_+| + E_-|\Psi_-\rangle\langle\Psi_-| = E_+\hat{P}_+ + E_-\hat{P}_-,$$

ahol a projektorokra megmutatható, hogy $\hat{P}_{\pm}^2 = \hat{P}_{\pm}$ és $\hat{P}_+\hat{P}_- = 0$. Az időfejllesztő operátor így

$$\begin{aligned} \hat{U}(t) &= e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} \left(\frac{-it}{\hbar}\right)^k \hat{H}^k = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} \left(\frac{-it}{\hbar}\right)^k (E_+^k \hat{P}_+ + E_-^k \hat{P}_-) \\ &= e^{-\frac{i}{\hbar}E_+t} \hat{P}_+ + e^{-\frac{i}{\hbar}E_-t} \hat{P}_-. \end{aligned}$$

Legyen $\omega = V/\hbar$, ekkor

$$\hat{U}(t) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} e^{-i\omega t} + e^{i\omega t} & e^{-i\omega t} - e^{i\omega t} \\ e^{-i\omega t} - e^{i\omega t} & e^{-i\omega t} + e^{i\omega t} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos(\omega t) & -i \sin(\omega t) \\ -i \sin(\omega t) & \cos(\omega t) \end{pmatrix}.$$

Látható, hogy \hat{U} unitér. Ezt követően $|\Psi(0)\rangle$ -ra hattanva $\hat{U}(t)$ -t:

$$\hat{U}(t)|\Psi(0)\rangle = |\Psi(t)\rangle = \begin{pmatrix} \cos(\omega t) & -i \sin(\omega t) \\ -i \sin(\omega t) & \cos(\omega t) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos(\omega t) \\ -i \sin(\omega t) \end{pmatrix}.$$

Az időfejlődést a mátrixszorzás elvégzése nélkül is felírhatjuk³. Fejtsük ki $|\Psi(0)\rangle$ -t a $|\Psi_{\pm}\rangle$ sajátállapotok bázisán:

$$|\Psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} + \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \right] = \frac{1}{\sqrt{2}} [|\Psi_+\rangle + |\Psi_-\rangle] .$$

Tudjuk, hogy $\hat{P}_{\pm}|\Psi_{\pm}\rangle = |\Psi_{\pm}\rangle$ és $\hat{P}_{\mp}|\Psi_{\pm}\rangle = 0$, így

$$\begin{aligned} \hat{U}(t)|\Psi(0)\rangle &= \left(e^{-\frac{i}{\hbar}E_+t} \hat{P}_+ + e^{-\frac{i}{\hbar}E_-t} \hat{P}_- \right) \frac{1}{2} [|\Psi_+\rangle + |\Psi_-\rangle] \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left[e^{-\frac{i}{\hbar}E_+t} |\Psi_+\rangle + e^{-\frac{i}{\hbar}E_-t} |\Psi_-\rangle \right] \\ &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} e^{-i\omega t} + e^{i\omega t} \\ e^{-i\omega t} - e^{i\omega t} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos(\omega t) \\ -i \sin(\omega t) \end{pmatrix} . \end{aligned}$$

Látható, hogy a két eljárással azonos eredményre jutunk, a kérdés annyi, hogy mikor melyiket érdemes használni.

3-dimenziós problémák

1. Harmonikus oszcillátor

Az előadáson már mindenki látta a kvantummechanikai harmonikus oszcillátor megoldásának menetét, az energiasajátértékek és a hullámfüggvény alakját (Hermite-polinomok, stb.). Az alábbiakban látni fogjuk, hogy az egydimenziós eset milyen könnyen kiterjeszthető magasabb dimenziókba is, ehhez először írjuk fel az időfüggetlen Schrödinger-egyenletet háromdimenziós Descartes-i koordinátákban:

$$\hat{H}\psi(\mathbf{x}) = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i=1}^3 \partial_i^2 \psi(\mathbf{x}) + \frac{1}{2} m \omega^2 \sum_{i=1}^3 x_i^2 \psi(\mathbf{x}) = E \psi(\mathbf{x}) ,$$

ahol $\mathbf{x} = (x, y, z)$ és $\sum_i \partial_i^2 = \Delta$ a Laplace-operátor. Ez egy parciális differenciálegyenlet, melynek megoldását keressük szeparálható alakban⁴:

$$\psi(\mathbf{x}) = \prod_i X_i(x_i) = X(x)Y(y)Z(z) ,$$

Osszuk el az egyenletet az *ansatz*unkkal:

$$\sum_{i=1}^3 \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{X_i(x_i)} \frac{\partial^2 X_i(x_i)}{\partial x_i^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x_i^2 \right) = E .$$

Vegyük észre, hogy egy adott i -re csak x_i -től függ az adott tag, azaz az egyenlőség csak akkor fog teljesülni, ha az egyes tagok az összegzésben külön-külön konstansok, azaz az egyenletek szétcsatolódnak és kapunk három független egydimenziós Schrödinger-egyenletet. Jó ötlet volt ilyen alakban keresni a megoldást!

³Ez pl. egy sokkal nagyobb mátrix esetén jó ötlet lehet.

⁴Ez egy jó ötlet szokott lenni egyszerűbb parciális differenciálegyenleteknél.

Az egydimenziós egyenlet megoldását ismerjük előadásról. Az energiák külön-külön és a háromdimenziós esetben

$$E_i = \hbar\omega \left(n_i + \frac{1}{2} \right) \quad \Rightarrow \quad E = \hbar\omega \left(n_1 + n_2 + n_3 + \frac{3}{2} \right) = \hbar\omega \left(N + \frac{3}{2} \right).$$

A hullámfüggvény pedig Hermite-polinomok és egy Gauss-i faktor szorzataiból áll össze egy normálási faktor erejéig

$$\psi(\mathbf{x}) \propto H_{n_1}(\alpha x) H_{n_2}(\alpha y) H_{n_3}(\alpha z) e^{-\frac{\alpha^2}{2}(x^2+y^2+z^2)},$$

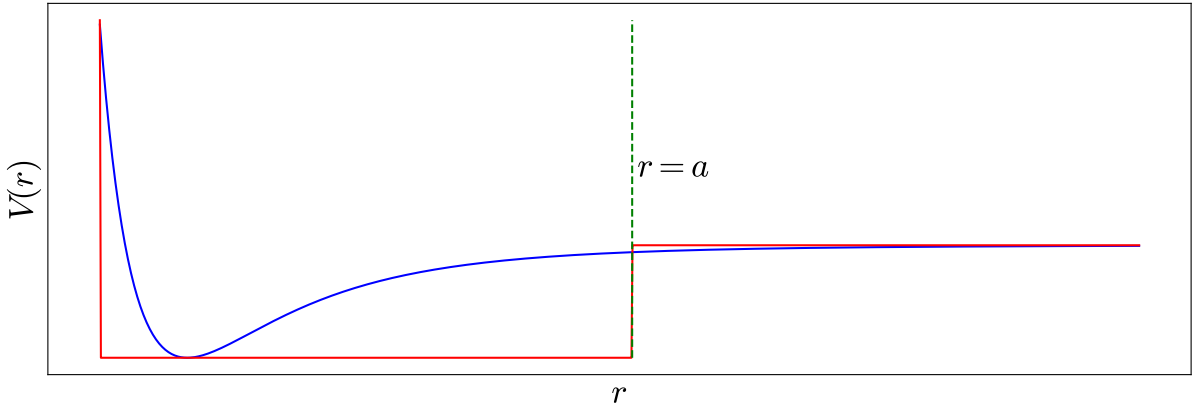
ahol $\alpha = \sqrt{m\omega/\hbar}$.

2. Kötött állapotok centrális potenciálban

Modellezzük az atommagok közti potenciált a lehető legegyszerűbb módon: potenciálgödörrel (ld. az 1. ábrán), azaz a centrális potenciálunk legyen

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

ahol $a > 0$.



1. ábra. A vázlatos nukleon-nukleon potenciál közelítése potenciálgödörrel.

Ahogy előadáson láttuk, centrális potenciál esetén fel tudunk írni egy effektív egydimenziós egyenletet a hullámfüggvény sugárfüggő részére⁵. Ha a hullámfüggvény $\psi(r, \vartheta, \varphi) = R(r)Y_{lm}(\vartheta, \varphi) = U(r)/r Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$ alakú, akkor

$$\frac{d^2 U(r)}{dr^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left[E - \left(V(r) - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2} \right) \right] U(r) = 0,$$

ahol $U(r=0) = 0$, hogy $\psi(r, \vartheta, \varphi)$ ne divergáljon, ha $r \rightarrow 0$. Az egyszerűség kedvéért legyen $l = 0$ és $V_0 > 0$, azaz akkor kapunk kötött állapotokat, ha $-V_0 < E < 0$. Ekkor az egyenlet, ha benn vagyunk a gödörben, azaz $r < a$,

$$\frac{d^2 U(r)}{dr^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (-|E| + V_0) U(r) = \frac{d^2 U(r)}{dr^2} + k^2 U(r) = 0$$

⁵Ehhez fel kell írunk a háromdimenziós Schrödinger-egyenletet gömbi koordinátákkal; szeparálni a sugár- és szögfüggő részeket; felismerni, hogy a szögfüggő részt éppen a gömbfüggvényekkel lehet felírni; majd kiredukálni a gömbfüggvényeket.

alakban írható, ami (meglepetés) éppen a klasszikus harmonikus oszcillátor differenciálegyenlete. A megoldás

$$U_{r<a}(r) = A \sin(kr) + B \cos(kr) ,$$

ahol $B \stackrel{!}{=} 0$ az $U(0) = 0$ feltétel miatt. Az $r > a$ esetben a potenciál zérus, ekkor

$$\frac{d^2 U(r)}{dr^2} - \frac{2m}{\hbar^2} |E| U(r) = \frac{d^2 U(r)}{dr^2} - \kappa^2 U(r) = 0$$

ahol a megoldás

$$U_{r>a}(r) = C e^{-\kappa r} + D e^{\kappa r} .$$

Legyen $D = 0$ a normálhatóság miatt: az $r \rightarrow \infty$ esetben ne robbanjon fel a hullámfüggvény. Az $r = a$ határon illeszteni kell a két megoldást:

$$\begin{aligned} U_{r>a}(a) &= U_{r<a}(a) , \\ \left. \frac{dU_{r>a}(r)}{dr} \right|_{r=a} &= \left. \frac{dU_{r<a}(r)}{dr} \right|_{r=a} , \end{aligned}$$

azaz

$$\begin{aligned} A \sin(ka) &= C e^{-\kappa a} , \\ A k \cos(ka) &= -C \kappa e^{-\kappa a} , \end{aligned}$$

ahonnan

$$k \operatorname{ctg}(ka) = -\kappa ,$$

ami éppen az a transzcendens egyenlet, amit már láttunk a véges mély potenciálgödör problémájánál. Emlékezzünk vissza, hogy ez az egyenlet a páratlan hullámfüggvények esetén adta meg nekünk a kötött állapotok energiáit. Vegyük észre, hogy most páros megoldások nincsenek, azaz csak akkor lesz kötött állapotunk a gödörben, ha $k_0 a > \pi/2$ ($k_0^2 = 2mV_0/\hbar^2$), ami egy minimumot ad meg a gödör V_0 mélységére:

$$V_0 > \frac{\hbar^2 \pi^2}{8ma^2} .$$

Következő gyakorlaton megnézzük, hogy hogyan változik a megoldás, ha $l \geq 0$ tetszőleges egész szám és $V_0 \rightarrow \infty$ (azaz végtelen mély a gödör).

3. Ismerkedés a gömbfüggvényekkel

Legyen a hidrogénatomunk a

$$\psi(r, \vartheta, \varphi) = \frac{f(r)}{2\sqrt{\pi}} (\cos \vartheta - \sin \vartheta e^{i\varphi})$$

állapotban (ahol $f(r)$ valamilyen tisztán sugárfüggő függvény), és mi arra vagyunk kíváncsiak, hogy ha megmérjük az \hat{L}^2 és az \hat{L}_z értékét (valahogy), akkor milyen értékeket mérhetünk és ezeket milyen valószínűséggel mérhetjük.

Tudjuk, hogy \hat{L}^2 és \hat{L}_z sajátfüggvényei a gömbfüggvények, így jó lenne, ha fel tudnánk írni ψ -t mint valamilyen gömbfüggvények lineárkombinációja, azaz fejtsük ki az állapotot a gömbfüggvények bázisán. Ehhez érdemes megnézni a Wikipédián⁶, hogy milyen gömbfüggvények jöhetnek szóba. Nekünk majd az Y_{10} -ra és az Y_{11} -re lesz szükségünk, mivel

$$Y_{10}(\vartheta, \varphi) = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{\pi}} \cos \vartheta \propto \cos \vartheta ,$$

$$Y_{11}(\vartheta, \varphi) = -\frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{2\pi}} \sin \vartheta e^{i\varphi} \propto \sin \vartheta e^{i\varphi} .$$

Figyelve a konstansokra

$$\psi(r, \vartheta, \varphi) = \frac{f(r)}{2\sqrt{\pi}} \left(2\sqrt{\frac{\pi}{3}} Y_{10} + 2\sqrt{\frac{2\pi}{3}} Y_{11} \right) = f(r) \left(\sqrt{\frac{1}{3}} Y_{10} + \sqrt{\frac{2}{3}} Y_{11} \right) ,$$

ahonnan leolvashatjuk \hat{L}^2 és \hat{L}_z megfelelő sajátértékeit. Látható, hogy mindkét gömbfüggvény esetén $l = 1$, azaz mérés után a várható érték 1 valószínűséggel $2\hbar^2$ (pedig ψ nem is egy konkrét sajátállapot állapot), mivel

$$\hat{L}^2 \psi(r, \vartheta, \varphi) = \hbar^2 l(l+1) \psi(r, \vartheta, \varphi) = \hbar^2 1(1+1) \psi(r, \vartheta, \varphi) = 2\hbar^2 \psi(r, \vartheta, \varphi) .$$

Az \hat{L}_z mérésekor látható, hogy már nem lesz triviális az eredmény. Az egyik gömbfüggvénynél $m = 0$, míg a másikonál $m = 1$, és tudjuk, hogy \hat{L}_z sajátértéke adott m esetén egyszerűen $\hbar m$. A mérési eredmények valószínűségét az együtthatók abszolútérték négyzete adja, azaz $1/3$ valószínűséggel mérhetünk 0-át, míg $2/3$ valószínűséggel \hbar -t.

⁶https://en.wikipedia.org/wiki/Table_of_spherical_harmonics