

KVANTUMMECHANIKA FELADATOK

Sailer Kornél

Elméleti Fizikai Tanszék
Debreceni Egyetem
Debrecen
2024.

Tartalomjegyzék

1. gyakorlat	5
2. gyakorlat	14
3. gyakorlat	22
4. gyakorlat	26
5. gyakorlat	31
6. gyakorlat	36
7. gyakorlat	43
8. gyakorlat	47
9. gyakorlat	57
10.gyakorlat	65

1. gyakorlat

1. A speciális relativitáselmélet szerint az $m_0 \geq 0$ nyugalmi tömegű, adott K inerciarendszerben $\vec{p}$ impulzusú részecske energiája K -ban

$$E = +\sqrt{m_0^2 c^4 + \vec{p}^2 c^2}, \quad (1.1)$$

ahol c a fénysebesség vákuumban. (Utóbbi minden inerciarendszerben és minden irányban azonos!) Ha a részecske nyugalmi tömege nem nulla, azaz $m_0 \neq 0$, akkor a K inerciarendszerben a részecske $\vec{v}$ sebessége és $\vec{p}$ impulzusa között a

$$\vec{p} = m(v)\vec{v} \quad (1.2)$$

kapcsolat áll fenn, ahol

$$m(v) = \frac{m_0}{\sqrt{1 - (v^2/c^2)}} \quad (1.3)$$

a részecske mozgási tömege. A fentieket felhasználva

- (a) lássa be az Einstein által felfedezett híres $E = m(v)c^2$ összefüggést;
- (b) mutassa meg, hogy $m_0 = 0$ nyugalmi tömegű részecske esetén az E és $\vec{p}$ közti összefüggés összhangban van a de Broglie-féle $\lambda = h/p$ összefüggéssel.

Megoldás:

- (a) Ha $m_0 \neq 0$, akkor

$$\begin{aligned} E &= \sqrt{m_0^2 c^4 + [m(v)]^2 v^2 c^2} = \sqrt{m_0^2 c^4 + \frac{m_0^2 v^2 c^2}{1 - (v/c)^2}} = m_0 c^2 \sqrt{1 + \frac{(v/c)^2}{1 - (v/c)^2}} \\ &= \frac{m_0 c^2}{\sqrt{1 - (v/c)^2}} = m(v)c^2. \end{aligned} \quad (1.4)$$

- (b) Ha $m_0 = 0$, akkor $E = pc$ adódik, ugyanakkor a de Broglie-összefüggésből kapjuk, hogy

$$\lambda = \frac{2\pi}{k} = \frac{h}{p} \Rightarrow p = \hbar k, \quad (1.5)$$

amit felhasználva azt találjuk, hogy

$$E = pc = \hbar k c = \hbar \omega. \quad (1.6)$$

Ez a helyes kifejezés a foton energiájára.

2. A Compton-szórás ω körfrekvenciájú Röntgen-sugárzásból származó foton és kezdetben nyugalomban levő m_e nyugalmi tömegű elektron ütközésének tekintve, írja fel az ütközésre az energia- és az impulzusmegmaradás törvényeit. Mutassa meg, hogy ezekből következik a Röntgen-sugárzás körfrekvenciájának csökkenésére vonatkozó

$$\omega - \omega' = \frac{2\hbar}{m_e c^2} \omega \omega' \sin^2 \frac{\theta}{2} \quad (1.7)$$

összefüggés, ahol ω' a szórt Röntgen-sugárzás körfrekvenciája, θ pedig a foton eltérülési szöge. Láss be, hogy a sugárzás hullámhosszának növekedése ekkor

$$\lambda' - \lambda = 2\lambda_C \sin^2 \frac{\theta}{2}, \quad (1.8)$$

ahol λ a beérkező és λ' a szórt Röntgen-sugárzás hullámhossza és $\lambda_C = h/(m_e c)$ az elektron Compton-hullámhossza!

Megoldás:

Az energiamegmaradás törvénye értelmében:

$$\hbar\omega + m_e c^2 = \hbar\omega' + \frac{m_e c^2}{\sqrt{1 - (v/c)^2}}, \quad (1.9)$$

ahol $\vec{v}$ az elektron sebessége a végállapotban. Az impulzusmegmaradás törvénye értelmében:

$$\hbar\vec{k} + \vec{0} = \hbar\vec{k}' + \frac{m_e \vec{v}}{\sqrt{1 - (v/c)^2}}, \quad (1.10)$$

ahol $|\vec{k}| = k = \omega/c$, $|\vec{k}'| = k' = \omega'/c$. Legyen $(\vec{k}, \vec{k}') \angle = \theta$ és $(\vec{v}, \vec{k}) \angle = \alpha$, ekkor Descartes-komponensekben

$$\vec{k} = (k, 0), \quad \vec{k}' = (k' \cos \theta, k' \sin \theta), \quad \vec{v} = (v \cos \alpha, -v \sin \alpha), \quad (1.11)$$

és az impulzusmegmaradás törvényéből az alábbi 2 egyenlőséget kapjuk:

$$\begin{aligned} \hbar k &= \hbar k' \cos \theta + \frac{m_e v \cos \alpha}{\sqrt{1 - (v/c)^2}} \\ \Rightarrow \hbar k - \hbar k' \cos \theta &= \frac{m_e v \cos \alpha}{\sqrt{1 - (v/c)^2}}, \end{aligned} \quad (1.12)$$

$$\begin{aligned} 0 &= \hbar k' \sin \theta - \frac{m_e v \sin \alpha}{\sqrt{1 - (v/c)^2}} \\ \Rightarrow \hbar k' \sin \theta &= \frac{m_e v \sin \alpha}{\sqrt{1 - (v/c)^2}}. \end{aligned} \quad (1.13)$$

A fenti módon átrendezett 2 egyenlet mindkét oldalát emeljük négyzetre, majd adjuk össze a megfelelő oldalakat:

$$\frac{m_e^2 v^2}{1 - (v/c)^2} = \hbar^2 k^2 + \hbar^2 (k')^2 - 2\hbar^2 k k' \cos \theta, \quad (1.14)$$

$$\frac{m_e^2 v^2 c^2}{1 - (v/c)^2} = \hbar^2 \left[(\omega - \omega')^2 + 4\omega\omega' \sin^2 \frac{\theta}{2} \right]. \quad (1.15)$$

A bal oldalon álló kifejezést azonosan átalakítjuk:

$$\frac{m_e^2 v^2 c^2}{1 - (v/c)^2} = \frac{m^2 c^4 (v/c)^2}{1 - (v/c)^2} = m^2 c^4 \frac{(v/c)^2 - 1 + 1}{1 - (v/c)^2} = \frac{m^2 c^4}{1 - (v/c)^2} - m^2 c^4. \quad (1.16)$$

Az energiamegmaradás törvényéből rendezéssel kapjuk, hogy

$$\frac{m_e c^2}{\sqrt{1 - (v/c)^2}} = \hbar(\omega - \omega') + m_e c^2, \quad (1.17)$$

amit négyzetre emelve

$$\frac{m^2 c^4}{1 - (v/c)^2} = [\hbar^2(\omega - \omega')^2 + m_e c^2]^2 \quad (1.18)$$

adódik. Azt találjuk tehát, hogy

$$\begin{aligned} \frac{m_e^2 v^2 c^2}{1 - (v/c)^2} &= \frac{m^2 c^4}{1 - (v/c)^2} - m^2 c^4 \\ &= [\hbar^2(\omega - \omega')^2 + m_e c^2]^2 - m^2 c^4 \\ &= \hbar^2(\omega - \omega')^2 + 2\hbar(\omega - \omega')m_e c^2. \end{aligned} \quad (1.19)$$

Írjuk ezt be az (1.15) egyenlet bal oldalába:

$$\hbar^2(\omega - \omega')^2 + 2\hbar(\omega - \omega')m_e c^2 = \hbar^2 \left[(\omega - \omega')^2 + 4\omega\omega' \sin^2 \frac{\theta}{2} \right]. \quad (1.20)$$

Innen kapjuk, hogy

$$\omega - \omega' = \frac{2\hbar}{m_e c^2} \omega \omega' \sin^2 \frac{\theta}{2}. \quad (1.21)$$

Használjuk fel, hogy $\omega = 2\pi c/\lambda$, és írjuk át az eredményt a hullámhossz megváltozására:

$$\frac{2\pi c}{\lambda} - \frac{2\pi c}{\lambda'} = \frac{2\hbar}{m_e c^2} \frac{2\pi c)^2}{\lambda \lambda'} \sin^2 \frac{\theta}{2}, \quad (1.22)$$

ahonnan $\frac{\lambda \lambda'}{2\pi c}$ -vel szorozva kapjuk, hogy

$$\lambda' - \lambda = \frac{4\pi \hbar}{m_e c} \sin^2 \frac{\theta}{2} = 2 \frac{h}{m_e c} \sin^2 \frac{\theta}{2}. \quad (1.23)$$

3. A Planck-féle sugárzási törvény,

$$du \propto \frac{\hbar \omega^3}{e^{\frac{\hbar \omega}{k_B T}} - 1} d\omega \quad (1.24)$$

felhasználásával mutassa meg az alábbiakat:

- (a) A feketetest egységfelületén időegység alatt kilépő energia arányos a feketetest T hőmérsékletének 4-dik hatványával: $j_\epsilon \propto T^4$.
- (b) A feketetest azon az $\omega_{\max}$ körfrekvencián sugároz maximális intenzitással, amelyre fennáll a

$$k_B T \propto \hbar \omega_{\max} \quad (1.25)$$

Wien-féle eltolódási törvény.

(a)

$$j_\epsilon = cu = c \int du \propto \int_0^\infty \frac{\hbar \omega^3 d\omega}{e^{\frac{\hbar \omega}{k_B T}} - 1}. \quad (1.26)$$

Az integrál véges, mert az integrandus $\omega \rightarrow \infty$ esetben exponenciálisan lecseng. Az integrál T -függését explicit módon látjuk, ha bevezetjük a $\xi = \frac{\hbar\omega}{k_B T}$ új integrálási változót. Az integrálási határok továbbra is $\xi = 0$ és $\xi \rightarrow \infty$. Az új változóval az integrál:

$$j_\varepsilon \propto \left(\frac{k_B T}{\hbar}\right)^3 \frac{k_B T}{\hbar} \int_0^\infty \frac{\xi^3 d\xi}{e^\xi - 1} \propto T^4. \quad (1.27)$$

- (b) A $du(\omega)/d\omega$ függvény maximum helyét keressük. A ξ változó segítségével ez ott van, ahol az

$$f(\xi) = \frac{\xi^3}{e^\xi - 1} \quad (1.28)$$

függvénynek maximuma van. A szélsőérték szükséges feltétele:

$$0 = \frac{df(\xi)}{d\xi} = \frac{3\xi^2}{e^\xi - 1} - \frac{\xi^3}{(e^\xi - 1)^2} e^\xi = \frac{\xi^2}{e^\xi - 1} \left(3 - \frac{\xi e^\xi}{e^\xi - 1}\right) \quad (1.29)$$

Innen egyetlen $\xi \neq 0$ gyök adódik, mint a

$$(3 - \xi)e^\xi = 3 \quad (1.30)$$

egyenlet $x_{\max}$ megoldása. Azt kapjuk tehát, hogy $\omega_{\max} \propto k_B T/\hbar$. A megfelelő hullámhossz

$$\lambda_{\max} = \frac{2\pi c}{\omega_{\max}} = \frac{2\pi c \hbar}{\xi_{\max} k_B T} = \frac{\hbar c}{\xi_{\max} k_B T} \approx \frac{2,9 \cdot 10^{-3} \text{ K m}}{T}. \quad (1.31)$$

4. Éljük Planck hipotézisével, hogy a lineáris harmonikus oszcillátor csak ε_0 energiaadagokban tud energiát felvenni, azaz az energiája csak a diszkrét $\varepsilon_n = n\varepsilon_0$ értékeket veheti fel, ahol $n = 0, 1, 2, \dots$. Használjuk fel Boltzmann állítását, hogy annak a valószínűsége, hogy egy részecske a T hőmérsékletű környezetével termikus egyensúlyban ε_n energiát vesz fel,

$$w_n = \frac{e^{-\frac{\varepsilon_n}{k_B T}}}{\sum_{n=0}^{\infty} e^{-\frac{\varepsilon_n}{k_B T}}}. \quad (1.32)$$

Határozzuk meg az oszcillátor $\bar{\varepsilon}$ átlagenergiáját, amikor termikus egyensúlyban van a T hőmérsékletű környezetével! Mi az eredmény, a $\varepsilon_0 \rightarrow 0$, és mi akkor ha $\varepsilon_0 = \hbar\omega (\neq 0)$, ahol ω az oszcillátor körfrekvenciája?

Megoldás:

Az oszcillátor energiájának várható értéke

$$\bar{\varepsilon} = \sum_{n=0}^{\infty} w_n n \varepsilon_0 = \frac{\sum_{n=0}^{\infty} e^{-\frac{n\varepsilon_0}{k_B T}} n \varepsilon_0}{\sum_{n=0}^{\infty} e^{-\frac{n\varepsilon_0}{k_B T}}}. \quad (1.33)$$

Legyen $\xi = e^{-\frac{\varepsilon_0}{k_B T}}$, ahol $0 < \xi < 1$. A nevezőben levő összeg mértani sor összege:

$$\sum_{n=0}^{\infty} e^{-\frac{n\varepsilon_0}{k_B T}} = \sum_{n=0}^{\infty} \xi^n = \frac{1}{1 - \xi}. \quad (1.34)$$

A számlálóban levő összeg ennek ξ szerinti deriváltjával fejezhető ki:

$$\begin{aligned} \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\frac{n\varepsilon_0}{k_B T}} n \varepsilon_0 &= \varepsilon_0 \sum_{n=0}^{\infty} n \xi^n = \varepsilon_0 \xi \sum_{n=0}^{\infty} n \xi^{n-1} = \varepsilon_0 \xi \frac{d}{d\xi} \sum_{n=0}^{\infty} \xi^n = \varepsilon_0 \xi \frac{d}{d\xi} \frac{1}{1-\xi} \\ &= \frac{\varepsilon_0 \xi}{(1-\xi)^2}. \end{aligned} \quad (1.35)$$

Azt kapjuk tehát, hogy

$$\bar{\varepsilon} = \frac{\varepsilon_0 \xi}{(1-\xi)^2} \bigg/ \frac{1}{1-\xi} = \frac{\varepsilon_0 \xi}{1-\xi} = \frac{\varepsilon_0}{e^{\frac{\varepsilon_0}{k_B T}} - 1} \quad (1.36)$$

Az $\varepsilon_0 \rightarrow 0$ eset a klasszikus harmonikus oszcillátornak felel meg, amikor az oszcillátor folytonosan vehet fel energiát. Ekkor a nevezőben élhetünk az $e^{\frac{\varepsilon_0}{k_B T}} \approx 1 + \frac{\varepsilon_0}{k_B T} + \dots$ közelítéssel és azt találjuk, hogy

$$\bar{\varepsilon}^{\text{kl.}} = k_B T. \quad (1.37)$$

A T hőmérsékletű környezettel termikus egyensúlyban levő klasszikus oszcillátor átlagenergiája nem függ az oszcillátor frekvenciájától. Ha a feketetestsugárzás a klasszikus fizika törvényeit követné, akkor a benne résztvevő minden oszcillátor-módus átlagenergiája $k_B T$ lenne.

Ha Planck hipotézisével élünk, hogy az ω körfrekvenciájú lineáris harmonikus oszcillátor csak $\varepsilon_0 = \hbar\omega$ energiaadagokat képes felvenni, akkor

$$\bar{\varepsilon}(\omega) = \frac{\hbar\omega}{e^{\frac{\hbar\omega}{k_B T}} - 1}. \quad (1.38)$$

Az infravörös módusok esetén $\hbar\omega \ll k_B T$, úgyhogy a nevezőben az exponenciális függvényt megint sorba fejthetjük, akárcsak a klasszikus esetben, és ezekre a módusokra visszkapjuk a klasszikus $\bar{\varepsilon}^{(\text{IR})} \approx k_B T$ átlagenergiát. Ugyanakkor az ultrahibolya $\hbar\omega \gg k_B T$ módusok esetén a nevezőben az exponenciális mellett a -1 tag elhanyagolható és ezeknek a módusoknak az átlagenergiája,

$$\bar{\varepsilon}^{(\text{UV})} \approx \hbar\omega e^{-\frac{\hbar\omega}{k_B T}} \quad (1.39)$$

exponenciálisan elnyomódik a növekvő frekvenciával.

5. Vizsgáljuk L oldalélű kocka alakú, ideális vezetővel határolt üreg belsejében a feketetestsugárzást! Határozzuk meg az $[\omega, \omega + d\omega]$ körfrekvencia-intervallumba eső állóhullámú módusok $g(\omega)d\omega$ számát! Használjuk fel, hogy az elektromos térerősség eltűnik az üreg falain.

Mivel az elektromos térerősségben kialakuló állóhullámok amplitúdója az üreg falain eltűnik, ezért csak olyan állóhullámú módusok tudnak kialakulni, amelyek esetén a félhullámhossz egész számszorosa fér rá az egyes oldalélekre. Legyenek a Descartes-koordinátarendszer tengelyei párhuzamosak a kocka oldaléleivel. Legyenek a $\vec{k}$ hullámvektor Descartes-komponensei k_i ($i = 1, 2, 3$), ekkor az egyes irányokban a lehetséges hullámhosszak $\lambda_i = 2\pi/k_i$ és az elektromos térerősségre vonatkozó határfeltételek előírják, hogy

$$L = L_i = n_i \frac{\lambda_i}{2} = n_i \frac{\pi}{k_i}. \quad (1.40)$$

Ez azt jelenti, hogy a k_i -k csak a diszkrét

$$k_i = n_i \frac{\pi}{L}, \quad n_i = 0, 1, 2, \dots \quad (1.41)$$

értékeket vehetik fel. (Vigyázat: ez nem kvantálás, csupán a klasszikus fizikában is érvényes következménye annak, hogy véges térfogatban vizsgáljuk az állóhullámokat. Végtelen térfogat, azaz $L \rightarrow \infty$ esetén a hullámszámok folytonosan minden értéket felvehetnek.)

Határozzuk meg azon módusok $N(\omega)$ számát, amelyeknek az ω' körfrekvenciája nem nagyobb, mint az adott ω , $\omega' \leq \omega$. A megfelelő $\vec{k}'$ hullámvektorokra teljesül a

$$\sum_{i=1}^3 (k'_i)^2 \leq \frac{\omega^2}{c^2}, \quad (1.42)$$

azaz a

$$\sum_{i=1}^3 n_i^2 \leq \frac{L^2}{\pi^2} \frac{\omega^2}{c^2} \equiv R^2 \quad (1.43)$$

egyenlőtlenség. Ha elképezelünk egy Descartes-koordinátarendszert, amelyben az egész számok (n_1, n_2, n_3) számhármasaival kijelölt pontokat ábrázoljuk, akkor egységnyi oldalélű kockákból felépített rácsot kapunk. Azok a rácsponatok, amelyek az $\omega' \leq \omega$ feltételnek eleget tevő módusokhoz tartoznak, az R sugarú gömb nyolcadában helyezkednek el, így számuk

$$N(\omega) = 2 \cdot \frac{1}{8} \cdot \frac{4R^3}{3} = \frac{L^3 \omega^3}{3\pi^2 c^3}. \quad (1.44)$$

A 2-es szorzó a módusok kétféle polarizációs irányát veszi figyelembe. A módusok frekvencia szerinti $g(\omega)$ sűrűségét megkapjuk, ha $N(\omega)$ -t ω szerint deriváljuk:

$$g(\omega) = \frac{dN(\omega)}{d\omega} = \frac{L^3}{\pi^2 c^3} \omega^2. \quad (1.45)$$

Látjuk, hogy $g(\omega)d\omega \propto \omega^2 d\omega$.

6. Tekintsük a monokromatikus anyaghullámokból szerkesztett

$$\psi(x, t) = \int_{k_0 - \Delta k}^{k_0 + \Delta k} e^{i(kx - \omega(k)t)} dk \quad (1.46)$$

hullámcsomagot, ahol $k_0 \gg \Delta k$ és a a diszperziós reláció jó közelítéssel

$$\omega(k) \approx \omega(k_0) + \left. \frac{d\omega(k)}{dk} \right|_{k=k_0} (k - k_0) + \dots \quad (1.47)$$

alakú, ahol

$$v_g = \left. \frac{d\omega(k)}{dk} \right|_{k=k_0} \quad (1.48)$$

a csoportsebesség. A k szerinti integrál elvégzésével lássa be, hogy

$$\psi(x, t) = 2 \frac{\sin z}{z} e^{i(k_0 x - \omega(k_0)t)} \Delta k, \quad (1.49)$$

ahol $z = (x - v_g t) \Delta k$. Vajon mi történne, ha a diszperziós reláció kvadratikus tagját is figyelembe vennénk?

Megoldás:

Helyettesítsük be a csonkolt diszperziós relációt az integrandusba, térjünk át a $\xi = k - k_0$ integrálási változóra, és végezzük el az integrálást:

$$\begin{aligned}\psi(x, t) &= \int_{-\Delta k}^{\Delta k} e^{i(k_0 + \xi)x - i\omega(k_0)t - iv_g \xi t} d\xi = e^{i(k_0 x - \omega(k_0)t)} \int_{-\Delta k}^{\Delta k} e^{i(x - v_g t)\xi} d\xi \\ &= e^{i(k_0 x - \omega(k_0)t)} \frac{e^{i(x - v_g t)\Delta k} - e^{-i(x - v_g t)\Delta k}}{i(x - v_g t)} = 2 \frac{\sin((x - v_g t)\Delta k)}{(x - v_g t)\Delta k} e^{i(k_0 x - \omega(k_0)t)} \Delta k \\ &= 2 \frac{\sin z}{z} e^{i(k_0 x - \omega(k_0)t)} \Delta k.\end{aligned}\tag{1.50}$$

A hullámcsomag főmaximuma a $z = 0$ feltételnek tesz eleget, ahonnan látjuk, hogy ez a maximum az $x = v_g t$ összefüggésnek megfelelően egyenesvonalu egyenletes mozgást végez a csoportsebességgel azonos sebességgel. A $(\sin z)/z$ függvény 2π periódussal és $1/z$ szerint csillapodó amplitúdóval oszcillál. Ha a hullámcsomag szélességét úgy definiáljuk, mint egy ilyen periódus hosszát, akkor $\Delta z = 2\pi = \Delta k \cdot \Delta x$ adódik a hullámcsomag térbeli Δx kiterjedésére. Szorozzuk $\hbar$ -sal ezen egyenlőség mindkét oldalát, akkor azt kapjuk, hogy

$$\Delta p \cdot \Delta x = \hbar\tag{1.51}$$

Vagyis a térben és az impulzustérben lokalizált a hullámcsomag, de minél jobban lokalizált az egyikben, annál kiterjedtebb a másikban.

Ha figyelembe vennénk a diszperziós reláció következő tagját, akkor azt találnánk, hogy a térbeli Δx szélesség az idő múlásával nő: a hullámcsomag elkezd szétfolyyni.

7. Bohr azt feltételezte, hogy a H-atomban az elektron körpályán mozog, de csak diszkrét energiákat vehet fel úgy, hogy az elektronhullám λ hullámhossza $n = 1, 2, \dots$ egész számszor férjen rá az elektronpálya kerületére:

$$2R\pi = n\lambda.\tag{1.52}$$

Vegyük ehhez hozzá azt, hogy az elektront a Coulomb-erő tartja körpályán, azaz

$$m_e \frac{v^2}{R} = \frac{e^2}{R}.\tag{1.53}$$

(Az egyszerűség kedvéért CGS egységrendszert használtunk.) Határozzuk meg, hogy milyen diszkrét elektronpályák (R_n és v_n) lehetségesek, és ezekhez mekkora E_n energiák tartoznak!

Megoldás:

Newton 2. törvényéből kapjuk, hogy

$$R = \frac{e^2}{m_e v^2},\tag{1.54}$$

amit behelyettesítünk a kvantálási feltételbe:

$$2\frac{e^2}{m_e v^2}\pi = n\frac{h}{p} = n\frac{h}{m_e v}, \quad (1.55)$$

ahol felhasználtuk a de Broglie-féle összefüggést. Innen megkapjuk az elektron kerületi sebességének lehetséges v_n diszkrét értékeit:

$$v_n = \frac{2e^2\pi}{nh}. \quad (1.56)$$

A megfelelő pályasugarak:

$$R_n = \frac{e^2}{m_e v_n^2} = \frac{n^2 h^2}{4m_e e^2 \pi^2}. \quad (1.57)$$

Az elektron kinetikus energiája:

$$K_n = \frac{1}{2}m_e v_n^2 = \frac{2m_e e^4 \pi^2}{n^2 h^2}, \quad (1.58)$$

potenciális energiája

$$U_n = -\frac{e^2}{R_n} = -\frac{4m_e e^4 \pi^2}{n^2 h^2} \quad (1.59)$$

Ezért az elektron lehetséges energiaszintjei:

$$E_n = -\frac{2m_e e^4 \pi^2}{n^2 h^2} \equiv -\frac{E_0}{n^2} \quad (1.60)$$

ahol $E_0 \approx 13,6$ eV. Az alapállapot energiája $-E_0$.

8. A Young-féle kettősréses kísérletben milyen irányokban kapunk maximumokat az interferenciaképekben?

Essen monokromatikus síkhullám merőlegesen arra a síklapra, amelyen két d szélességű, egymástól ℓ távolságra levő párhuzamos csík képviseli a réseket. Az interferenciaképet a résektől L távolságra vizsgáljuk az optikai tengelytől merőlegesen mért előjeles y távolság függvényében, az optikai tengelyhez képest kicsiny θ hajlássögek esetén. Tipikusan teljesülnek a $d \ll \ell \ll L$ feltételek. A résekből hengerhullámok indulnak ki, amelyek útkülönbsége állandó az időben a felfogó ernyő minden y koordinátájú P pontjában. Legyen P távolsága az egyes résektől r_1 és r_2 , és az optikai tengely és a résektől R távolság metszéspontjától R . Az egyes hullámok közti útkülönbség $\Delta s = r_2 - r_1 = \ell \sin \theta$ és $r_1 = R - \frac{1}{2}\ell \sin \theta$, $r_2 = R + \frac{1}{2}\ell \sin \theta$. A P pontban a hullámmennyiség

$$\begin{aligned} \psi(P) &= \frac{1}{\sqrt{R}} \left(e^{ikr_1} + e^{ikr_2} \right) e^{-i\omega t} \\ &\approx \frac{1}{\sqrt{R}} \left(e^{-ik\frac{1}{2}\Delta s} + e^{ik\frac{1}{2}\Delta s} \right) e^{i(kR - \omega t)} \\ &\approx \frac{2}{\sqrt{R}} \cos\left(\frac{1}{2}k\Delta s\right), \end{aligned} \quad (1.61)$$

ahol

$$\Delta s = \ell \sin \theta \approx \ell \theta \approx \ell \tan \theta = \ell \frac{y}{L}. \quad (1.62)$$

Ezért a intenzitás a felfogó ernyő mentén

$$|\psi(P)|^2 \approx \frac{4}{R} \cos^2\left(\frac{\ell}{2L}ky\right) \quad (1.63)$$

Az intenzitásmaximumok olyan y_n helyeken vannak, amelyekre a $\cos^2 \alpha$ argumentuma π egész számú többszöröse:

$$\frac{\ell}{2L}ky_n = n\pi, \Rightarrow y_n = n \frac{2\pi L}{k\ell}, \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (1.64)$$

2. gyakorlat

1. Lássa be, hogy a Hilbert-téren értelmezett belső szorzat az első tényezőjében anti-lineáris!

Megoldás:

Azt kell belátni, hogy tetszőleges $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle, |\phi\rangle \in \mathcal{H}$ vektorok esetén teljesül, hogy

$$\langle c_1\psi_1 + c_2\psi_2 | \phi \rangle = c_1^* \langle \psi_1 | \phi \rangle + c_2^* \langle \psi_2 | \phi \rangle. \quad (2.1)$$

Abból indulunk ki, hogy a belső szorzat a második tényezőjében lineáris, ezért írhatjuk, hogy

$$\begin{aligned} \langle c_1\psi_1 + c_2\psi_2 | \phi \rangle &= \langle \phi | c_1\psi_1 + c_2\psi_2 \rangle^* = \left(c_1 \langle \phi | \psi_1 \rangle + c_2 \langle \phi | \psi_2 \rangle \right)^* \\ &= c_1^* \langle \phi | \psi_1 \rangle^* + c_2^* \langle \phi | \psi_2 \rangle^* = c_1^* \langle \psi_1 | \phi \rangle + c_2^* \langle \psi_2 | \phi \rangle. \end{aligned} \quad (2.2)$$

2. Mutassa meg, hogy a belső szorzatra érvényes a

$$(\phi, \hat{A}\psi) = (\hat{A}^\dagger \phi, \psi) \quad (2.3)$$

számolási szabály.

$$(\phi, \hat{A}\psi) = \langle \phi | \hat{A} | \psi \rangle = \langle \psi | \hat{A}^\dagger | \phi \rangle^* = (\psi, \hat{A}^\dagger \phi)^* = (\hat{A}^\dagger \phi, \psi). \quad (2.4)$$

3. Legyen $\{|f_n\rangle\} \subset \mathcal{H}$ lineárisan független vektorrendszer. Konstruáljon ebből olyan ortonormált vektorrendszert, amelynek egyik eleme $|\varphi_1\rangle = c|f_1\rangle$, ahol c alkalmasan választott normálási tényező!

Megoldás:

A lineárisan független vektorrendszer mindig megszámlálható részhalmaza $\mathcal{H}$ -nak, ezért az alábbi rekurzív eljárást lehet alkalmazni. Nyilvánvalóan $|f_1\rangle$ normája $\sqrt{\langle f_1 | f_1 \rangle}$, ezért

$$|\varphi_1\rangle = \frac{|f_1\rangle}{\sqrt{\langle f_1 | f_1 \rangle}}. \quad (2.5)$$

Az $|f_2\rangle$ -ből úgy kapunk $|\varphi_1\rangle$ -re ortogonális $|\bar{f}_2\rangle$ vektort, hogy levonjuk belőle $|f_2\rangle$ -nek a $|\varphi_1\rangle$ irányú vetületét: $|\bar{f}_2\rangle = |f_2\rangle - \langle \varphi_1 | f_2 \rangle |\varphi_1\rangle$. Normálás után megkapjuk az ortonormált vektorrendszer 2. vektorát:

$$|\varphi_2\rangle = \frac{|\bar{f}_2\rangle}{\sqrt{\langle \bar{f}_2 | \bar{f}_2 \rangle}}. \quad (2.6)$$

Ha megkaptuk az első k darab $|\varphi_1\rangle, \dots, |\varphi_k\rangle$ ortonormált vektort, akkor a $(k+1)$ -diket úgy kapjuk meg $|f_{k+1}\rangle$ -ből, hogy utóbbit merőlegesen vetítjük az $|\varphi_1\rangle, \dots, |\varphi_k\rangle$ által kifeszített altérre és a vetületet kivonjuk $|f_{k+1}\rangle$ -ből, majd az így kapott vektort normáljuk:

$$|\bar{f}_{k+1}\rangle = |f_{k+1}\rangle - \sum_{i=1}^k \langle \varphi_i | f_{k+1} \rangle |\varphi_i\rangle, \quad (2.7)$$

$$|\varphi_{k+1}\rangle = \frac{|\bar{f}_{k+1}\rangle}{\sqrt{\langle \bar{f}_{k+1} | \bar{f}_{k+1} \rangle}}. \quad (2.8)$$

Ezt folytatjuk, amíg fel nem használjuk az eredeti lineárisan független vektorrendszer összes vektorát.

4. Legyen $\{|\varphi_k\rangle\} \subset \mathcal{H}$ ortonormált teljes rendszer és $|\psi\rangle = a_1|\varphi_1\rangle + a_2|\varphi_2\rangle$, $|\phi\rangle = b_1|\varphi_1\rangle + b_2|\varphi_2\rangle$ vektorok $\mathcal{H}$ -ban, ahol $a_k, b_k \in \mathbb{C}$.

- (a) Hogyan szorítja meg a normálási feltétel a kifejtési együtthatókat?
- (b) Milyen amplitúdóval található meg a $|\phi\rangle$ állapot a $|\psi\rangle$ állapotban?
- (c) Legyen $\hat{B} = \sum_n B_n |\varphi_n\rangle \langle \varphi_n|$ fizikai mennyiség operátora, ahol $B_n \in \mathbb{R}$. Ha a $|\psi\rangle$ állapotú rendszeren végrehajtjuk a B fizikai mennyiség mérését, akkor az egyes lehetséges B_n mérési eredmények milyen valószínűséggel fordulnak elő és hogyan változik meg a rendszer állapota?
- (d) Határozza meg, hogy mi a B mennyiség várható értéke és szórásnégyzete a $|\psi\rangle$ állapotban?

Megoldás:

- (a) A normálási feltétel a $|\psi\rangle$ állapotra:

$$1 = \langle \psi | \psi \rangle = (a_1^* \langle \varphi_1 | + a_2^* \langle \varphi_2 |) (a_1 |\varphi_1\rangle + a_2 |\varphi_2\rangle) = |a_1|^2 + |a_2|^2. \quad (2.9)$$

Hasonlóképpen $\langle \phi | \phi \rangle = |b_1|^2 + |b_2|^2$.

- (b) A $|\phi\rangle$ állapot a $|\psi\rangle$ állapotban $\langle \phi | \psi \rangle$ amplitúdóval található meg:

$$\langle \phi | \psi \rangle = \sum_i b_i^* a_j \langle \varphi_i | \varphi_j \rangle = \sum_i b_i^* a_j \delta_{ij} = b_1^* a_1 + b_2^* a_2. \quad (2.10)$$

- (c) A B mennyiséget a mérés $w_n = |\langle \varphi_n | \psi \rangle|^2 = |a_n|^2$ valószínűséggel találja B_n értékűnek. Esetünkben a B_1 és a B_2 eredmény fordul csak elő, rendre $w_1 = |a_1|^2$ és $w_2 = |a_2|^2$ valószínűséggel, a többi érték előfordulási valószínűsége $w_{n>2} = 0$. Közvetlenül a mérés végrehajtása után a rendszer a $|\varphi_1\rangle$ ($|\varphi_2\rangle$) állapotba kerül, ha a mérés eredménye B_1 (B_2) volt.
- (d) A B mennyiség várható értéke a $|\psi\rangle$ állapotban

$$\bar{B} = \langle \psi | \hat{B} | \psi \rangle = \sum_i w_i B_i = |a_1|^2 B_1 + |a_2|^2 B_2, \quad (2.11)$$

a szórásnégyzete pedig

$$\begin{aligned} (\Delta B)^2 &= \langle \psi | (\hat{B} - \bar{B})^2 | \psi \rangle = \langle \psi | \hat{B}^2 | \psi \rangle - \langle \psi | \hat{B} | \psi \rangle^2 \\ &= \sum_i w_i B_i^2 - \bar{B}^2 = |a_1|^2 B_1^2 + |a_2|^2 B_2^2 - (|a_1|^2 B_1 + |a_2|^2 B_2)^2. \end{aligned} \quad (2.12)$$

5. Legyen $\mathcal{S} \subset \mathcal{H}$ a Hilbert-tér altere. Ekkor tetszőleges $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ egyértelműen felbontható $|\psi\rangle = |\varphi\rangle + |\phi\rangle$ alakban, ahol $|\varphi\rangle \in \mathcal{S}$ és $|\phi\rangle$ ortogonális $|\varphi\rangle$ -re, azaz $\langle \varphi | \phi \rangle = 0$. Legyen $\hat{P}$ a $\mathcal{S} \subset \mathcal{H}$ altérre merőlegesen vetítő lineáris operátor (projektor), amit az definiál, hogy tetszőleges $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ esetén $\hat{P}|\psi\rangle = |\varphi\rangle$.

- (a) Mutassa meg, hogy $\hat{P}$ önadjungált és fennáll a $\hat{P}^2 = \hat{P}$ operátoregyenlőség!

- (b) Legyen $\{|\bar{\varphi}_k\rangle\}$ ortonormált teljes rendszer a $\mathcal{S}$ altérben. Mutassa meg, hogy

$$\hat{P} = \sum_k |\bar{\varphi}_k\rangle\langle\bar{\varphi}_k|. \quad (2.13)$$

Megoldás:

- (a) A $\hat{P}$ operátor akkor és csak akkor önadjungált, ha tetszőleges $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle \in \mathcal{H}$ esetén fennáll, hogy

$$\langle\psi_2|\hat{P}|\psi_1\rangle = \langle\psi_2|\hat{P}^\dagger|\psi_1\rangle. \quad (2.14)$$

A bal oldali kifejezés:

$$\langle\psi_2|\hat{P}|\psi_1\rangle = \langle\psi_2|\varphi_1\rangle = (\langle\varphi_2| + \langle\phi_2|)\varphi_1\rangle = \langle\varphi_2|\varphi_1\rangle. \quad (2.15)$$

A jobb oldali kifejezés:

$$\langle\psi_2|\hat{P}^\dagger|\psi_1\rangle = \langle\psi_1|\hat{P}|\psi_2\rangle^* = \langle\psi_1|\varphi_2\rangle^* = \langle\varphi_1|\varphi_2\rangle^* = \langle\varphi_2|\varphi_1\rangle. \quad (2.16)$$

A (2.14) egyenlőség tehát fennáll.

Meg kell továbbá mutassuk, hogy tetszőleges $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle \in \mathcal{H}$ esetén

$$\langle\psi_2|\hat{P}^2|\psi_1\rangle = \langle\psi_2|\hat{P}|\psi_1\rangle. \quad (2.17)$$

Itt $\hat{P}^2|\psi_1\rangle = \hat{P}\hat{P}|\psi_1\rangle = \hat{P}|\varphi_1\rangle = |\varphi_1\rangle = \hat{P}|\psi_1\rangle$, úgyhogy az egyenlőség valóban teljesül.

- (b) Képezzük a korábbi jelöléseket használva az alábbi mátrixelemet:

$$\langle\psi_2|\sum_k |\bar{\varphi}_k\rangle\langle\bar{\varphi}_k|\psi_1\rangle = \sum_k \langle\psi_2|\bar{\varphi}_k\rangle\langle\bar{\varphi}_k|\psi_1\rangle = \sum_k \langle\varphi_2|\bar{\varphi}_k\rangle\langle\bar{\varphi}_k|\varphi_1\rangle, \quad (2.18)$$

mert minden $|\bar{\varphi}_k\rangle$ ortogonális minden $\mathcal{S}_\perp$ -ből vett vektorra. Mivel $\{|\bar{\varphi}_k\rangle\}$ ortonormált teljes rendszer az $\mathcal{S}$ altérben, azért léteznek olyan c_{ak} ($a = 1, 2$) komplex számok, hogy

$$|\varphi_a\rangle = \sum_k c_{ak}|\bar{\varphi}_k\rangle. \quad (2.19)$$

Ekkor

$$\langle\bar{\varphi}_k|\varphi_1\rangle = c_{1k} \text{ és } \langle\varphi_2|\bar{\varphi}_k\rangle = c_{2k}^*, \quad (2.20)$$

úgyhogy

$$\langle\psi_2|\sum_k |\bar{\varphi}_k\rangle\langle\bar{\varphi}_k|\psi_1\rangle = \sum_k \langle\varphi_2|\bar{\varphi}_k\rangle\langle\bar{\varphi}_k|\varphi_1\rangle = \sum_k c_{2k}^* c_{1k}. \quad (2.21)$$

Másrésről írhatjuk, hogy

$$\langle\psi_2|\hat{P}|\psi_1\rangle = \langle\varphi_2|\varphi_1\rangle = \sum_{n,m} c_{2n}^* c_{1m} \langle\bar{\varphi}_n|\bar{\varphi}_m\rangle = \sum_n c_{2n}^* c_{1n}. \quad (2.22)$$

Ez azt jelenti, hogy

$$\langle \psi_2 | \sum_k |\bar{\varphi}_k\rangle \langle \bar{\varphi}_k | \psi_1 \rangle = \langle \psi_2 | \hat{P} | \psi_1 \rangle \quad (2.23)$$

tetszőleges $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle \in \mathcal{H}$ esetén, vagyis

$$\sum_k |\bar{\varphi}_k\rangle \langle \bar{\varphi}_k| = \hat{P}, \quad (2.24)$$

amit igazolni akartunk.

6. Legyen $c \in \mathbb{C}$ és $\hat{A}, \hat{B}, \hat{C}$ lineáris operátorok. Igazolja a kommutátor alábbi tulajdonságait:

(a)

$$[c, \hat{A}] = 0; \quad (2.25)$$

(b)

$$[c\hat{A}, \hat{B}] = [\hat{A}, c\hat{B}] = c[\hat{A}, \hat{B}]; \quad (2.26)$$

(c)

$$[\hat{A}, \hat{B}] = -[\hat{B}, \hat{A}]; \quad (2.27)$$

(d)

$$[\hat{A}, \hat{B} + \hat{C}] = [\hat{A}, \hat{B}] + [\hat{A}, \hat{C}]; \quad (2.28)$$

(e)

$$[\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] = \hat{B}[\hat{A}, \hat{C}] + [\hat{A}, \hat{B}]\hat{C}; \quad (2.29)$$

(f)

$$[\hat{A}, [\hat{B}, \hat{C}]] + [\hat{B}, [\hat{C}, \hat{A}]] + [\hat{C}, [\hat{A}, \hat{B}]] = 0. \quad (2.30)$$

A megoldás során explicit módon ki kell írni a kommutátorokat,

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}, \quad (2.31)$$

és ki kell használni, hogy az operátorok lineárisak, azaz $\hat{A}(c|\psi\rangle) = c\hat{A}|\psi\rangle$. A c komplex számot az (a) feladatban $c\hat{I}$ -nek, az azonossági leképezés operátora c -szeresének kell tekinteni.

7. Lássa be, hogy ha

$$[\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]] = 0, \quad (2.32)$$

akkor teljesül, hogy

$$[\hat{A}^m, \hat{B}] = m\hat{A}^{m-1}[\hat{A}, \hat{B}]. \quad (2.33)$$

Megoldás:

Az $m = 1$ esetben a (2.33) azonosság triviálisan teljesül,

$$[\hat{A}, \hat{B}] = [\hat{A}, \hat{B}]. \quad (2.34)$$

Az $m = 2$ esetben:

$$[\hat{A}^2, \hat{B}] = \hat{A}^2\hat{B} - \hat{B}\hat{A}^2. \quad (2.35)$$

Fejezzük ki itt $\hat{A}^2\hat{B}$ -t a (2.32) feltételből:

$$\begin{aligned} 0 &= [\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]] = \hat{A}(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}) - (\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})\hat{A} = \hat{A}^2\hat{B} - 2\hat{A}\hat{B}\hat{A} + \hat{B}\hat{A}^2, \\ &\Rightarrow \hat{A}^2\hat{B} = 2\hat{A}\hat{B}\hat{A} - \hat{B}\hat{A}^2. \end{aligned} \quad (2.36)$$

Ezért fennáll, hogy

$$[\hat{A}^2, \hat{B}] = \hat{A}^2\hat{B} - \hat{B}\hat{A}^2 = 2\hat{A}\hat{B}\hat{A} - 2\hat{B}\hat{A}^2 = 2[\hat{A}, \hat{B}]\hat{A} = 2\hat{A}[\hat{A}, \hat{B}], \quad (2.37)$$

ahol az utolsó egyenlőség felírásakor újra felhasználtuk a (2.32) feltételt. Ezzel beláttuk, hogy a (2.33) egyenlőség $m = 2$ esetén is fennáll.

A továbbiakban a bizonyítást tetszőleges m -re teljes indukcióval végezzük el. Feltesszük, hogy (2.33) igaz m -re, és belátjuk, hogy akkor $(m + 1)$ -re is igaz. Szorozzuk a (2.33) egyenlőség mindkét oldalát balról $\hat{A}$ -val és adjunk hozzá mindkét oldalhoz $\hat{A}^m[\hat{A}, \hat{B}]$ -t:

$$\hat{A}[\hat{A}^m, \hat{B}] + \hat{A}^m[\hat{A}, \hat{B}] = (m + 1)\hat{A}^m[\hat{A}, \hat{B}]. \quad (2.38)$$

Alakítsuk át azonosan a (2.38) egyenlőség bal oldalát:

$$\begin{aligned} \hat{A}[\hat{A}^m, \hat{B}] + \hat{A}^m[\hat{A}, \hat{B}] &= \hat{A}^{m+1}\hat{B} - \hat{A}\hat{B}\hat{A}^m + \hat{A}^{m+1}\hat{B} - \hat{A}^m\hat{B}\hat{A} \\ &= \hat{A}^m[\hat{A}, \hat{B}] - \hat{A}\hat{B}\hat{A}^m + \hat{A}^{m+1}\hat{B} = [\hat{A}, \hat{B}]\hat{A}^m - \hat{A}\hat{B}\hat{A}^m + \hat{A}^{m+1}\hat{B} \\ &= \hat{A}\hat{B}\hat{A}^m - \hat{B}\hat{A}^{m+1} - \hat{A}\hat{B}\hat{A}^m + \hat{A}^{m+1}\hat{B} = [\hat{A}^{m+1}, \hat{B}]. \end{aligned} \quad (2.39)$$

Ezzel a (2.38) egyenlőséget a (2.33) alakra hoztuk.

8. Igazolja, hogy ha az $\hat{A}$ és $\hat{B}$ lineáris operátorok kommutálnak a kommutátorukkal, azaz

$$[\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]] = [\hat{B}, [\hat{A}, \hat{B}]] = 0, \quad (2.40)$$

akkor igaz, hogy

$$e^{\hat{A}+\hat{B}} = e^{\hat{A}}e^{\hat{B}}e^{-\frac{1}{2}[\hat{A}, \hat{B}]}. \quad (2.41)$$

Megoldás:

Képezzük a $\hat{T}(s) = e^{s\hat{A}}e^{s\hat{B}}$ operátort, ahol $s \in \mathbb{R}$ folytonos paraméter. Deriváljuk ezt s szerint:

$$\begin{aligned}\frac{d\hat{T}(s)}{ds} &= \hat{A}e^{s\hat{A}}e^{s\hat{B}} + e^{s\hat{A}}\hat{B}e^{s\hat{B}} = \hat{A}e^{s\hat{A}}e^{s\hat{B}} + e^{s\hat{A}}\hat{B}e^{-s\hat{A}}e^{s\hat{A}}e^{s\hat{B}} \\ &= (\hat{A} + e^{s\hat{A}}\hat{B}e^{-s\hat{A}})\hat{T}(s).\end{aligned}\quad (2.42)$$

Itt a jobb oldalon a zárójelben írhatjuk, hogy

$$e^{s\hat{A}}\hat{B}e^{-s\hat{A}} = e^{s\hat{A}}\hat{B}e^{-s\hat{A}} + \hat{B} - \hat{B}e^{s\hat{A}}e^{-s\hat{A}} = \hat{B} + e^{s\hat{A}}[\hat{B}, e^{-s\hat{A}}], \quad (2.43)$$

ahol - az előző feladat eredményét felhasználva:

$$\begin{aligned}[\hat{B}, e^{-s\hat{A}}] &= \left[\hat{B}, \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-s\hat{A})^n}{n!} \right] = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-s)^n}{n!} [\hat{B}, \hat{A}^n] = - \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-s)^n}{n!} n\hat{A}^{n-1} [\hat{A}, \hat{B}] \\ &= se^{-s\hat{A}}[\hat{A}, \hat{B}].\end{aligned}\quad (2.44)$$

Írjuk ezt vissza (2.43)-ba,

$$e^{s\hat{A}}\hat{B}e^{-s\hat{A}} = \hat{B} + e^{s\hat{A}}[\hat{B}, e^{-s\hat{A}}] = \hat{B} + s[\hat{A}, \hat{B}], \quad (2.45)$$

majd az utóbbit helyettesítsük be a (2.42) egyenlőség jobb oldalába. Ekkor a

$$\frac{d\hat{T}(s)}{ds} = (\hat{A} + \hat{B} + s[\hat{A}, \hat{B}])\hat{T}(s) \quad (2.46)$$

differenciálegyenletet kapjuk a $\hat{T}(s)$ operátorra. A kezdőfeltétel

$$\hat{T}(0) = \hat{I}. \quad (2.47)$$

Az $\hat{A} + \hat{B}$ operátor kommutál az $[\hat{A}, \hat{B}]$ kommutátorral. Ezért a differenciálegyenletet formálisan ugyanúgy oldhatjuk meg, mintha nem operátorokra vonatkozna. Mindkét oldalt integrálva kapjuk, hogy

$$\int_0^s ds' \frac{d}{ds'} \ln \hat{T}(s') = (\hat{A} + \hat{B})s + \frac{1}{2}s^2[\hat{A}, \hat{B}], \quad (2.48)$$

ahonnan

$$\hat{T}(s) = \exp\left\{(\hat{A} + \hat{B})s + \frac{1}{2}s^2[\hat{A}, \hat{B}]\right\} = \exp\{s(\hat{A} + \hat{B})\} \exp\left\{\frac{1}{2}s^2[\hat{A}, \hat{B}]\right\}. \quad (2.49)$$

Végül $s = 1$ helyettesítéssel kapjuk, hogy

$$e^{\hat{A}+\hat{B}} = e^{\hat{A}}e^{\hat{B}} \exp\left\{-\frac{1}{2}s^2[\hat{A}, \hat{B}]\right\}. \quad (2.50)$$

Ezt akartuk belátni.

9. Legyen $|\psi\rangle$ a vizsgált kvantumrendszer tetszőleges állapota és $\hat{f}$ a rendszeren mérhető, diszkrét spektrumú fizikai mennyiség operátora. Az f mennyiség várható értéke a $|\psi\rangle$ állapotban $\bar{f} = \langle\psi|\hat{f}|\psi\rangle$. Mutassa meg, hogy ez a

definíció összhangban a várható érték valószínűségszámításban használatos értelmezésével.

Megoldás:

Az $\hat{f}$ operátor önadjungált, ezért létezik a sajátvektorainak az ortonormált teljes rendszere, $\{|\varphi_n\rangle\}$ a Hilbert-térben, és

$$\hat{f}|\varphi_n\rangle = f_n|\varphi_n\rangle \quad (2.51)$$

teljesül minden n -re valamilyen f_n sajátértékkel. Ekkor a $|\psi\rangle$ állapot kifejthető ezen ortonormált teljes rendszer szerint:

$$|\psi\rangle = \sum_n c_n |\varphi_n\rangle. \quad (2.52)$$

Ezt felhasználva a várható érték:

$$\begin{aligned} \bar{f} &= \langle\psi|\hat{f}|\psi\rangle = \sum_{n,m} c_n^* c_m \langle\varphi_n|\hat{f}|\varphi_m\rangle = \sum_{n,m} c_n^* c_m f_m \langle\varphi_n|\varphi_m\rangle \\ &= \sum_{n,m} c_n^* c_m f_m \delta_{n,m} = \sum_n |c_n|^2 f_n = \sum_n w_n f_n. \end{aligned} \quad (2.53)$$

Itt f_n a mérés lehetséges eredményei és $w_n = |c_n|^2$ annak a valószínűsége, hogy f mérése a $|\psi\rangle$ állapotú rendszeren az n -edik eredményt adja. A kapott képlet pontosan a várható érték kiszámításának módja a valószínűségszámítás szabályai szerint.

10. Mutassa meg, hogy a

$$(\Delta f)^2 = \langle\psi|(\hat{f} - \langle\psi|\hat{f}|\psi\rangle)^2|\psi\rangle \quad (2.54)$$

szórásnégyzet azonosan átírható a

$$(\Delta f)^2 = \langle\psi|\hat{f}^2|\psi\rangle - \langle\psi|\hat{f}|\psi\rangle^2 \quad (2.55)$$

alakba.

Megoldás:

$$\begin{aligned} (\Delta f)^2 &= \langle\psi|(\hat{f} - \langle\psi|\hat{f}|\psi\rangle)^2|\psi\rangle = \langle|\hat{f}^2 - 2\bar{f}\hat{f} + \bar{f}^2|\rangle \\ &= \langle|\hat{f}^2|\rangle - 2\bar{f}\bar{f} + \bar{f}^2 = \langle|\hat{f}^2|\rangle - \bar{f}^2. \end{aligned} \quad (2.56)$$

11. Lássa be, hogy ha $\hat{A}$ és $\hat{B}$ önadjungált operátorok és $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ tetszőleges állapot (amelyen $\hat{A}$ és $\hat{B}$ értelmezve van), akkor teljesül a

$$\Delta A \Delta B \geq \sqrt{-\frac{1}{4}\langle\psi|[\hat{A}, \hat{B}]|\psi\rangle^2} \quad (2.57)$$

határozatlansági reláció. Mutassa meg, hogy az $\hat{A} = \hat{x}$, $\hat{B} = \hat{p}_x$ speciális esetben visszakapjuk a jól ismert Heisenberg-féle határozatlansági relációt:

$$\frac{\hbar}{2} \leq \Delta x \Delta p_x. \quad (2.58)$$

Legyen $\xi \in \mathbb{R}$ változó, $b \in \mathbb{R}$ tetszőleges paraméter, és képezzük a

$$|\phi\rangle = \left(\xi(\hat{A} - \bar{A}) + ib(\hat{B} - \bar{B}) \right) |\psi\rangle \quad (2.59)$$

vektort. Definíciójánál fogva $|\phi\rangle$ a Hilbert-tér vektora, de akkor a normájának a négyzete nem negatív:

$$\begin{aligned} 0 &\leq \langle \phi | \phi \rangle \\ &= \langle \psi | \left(\xi(\hat{A}^\dagger - \bar{A}) - ib(\hat{B}^\dagger - \bar{B}) \right) \left(\xi(\hat{A} - \bar{A}) + ib(\hat{B} - \bar{B}) \right) | \psi \rangle \\ &= \langle \psi | \left(\xi(\hat{A} - \bar{A}) - ib(\hat{B} - \bar{B}) \right) \left(\xi(\hat{A} - \bar{A}) + ib(\hat{B} - \bar{B}) \right) | \psi \rangle \\ &= \langle \psi | \xi^2(\hat{A} - \bar{A})^2 + b^2(\hat{B} - \bar{B})^2 + ib\xi[\hat{A} - \bar{A}, \hat{B} - \bar{B}] | \psi \rangle \\ &= \xi^2(\Delta A)^2 + b^2(\Delta B)^2 + ib\xi\langle \psi | [\hat{A}, \hat{B}] | \psi \rangle. \end{aligned} \quad (2.60)$$

A kapott egyenlőtlenség jobb oldala a ξ valós változó másodfokú polinomja. Az egyenlőtlenség azt fejezi ki, hogy a megfelelő másodfokú egyenletnek nincsen 2 különböző valós gyöke. Ez akkor és csak akkor következik be, ha az egyenlet diszkriminánsa nem pozitív:

$$-b^2\langle \psi | [\hat{A}, \hat{B}] | \psi \rangle - 4(\Delta A)^2 b^2 (\Delta B)^2 \leq 0. \quad (2.61)$$

Innen rendezés után adódik a keresett egyenlőtlenség.

Az $\hat{A} = \hat{x}$, $\hat{B} = \hat{p}_x$ esetben $[\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar$, úgyhogy ekkor

$$\sqrt{-\frac{1}{4}\langle \psi | [\hat{A}, \hat{B}] | \psi \rangle^2} = \sqrt{\frac{\hbar^2}{4}} = \frac{\hbar}{2}. \quad (2.62)$$

3. gyakorlat

1. Mutassa meg, hogy az $\hat{U}$ unitér operátor megőrzi a belső szorzatot!

Megoldás:

Legyenek $|\psi\rangle, |\phi\rangle$ tetszőleges állapotvektorok. Azt kell megmutatni, hogy

$$(\hat{U}\phi, \hat{U}\psi) = (\phi, \psi), \quad (3.1)$$

ahol $\hat{U}^\dagger \hat{U} = \hat{I}$. A (2.3) szabály felhasználásával írhatjuk, hogy

$$(\hat{U}\phi, \hat{U}\psi) = (\phi, \hat{U}^\dagger \hat{U}\psi) = \langle \phi | \hat{U}^\dagger \hat{U} | \psi \rangle = \langle \phi | \psi \rangle = (\phi, \psi). \quad (3.2)$$

2. Mutassa meg, hogy ha az $\hat{U}(t, t_0) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t - t_0)\right)$ evolúciós operátor unitér, akkor a $\hat{H}$ Hamilton-operátor önadjungált!

Megoldás:

Legyen $t - t_0 = \delta t$ tetszőleges infinitezimális időtartam, akkor jó közelítéssel

$$\hat{U}(t_0 + \delta t, t_0) = \hat{I} - \frac{i}{\hbar} \hat{H} \delta t + \mathcal{O}((\delta t)^2), \quad (3.3)$$

és a δt -ben első rendű tagokkal bezárólag

$$\begin{aligned} \hat{I} &= [\hat{U}(t_0 + \delta t, t_0)]^\dagger \hat{U}(t_0 + \delta t, t_0) = \left(\hat{I} + \frac{i}{\hbar} \hat{H}^\dagger \delta t + \dots \right) \left(\hat{I} - \frac{i}{\hbar} \hat{H} \delta t + \dots \right) \\ &= \hat{I} + \frac{i}{\hbar} (\hat{H}^\dagger - \hat{H}) \delta t + \dots, \end{aligned} \quad (3.4)$$

ahonnan következik, hogy $\hat{H}^\dagger = \hat{H}$.

3. Mutassa meg, hogy a $\langle \psi(t) |$ bravektorra vonatkozó Schrödinger-egyenlet:

$$-i\hbar \partial_t \langle \psi(t) | = \langle \psi(t) | \hat{H}. \quad (3.5)$$

Megoldás:

Az állapot unitér időbeli fejlődése során a belső szorzat állandó: $\langle \phi(t) | \psi(t) \rangle = \langle \phi(0) | \psi(0) \rangle$, ahol $|\psi(0)\rangle$ és $|\phi(0)\rangle$ tetszőleges kezdeti állapotok. Deriváljuk ezt a feltételt a t idő szerint:

$$\begin{aligned} 0 &= (\partial_t \langle \phi |) \psi + \langle \phi | (\partial_t \psi), \\ \Rightarrow (\partial_t \langle \phi |) \psi &= -\langle \phi | (\partial_t \psi). \end{aligned} \quad (3.6)$$

Szorozzuk a kapott egyenlőség mindkét oldalát $i\hbar$ -sal és használjuk fel a ketvektorra vonatkozó Schrödinger-egyenletet:

$$(i\hbar \partial_t \langle \phi(t) |) \psi(t) = -\langle \phi(t) | (i\hbar \partial_t \psi(t)) = -\langle \phi(t) | \hat{H} \psi(t), \quad (3.7)$$

ahol $|\psi(t)\rangle$ tetszőleges, úgyhogy

$$i\hbar \partial_t \langle \phi(t) | = -\langle \phi(t) | \hat{H}. \quad (3.8)$$

4. Legyen $\hat{f}$ az időtől explicit módon nem függő fizikai mennyiség operátora. Mutassa meg, hogy az f fizikai mennyiség várható értéke stacionárius állapotban megmaradó mennyiség!

Megoldás:

Legyen $|\varphi_n(t)\rangle = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}E_n t\right)\varphi_n(0)$ a $\hat{H}$ Hamilton-operátor E_n energia-sajátértékhez tartozó sajátállapota. Azt kell belátni, hogy $\langle\varphi_n(t)|\hat{f}|\varphi_n(t)\rangle = \text{áll.}$, ha $\partial_t \hat{f} = \hat{0}$. Képezzük a $\langle\varphi_n(t)|\hat{f}|\varphi_n(t)\rangle$ várható érték idő szerinti deriváltját:

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\langle\varphi_n(t)|\hat{f}|\varphi_n(t)\rangle &= (\partial_t \langle\varphi_n(t)|)\hat{f}|\varphi_n(t)\rangle + \langle\varphi_n(t)|(\partial_t \hat{f})|\varphi_n(t)\rangle + \langle\varphi_n(t)|\hat{f}(\partial_t |\varphi_n(t)\rangle) \\ &= +\frac{i}{\hbar}E_n \langle\varphi_n(t)|\hat{f}|\varphi_n(t)\rangle + 0 - \frac{i}{\hbar}E_n \langle\varphi_n(t)|\hat{f}|\varphi_n(t)\rangle = 0,\end{aligned}\quad (3.9)$$

azaz a $\langle\varphi_n(t)|\hat{f}|\varphi_n(t)\rangle$ várható érték megmaradó mennyiség.

5. Lásza be a Dirac-delta alábbi tulajdonságait:

- (a) $\delta(x) = \delta(-x)$.
- (b) $x\delta(x) = 0$.
- (c) $\delta(ax) = |a|^{-1}\delta(x)$, ha $a \neq 0$ valós szám.
- (d) $f(x)\delta(x-a) = f(a)\delta(x-a)$, ahol $f(x)$ az $x=a$ helyen nem szinguláris valós függvény és $a \in \mathbb{R}$.
- (e) $x\delta'(x) = -\delta(x)$.
- (f) $\int_{-\infty}^{\infty} dx \delta(a-x)\delta(x-b) = \delta(a-b)$.

Megoldás:

A bizonyításhoz abból indulunk ki, hogy a Dirac-delta egy funkcionál magja. Vegyünk ezért egy tetszőleges $g(x)$ „jó viselkedésű”¹ valós függvényt.

- (a) Az $x \rightarrow -x$ változó-transzformáció elvégzésével írhatjuk, hogy

$$\begin{aligned}\int_{-\infty}^{\infty} dx \delta(-x)g(x) &\stackrel{y=-x}{=} -\int_{\infty}^{-\infty} dy \delta(y)g(-y) = \int_{-\infty}^{\infty} dy \delta(y)g(-y) \\ &= g(0) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \delta(x)g(x).\end{aligned}\quad (3.10)$$

- (b)

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx x\delta(x)g(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \delta(x)[xg(x)] = [xg(x)]_{x=0} = 0.\quad (3.11)$$

- (c) Hajtsuk végre az $x \rightarrow y = |a|x$ változó-transzformációt:

$$\begin{aligned}\int_{-\infty}^{\infty} dx \delta(ax)g(x) &\stackrel{y=|a|x}{=} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dy}{|a|} \delta(y)g(y/|a|) = \frac{1}{|a|} \int_{-\infty}^{\infty} dy \delta(y)g(y/|a|) \\ &= \frac{g(0)}{|a|} = \frac{1}{|a|} \int_{-\infty}^{\infty} dx \delta(x)g(x).\end{aligned}\quad (3.12)$$

¹A $g(x)$ függvény végtelen sokszor differenciálható és $|x| \rightarrow \infty$ esetén $x^n \partial_m g(x)$ zérushoz tart minden n, m pozitív egész szám esetén.

(d)

$$\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{\infty} dx f(x) \delta(x-a) g(x) &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \delta(x-a) [f(x)g(x)] = f(a)g(a) \\
&= f(a) \int_{-\infty}^{\infty} dx \delta(x-a) g(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dx [f(a)\delta(x-a)] g(x).
\end{aligned}
\tag{3.13}$$

(e) Hajtsunk végre parciális integrálást:

$$\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{\infty} dx x \delta'(x) f(x) &= [\delta(x) x f(x)]_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} dx \delta(x) [x f(x)]' \\
&= 0 - \int_{-\infty}^{\infty} dx \delta(x) [f(x) + x f'(x)] \\
&= - \int_{-\infty}^{\infty} dx \delta(x) f(x) - \int_{-\infty}^{\infty} dx [x \delta(x)] f(x) \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} dx [-\delta(x)] f(x),
\end{aligned}
\tag{3.14}$$

ahol az utolsó egyenlőség felírásakor felhasználtuk a (b) tulajdonságot.

6. Mutassa meg, hogy a Dirac-delta Fourier-előállítása

$$\delta(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx} dk.
\tag{3.15}$$

Legyen $f(x)$ tetszőleges „jó viselkedésű” függvény; ennek a Fourier-előállítása

$$f(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk e^{-ikx} \tilde{f}(k),
\tag{3.16}$$

ahol

$$\tilde{f}(k) = \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{ikx} f(x)
\tag{3.17}$$

az $f(x)$ függvény Fourier-transzformáltja. A fentiek segítségével írhatjuk, hogy

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk e^{ikx} f(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk \tilde{f}(k) = f(0) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \delta(x) f(x),
\tag{3.18}$$

ahol az első és a második egyenlőség felírásához felhasználtuk a Fourier-transzformáció (3.17) és az inverz Fourier-transzformáció (3.16) képleteit.

7. Mutassa meg, a Dirac-delta Fourier-előállításának segítségével, hogy

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \delta(x-a) \delta(x-b) = \delta(a-b).
\tag{3.19}$$

A Dirac-delták helyére helyettesítsük be a Fourier-előállításukat:

$$\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{\infty} dx \delta(x-a) \delta(x-b) &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk'}{2\pi} e^{ik(a-x)} e^{ik'(x-b)} \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk'}{2\pi} e^{ika-ik'b} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{i(k'-k)x} \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk'}{2\pi} e^{ika-ik'b} 2\pi \delta(k-k') \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} e^{ik(a-b)} = \delta(a-b). \tag{3.20}
\end{aligned}$$

4. gyakorlat

1. Mutassa meg, hogy koordináta-reprezentációban az $\hat{x} \leftrightarrow x$, $\hat{p}_x \leftrightarrow \frac{\hbar}{i}\partial_x$ megfeleltetés kielégíti a Heisenberg-féle kanonikus $[\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar$ csererelációt!

Megoldás:

Legyen $\psi(x)$ tetszőleges koordináta-hullámfüggvény; akkor

$$\begin{aligned} (\hat{x}\hat{p}_x - \hat{p}_x\hat{x})|\psi\rangle &\leftrightarrow x\frac{\hbar}{i}\partial_x\psi(x) - \frac{\hbar}{i}\partial_x(x\psi(x)) = \frac{\hbar}{i}(x\partial_x\psi - \psi - x\partial_x\psi) \\ &= i\hbar\psi(x). \end{aligned} \quad (4.1)$$

2. Lássa be, hogy az $\hat{x} \leftrightarrow x$ koordinátával történő szorzás a koordináta-reprezentációban önadjungált operátor, mint a tetszőleges $[a, b]$ intervallumon értelmezett négyzetesen integrálható függvények $L_2([a, b], dx)$ terén ható operátor!

Megoldás:

Legyenek $\phi(x), \psi(x) \in L_2([a, b], dx)$ tetszőleges hullámfüggvények! Azt szeretnénk belátni, hogy teljesül a formálisan

$$\langle\phi|\hat{x}^\dagger|\psi\rangle = \langle\phi|\hat{x}|\psi\rangle \quad (4.2)$$

alakú azonosság. Írjuk ki a bal oldalt részletesen:

$$\langle\phi|\hat{x}^\dagger|\psi\rangle = \langle\psi|\hat{x}|\phi\rangle^* = \left[\int_a^b dx\psi^*(x)x\phi(x)\right]^* = \int_a^b dx\phi^*(x)x\psi(x) = \langle\phi|\hat{x}|\psi\rangle. \quad (4.3)$$

Az intervallum akár egyik, akár mindkét irányban végtelen is lehet, a levezetés, akkor is érvényes.

3. Lássa be, hogy a $\hat{p}_x \leftrightarrow \frac{\hbar}{i}\partial_x$ operátor önadjungált, mint az $x \in (-\infty, \infty)$ számegyenesen értelmezett négyzetesen integrálható függvények $L_2(\mathbb{R}, dx)$ terén ható operátor.

Megoldás:

Legyen $\phi(x), \psi(x) \in L_2(\mathbb{R}, dx)$ tetszőleges hullámfüggvények. Azt szeretnénk belátni, hogy

$$\langle\phi|\hat{p}_x^\dagger|\psi\rangle = \langle\phi|\hat{p}_x|\psi\rangle. \quad (4.4)$$

Írjuk fel a bal oldali mátrixelemet koordináta-reprezentációban, majd integráljunk parciálisan:

$$\begin{aligned} \langle\phi|\hat{p}_x^\dagger|\psi\rangle &= \langle\psi|\hat{p}_x|\phi\rangle^* = \left[\int_{-\infty}^{\infty} dx\psi^*(x)\frac{\hbar}{i}\partial_x\phi(x)\right]^* = -\int_{-\infty}^{\infty} dx\psi(x)\frac{\hbar}{i}\partial_x\phi^*(x) \\ &= -\frac{\hbar}{i}\left[\psi(x)\phi^*(x)\right]_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} dx\phi^*(x)\partial_x\psi(x). \end{aligned} \quad (4.5)$$

Itt $[\psi(x)\phi^*(x)]_{-\infty}^{\infty} = 0$, mert a négyzetes integrálhatóság miatt $\int_{-\infty}^{\infty} dx|\psi(x)|^2 < +\infty$, ami azt jelenti, hogy $|\psi(x)|^2 < 1/|x|$ kell legyen, ha $|x| \rightarrow \infty$, vagyis a hullámfüggvények a térbeli végtelenben nullához kell tartanak. Ezért azt találjuk, hogy

$$\langle\phi|\hat{p}_x^\dagger|\psi\rangle = \frac{\hbar}{i}\int_{-\infty}^{\infty} dx\phi^*(x)\partial_x\psi(x), \quad (4.6)$$

ami a bizonyítani kívánt (4.4) egyenlőség jobb oldalának koordináta-reprezentációs alakja.

4. Mutassa meg, hogy a $\hat{p}_x \leftrightarrow \frac{\hbar}{i}\partial_x$ hozzárendelésnek az $\langle x|\hat{p}_x|x'\rangle = -(\hbar/i)\partial_x\delta(x'-x)$ „mátrix” (azaz integrál-magfüggvény) felel meg! (Ez példa arra, hogy a lineáris differenciáloperátoroknak alkalmas magfüggvénnyel definiált lineáris funkcionálok feleltethetők meg.)

Bizonyítás:

Legyen $\psi(x) \in L_2(\mathbb{R}, dx)$ tetszőleges hullámfüggvény, ekkor

$$\begin{aligned}\langle x|\hat{p}_x|\psi\rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} dx' \langle x|\hat{p}_x|x'\rangle \langle x'|\psi\rangle = - \int_{-\infty}^{\infty} dx' (\hbar/i)\partial_x\delta(x'-x)\psi(x') \\ &= (\hbar/i) \int_{-\infty}^{\infty} dx' \partial_x\delta(x'-x)\psi(x') = (\hbar/i)\partial_x \int_{-\infty}^{\infty} dx' \delta(x'-x)\psi(x') \\ &= (\hbar/i)\partial_x\psi(x).\end{aligned}\tag{4.7}$$

5. Lássa be, hogy az

$$\hat{I} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_x}{2\pi\hbar} |p_x\rangle \langle p_x|,\tag{4.8}$$

$$\hat{I} = \int_{-\infty}^{\infty} dx |x\rangle \langle x|\tag{4.9}$$

egységfelbontások és az impulzusoperátor koordináta-reprezentációbeli saját-függvényeinek $\langle x|p_x\rangle = e^{\frac{i}{\hbar}p_x x}$ alakja (azzal a választással, hogy a normálási együttható 1) összhangban van az

$$\langle x|x'\rangle = \delta(x-x') \text{ és } \langle p_x|p'_x\rangle = 2\pi\hbar\delta(p_x-p'_x)\tag{4.10}$$

„ortonormáltsági” feltételekkel!

Megoldás:

A (4.8) egységfelbontás segítségével kapjuk, hogy

$$\begin{aligned}\langle x|x'\rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_x}{2\pi\hbar} \langle x|p_x\rangle \langle p_x|x'\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_x}{2\pi\hbar} e^{\frac{i}{\hbar}p_x x} e^{-\frac{i}{\hbar}p_x x'} \\ &\stackrel{k_x=p_x/\hbar}{=} \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk_x e^{ik_x(x-x')} = \delta(x-x').\end{aligned}\tag{4.11}$$

A (4.9) egységfelbontás segítségével kapjuk, hogy

$$\begin{aligned}\langle p_x|p'_x\rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \langle p_x|x\rangle \langle x|p'_x\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\frac{i}{\hbar}p_x x + \frac{i}{\hbar}p'_x x} = \delta\left(\frac{p_x-p'_x}{2\pi\hbar}\right) \\ &= 2\pi\hbar\delta(p_x-p'_x).\end{aligned}\tag{4.12}$$

6. Legyen a fizikai rendszer koordináta-hullámfüggvénye Gauss-függvény:

$$\psi(x) = \mathcal{N}e^{-ax^2}, \quad a > 0.\tag{4.13}$$

- (a) Határozza meg az $\mathcal{N}$ normálási tényezőt, hogy $\|\psi\|^2 = 1$ legyen!

(b) Határozza meg a hullámfüggvényt az impulzus-reprezentációban!

Fel kell használni az alábbi Gauss-integrálokat:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-ax^2} = \sqrt{\frac{\pi}{a}}, \quad a > 0 \quad (4.14)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-ax^2+bx} = \sqrt{\frac{\pi}{a}} \exp\left(\frac{b^2}{4a}\right). \quad (4.15)$$

Megoldás:

(a) A normálási feltétel

$$\|\psi\|^2 = \int_{-\infty}^{\infty} dx |\psi(x)|^2 = |\mathcal{N}|^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-2ax^2} = |\mathcal{N}|^2 \sqrt{\frac{\pi}{2a}} = 1, \quad (4.16)$$

ahonnan egységnyi abszolút értékű $e^{i\alpha}$ fázisfaktor erejéig

$$\mathcal{N} = \left(\frac{2a}{\pi}\right)^{1/4} \quad (4.17)$$

adódik.

(b) Az impulzus-reprezentációban a $\tilde{\psi}(p_x)$ hullámfüggvény a $\psi(x)$ koordináta-hullámfüggvény Fourier-transzformáltja:

$$\begin{aligned} \langle p_x | \psi \rangle &= \tilde{\psi}(p_x) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \langle p_x | x \rangle \langle x | \psi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\frac{i}{\hbar} p_x x} \psi(x) \\ &= \mathcal{N} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\frac{i}{\hbar} p_x x - ax^2}. \end{aligned} \quad (4.18)$$

Ez nevezetes Gauss-integrál, amelynek eredménye:

$$\tilde{\psi}(p_x) = \mathcal{N} \sqrt{\frac{\pi}{a}} \exp\left\{\left(-\frac{i}{\hbar} p_x\right)^2 \frac{1}{4a}\right\} = \mathcal{N} \sqrt{\frac{\pi}{a}} \exp\left(-\frac{p_x^2}{4a\hbar^2}\right), \quad (4.19)$$

vagyis az impulzus-hullámfüggvény is Gauss-függvény.

7. Az m tömegű, p_x impulzusú részecske stacionárius „állapota” a

$$\psi(x, t) = \mathcal{N} e^{\frac{i}{\hbar}(p_x x - Et)}, \quad E = \frac{p_x^2}{2m} \quad (4.20)$$

de Broglie-hullám. Határozza meg, hogy milyen $\rho(x, t)$ valószínűségi sűrűség és $j_x(x, t)$ valószínűségi áramsűrűség tartozik ehhez az „állapothoz”? (Megjegyzés: Ez a hullámfüggvény nem integrálható négyzetesen, azaz nem valódi fizikai állapotot ír le, ezért áll itt idézőjelben az állapot szó.)

Megoldás:

A valószínűségi sűrűség:

$$\rho(x, t) = |\psi(x, t)|^2 = |\mathcal{N}|^2 = \text{áll.}, \quad (4.21)$$

ami az x -tengely mentén homogén és időben állandó. Ezért az $\int_{-\infty}^{\infty} \rho dx$ integrál nem véges, vagyis a de Broglie-hullám nem valódi fizikai állapot, nem normálható.

A valószínűségi áramsűrűség:

$$\begin{aligned} j_x(x, t) &= \frac{i\hbar}{2m}(\psi \partial_x \psi^* - \psi^* \partial_x \psi) \\ &= \frac{i\hbar}{2m} |\mathcal{N}|^2 \left(-e^{\frac{i}{\hbar}(p_x x - Et)} \frac{i}{\hbar} p_x e^{-\frac{i}{\hbar}(p_x x - Et)} - e^{-\frac{i}{\hbar}(p_x x - Et)} \frac{i}{\hbar} p_x e^{\frac{i}{\hbar}(p_x x - Et)} \right) \\ &= \frac{i\hbar}{2m} |\mathcal{N}|^2 \left(-2 \frac{i}{\hbar} p_x \right) = \frac{p_x}{m} |\mathcal{N}|^2 = \frac{p_x}{m} \rho = \rho (v_f)_x, \end{aligned} \quad (4.22)$$

ahol $(v_f)_x$ a fázissebesség. A valószínűségi áramsűrűség is homogén az x -tengely mentén és időben állandó.

8. A $\Delta p = \hbar \Delta k$ bizonytalansággal p_0 impulzusú részecskét a

$$\psi(x, t) = \mathcal{N} \frac{\sin[(x - v_g t) \Delta k]}{(x - v_g t) \Delta k} e^{\frac{i}{\hbar}(p_0 x - E_0 t)} \quad (4.23)$$

hullámcsomag írja le a diszperziós reláció lineáris közelítésében, ahol v_g a csoportsebesség (ld. az 1. gyakorlat 6. feladatát!). Határozza meg az ehhez az állapothoz tartozó $\rho(x, t)$ valószínűségi sűrűséget és $j_x(x, t)$ valószínűségi áramsűrűséget! Ez valódi, azaz normálható fizikai állapot?

Megoldás:

Vezessük be a $z = (v_g t - x) \Delta k$ jelölést. A valószínűségi sűrűség:

$$\rho(x, t) = |\psi(x, t)|^2 = |\mathcal{N}|^2 \left(\frac{\sin z}{z} \right)^2. \quad (4.24)$$

Ez a $z = 0$ helyen főmaximummal és $1/z^2$ -tel arányosan csökkenő amplitúdójú mellékmaximumokkal rendelkező függvény. Az egész mintázat alakja időben nem változik, ami a diszperziós reláció lineáris közelítésének a következménye, és a mintázat a v_g = áll. = $dE/dp|_{p=p_0} = p_0/m$ csoportsebességgel egyenes vonalú egyenletes mozgást végez. Ha $|x| \rightarrow \infty$ és t tetszőlegesen rögzített pillanat, akkor $\rho \sim 1/x^2$ szerint lecseng, ezért a hullámcsomag négyzetesen integrálható:

$$1 = \int_{-\infty}^{\infty} dx |\psi(x, t)|^2 \stackrel{x \rightarrow z = (x - v_g t) \Delta k}{=} \frac{|\mathcal{N}|^2}{\Delta k} \int_{-\infty}^{\infty} dz \left(\frac{\sin z}{z} \right)^2 = \frac{\pi |\mathcal{N}|^2}{\Delta k}, \quad (4.25)$$

ahonnan egységnyi abszolút értékű fázisfaktor erejéig

$$\mathcal{N} = \sqrt{\frac{\Delta k}{\pi}}. \quad (4.26)$$

Itt felhasználtuk az

$$\int_{-\infty}^{\infty} dz \frac{\sin^2 z}{z^2} = \pi \quad (4.27)$$

nevezetes integrált.

A valószínűségi áramsűrűség meghatározásához szükségünk van a hullámfüggvény x szerinti deriváltjára:

$$\partial_x \psi = \mathcal{N} \left[\left(\frac{d}{dz} \frac{\sin z}{z} \right) \Delta k + \frac{\sin z}{z} \frac{i}{\hbar} p_0 \right] e^{\frac{i}{\hbar} (p_0 x - Et)}. \quad (4.28)$$

Ezt felhasználva kapjuk, hogy

$$\begin{aligned} j_x(x, t) &= \frac{i\hbar}{2m} |\mathcal{N}|^2 \left\{ \frac{\sin z}{z} \left[\left(\frac{d}{dz} \frac{\sin z}{z} \right) \Delta k - \frac{\sin z}{z} \frac{i}{\hbar} p_0 \right] \right. \\ &\quad \left. - \frac{\sin z}{z} \left[\left(\left(\frac{d}{dz} \frac{\sin z}{z} \right) \Delta k + \frac{\sin z}{z} \frac{i}{\hbar} p_0 \right) \right] \right\} \\ &= -\frac{i\hbar}{2m} |\mathcal{N}|^2 2 \left(\frac{\sin z}{z} \right) \frac{i}{\hbar} p_0 = |\mathcal{N}|^2 \frac{p_0}{m} = \rho v_g \end{aligned} \quad (4.29)$$

mert $v_g = dE/dp|_{p=p_0} = p_0/m$.

9. Mutassa meg, hogy impulzus-reprezentációban a

$$\hat{p}_x \leftrightarrow p_x, \quad \hat{x} \leftrightarrow -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial p_x} \quad (4.30)$$

megfeleltetések kielégítik a Heisenberg-féle $[\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar$ relációt.

Megoldás:

Legyen $\tilde{\psi}(p_x) \in L_2(\mathbb{R}, dp_x/(2\pi\hbar))$ tetszőleges. Akkor a fenti megfeleltetésekkel írhatjuk, hogy

$$\begin{aligned} \langle p_x | [\hat{x}, \hat{p}_x] | \psi \rangle &= -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial p_x} (p_x \tilde{\psi}) + p_x \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial p_x} \tilde{\psi} = -\frac{\hbar}{i} \tilde{\psi} \\ &= i\hbar \tilde{\psi}(p_x) = \langle p_x | i\hbar \hat{I} | \psi \rangle. \end{aligned} \quad (4.31)$$

10. A fizikai rendszer $|\psi\rangle$ állapotát a rögzített K inerciarendszerben a $\psi(x)$ hullámfüggvény írja le. Legyen továbbá adott a $\hat{T}(a) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} a \hat{p}_x\right)$ lineáris önadjungált operátor, ahol $a \in \mathbb{R}$ folytonos paraméter. Mutassa meg, hogy a $\psi'(x) \equiv \hat{T}(a)\psi(x)$ hullámfüggvény az ugyancsak $|\psi\rangle$ állapotú, de az x -tengely mentén pozitív irányban a -val eltolt fizikai rendszert írja le a K inerciarendszerben. Lássa be, hogy ha nem a fizikai rendszert toljuk el, hanem a K inerciarendszert toljuk el $-a$ -val az x -tengely mentén, akkor a $|\psi\rangle$ állapotú fizikai rendszert az eltolt K' inerciarendszerben a $\psi_{K'}(x) = \hat{T}(a)\psi(x) = \psi'(x)$ hullámfüggvény írja le.

Legyen $\psi(x) \in L_2(\mathbb{R}, dx)$ tetszőleges hullámfüggvény. Hassunk rá a $\hat{T}(a)$ unitér operátorral:

$$\begin{aligned} \hat{T}(a)\psi(x) &= \exp\left(-\frac{i}{\hbar} a \hat{p}_x\right)\psi(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(-\frac{i}{\hbar} a\right)^n \hat{p}_x^n \psi(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-a)^n}{n!} \partial_x^n \psi(x) \\ &= \psi(x - a), \end{aligned} \quad (4.32)$$

mert az utolsó egyenlőség bal oldala éppen $\psi(x - a)$ Taylor-sora az x helyen.

Tegyük fel, hogy a K inerciarendszer rögzített és az S fizikai rendszert eltoljuk a x -tengely mentén pozitív irányban a -val. Ekkor a fizikai rendszer valamely adott pontja a K inerciarendszer P pontjából annak P' pontjába kerül. Ha az eredeti rendszer állapotát a $\psi(x)$, az eltoló fizikai rendszer ugyanezen állapotát pedig a $\psi'(x)$ hullámfüggvény írja le, akkor annak az egyenlőségnek kell teljesülnie, hogy

$$\psi(P) = \psi'(P'), \quad (4.33)$$

ahol P az x koordinátájú pont, P' pedig az $x' = x + a$ koordinátájú pont. Írhatjuk tehát, hogy

$$\psi(x) = \psi'(x + a), \Rightarrow \psi'(x) = \psi(x - a), \quad (4.34)$$

azaz a hullámfüggvény megváltozása az eltolás következtében

$$\psi'(x) - \psi(x) = \psi(x - a) - \psi(x) = \hat{T}(a)\psi(x). \quad (4.35)$$

Az eltolásnak ez a felfogása az úgynevezett aktív szemlélet.

Másrészről, ha az S rendszer adott állapotát a K inerciarendszerben a $\psi_K(x) \equiv \psi(x)$ hullámfüggvény írja le, és ugyanezt az állapotot a K -hoz képest a x -tengely mentén negatív irányban a -val eltoló (azaz a $-a$ -val eltoló) K' másik inerciarendszerben a $\psi_{K'}(x)$ hullámfüggvény írja le, akkor teljesülnie kell, hogy az S fizikai rendszer P pontjában

$$\psi_{K'}(P) = \psi_K(P). \quad (4.36)$$

A fizikai rendszer adott pontjának K -ban x a koordinátája és K' -ben $x' = x + a$, ezért

$$\psi_{K'}(x + a) = \psi_K(x), \Rightarrow \psi_{K'}(x) = \psi_K(x - a), \quad (4.37)$$

úgyhogy a hullámfüggvény megváltozása a koordinátarendszer eltolása miatt

$$\psi_{K'}(x) - \psi_K(x) = \psi_K(x - a) - \psi_K(x) = \psi(x - a) - \psi(x) = \hat{T}(a)\psi(x). \quad (4.38)$$

Az eltolás értelmezésének ez a passzív felfogása.

Látjuk, hogy a hullámfüggvény megváltozása mindkét szemlélet szerint azonosnak adódik.

5. gyakorlat

1. Lásd be a pályaimpulzusmomentum operátorának $\hat{\ell} = \hat{r} \times \hat{p}$ definíciója alapján, hogy teljesülnek az alábbi csererelációk:

$$[\hat{\ell}_x, \hat{\ell}_y] = i\hbar\hat{\ell}_z, \quad [\hat{\ell}_y, \hat{\ell}_z] = i\hbar\hat{\ell}_x, \quad [\hat{\ell}_z, \hat{\ell}_x] = i\hbar\hat{\ell}_y, \quad (5.1)$$

azaz

$$[\hat{\ell}_j, \hat{\ell}_k] = i\hbar\varepsilon_{jkm}\hat{\ell}_m \quad (5.2)$$

ahol az azonos indexekre összegzés van és $\hat{\ell}_1 = \hat{\ell}_x$, $\hat{\ell}_2 = \hat{\ell}_y$, $\hat{\ell}_3 = \hat{\ell}_z$, továbbá a 3-dimenziós Levi-Civita-szimbólum

$$\varepsilon_{jkm} = \begin{cases} +1, & \text{ha } (jkm) = (123), (231), (312) \\ -1, & \text{ha } (jkm) = (321), (213), (132) \\ 0 & \text{egyébként} \end{cases} \quad (5.3)$$

Érvényes az alábbi azonosság;

$$\varepsilon_{ijk}\varepsilon_{mnk} = \delta_{im}\delta_{jn} - \delta_{in}\delta_{jm}. \quad (5.4)$$

Célszerű felhasználni, hogy a $\vec{c} = \vec{a} \times \vec{b}$ vektorszorzat Descartes-komponensei

$$c_j = \varepsilon_{jkm}a_kb_m. \quad (5.5)$$

Ez vektoroperátorokra is érvényes a tényezők ilyen sorrendjében.

Megoldás:

Mivel

$$\hat{\ell}_j = \varepsilon_{jkm}\hat{x}_k\hat{p}_m, \quad (5.6)$$

azért írhatjuk, hogy

$$\begin{aligned} [\hat{\ell}_j, \hat{\ell}_k] &= [\varepsilon_{jmr}\hat{x}_m\hat{p}_r, \varepsilon_{kns}\hat{x}_n\hat{p}_s] = \varepsilon_{jmr}\varepsilon_{kns}[\hat{x}_m\hat{p}_r, \hat{x}_n\hat{p}_s] \\ &= \varepsilon_{jmr}\varepsilon_{kns}(\hat{x}_m\hat{p}_r\hat{x}_n\hat{p}_s - \hat{x}_n\hat{p}_s\hat{x}_m\hat{p}_r). \end{aligned} \quad (5.7)$$

Használjuk fel az $[\hat{x}_j, \hat{p}_k] = i\hbar\delta_{jk}$ kanonikus csererelációkat:

$$\begin{aligned} [\hat{\ell}_j, \hat{\ell}_k] &= \varepsilon_{jmr}\varepsilon_{kns} \left(\hat{x}_m(\hat{x}_n\hat{p}_r - i\hbar\delta_{nr})\hat{p}_s - \hat{x}_n(\hat{x}_m\hat{p}_s - i\hbar\delta_{ms})\hat{p}_r \right) \\ &= \varepsilon_{jmr}\varepsilon_{kns} \left(\hat{x}_m\hat{x}_n\hat{p}_r\hat{p}_s - \hat{x}_n\hat{x}_m\hat{p}_s\hat{p}_r + i\hbar(\delta_{ms}\hat{x}_n\hat{p}_r - \delta_{nr}\hat{x}_m\hat{p}_s) \right) \\ &= i\hbar \underbrace{(\varepsilon_{jmr}\varepsilon_{kns})}_{=\varepsilon_{rjm}} \hat{x}_n\hat{p}_r - \varepsilon_{jmn}\underbrace{(\varepsilon_{kns})}_{=\varepsilon_{skn}} \hat{x}_m\hat{p}_s \\ &= i\hbar \left((\delta_{rk}\delta_{jn} - \delta_{rn}\delta_{jk})\hat{x}_n\hat{p}_r - (\delta_{js}\delta_{mk} - \delta_{jk}\delta_{ms})\hat{x}_m\hat{p}_s \right) \\ &= i\hbar(\hat{x}_j\hat{p}_k - \delta_{jk}\hat{x}_n\hat{p}_n - \hat{x}_k\hat{p}_j + \delta_{jk}\hat{x}_m\hat{p}_m) \\ &= i\hbar(\hat{x}_j\hat{p}_k - \hat{x}_k\hat{p}_j) = i\hbar\varepsilon_{jkm}\hat{\ell}_m, \end{aligned} \quad (5.8)$$

hiszen

$$i\hbar\varepsilon_{jkm}\hat{\ell}_m = i\hbar\varepsilon_{jkm}\varepsilon_{mrs}\hat{x}_r\hat{p}_s = i\hbar(\delta_{jr}\delta_{ks} - \delta_{js}\delta_{kr})\hat{x}_r\hat{p}_s = i\hbar(\hat{x}_j\hat{p}_k - \hat{x}_k\hat{p}_j). \quad (5.9)$$

2. Mutassa meg, hogy $[\hat{\ell}_i, \vec{\hat{\ell}}^2] = 0$!

Megoldás:

$$\begin{aligned} [\hat{\ell}_i, \vec{\hat{\ell}}^2] &= [\hat{\ell}_i, \sum_j \hat{\ell}_j^2] \\ &= \sum_j [\hat{\ell}_i, \hat{\ell}_j^2] = \sum_j (\hat{\ell}_i\hat{\ell}_j^2 - \hat{\ell}_j^2\hat{\ell}_i) \\ &= (\hat{\ell}_j\hat{\ell}_i + i\hbar\varepsilon_{ijk}\hat{\ell}_k)\hat{\ell}_j - \hat{\ell}_j^2\hat{\ell}_i \\ &= \hat{\ell}_j\hat{\ell}_i\hat{\ell}_j + i\hbar\varepsilon_{ijk}\hat{\ell}_k\hat{\ell}_j - \hat{\ell}_j^2\hat{\ell}_i \\ &= \hat{\ell}_j(\hat{\ell}_j\hat{\ell}_i + i\hbar\varepsilon_{ijk}\hat{\ell}_k) + i\hbar\varepsilon_{ijk}\hat{\ell}_k\hat{\ell}_j - \hat{\ell}_j^2\hat{\ell}_i \\ &= i\hbar\varepsilon_{ijk}(\hat{\ell}_j\hat{\ell}_k + \hat{\ell}_k\hat{\ell}_j) = 0. \end{aligned} \quad (5.10)$$

Az utolsó előtti egyenlőség jobb oldalán egy antiszimmetrikus és egy szimmetrikus tenzor kontrakciója áll, ezért az eredmény zérus:

$$\varepsilon_{ijk}(\hat{\ell}_j\hat{\ell}_k + \hat{\ell}_k\hat{\ell}_j) = \varepsilon_{ijk}\hat{\ell}_j\hat{\ell}_k + \varepsilon_{ikj}\hat{\ell}_j\hat{\ell}_k = (\varepsilon_{ijk} - \varepsilon_{ikj})\hat{\ell}_j\hat{\ell}_k = 0. \quad (5.11)$$

3. Mutassa meg, hogy az $\hat{\ell}_\pm = \hat{\ell}_x \pm i\hat{\ell}_y$ léptető operátorok eleget tesznek az alábbi kommutátoros azonosságoknak:

(a)

$$[\hat{\ell}_+, \hat{\ell}_-] = 2\hbar\hat{\ell}_z, \quad (5.12)$$

(b)

$$[\hat{\ell}_z, \hat{\ell}_+] = \hbar\hat{\ell}_+, \quad (5.13)$$

(c)

$$[\hat{\ell}_z, \hat{\ell}_-] = \hbar\hat{\ell}_-, \quad (5.14)$$

(d)

$$[\hat{\ell}_\pm, \hat{\ell}^2] = 0. \quad (5.15)$$

(a)

$$\begin{aligned} [\hat{\ell}_+, \hat{\ell}_-] &= [\hat{\ell}_x + i\hat{\ell}_y, \hat{\ell}_x - i\hat{\ell}_y] = -i[\hat{\ell}_x, \hat{\ell}_y] + i[\hat{\ell}_y, \hat{\ell}_x] = 2i[\hat{\ell}_y, \hat{\ell}_x] \\ &= 2i(-i\hbar)\hat{\ell}_z = 2\hbar\hat{\ell}_z. \end{aligned} \quad (5.16)$$

(b)

(c)

$$\begin{aligned} [\hat{\ell}_z, \hat{\ell}_\pm] &= [\hat{\ell}_z, \hat{\ell}_x \pm i\hat{\ell}_y] = [\hat{\ell}_z, \hat{\ell}_x] \pm i[\hat{\ell}_z, \hat{\ell}_y] \\ &= i\hbar\hat{\ell}_y \pm i(-i\hbar)\hat{\ell}_x = \pm\hbar(\hat{\ell}_x \pm i\hat{\ell}_y) = \pm\hbar\hat{\ell}_\pm. \end{aligned} \quad (5.17)$$

(d) Mivel $\hat{\ell}_x$ és $\hat{\ell}_y$ kommutálnak $\hat{\ell}^2$ -tel, azért ez a kommutátor nyilvánvalóan nulla.

4. Mutassa meg, hogy az $\frac{i}{\hbar}\vec{\delta\varphi} \cdot \hat{\vec{\ell}}$ operátor az infinitezimális $\vec{\delta\varphi} = \vec{n}\delta\varphi$ szögű elforgatást generálja, ahol $\vec{n}$ az elforgatás iránya, $\delta\varphi$ az elforgatás infinitezimális szöge!

Megoldás:

Hattassuk ezt az operátort tetszőleges $\psi(\vec{r})$ koordináta-hullámfüggvényre:

$$\frac{i}{\hbar}\vec{\delta\varphi} \cdot \hat{\vec{\ell}}\psi(\vec{r}) = \frac{i}{\hbar}\vec{\delta\varphi} \cdot \left(\vec{r} \times \frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}\right)\psi(\vec{r}) = \vec{\delta\varphi} \cdot \left(\vec{r} \times \vec{\nabla}\right)\psi(\vec{r}), \quad (5.18)$$

ahol

$$\vec{\delta\varphi} \cdot \left(\vec{r} \times \vec{\nabla} \right) = \delta\varphi_i \varepsilon_{ijk} x_j \partial_k = (\varepsilon_{kij} \delta\varphi_i x_j) \partial_k = (\vec{\delta\varphi} \times \vec{r}) \cdot \vec{\nabla}, \quad (5.19)$$

úgyhogy

$$\frac{i}{\hbar} \vec{\delta\varphi} \cdot \hat{\vec{L}} \psi(\vec{r}) = (\vec{\delta\varphi} \times \vec{r}) \cdot \vec{\nabla} \psi(\vec{r}) = \psi(\vec{r} + \vec{\delta r}) - \psi(\vec{r}), \quad (5.20)$$

ahol $\vec{\delta r} = \vec{\delta\varphi} \times \vec{r}$ az $\vec{r}$ vektor megváltozása a fizikai rendszer elforgatása következtében.

5. Legyenek $\hat{\vec{J}}_1$ és $\hat{\vec{J}}_2$ az egyes részecskék teljes impulzusmomentumainak operátorai. Mutassa meg, hogy a két-részecskés rendszer $\hat{\vec{J}}$ teljes impulzusmomentumának operátorára érvényesek az alábbi csererelációk:

$$(a) \quad [\hat{J}_j, \hat{J}_k] = i\hbar \varepsilon_{jkm} \hat{J}_m,$$

$$(b) \quad [\hat{J}_i, \hat{\vec{J}}^2] = 0.$$

(A kétszer előforduló azonos indexekre összegzés van.)

A kommutátorok kiértékelése során figyelembe vesszük, hogy az egyes részecskék impulzusmomentum-operátorai az egyik és a másik részecske állapotainak Hilbert-terén hatnak, valamint azt, hogy adott részecske impulzusmomentum-operátorai a szokásos csererelációkat elégítik ki.

(a)

$$\begin{aligned} [\hat{J}_j, \hat{J}_k] &= [\hat{j}_{1j} + \hat{j}_{2j}, \hat{j}_{1k} + \hat{j}_{2k}] = [\hat{j}_{1j}, \hat{j}_{1k}] + [\hat{j}_{1j}, \hat{j}_{2k}] + [\hat{j}_{2j}, \hat{j}_{1k}] + [\hat{j}_{2j}, \hat{j}_{2k}] \\ &= i\hbar \varepsilon_{jkm} \hat{j}_{1m} + 0 + 0 + i\hbar \varepsilon_{jkm} \hat{j}_{2m} = i\hbar \varepsilon_{jkm} \hat{J}_m. \end{aligned} \quad (5.21)$$

(b)

$$\begin{aligned} [\hat{J}_i, \hat{\vec{J}}^2] &= [\hat{j}_{1i} + \hat{j}_{2i}, \hat{j}_1^2 + \hat{j}_2^2 + 2\hat{j}_1 \cdot \hat{j}_2] = [\hat{j}_{1i}, \hat{j}_1^2] + [\hat{j}_{1i}, \hat{j}_2^2] + [\hat{j}_{1i}, 2\hat{j}_1 \cdot \hat{j}_2] + [\hat{j}_{2i}, \hat{j}_1^2] + [\hat{j}_{2i}, \hat{j}_2^2] + [\hat{j}_{2i}, 2\hat{j}_1 \cdot \hat{j}_2] \\ &= 0 + i\hbar \varepsilon_{ijk} \hat{j}_{1k} \hat{j}_{2j} + \hat{j}_{2j} i\hbar \varepsilon_{ijk} \hat{j}_{1k} + \hat{j}_{1j} i\hbar \varepsilon_{ijk} \hat{j}_{2k} + i\hbar \varepsilon_{ijk} \hat{j}_{2k} \hat{j}_{1j} + 0 \\ &= 2i\hbar \varepsilon_{ijk} \hat{j}_{1k} \hat{j}_{2j} + 2i\hbar \varepsilon_{ijk} \hat{j}_{1j} \hat{j}_{2k} \\ &= 2i\hbar (\varepsilon_{ijk} + \varepsilon_{ikj}) \hat{j}_{1k} \hat{j}_{2j} = 2i\hbar (\varepsilon_{ijk} - \varepsilon_{ijk}) \hat{j}_{1k} \hat{j}_{2j} = 0. \end{aligned} \quad (5.22)$$

6. Legyenek $\hat{\vec{J}}_1$ és $\hat{\vec{J}}_2$ az egyes részecskék teljes impulzusmomentumainak operátorai. Mutassa meg, hogy a két-részecskés rendszer $\hat{\vec{J}}$ teljes impulzusmomentumának operátorára érvényesek az alábbi csererelációk:

(a)

$$[\hat{\vec{J}}_1^2, \hat{\vec{J}}^2] = [\hat{\vec{J}}_2^2, \hat{\vec{J}}^2] = 0; \quad (5.23)$$

(b)

$$[\hat{j}_1^2, \hat{J}_z] = [\hat{j}_2^2, \hat{J}_z] = 0. \quad (5.24)$$

Megoldás:

(a)

$$\begin{aligned} [\hat{j}_1^2, \hat{J}^2] &= [\hat{j}_1^2, \hat{j}_1^2 + \hat{j}_1 \cdot \hat{j}_2 + \hat{j}_2 \cdot \hat{j}_1 + \hat{j}_2^2] \\ &= \underbrace{[\hat{j}_1^2, \hat{j}_1^2]}_{=0} + \underbrace{[\hat{j}_1^2, \hat{j}_{1i}]}_{=0} \hat{j}_{2i} + \hat{j}_{2i} \underbrace{[\hat{j}_1^2, \hat{j}_{1i}]}_{=0} + \underbrace{[\hat{j}_1^2, \hat{j}_2^2]}_{=0} \\ &= 0. \end{aligned} \quad (5.25)$$

Hasonlóan adódik a másik kommutátor eltűnése is.

Itt figyelembe vettük, hogy az egyes részecskék pályaimpulzusmomentumainak operátorai az egyes részecskék $\mathcal{H}_1$ és $\mathcal{H}_2$ Hilbert-terein hatnak, míg a két-részecskés rendszer impulzusmomentum-operátorai a $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ tenzori szorzat Hilbert-téren.

(b)

$$[\hat{j}_1^2, \hat{J}_z] = [\hat{j}_1^2, \hat{j}_{1z} + \hat{j}_{2z}] = [\hat{j}_1^2, \hat{j}_{1z}] + [\hat{j}_1^2, \hat{j}_{2z}] = 0 + 0 = 0. \quad (5.26)$$

7. Legyenek $\hat{j}_1$ és $\hat{j}_2$ az egyes részecskék teljes impulzusmomentumainak operátorai. Hogyan bontható fel a két-részecskés rendszer $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ Hilbert-tere páronként ortogonális alterek direkt összegére az eredő teljes impulzusmomentum (J, M) kvantumszámainak megfelelően? Ha $j_1 = 2$ és $j_2 = 1/2$, akkor melyek a lehetséges eredő teljes impulzusmomentum szerinti sajátállapotok, azaz (J, M) lehetséges értékei?

Megoldás:

A $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ tenzori szorzat Hilbert-tér az impulzusmomentum összeadásának szabálya szerint

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{|j_1-j_2|} \oplus \mathcal{H}_{|j_1-j_2|+1} \oplus \dots \oplus \mathcal{H}_{j_1+j_2-1} \oplus \mathcal{H}_{j_1+j_2} \quad (5.27)$$

módon bontható fel páronként ortogonális alterek direkt összegére. Ennek értelmében J lehetséges értékei

$$J = |j_1 - j_2|, |j_1 - j_2| + 1, \dots, j_1 + j_2 - 1, j_1 + j_2, \quad (5.28)$$

és M minden esetben $2J + 1$ különböző értéket vehet fel:

$$M = -J, -J + 1, \dots, J_1, J. \quad (5.29)$$

Ha $j_1 = 2$ és $j_2 = 1/2$, akkor $|j_1 - j_2| = 3/2$ és $j_1 + j_2 = 5/2$, ezért a lehetséges (J, M) értékek:

J	3/2	5/2
M	-3/2, -1/2, 1/2, 3/2	-5/2, -3/2, -1/2, 1/2, 3/2, 5/2

6. gyakorlat

1. Ha az elektron az atomban R sugarú körpályán v állandó nagyságú kerületi sebességgel keringene, akkor ez a köráram mekkora $\vec{\mu}$ mágneses dipólusmomentumot hozna létre? Mi lenne a $\vec{\mu}$ dipólusmomentum és az $\vec{\ell}$ pályaimpulzusmomentum közti kapcsolat?

Megoldás:

Legyen a z -tengely a körpálya síkjára merőleges, a kör középpontján áthaladó tengely. A pályaimpulzusmomentum merőleges a körpálya síkjára és $\ell_z = Rmv$, ahol m az elektron nyugalmi tömege. A $q = -|e|$ töltésű elektron olyan i erősségű köráramot képvisel, amelyre $iT = -|e|$, ahol T a keringési idő, $T = 2R\pi/v$. Az i erősségű köráram z -irányú mágneses momentumot hoz létre:

$$\mu_z = \frac{1}{c} i R^2 \pi = \frac{-|e|}{cT} R^2 \pi = -\frac{|e|v}{c2R\pi} R^2 \pi = -\frac{|e|Rv}{2c} = -\frac{|e|}{2mc} \ell_z. \quad (6.1)$$

(Itt CGS egységrendszert használtunk; c a vákuumbeli fénysebesség, megjelenése tükrözi, hogy a mágneses momentum relativisztikus eredetű.) A mágneses momentum tehát arányos a pályaimpulzusmomentummal, azzal ellentétes irányú az elektron negatív töltése miatt, és az arányossági tényező

$$g_\ell = \frac{|e|}{2mc}. \quad (6.2)$$

Megjegyzés: A tapasztalat szerint az elektron spinjétől is származik mágneses momentum (ld. Stern-Gerlach-kísérlet), $\mu_z = -g_s s_z$, de itt az arányossági tényező $g_s = 2g_\ell$.

2. A Pauli-mátrixok:

$$\sigma_x = \sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (6.3)$$

azaz tömörebben

$$\sigma_j = \begin{pmatrix} \delta_{j3} & \delta_{j1} - i\delta_{j2} \\ \delta_{j1} + i\delta_{j2} & -\delta_{j3} \end{pmatrix}. \quad (6.4)$$

Lássa be az alábbi azonosságokat:

- (a) $\sigma_j^2 = I$, ahol I az egységmátrix és $j = 1, 2, 3$;
- (b) $-i\sigma_1\sigma_2\sigma_3 = I$;
- (c) $\det\sigma_j = -1$;
- (d) $\text{tr}\sigma_j = 0$;
- (e) $[\sigma_j, \sigma_k] = 2i\varepsilon_{jkm}\sigma_m$;
- (f) $\{\sigma_i, \sigma_j\} \equiv \sigma_i\sigma_j + \sigma_j\sigma_i = 2\delta_{ij}I$;
- (g) $\sigma_j\sigma_k = i\varepsilon_{jkm}\sigma_m + \delta_{jk}I$.

Megoldás:

(a)

$$\begin{aligned}
\sigma_j^2 &= \begin{pmatrix} \delta_{j3} & \delta_{j1} - i\delta_{j2} \\ \delta_{j1} + i\delta_{j2} & -\delta_{j3} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \delta_{j3} & \delta_{j1} - i\delta_{j2} \\ \delta_{j1} + i\delta_{j2} & -\delta_{j3} \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} (\delta_{j3})^2 + (\delta_{j1})^2 + (\delta_{j2})^2 & \delta_{j3}(\delta_{j1} - i\delta_{j2}) - (\delta_{j1} - i\delta_{j2})\delta_{j3} \\ (\delta_{j1} + i\delta_{j2})\delta_{j3} - \delta_{j3}(\delta_{j1} + i\delta_{j2}) & (\delta_{j1})^2 + (\delta_{j2})^2 + (\delta_{j3})^2 \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}; \tag{6.5}
\end{aligned}$$

(b)

$$\begin{aligned}
-i\sigma_1\sigma_2\sigma_3 &= -i\sigma_1 \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = -i \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & i \\ i & 0 \end{pmatrix} \\
&= -i \begin{pmatrix} i & 0 \\ 0 & i \end{pmatrix} = I; \tag{6.6}
\end{aligned}$$

(c)

$$\begin{aligned}
\det\sigma_j &= \det \begin{pmatrix} \delta_{j3} & \delta_{j1} - i\delta_{j2} \\ \delta_{j1} + i\delta_{j2} & -\delta_{j3} \end{pmatrix} = -(\delta_{j3})^2 - (\delta_{j1} - i\delta_{j2})(\delta_{j1} + i\delta_{j2}) \\
&= -(\delta_{j3})^2 - (\delta_{j1})^2 - (\delta_{j2})^2 = -1; \tag{6.7}
\end{aligned}$$

(d)

$$\text{tr}\sigma_j = \delta_{j3} - \delta_{j3} = 0; \tag{6.8}$$

(e) Explicit módon kiírva az alábbi azonosságokat kell belátni:

$$[\sigma_1, \sigma_2] = 2i\sigma_3, \quad [\sigma_2, \sigma_3] = 2i\sigma_1, \quad [\sigma_3, \sigma_1] = 2i\sigma_2. \tag{6.9}$$

Ezek a kommutátor definíciójának és a mátrixszorzásoknak az elvégzése után azonnal adódnak.

(f) Explicit módon kiírva az alábbi azonosságokat kell belátni:

$$\{\sigma_1, \sigma_2\} = \{\sigma_1, \sigma_3\} = \{\sigma_2, \sigma_3\} = 0, \quad \{\sigma_i, \sigma_i\} = 2I. \tag{6.10}$$

Az antikommutátor definícióját felhasználva és a mátrixszorzásokat explicit módon elvégezve azonnal adódik a különböző Pauli-mátrixok antikommutátorainak eltűnése, ugyanakkor

$$\{\sigma_i, \sigma_i\} = 2\sigma_i^2 = 2I. \tag{6.11}$$

(g) Az előző két pontban belátott azonosságokat felhasználva kapjuk, hogy

$$\sigma_j\sigma_k = \frac{1}{2} \left([\sigma_j, \sigma_k] + \{\sigma_j, \sigma_k\} \right) = i\varepsilon_{jkm}\sigma_m + I\delta_{jk}. \tag{6.12}$$

3. Legyen $\vec{n}$ tetszőleges egységvektor. Bizonyítsa be, hogy $\vec{\sigma} \cdot \vec{n}$ páros hatványai az I egységmátriksszal, páratlan hatványai $(\vec{\sigma} \cdot \vec{n})$ -nel azonosak!.

Megoldás:

Az általánosság csorbítása nélkül választhatjuk a Descartes-koordinátarendszer z -tengelyét az $\vec{n}$ egységvektorral egyirányúnak, $\vec{n} = (0, 0, 1)$. Ekkor $\vec{\sigma} \cdot \vec{n} = \sigma_3$ diagonális mátrix, amelynek a négyzete az egységmátrix. Ebből rögtön következik, hogy $n = 1, 2, \dots$ esetén

$$(\vec{\sigma} \cdot \vec{n})^{2n} = \sigma_z^{2n} = I^n = I, \text{ és } (\vec{\sigma} \cdot \vec{n})^{2n+1} = \sigma_z^{2n+1} = I\sigma_z = \sigma_z = \vec{\sigma} \cdot \vec{n}. \quad (6.13)$$

4. Láss be az $e^{i\alpha} = \cos \alpha + i \sin \alpha$ Euler-féle azonosság általánosítását:

$$e^{i\vec{\sigma} \cdot \vec{n} \alpha} = \cos \alpha + i\vec{\sigma} \cdot \vec{n} \sin \alpha, \quad (6.14)$$

ahol $\alpha \in [0, 2\pi]$, $\vec{n}$ tetszőleges egységvektor és $\vec{\sigma} = (\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3)$ a Pauli-mátrixokból képezett vektor.

Megoldás:

A mátrix-azonosság belátásának egyik módja, hogy az azonosság mindkét oldalát hattatjuk az $s = \hbar/2$ spinű részecske spinállapotainak 2-dimenziós Hilbert-terében választott bázis mindkét vektorára, és megmutatjuk, hogy az egyenlőség fennáll. Válasszunk olyan Descartes-koordinátarendszert a 3-dimenziós térben, amelynek z -tengelye az $\vec{n}$ egységvektorral azonos irányú, azaz amelyben $\vec{n} = (0, 0, 1)$. Ebben a koordinátarendszerben $\vec{\sigma} \cdot \vec{n} = \sigma_3$. Válasszuk a 2-dimenziós Hilbert-térben az $\hat{s}_z = \frac{\hbar}{2}\sigma_3$ operátor sajátvektorait bázisnak:

$$\hat{s}_z \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{s}_z \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = -\frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (6.15)$$

Ezek egyúttal σ_3 -nak is sajátvektorai rendre a $+1$ és -1 sajátértékkel:

$$\sigma_3 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = + \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (6.16)$$

Következésképpen írhatjuk, hogy

$$e^{i\vec{\sigma} \cdot \vec{n} \alpha} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = e^{i\sigma_3 \alpha} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = e^{i\alpha} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = (\cos \alpha + i \sin \alpha) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = (\cos \alpha + i\vec{\sigma} \cdot \vec{n} \sin \alpha) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (6.17)$$

$$e^{i\vec{\sigma} \cdot \vec{n} \alpha} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = e^{i\sigma_3 \alpha} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = e^{-i\alpha} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = (\cos \alpha - i \sin \alpha) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = (\cos \alpha - i\vec{\sigma} \cdot \vec{n} \sin \alpha) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (6.18)$$

Látjuk tehát, hogy a feltételezett mátrix-azonosság mindkét bázisvektorra hatva teljesül, ezért mátrix-azonossággént is teljesül.

A megoldás egy másik módja, hogy részletesen kiírjuk az $e^{i\vec{\sigma} \cdot \vec{n} \alpha}$ mátrix Taylor-sorát, és abban a páros és páratlan kitevőjű hatványokat külön-külön összegezve felismerjük $\cos \alpha$ és $\sin \alpha$ Taylor-sorát:

$$e^{i\vec{\sigma} \cdot \vec{n} \alpha} = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(i\vec{\sigma} \cdot \vec{n} \alpha)^m}{m!} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(i\vec{\sigma} \cdot \vec{n} \alpha)^{2k}}{(2k)!} + \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(i\vec{\sigma} \cdot \vec{n} \alpha)^{2k+1}}{(2k+1)!} \quad (6.19)$$

Felhasználjuk a 6. gyakorlat 4. feladatának eredményeit, és írjuk, hogy

$$e^{i\vec{\sigma} \cdot \vec{n} \alpha} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k \alpha^{2k}}{(2k)!} + i\vec{\sigma} \cdot \vec{n} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k \alpha^{2k+1}}{(2k+1)!} = \cos \alpha + i\vec{\sigma} \cdot \vec{n} \sin \alpha. \quad (6.20)$$

„

5. Tekintsük az $s = \hbar/2$ spinű részecske spinállapotainak $\mathcal{H}$ Hilbert-terét! Vezessük be az $\hat{s}_z$ operátor sajátállapotaira a

$$|+\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |-\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (6.21)$$

jelöléseket.

- (a) Mutassa meg, hogy tetszőleges $|\chi\rangle$ spinállapot parametrizálható

$$|\chi\rangle = \cos \frac{\alpha}{2} |+\rangle + e^{i\varphi} \sin \frac{\alpha}{2} |-\rangle \quad (6.22)$$

alakban, ahol $\alpha \in [0, \pi]$ és $\varphi \in [0, 2\pi]$.

- (b) Lássá be, hogy a tetszőleges spinállapotban a spinvektor $\vec{s} = \langle \chi | \hat{\vec{s}} | \chi \rangle$ várható értéke szemléltethető az $R = \hbar/2$ sugarú gömb középpontjából a gömb felületének azon P pontjába mutató vektorral, amely a z -tengellyel $\alpha \in [0, \pi]$ szöget zár be, és amelynek az (x, y) -síkra vett merőleges vetülete az x tengellyel $\varphi \in [0, 2\pi]$ szöget zár be.
- (c) Mennyi a $\hbar/2$ spinű részecske spinállapotai Hilbert-terének dimenziója? Hány állapot van ebben a Hilbert-térben?

Megoldás:

- (a) Az $\hat{s}_z$ operátor sajátvektoraira fennáll, hogy

$$\hat{s}_z |\pm\rangle = \pm \frac{1}{2} \hbar |\pm\rangle \quad (6.23)$$

és ortonormáltak,

$$\langle + | + \rangle = \langle - | - \rangle = 1, \quad \langle + | - \rangle = 0, \quad (6.24)$$

és teljes rendszert alkotnak, vagyis tetszőleges $|\chi\rangle$ spinállapot

$$|\chi\rangle = c_1 |+\rangle + c_2 |-\rangle \quad (6.25)$$

alakba írható. A $\langle \chi | \chi \rangle = 1$ normálási feltétel értelmében az kifejtési együtthatók eleget kell tegyenek a

$$|c_1|^2 + |c_2|^2 = 1 \quad (6.26)$$

feltételnek. Ez nyilvánvalóan kielégíthető úgy, hogy $|c_1| = \cos(\alpha/2)$, $|c_2| = \sin(\alpha/2)$, ahol $\alpha \in [0, \pi]$. Ezenkívül a c_1 és c_2 komplex számok fázisa különbözhet egymástól φ -vel, ahol $\varphi \in [0, 2\pi]$. Az általánosság csorbítása nélkül választhatjuk c_1 fázisát nullának, mert az állapotvektor szorzása tetszőleges $e^{i\beta}$ számmal nem változtatja meg a normát. A fentiek alapján (6.22) a spinállapot parametrizációjának általános alakja.

- (b) Kiszámoljuk az egyes spinvetületek $\langle \chi | \hat{s}_i | \chi \rangle$ várható értékeit, és leolvassuk, hogy ezek olyan vektor komponensei, amelyet a leírt módon lehet szelvéltetni.

$$\begin{aligned}\langle \chi | \hat{s}_z | \chi \rangle &= \frac{\hbar}{2} \left(\langle \chi | + \rangle \cos \frac{\alpha}{2} - \langle \chi | - \rangle e^{i\varphi} \sin \frac{\alpha}{2} \right) = \frac{\hbar}{2} \left(\cos^2 \frac{\alpha}{2} - e^{-i\varphi} e^{i\varphi} \sin^2 \frac{\alpha}{2} \right) \\ &= \frac{\hbar}{2} \cos \alpha.\end{aligned}\quad (6.27)$$

Ahhoz, hogy kiszámítsuk $\langle \chi | \hat{s}_x | \chi \rangle$ -t és $\langle \chi | \hat{s}_y | \chi \rangle$ -t szükségünk van arra, hogy $\hat{s}_x$ és $\hat{s}_y$ hogyan hatnak a $|\pm\rangle$ bázisállapotokra:

$$\hat{s}_x |+\rangle = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = |-\rangle, \quad (6.28)$$

$$\hat{s}_x |-\rangle = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = |+\rangle, \quad (6.29)$$

$$\hat{s}_y |+\rangle = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ i \end{pmatrix} = i|-\rangle, \quad (6.30)$$

$$\hat{s}_y |-\rangle = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -i \\ 0 \end{pmatrix} = -i|+\rangle. \quad (6.31)$$

Ezeket felhasználva kapjuk, hogy

$$\begin{aligned}\langle \chi | \hat{s}_x | \chi \rangle &= \frac{\hbar}{2} \left(\langle \chi | - \rangle \cos \frac{\alpha}{2} + \langle \chi | + \rangle e^{i\varphi} \sin \frac{\alpha}{2} \right) \\ &= \frac{\hbar}{2} \left(e^{-i\varphi} \sin \frac{\alpha}{2} \cos \frac{\alpha}{2} + \cos \frac{\alpha}{2} e^{i\varphi} \sin \frac{\alpha}{2} \right) = \frac{\hbar}{2} \frac{1}{2} (e^{i\varphi} + e^{-i\varphi}) \sin \alpha \\ &= \frac{\hbar}{2} \sin \alpha \cos \varphi,\end{aligned}\quad (6.32)$$

$$\begin{aligned}\langle \chi | \hat{s}_y | \chi \rangle &= \frac{\hbar}{2} \left(\langle \chi | - \rangle i \cos \frac{\alpha}{2} - \langle \chi | + \rangle e^{i\varphi} \sin \frac{\alpha}{2} \right) \\ &= \frac{\hbar}{2} \left(e^{-i\varphi} \sin \frac{\alpha}{2} i \cos \frac{\alpha}{2} - \cos \frac{\alpha}{2} e^{i\varphi} \sin \frac{\alpha}{2} \right) \\ &= \frac{\hbar}{2} \frac{1}{2} i (e^{-i\varphi} - e^{i\varphi}) \sin \alpha = \frac{\hbar}{2} \sin \alpha \sin \varphi.\end{aligned}\quad (6.33)$$

- (c) A Hilbert-tér $2 \cdot (1/2) + 1 = 2$ -dimenziós, de a (6.22) parametrizáció mutatja, hogy kontinuum sok állapot található benne.

6. Ha elfogadjuk a H-atom Bohr-féle modelljét (ld. 1. gyakorlat 7. feladatát), akkor a körpályán mozgó elektron mágneses momentumot létesít (ld. 6. gyakorlat 1.feladatát). Hogyan mozogna ebben az esetben az elektron $\vec{\ell}$ pályaimpulzus-momentuma homogén $\vec{B}$ mágneses indukciójú külső térben a klasszikus fizika törvényei szerint? Tegyük fel, hogy a $t = 0$ időpillanatban $(\vec{B}, \vec{\mu}) \angle = \theta$.

Megoldás:

Az impulzusmomentum-tétel értelmében:

$$\frac{d\vec{\ell}}{dt} = \vec{M}, \quad (6.34)$$

ahol $\vec{M}$ a külső mágneses tér által a $\vec{\mu} = -g_e \vec{\ell}$ mágneses momentumra kifejtett forgatónyomaték,

$$\vec{M} = \vec{\mu} \times \vec{B} = -g_e \vec{\ell} \times \vec{B} = \vec{\omega} \times \vec{\ell}, \quad (6.35)$$

ahol bevezettük az

$$\vec{\omega} = g_e \vec{B} \quad (6.36)$$

vektort. A mozgásegyenlet tehát

$$\frac{d\vec{\ell}}{dt} = \vec{\omega} \times \vec{\ell} \quad (6.37)$$

alakot ölt. Legyen a z -tengely párhuzamos és egyirányú a $\vec{B}$ mágneses indukcióval. Ekkor az $\vec{M}$ forgatónyomaték merőleges a z -tengelyre, azaz a mozgás során benne marad az (x, y) -síkban. Ebből következik, hogy $M_z = 0$ a mozgás során, vagyis $\frac{d\ell_z}{dt} = 0$, úgyhogy $\ell_z = \text{áll.}$ Az $\vec{\ell}$ hosszát sem változtatja meg a mágneses tér, mert

$$\frac{d\vec{\ell}^2}{dt} = 2\vec{\ell} \cdot \frac{d\vec{\ell}}{dt} = 2\vec{\ell} \cdot (\vec{\omega} \times \vec{\ell}) = 0, \quad (6.38)$$

mert $(\vec{\omega} \times \vec{\ell})$ merőleges $\vec{\ell}$ -re. Ez azt jelenti a mozgás során $\vec{\ell}$, azaz $\vec{\mu}$ és a $\vec{B}$ mágneses indukció által bezárt szög állandó marad.

A mozgásegyenlet a vektorok x és y komponenseire:

$$\frac{d\ell_x}{dt} = -\omega \ell_y, \quad (6.39)$$

$$\frac{d\ell_y}{dt} = \omega \ell_x. \quad (6.40)$$

Vezessük be az $X = \ell_x + i\ell_y$ komplex értékű függvényt, majd származtassunk le erre elsőrendű differenciálegyenletet úgy, hogy a (6.39) egyenlet megfelelő oldalaihoz hozzáadjuk a (6.40) egyenlet megfelelő oldalainak i -szeresét:

$$\frac{dX}{dt} = i\omega X. \quad (6.41)$$

Ennek az egyenletnek a megoldása $X \propto Ae^{i\omega t + \alpha}$, vagyis azt találjuk, hogy

$$\ell_x = A \cos(\omega t + \alpha), \quad \ell_y = A \sin(\omega t + \alpha), \quad A \in \mathbb{R}, \quad \alpha \in [0, 2\pi]. \quad (6.42)$$

Másrésről

$$\ell_x^2 + \ell_y^2 = A^2 = \vec{\ell}^2 - \ell_z^2 = \text{áll.} \quad (6.43)$$

valóban állandó. Ez azt jelenti, hogy az $\vec{\ell}$ vektor (x, y) -síkra vett merőleges vetülete állandó hosszúságú és $\omega = g_e B$ szögsebességgel körfordul. Az $\vec{\ell}$ tehát a $\vec{B}$ vektorral állandó θ szöget bezárva jár körbe egy θ nyílás kettős kúp palástján, a $\vec{\mu}$ vektor meg ugyanezt csinálja a palást $z < 0$ térfélre eső részén. Ez a Larmor-precesszió.

7. Hogyan mozog az elektron spinvektorának $\vec{s}$ várható értéke homogén $\vec{B}$ mágneses indukciójú külső térben? Tegyük fel, hogy a $t = 0$ pillanatban $(\vec{B}, \vec{s}) \angle = \alpha$ és $\vec{s}$ benne van az (x, z) -síkban.

Megoldás:

A kezdeti feltételek meghatározzák az elektron $|\chi(0)\rangle$ spinállapotát a $t = 0$ időpillanatban (ld. a (6.22) parametrizációt):

$$\chi(0) = \cos \frac{\alpha}{2} |+\rangle + \sin \frac{\alpha}{2} |-\rangle. \quad (6.44)$$

Az elektron állapotát a tetszőleges $t > 0$ időpillanatban úgy kapjuk meg, hogy hattatjuk $|\chi(0)\rangle$ -re az $\hat{U}(t, 0)$ evolúciós operátort. Az elektron spinjéhez $\hat{\vec{\mu}} = -g_s \hat{\vec{s}}$ mágneses dipólmomentum társul, amelynek Hamilton-operátora külső homogén mágneses indukciótérben

$$\hat{H} = -\hat{\vec{\mu}} \cdot \vec{B} = g_s \hat{\vec{s}} \cdot \vec{B}. \quad (6.45)$$

Az általánosság csorbítása nélkül választhatjuk a z -tengely irányát a $\vec{B}$ -vel egyirányúnak, ekkor

$$\hat{H} = g_s B \hat{s}_z \equiv \omega \hat{s}_z \quad (6.46)$$

adódik, ahol bevezettük az $\omega = g_s B$ jelölést. A Hamilton-operátor segítségével az evolúciós operátor:

$$\hat{U}(t, 0) = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t} = e^{-\frac{i}{\hbar} \omega \hat{s}_z t}. \quad (6.47)$$

Az elektron spinállapota a t időpillanatban:

$$\begin{aligned} |\chi(t)\rangle &= \hat{U}(t, 0) |\chi(0)\rangle = \hat{U}(t, 0) \left(\cos \frac{\alpha}{2} |+\rangle + \sin \frac{\alpha}{2} |-\rangle \right) \\ &= \cos \frac{\alpha}{2} \hat{U}(t, 0) |+\rangle + \sin \frac{\alpha}{2} \hat{U}(t, 0) |-\rangle = e^{-i\frac{1}{2}\omega t} \cos \frac{\alpha}{2} |+\rangle + e^{i\frac{1}{2}\omega t} \sin \frac{\alpha}{2} |-\rangle \end{aligned} \quad (6.48)$$

Most következik az $\vec{s} = \langle \chi(t) | \hat{\vec{s}} | \chi(t) \rangle$ várható érték kiszámítása:

$$\begin{aligned} \bar{s}_z &\equiv \langle \chi(t) | \hat{s}_z | \chi(t) \rangle = \frac{\hbar}{2} \left(\langle \chi(t) | + \rangle e^{-i\frac{1}{2}\omega t} \cos \frac{\alpha}{2} - \langle \chi(t) | - \rangle e^{i\frac{1}{2}\omega t} \sin \frac{\alpha}{2} \right) \\ &= \frac{\hbar}{2} \left(e^{+i\frac{1}{2}\omega t} \cos \frac{\alpha}{2} e^{-i\frac{1}{2}\omega t} \cos \frac{\alpha}{2} - e^{-i\frac{1}{2}\omega t} \sin \frac{\alpha}{2} e^{i\frac{1}{2}\omega t} \sin \frac{\alpha}{2} \right) \\ &= \frac{\hbar}{2} \left(\cos^2 \frac{\alpha}{2} - \sin^2 \frac{\alpha}{2} \right) = \frac{\hbar}{2} \cos \alpha. \end{aligned} \quad (6.49)$$

Az $\bar{s}_x$ és $\bar{s}_y$ kiszámításához felhasználjuk a (6.28)-(6.31) azonosságokat:

$$\begin{aligned} \bar{s}_x &= \langle \chi(t) | \hat{s}_x | \chi(t) \rangle = \frac{\hbar}{2} \left(\langle \chi(t) | - \rangle e^{-i\frac{1}{2}\omega t} \cos \frac{\alpha}{2} + \langle \chi(t) | + \rangle e^{i\frac{1}{2}\omega t} \sin \frac{\alpha}{2} \right) \\ &= \frac{\hbar}{2} \left(\sin \frac{\alpha}{2} \cos \frac{\alpha}{2} e^{-i\omega t} + \sin \frac{\alpha}{2} \cos \frac{\alpha}{2} e^{i\omega t} \right) \\ &= \frac{\hbar}{2} \sin \alpha \cos(\omega t), \end{aligned} \quad (6.50)$$

és hasonló módon kapjuk, hogy

$$\bar{s}_y = \langle \chi(t) | \hat{s}_y | \chi(t) \rangle = \frac{\hbar}{2} \sin \alpha \sin(\omega t). \quad (6.51)$$

Azt kaptuk, hogy az $\vec{s}$ vektor a $\vec{B}$ mágneses indukcióval állandó α szöget bezárva $\omega = g_s B$ állandó szögsebességgel precesszál $\vec{B}$ körül.

7. gyakorlat

1. Az m tömegű részecske x -tengely mentén történő szabad mozgását a $\psi(x, t)$ hullámfüggvény írja le, amely a $t = 0$ időpillanatban az $f(x)$ hullámcsomaggal azonos.

- (a) Határozza meg a kezdeti állapot impulzus-hullámfüggvényét!
- (b) Hogyan fejlődik a hullámcsomag az időben?
- (c) Határozza meg $\psi(x, t)$ explicit alakját, ha a kezdeti állapot a

$$\psi(x, 0) = \mathcal{N} \int_{p_0 - \Delta p}^{p_0 + \Delta p} dp e^{\frac{i}{\hbar} p x} \quad (7.1)$$

hullámcsomag, ahol $\Delta p \ll p_0$.

- (d) Határozza meg $\psi(x, t)$ explicit alakját, ha a kezdeti állapot a

$$\psi(x, 0) = \mathcal{N} e^{-\frac{x^2}{4\sigma^2}} \quad (7.2)$$

hullámcsomag, ahol $\sigma^2 > 0$ állandó. Hogyan változik a Δx hely- és a Δp impulzus-határozatlanság az idő függvényében?

Megoldás:

- (a) A kezdeti állapot $\tilde{\psi}(p, 0)$ impulzus-hullámfüggvényét Fourier-transzformációval kapjuk meg $\psi(x, 0)$ -ból:

$$\tilde{\psi}(p, 0) = \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\frac{i}{\hbar} p x} \psi(x, 0) = \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\frac{i}{\hbar} p x} f(x). \quad (7.3)$$

- (b) A $\psi(x, t)$ hullámfüggvény az időfüggő Schrödinger-egyenletnek,

$$i\hbar \partial_t \psi(x, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \partial_x^2 \psi(x, t) \quad (7.4)$$

a $\psi(x, 0) = f(x)$ kezdőfeltételhez tartozó megoldása. Helyettesítsük be a

$$\psi(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp}{2\pi\hbar} e^{\frac{i}{\hbar} p x} \tilde{\psi}(p, t) \quad (7.5)$$

Fourier-integrál alakot a Schrödinger-egyenletbe. Akkor az

$$i\hbar \partial_t \tilde{\psi}(p, t) = \frac{p^2}{2m} \tilde{\psi}(p, t) \quad (7.6)$$

közönséges elsőrendű differenciálegyenletet kapjuk a $\tilde{\psi}(p, t)$ impulzus-hullámfüggvényre. Ennek megoldása:

$$\tilde{\psi}(p, t) = \tilde{\psi}(p, 0) e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{p^2}{2m} t}, \quad (7.7)$$

ahol a $\tilde{\psi}(p, 0)$ kezdeti feltételt az (a) pontban meghatároztuk. A hullámcsomag időfejlődését tehát a

$$\psi(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp}{2\pi\hbar} \tilde{\psi}(p, 0) e^{\frac{i}{\hbar} (p x - \frac{p^2}{2m} t)} \quad (7.8)$$

hullámfüggvény írja le.

(c) Az (7.1) állapothoz tartozó impulzus-hullámfüggvény:

$$\begin{aligned}
\tilde{\psi}(p, 0) &= \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\frac{i}{\hbar} p x} \psi(x, 0) = \mathcal{N} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\frac{i}{\hbar} p x} \int_{p_0 - \Delta p}^{p_0 + \Delta p} dq e^{\frac{i}{\hbar} q x} \\
&= \mathcal{N} \int_{p_0 - \Delta p}^{p_0 + \Delta p} dq \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{\frac{i}{\hbar} (q - p) x} = \mathcal{N} \int_{p_0 - \Delta p}^{p_0 + \Delta p} dq 2\pi \hbar \delta(p - q) \\
&= \begin{cases} 2\pi \hbar \mathcal{N} & \text{ha } p \in [p_0 - \Delta p, p_0 + \Delta p] \\ 0 & \text{ha } p \notin [p_0 - \Delta p, p_0 + \Delta p] \end{cases}. \quad (7.9)
\end{aligned}$$

A normálási tényezőt a normálási feltétel határozza meg:

$$\begin{aligned}
1 &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp}{2\pi \hbar} |\tilde{\psi}(p, 0)|^2 = |\mathcal{N}|^2 (2\pi \hbar) \int_{p_0 - \Delta p}^{p_0 + \Delta p} dp = |\mathcal{N}|^2 (2\pi \hbar) 2\Delta p, \\
\Rightarrow \mathcal{N} &= [(2\pi \hbar) 2\Delta p]^{-1/2} \quad (7.10)
\end{aligned}$$

egységnyi abszolút értékű komplex fázisfaktor erejéig. A hullámcsomag időbeli fejlődését a (b) pont eredménye értelmében a

$$\begin{aligned}
\psi(x, t) &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp}{2\pi \hbar} \tilde{\psi}(p, 0) e^{\frac{i}{\hbar} (p x - \frac{p^2}{2m} t)} \\
&= 2\pi \hbar \mathcal{N} \int_{p_0 - \Delta p}^{p_0 + \Delta p} \frac{dp}{2\pi \hbar} e^{\frac{i}{\hbar} (p x - \frac{p^2}{2m} t)} \\
&= [(2\pi \hbar) 2\Delta p]^{-1/2} \int_{p_0 - \Delta p}^{p_0 + \Delta p} dp e^{\frac{i}{\hbar} (p x - \frac{p^2}{2m} t)} \quad (7.11)
\end{aligned}$$

hullámfüggvény írja le. Ez nem más, mint monokromatikus de Broglie-hullámok szuperpozíciója, amelyek impulzusa a keskeny $[p_0 - \Delta p, p_0 + \Delta p]$ intervallumra van korlátozva. Korábban láttuk, hogy ennek a hullámcsomagnak a maximuma, pontosabban $|\psi(x, t)|^2$ főmaximuma a $v_g = \frac{dE}{dp}|_{p=p_0} = p_0/m$ csoportsebességgel mozog.

(d) A kezdeti állapot impulzus-hullámfüggvénye:

$$\begin{aligned}
\tilde{\psi}(p, 0) &= \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\frac{i}{\hbar} p x} \mathcal{N} e^{-\frac{x^2}{4\sigma^2}} = \mathcal{N} \sqrt{4\pi\sigma^2} \exp\left(-\frac{p^2 4\sigma^2}{2\hbar^2}\right) \\
&= \mathcal{N} \sqrt{4\pi\sigma^2} \exp\left(-\frac{2p^2 \sigma^2}{\hbar^2}\right). \quad (7.12)
\end{aligned}$$

A (b) pont eredményei értelmében:

$$\tilde{\psi}(p, t) = \tilde{\psi}(p, 0) e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{p^2}{2m} t} = \mathcal{N} \sqrt{4\pi\sigma^2} \exp\left[-\left(\frac{i}{\hbar} \frac{t}{2m} + \frac{2\sigma^2}{\hbar^2}\right)\right], \quad (7.13)$$

$$\begin{aligned}
\psi(x, t) &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp}{2\pi \hbar} e^{\frac{i}{\hbar} p x} \tilde{\psi}(p, t) = \mathcal{N} \sqrt{4\pi\sigma^2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp}{2\pi \hbar} \exp\left[-\left(\frac{i}{\hbar} \frac{t}{2m} + \frac{2\sigma^2}{\hbar^2}\right) + \frac{i}{\hbar} p x\right], \\
&= \frac{\mathcal{N} \sqrt{4\pi\sigma^2}}{2\pi \hbar} \sqrt{\frac{\pi}{\frac{2\sigma^2}{\hbar^2} + \frac{it}{2m\hbar}}} \exp\left[-\frac{x^2}{2\hbar^2 \left(\frac{2\sigma^2}{\hbar^2} + \frac{it}{2m\hbar}\right)}\right]. \quad (7.14)
\end{aligned}$$

Felhasználtuk a nevezetes Gauss-integrálokat (ld. 4. gyakorlat 6. feladatát). Érdemes elvégezni az alábbi azonos átalakítást:

$$\frac{1}{\frac{2\sigma^2}{\hbar^2} + \frac{it}{2m\hbar}} = \frac{\frac{2\sigma^2}{\hbar^2} - \frac{it}{2m\hbar}}{\frac{4\sigma^4}{\hbar^4} + \frac{t^2}{4m^2\hbar^2}}, \quad (7.15)$$

ezután

$$\begin{aligned}
\psi(x, t) &= \frac{\mathcal{N}\sqrt{4\pi\sigma^2}}{2\pi\hbar} \sqrt{\pi \frac{\frac{2\sigma^2}{\hbar^2} - \frac{it}{2m\hbar}}{\frac{4\sigma^4}{\hbar^4} + \frac{t^2}{4m^2\hbar^2}}} \exp\left[-\frac{x^2}{2\hbar^2} \frac{\frac{2\sigma^2}{\hbar^2} - \frac{it}{2m\hbar}}{\frac{4\sigma^4}{\hbar^4} + \frac{t^2}{4m^2\hbar^2}}\right] \\
&= \frac{\mathcal{N}\sqrt{4\pi\sigma^2}}{2\pi\hbar} \sqrt{\pi \frac{\frac{2\sigma^2}{\hbar^2} - \frac{it}{2m\hbar}}{\frac{4\sigma^4}{\hbar^4} + \frac{t^2}{4m^2\hbar^2}}} \exp\left[-\frac{x^2\hbar^2}{8} \frac{\frac{2\sigma^2}{\hbar^2} - \frac{it}{2m\hbar}}{\sigma^4 + \frac{\hbar^2 t^2}{16m^2}}\right] \\
&= \frac{\mathcal{N}\sqrt{4\pi\sigma^2}}{2\pi\hbar} \sqrt{\pi \frac{\frac{2\sigma^2}{\hbar^2} - \frac{it}{2m\hbar}}{\frac{4\sigma^4}{\hbar^4} + \frac{t^2}{4m^2\hbar^2}}} \exp\left[-\frac{x^2\hbar^2}{8} \frac{\frac{2\sigma^2}{\hbar^2} \left(1 - \frac{i\hbar t}{4m\sigma^2}\right)}{\sigma^4 \left(1 + \frac{\hbar^2 t^2}{16m^2\sigma^4}\right)}\right] \\
&= \frac{\mathcal{N}\sqrt{4\pi\sigma^2}}{2\pi\hbar} \sqrt{\pi \frac{\frac{2\sigma^2}{\hbar^2} - \frac{it}{2m\hbar}}{\frac{4\sigma^4}{\hbar^4} + \frac{t^2}{4m^2\hbar^2}}} \exp\left[-\frac{x^2}{4\sigma^2} \frac{1 - \frac{i\hbar t}{4m\sigma^2}}{1 + \frac{\hbar^2 t^2}{16m^2\sigma^4}}\right]. \tag{7.16}
\end{aligned}$$

Határozzuk most meg először Δx -et és Δp -t a kezdeti állapotban:

$$\begin{aligned}
(\Delta x)_{t=0}^2 &= \int_{-\infty}^{\infty} dx x^2 |\mathcal{N}|^2 \exp\left(-\frac{x^2}{2\sigma^2}\right) \\
&= -|\mathcal{N}|^2 \frac{d}{d(1/2\sigma^2)} \int_{-\infty}^{\infty} dx \exp\left(-\frac{x^2}{2\sigma^2}\right) \tag{7.17}
\end{aligned}$$

ahol

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \exp\left(-\frac{x^2}{2\sigma^2}\right) = \sqrt{2\pi\sigma^2}, \tag{7.18}$$

$$\begin{aligned}
-\frac{d}{d(1/2\sigma^2)} \int_{-\infty}^{\infty} dx \exp\left(-\frac{x^2}{2\sigma^2}\right) &= -\frac{d}{d(1/2\sigma^2)} \sqrt{\frac{\pi}{1/2\sigma^2}} \\
&= \sqrt{\pi} \frac{1}{2} \left(\frac{1}{2\sigma^2}\right)^{-3/2} = \sqrt{2\pi}\sigma^3 \tag{7.19}
\end{aligned}$$

és a normálási feltételből

$$\begin{aligned}
1 &= \int_{-\infty}^{\infty} dx |\psi(x, 0)|^2 = |\mathcal{N}|^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx \exp\left(-\frac{x^2}{2\sigma^2}\right) = |\mathcal{N}|^2 \sqrt{2\pi}\sigma^2 \\
\Rightarrow |\mathcal{N}|^2 &= (2\pi\sigma^2)^{-1/2}. \tag{7.20}
\end{aligned}$$

Azt találjuk így, hogy

$$(\Delta x)_{t=0}^2 = (2\pi\sigma^2)^{-1/2} \sqrt{2\pi}\sigma^3 = \sigma^2. \tag{7.21}$$

A kezdeti

$$|\psi(x, 0)|^2 \propto \exp\left(-\frac{x^2}{2\sigma^2}\right) \tag{7.22}$$

valószínűségi sűrűségben szereplő σ^2 paraméter fizikai jelentése tehát a helybizonytalanság négyzete. A tetszőleges t időpillanatban a valószínűségi sűrűség:

$$|\psi(x, t)|^2 \propto \exp\left(-\frac{x^2}{2\sigma_t^2}\right), \tag{7.23}$$

ahol

$$\sigma_t^2 = \sigma^2 \left(1 + \frac{\hbar^2 t^2}{16m^2 \sigma^4} \right). \quad (7.24)$$

Ez azt jelenti, hogy tetszőleges $t > 0$ pillanatban

$$(\Delta x)^2 = \sigma_t^2 > \sigma^2, \quad (7.25)$$

azaz az idő múlásával nő a helybizonytalanság, más szóval a hullámcsomag szétfolyik a koordinátatérben. Ez a szétfolyás tisztán kvantumfizikai jelenség, amire az utal, hogy $\sigma_t^2 - \sigma^2 \propto \hbar^2$.

Vizsgáljuk még meg a kezdeti hullámcsomag impulzustérbeli szélességét. Ehhez elegendő észrevenni, hogy

$$|\tilde{\psi}(p, 0)|^2 \propto \exp\left(-\frac{4p^2 \sigma^2}{\hbar^2}\right) \equiv \exp\left(-\frac{p^2}{2\sigma_p^2}\right), \quad (7.26)$$

ahonnan az előzőekkel analóg módon leolvashatjuk, hogy

$$(\Delta p)_{t=0}^2 = \sigma_p^2 = \frac{\hbar^2}{8\sigma^2}. \quad (7.27)$$

Mivel

$$|\tilde{\psi}(p, t)|^2 = \left| \tilde{\psi}(p, 0) e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{p^2}{2m} t} \right|^2 = |\tilde{\psi}(p, 0)|^2, \quad (7.28)$$

azért a hullámcsomag szélessége az impulzustérben nem változik az idő függvényében, azaz

$$(\Delta p)^2 = (\Delta p)_{t=0}^2. \quad (7.29)$$

Azt találjuk végül, hogy

$$(\Delta x)^2 (\Delta p)^2 = \sigma^2 \left(1 + \frac{\hbar^2 t^2}{16m^2 \sigma^4} \right) \frac{\hbar^2}{8\sigma^2} = \frac{\hbar^2}{8} \left(1 + \frac{\hbar^2 t^2}{16m^2 \sigma^4} \right) \quad (7.30)$$

alakban teljesül a Heisenberg-féle határozatlansági reláció.

8. gyakorlat

1. A

$$V(x) = \begin{cases} V_0, & \text{ha } x < -a, \quad a < x \\ 0, & \text{ha } -a \leq x \leq a \end{cases} \quad (8.1)$$

potenciálgödörben m tömegű részecske mozog; V_0 és $a > 0$ állandók.

- (a) Keresse meg a kötött stacionárius állapotokat!
- (b) Milyen mély legyen a potenciálgödör, hogy a rendszernek legalább egy kötött állapota legyen?
- (c) Mutassa meg, hogy $V_0 \rightarrow \infty$ esetben ugyanazokat a kötött állapotokat találjuk, mint amelyeket akkor kaptunk volna meg, ha kezdettől fogva feltettük volna, hogy $V_0 \rightarrow \infty$ és így oldottuk volna meg az időtől független Schrödinger-egyenletet!

Megoldás:

- (a) Vezessük be az egyes koordináta-intervallumok alábbi elnevezését:

$$\begin{aligned} I &: -a \leq x \leq a, \\ II &: x < -a, \\ III &: a < x. \end{aligned} \quad (8.2)$$

Az időtől független Schrödinger-egyenlet az egyes tartományokban:

$$I : -\frac{\hbar^2}{2m}\psi_I''(x) = E\psi_I(x), \quad (8.3)$$

$$II, III : -\frac{\hbar^2}{2m}\psi_{II,III}''(x) = (E - V_0)\psi_{II,III}(x), \quad (8.4)$$

ahol kötött állapotok esetén $0 \leq E < V_0$ kell legyen. A potenciálnak véges szakadása van az $x = \pm a$ helyeken. Ezeken a helyeken ψ'' is szakadós, mert $\psi(\pm a)$ általában nem zérus. A potenciál szakadási helyein a hullámfüggvény folytonos és folytonosan differenciálható, azaz

$$\psi_{II}(-a) = \psi_I(-a), \quad \psi_I(a) = \psi_{III}(a), \quad (8.5)$$

$$\psi'_{II}(-a) = \psi'_I(-a), \quad \psi'_I(a) = \psi'_{III}(a). \quad (8.6)$$

Ezek a határfeltételek kiegészülnek azzal, hogy a hullámfüggvény négyzetesen integrálható kell legyen, s ezért eleget kell tegyen a

$$\psi(x \rightarrow \pm\infty) = 0 \quad (8.7)$$

határfeltételeknek is.

Vezessük be a

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}, \quad \text{és} \quad \kappa = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar} \quad (8.8)$$

jelöléseket. Ekkor az egyes tartományokban a Schrödinger-egyenlet általános megoldása:

$$\begin{aligned} I &: \psi_I(x) = A \cos(kx) + B \sin(kx), \\ II &: \psi_{II}(x) = C e^{\kappa x} + C' e^{-\kappa x}, \\ III &: \psi_{III}(x) = D e^{-\kappa x} + D' e^{\kappa x}, \end{aligned} \quad (8.9)$$

ahol A, B, C, C', D, D' 6 darab állandó; értéküket az 5 darab határfeltétel és a $\|\psi\|^2 = 1$ normálási feltétel egyértelműen rögzíti, ha adott az E energia, ami azonban, mint alább látni fogjuk, csak diszkrét értékeket vehet fel.

A (8.7) határfeltételekből azonnal adódik, hogy $C' = D' = 0$ kell legyen. Ekkor a (8.5) és (8.6) feltételek az alábbi alakot öltik:

$$C e^{-\kappa a} = A \cos(ka) - B \sin(ka), \quad (8.10)$$

$$\kappa C e^{-\kappa a} = A k \sin(ka) + B k \cos(ka), \quad (8.11)$$

$$D e^{-\kappa a} = A \cos(ka) + B \sin(ka), \quad (8.12)$$

$$-\kappa D e^{-\kappa a} = -A k \sin(ka) + B k \cos(ka). \quad (8.13)$$

Adjuk össze, illetve vonjuk ki egymásból a (8.10)+(8.12), (8.11)–(8.13), (8.10)–(8.12), (8.11)+(8.13) séma szerint az egyes egyenletek megfelelő oldalait:

$$(C + D) e^{-\kappa a} = 2A \cos(ka), \quad (8.14)$$

$$\kappa(C + D) e^{-\kappa a} = 2Ak \sin(ka), \quad (8.15)$$

$$(C - D) e^{-\kappa a} = -2B \sin(ka), \quad (8.16)$$

$$\kappa(C - D) e^{-\kappa a} = 2Bk \cos(ka). \quad (8.17)$$

Különböző típusú megoldásokat kapunk, ha $C + D \neq 0$ és ha $C - D \neq 0$:

Ha $C + D \neq 0$,

akkor (8.14) és (8.15) értelmében $A \neq 0$. A (8.15) és (8.14) egyenletek megfelelő oldalainak hányadosát képezve a

$$\kappa = k \operatorname{tg}(ka) \quad (8.18)$$

egyenlet adódik a E energia diszkrét értékeinek meghatározására. A (8.16) és (8.17) egyenletek triviálisan kielégülnek, ha $C = D$ és $B = 0$. Mivel az inhomogén lineáris egyenletrendszerek megoldása egyértelmű, azért meg is találtuk a megoldások egyik osztályát:

$$\psi_I(x) = A \cos(kx), \quad \psi_{II}(x) = C e^{\kappa x}, \quad \psi_{III}(x) = C e^{-\kappa x}. \quad (8.19)$$

A (8.18) egyenlet minden gyökéhez tartozik egy ilyen tulajdonságú megoldás. Ezen megoldások $\psi(x) = \psi(-x)$ tulajdonságú, az x -tengelynek az origóra történő tükrözésével szemben invariáns hullámfüggvényű állapotokat jelentenek, vagyis páros hullámfüggvénnyel leírt pozitív paritású állapotokat. Itt (8.14)-ből

$$C = A e^{\kappa a} \cos(ka) \quad (8.20)$$

és A értékét az

$$1 = \int_{-\infty}^{-1} dx |C|^2 e^{2\kappa x} + \int_{-a}^a dx |A|^2 \cos^2(kx) + \int_a^{\infty} dx |C|^2 e^{-2\kappa x} \quad (8.21)$$

normálási feltétel rögzíti.

Ha $C - D \neq 0$,

akkor a (8.16) és (8.17) egyenletekből adódik, hogy $B \neq 0$. A (8.17) és (8.16) egyenletek megfelelő oldalait elosztva egymással a

$$\kappa = -k \operatorname{ctg}(ka) \quad (8.22)$$

egyenletet kapjuk az E energia lehetséges értékeinek meghatározására. A (8.14), (8.15) egyenletek triviálisan kielégülnek, ha $C = -D$ és $A = 0$. A (8.22) egyenlet minden gyökéhez tartozik egy

$$\psi_I(x) = B \sin(kx), \quad \psi_{II}(x) = C e^{\kappa x}, \quad \psi_{III}(x) = -C e^{-\kappa x} \quad (8.23)$$

alakú, páratlan hullámfüggvénnyel leírt negatív paritású megoldás, amelyre $\psi(-x) = -\psi(x)$. A (8.16)-ból

$$C = -B e^{\kappa a} \sin(ka), \quad (8.24)$$

és B értékét ismét a normálási feltétel rögzíti:

$$1 = \int_{-\infty}^{-a} dx |C|^2 e^{2\kappa x} + \int_{-a}^a dx |B|^2 \sin^2(kx) + \int_a^{\infty} dx |C|^2 e^{-2\kappa x}. \quad (8.25)$$

- (b) Hátra van még a diszkrét E értékek megkeresése, ami a (8.18), illetve (8.22) trigonometrikus egyenletek numerikus megoldásával lehetséges. A megoldások létezése azonban geometriailag is szemléltethető. Ehhez vezessük be a $\xi = ka > 0$ és $\eta = \kappa a > 0$ jelöléseket, majd κ és k definícióját felhasználva írjuk, hogy

$$\kappa^2 = \frac{2mV_0}{\hbar^2} - \frac{2mE}{\hbar^2} = \frac{2mV_0}{\hbar^2} - k^2, \quad (8.26)$$

$$\kappa^2 + k^2 = \frac{2mV_0}{\hbar^2}, \quad (8.27)$$

$$\xi^2 + \eta^2 = \frac{2ma^2V_0}{\hbar^2} \equiv r^2. \quad (8.28)$$

Az r sugarú körnegyed egyenletét kaptuk az (ξ, η) síkon. A megoldásoknak ezen a negyedköríven kell elhelyezkedniük ott, ahol pozitív paritás esetén az

$$\eta = \xi \operatorname{tg}(\xi), \quad (8.29)$$

negatív paritás esetén az

$$\eta = -\xi \operatorname{ctg} \xi \quad (8.30)$$

görbék metszik a negyedkörívet. Pozitív paritású állapotok esetén a $\operatorname{tg} \xi$ a $\xi = \pi/2, 3\pi/2, \dots$ pontokban $+\infty$ -hez tart, a $\xi = 0, \pi, 2\pi, \dots$ pontokban pedig eltűnik, úgyhogy a metszéspontok a $[0, \pi/2], [\pi, 3\pi/2], \dots$ intervallumokban lehetnek valamely $\xi \leq r$ pontokban. Ha $r < \pi/2$, akkor is van pontosan 1 darab metszéspont, úgyhogy legalább 1 pozitív paritású kötött állapot bármilyen sekély potenciálgödörben is létezik.

Negatív paritású állapotok esetében $-\operatorname{ctg} \xi$ zérushelyei $\xi = \pi/2, 3\pi/2, \dots$ és az $\xi = \pi, 2\pi, \dots$ helyeken tart $+\infty$ -hez, ezért a metszéspontok a $[\pi/2, \pi], [3\pi/2, 2\pi], \dots$ intervallumokban lehetnek valamilyen $\xi \leq r$ helyeken. Ha azonban $r < \pi/2$, akkor nem lesz egyetlen metszéspontja sem a (8.30) görbének és a (8.28) negyedkörívnek; ilyenkor nem léteznek negatív paritású kötött állapotok.

- (c) A $V_0 \rightarrow \infty$ esetben $r \rightarrow \infty$, ami egyúttal azt is jelenti, hogy a metszéspontok oda csúsznak el, ahol a pozitív paritású esetben $\operatorname{tg} \xi \rightarrow \infty$,

$$k_n a = (2n-1)\frac{\pi}{2}, \quad n = 1, 2, \dots, \quad (8.31)$$

negatív paritású esetben meg oda, ahol $-\operatorname{ctg} \xi \rightarrow +\infty$,

$$k_n a = n\pi, \quad n = 1, 2, \dots \quad (8.32)$$

Ezek együttesen olyan E_n energiákat jelentenek, amelyekre

$$\begin{aligned} k_n a &= n\frac{\pi}{2}, \quad n = 1, 2, \dots \\ \Rightarrow k_n &= n\frac{\pi}{2a} = n\frac{\pi}{L}, \end{aligned} \quad (8.33)$$

ahol L a potenciálgödör szélessége. Ezzel visszakaptuk, hogy olyan állóhullámok alakulnak ki, amelyek félhullámhossza egész számszor fér rá az L szélességre:

$$\lambda_n = \frac{2\pi}{k_n} = \frac{2L}{n}, \quad \Rightarrow \quad L = n\frac{\lambda_n}{2}. \quad (8.34)$$

Ezek a megoldások pontosan azok, amelyeket akkor kaptunk, amikor az időtől független Schrödinger-egyenletet „végtelen potenciálfalú dobozba” zárt részecskére oldottuk meg (ld. a jegyzetet).

2. A $V(x) = 0$, ha $x \in [-a, a]$, és $V(x) \rightarrow \infty$, ha $x \notin [-a, a]$ potenciállal jellemzett „dobozba” zárt m tömegű részecske alapállapotának és első gerjesztett állapotának hullámfüggvénye rendre:

$$\psi_1(x) = A \cos\left(\frac{\pi}{2a}x\right), \quad (8.35)$$

$$\psi_2(x) = B \sin\left(2\frac{\pi}{2a}x\right). \quad (8.36)$$

- Határozza meg az A és B normálási faktorokat!
- Mutassa meg, hogy $|\psi_1\rangle$ és $|\psi_2\rangle$ ortogonális állapotok!
- Határozza meg az alapállapot és az első gerjesztett állapot energiáját a $\psi_1(x)$ és $\psi_2(x)$ hullámfüggvények ismeretében!
- Mutassa meg, hogy az alapállapotban az x koordináta és a p_x impulzus várható értéke zérus!
- Mutassa meg, hogy az alapállapotban teljesül a határozatlansági reláció!

Megoldás:

- Vezessük be a $k = \frac{\pi}{2a}$ jelölést. A normálási feltételeket explicit módon felírjuk és a kapott integrálokat kiszámítjuk:

$$\begin{aligned} 1 &= \langle \psi_1 | \psi_1 \rangle = \int_{-a}^a dx |\psi_1(x)|^2 = |A|^2 \int_{-a}^a dx \cos^2(kx) \\ &= \frac{1}{2}|A|^2 \int_{-a}^a dx \left(1 + \cos(2kx)\right) = \frac{1}{2}|A|^2 \left([x]_{-a}^a + \frac{1}{2k}[\sin(2kx)]_{-a}^a\right) \\ &= |A|^2 a, \end{aligned} \quad (8.37)$$

ahonnan adódik, hogy A értékét választhatjuk valós számnak:

$$A = \frac{1}{\sqrt{a}}; \quad (8.38)$$

továbbá

$$\begin{aligned} 1 &= \langle \psi_2 | \psi_2 \rangle = \int_{-a}^a dx |\psi_2(x)|^2 = |B|^2 \int_{-a}^a dx \sin^2(2kx) \\ &= \frac{1}{2} B^2 \int_{-a}^a dx (1 - \cos(4kx)) = \frac{1}{2} |B|^2 \left([x]_{-a}^a - \frac{1}{4k} [\sin(4kx)]_{-a}^a \right) \\ &= |B|^2 a, \end{aligned} \quad (8.39)$$

ahonnan $B = A$ lehetséges választás.

(b) Képezzük a $\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle$ belső szorzatot:

$$\begin{aligned} \langle \psi_1 | \psi_2 \rangle &= \int_{-a}^a dx \langle \psi_1 | x \rangle \langle x | \psi_2 \rangle = \int_{-a}^a dx \psi_1^*(x) \psi_2(x) \\ &= A^2 \int_{-a}^a dx \cos(kx) \sin(2kx). \end{aligned} \quad (8.40)$$

Mivel

$$\sin(3kx) = \sin(2kx) \cos(kx) + \cos(2kx) \sin(kx), \quad (8.41)$$

$$\sin(kx) = \sin(2kx) \cos(kx) - \cos(2kx) \sin(kx), \quad (8.42)$$

azért

$$\cos(kx) \sin(2kx) = \frac{1}{2} (\sin(3kx) + \sin(kx)), \quad (8.43)$$

úgyhogy

$$\begin{aligned} \langle \psi_1 | \psi_2 \rangle &= A^2 \int_{-a}^a dx \cos(kx) \sin(2kx) = \frac{1}{2} A^2 \int_{-a}^a dx (\sin(3kx) + \sin(kx)) \\ &= \frac{1}{2} A^2 \left(\frac{1}{3k} [-\cos(3kx)]_{-a}^a + \frac{1}{k} [-\cos(kx)]_{-a}^a \right) = 0, \end{aligned} \quad (8.44)$$

mert $\cos x$ páros függvény. Tehát $\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle = 0$, azaz a két állapot ortogonális. Ennek így is kell lennie, mert a $\hat{H}$ Hamilton-operátor (önadjungált!) különböző sajátértékeihez tartozó állapotok.

(c) Az energiasajátértékeket megkapjuk, ha a Hamilton-operátort haddatjuk az egyes stacionárius állapotok hullámfüggvényeire:

$$\hat{H}|\psi_1\rangle \leftrightarrow \langle x|\hat{H}|\psi_1\rangle = -\frac{\hbar^2}{2m}\psi_1''(x) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}\psi_1(x) \equiv E_1\psi_1(x), \quad (8.45)$$

$$\hat{H}|\psi_2\rangle \leftrightarrow \langle x|\hat{H}|\psi_2\rangle = -\frac{\hbar^2}{2m}\psi_2''(x) = \frac{4\hbar^2 k^2}{2m}\psi_2(x) \equiv E_2\psi_2(x). \quad (8.46)$$

A keresett energiasajátértékek tehát:

$$E_1 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2}, \quad E_2 = 4E_1 = 2^2 E_1. \quad (8.47)$$

(d) Az x koordináta várható értéke az alapállapotban:

$$\langle \psi_1 | \hat{x} | \psi_1 \rangle = \int_{-a}^a dx x |\psi_1(x)|^2 = A^2 \int_{-a}^a dx x \cos^2(kx) = 0, \quad (8.48)$$

mert az integrálási tartomány $x = 0$ -ra szimmetrikus, az integrandus pedig páratlan függvénye x -nek. A p_x impulzusvetület várható értéke az alapállapotban:

$$\begin{aligned} \langle \psi_1 | \hat{p}_x | \psi_1 \rangle &= \int_{-a}^a dx \psi_1^*(x) \frac{\hbar}{i} \psi_1'(x) = A^2 \frac{\hbar}{i} \int_{-a}^a dx \cos(kx) [\cos(kx)]' \\ &= -i A^2 \hbar k \int_{-a}^a dx \cos(kx) \sin(kx) = 0, \end{aligned} \quad (8.49)$$

mert az integrálási tartomány $x = 0$ -ra szimmetrikus, az integrandus pedig páratlan függvénye x -nek.

(e) Meghatározzuk az x koordináta és a p_x impulzus szórásnégyzetét:

$$\begin{aligned} (\Delta x)^2 &= \langle \psi_1 | \hat{x}^2 | \psi_1 \rangle - \langle \psi_1 | \hat{x} | \psi_1 \rangle^2 = \langle \psi_1 | \hat{x}^2 | \psi_1 \rangle \\ &= \int_{-a}^a dx x^2 |\psi_1(x)|^2 = A^2 \int_{-a}^a dx x^2 \cos^2(kx) \\ &= 2A^2 \int_0^a dx x^2 \frac{1}{2} (1 + \cos(2kx)) \\ &= A^2 \left(\frac{1}{3} [x^3]_0^a + \int_0^a dx x^2 \cos(2kx) \right) \end{aligned} \quad (8.50)$$

A második integrált kétszeri parciális integrálással kapjuk meg:

$$\begin{aligned} \int_0^a dx x^2 \cos(2kx) &= \left[x^2 \frac{\sin(2kx)}{2k} \right]_0^a - \frac{1}{2k} \int_0^a dx 2x \sin(2kx) \\ &= 0 - \frac{1}{k} \left(\left[-\frac{1}{2k} x \cos(2kx) \right]_0^a + \frac{1}{2k} \int_0^a dx \cos(2kx) \right) \\ &= -\frac{a}{2k^2} - \frac{1}{2k^2} \left[\frac{\sin(2kx)}{2k} \right]_0^a = -\frac{a}{2k^2}. \end{aligned} \quad (8.51)$$

Ezt felhasználva kapjuk, hogy

$$(\Delta x)^2 = A^2 \left(\frac{a^3}{3} - \frac{a}{2k^2} \right) = A^2 a^3 \left(\frac{1}{3} - \frac{2}{\pi^2} \right) = a^2 \left(\frac{1}{3} - \frac{2}{\pi^2} \right) \quad (8.52)$$

Meghatározzuk a $(\Delta p_x)^2$ szórásnégyzetet:

$$\begin{aligned} (\Delta p_x)^2 &= \langle \psi_1 | \hat{p}_x^2 | \psi_1 \rangle - \langle \psi_1 | \hat{p}_x | \psi_1 \rangle^2 = \langle \psi_1 | \hat{p}_x^2 | \psi_1 \rangle \\ &= \int_{-a}^a dx \psi_1^*(x) \left(\frac{\hbar}{i} \right)^2 \psi_1''(x) = -A^2 \hbar^2 \int_{-a}^a dx \cos(kx) [\cos(kx)]'' \\ &= A^2 \hbar^2 k^2 \int_{-a}^a dx \cos^2(kx) = 2A^2 \hbar^2 k^2 \int_0^a dx \cos^2(kx) \\ &= A^2 \hbar^2 k^2 \int_0^a dx \left(1 + \cos(2kx) \right) = A^2 \hbar^2 k^2 \left(a + \frac{1}{2k} [\sin(2kx)]_0^a \right) \\ &= A^2 \hbar^2 k^2 a = A^2 \frac{\hbar^2 \pi^2}{4a} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{4a^2}. \end{aligned} \quad (8.53)$$

Az egy-dimenziós dobozba zárt részecske alapállapotában a határozatlansági reláció tehát

$$\Delta x \Delta p_x = a \left(\frac{1}{3} - \frac{2}{\pi^2} \right)^{1/2} \frac{\hbar \pi}{2a} = \frac{\hbar}{2} \left(\frac{\pi^2}{3} - 2 \right)^{1/2} \approx 1,14 \cdot \frac{\hbar}{2} > \frac{\hbar}{2} \quad (8.54)$$

alakban teljesül. Látjuk, hogy ez az alapállapot „nem viszi telítésbe” a $\Delta x \Delta p_x \geq \hbar/2$ határozatlansági relációt.

3. Határozza meg annak az m tömegű részecskének a stacionárius kötött és szórási állapotait, amely a $V(x) = -W\delta(x)$ külső potenciáltérben mozog, ahol $W > 0$. Tegye fel, hogy a hullámfüggvény a potenciál szingularitási helyén is folytonos és korlátos! Mutassa meg, hogy szórási állapotok esetén az R reflexiós együttható és a T transzmissziós együttható összege $R + T = 1$!

Megoldás:

Az időtől független Schrödinger-egyenlet:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x) - W\delta(x)\psi(x) = E\psi(x). \quad (8.55)$$

Kezdjük először a kötött állapotok megkeresésével! A kötött állapotok esetén $E < 0$. Vezessük be a $\kappa = \sqrt{\frac{-2mE}{\hbar^2}}$ jelölést. Ekkor az $x = 0$ pont kivételével mindenütt

$$\psi''(x) = \kappa^2\psi(x) \quad (8.56)$$

alakot ölt az időtől független Schrödinger-egyenlet. Ennek általános megoldása

$$\psi_{<}(x) = Ae^{\kappa x} + Be^{-\kappa x}, \text{ ha } x < 0, \text{ és } \psi_{>}(x) = Ce^{-\kappa x} + De^{\kappa x} \text{ ha } x > 0, \quad (8.57)$$

ahol A, B, C, D a határfeltételekből és a normálási feltételből meghatározható állandók. A hullámfüggvény normálhatósága megköveteli a hullámfüggvény korlátosságát, amiből $B = D = 0$ adódik. A folytonosság az $x = 0$ pontban az eredményezi, hogy $A = C$.

Külön vizsgálatot igényel, hogy hogyan viselkedik a hullámfüggvény x szerinti első deriváltja a potenciál Dirac-deltás szingularitásának helyén, azaz az $x = 0$ pontban. Integráljuk a Schrödinger-egyenlet mindkét oldalát a potenciál szingularitási helyét tartalmazó infinitesimális $[-\varepsilon, +\varepsilon]$ intervallumon, ahol $\varepsilon \rightarrow 0$; így határfeltételt nyerünk $\psi_{<}(x)$ és $\psi_{>}(x)$ összevarrására az $x = 0$ pontban:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} dx \psi'' - W\psi(0) = E \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} dx \psi(x), \quad (8.58)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} [\psi'(\varepsilon) - \psi'(-\varepsilon)] = W\psi(0), \quad (8.59)$$

mert $\psi(x)$ feltevésünk szerint folytonos és korlátos az $x = 0$ helyen, úgyhogy $\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} dx \psi(x) = 0$. Azt kaptuk tehát, hogy

$$\psi'_{>}(0) - \psi'_{<}(0) = -\frac{2mW}{\hbar^2}\psi(0) \equiv -f\psi(0), \quad (8.60)$$

ahol $\psi(0) \equiv \psi_{>}(0) = \psi_{<}(0)$.

Az első deriváltra vonatkozó (8.60) feltételből azt kapjuk, hogy

$$-\kappa C - \kappa A = -2\kappa A = -fA. \quad (8.61)$$

Ezt részletesen kiírva egyetlen diszkrét energia-sajátértéket kapunk:

$$\kappa = \frac{mW}{\hbar^2} = \sqrt{\frac{-2mE}{\hbar^2}}, \quad (8.62)$$

$$\Rightarrow E = -\frac{mW^2}{2\hbar^2}. \quad (8.63)$$

Végül a hullámfüggvény,

$$\psi_{<}(x) = Ae^{\kappa x}, \quad \psi_{>}(x) = Ae^{-\kappa x} \quad (8.64)$$

páros függvény. Az egyetlen kötött állapot pozitív paritású. Az A együttható értékét megkapjuk a normálási feltételből:

$$\begin{aligned} 1 &= \int_{-\infty}^{\infty} dx |\psi|^2 = 2 \int_0^{\infty} dx |\psi_{>}|^2 = 2|A|^2 \int_0^{\infty} dx e^{-2\kappa x} = \frac{|A|^2}{\kappa}, \\ \Rightarrow |A| &= \sqrt{\kappa} = \sqrt{\frac{mW}{\hbar^2}}. \end{aligned} \quad (8.65)$$

Térjünk most rá a szórési állapotok meghatározására, amelyek az $E > 0$ energiasajátértékekhez tartoznak. Vezessük be az $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ parametrizációt. Az $x = 0$ pont kivételével mindenütt a szabad mozgásra vonatkozó Schrödinger-egyenlet érvényes, amelynek általános megoldása

$$\psi_{<}(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, \quad \text{ha } x < 0, \quad \text{és} \quad \psi_{>}(x) = Ce^{ikx} + De^{-ikx}, \quad \text{ha } x > 0. \quad (8.66)$$

Ha gondolatban az időtől független hullámfüggvényt megszorozzuk az $e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$ időtől függő fázisfaktoral, akkor be tudjuk azonosítani, hogy mely síkhullámkomponensek a „jobbra” és a „balra” haladók. Vizsgáljunk olyan határfeltételű megoldásokat, amelyek balról befutó hullámot írnak le, ekkor $x \rightarrow -\infty$ esetén a $\psi_{\text{b}}(x) = Ae^{ikx}$ befutó hullámnak, a $\psi_{\text{R}}(x) = Be^{-ikx}$ visszavert hullámnak, $x \rightarrow +\infty$ esetén csak az áteresztett $\psi_{\text{T}}(x) = Ce^{ikx}$ hullámnak kell jelen lennie, ezért $D = 0$ és

$$\psi_{<}(x) = \psi_{\text{b}}(x) + \psi_{\text{R}}(x) \quad \text{és} \quad \psi_{>}(x) = \psi_{\text{T}}(x). \quad (8.67)$$

Az $x = 0$ -ban a hullámfüggvény folytonossága miatt

$$A + B = C. \quad (8.68)$$

A (8.60) határfeltételből:

$$ik[C - (A - B)] = -\frac{2mW}{\hbar^2}C \equiv -fC. \quad (8.69)$$

Mivel $B = C - A$, az utóbbi feltételből kapjuk, hogy

$$2ik(C - A) = -fC, \quad \Rightarrow \quad C = \frac{2ik}{f + 2ik}A \quad (8.70)$$

és

$$B = C - A = \frac{-f}{f + 2ik} A. \quad (8.71)$$

A keresett reflexió és traszmissziós együttható rendre

$$R = \left| \frac{j_{Rx}}{j_{bx}} \right|, \quad T = \left| \frac{j_{Tx}}{j_{bx}} \right|, \quad (8.72)$$

ahol a 4. gyakorlat 7. feladatának eredményét felhasználva

$$j_{bx} = \frac{k\hbar}{m}|A|^2, \quad j_{Rx} = -\frac{k\hbar}{m}|B|^2, \quad j_{Tx} = \frac{k\hbar}{m}|C|^2. \quad (8.73)$$

Azt találjuk tehát, hogy

$$R = \frac{|B|^2}{|A|^2} = \frac{f^2}{f^2 + 4k^2}, \quad T = \frac{|C|^2}{|A|^2} = \frac{4k^2}{f^2 + 4k^2} \quad (8.74)$$

és $R + T = 1$.

4. Mozogjon m tömegű részecske a $V(x) = 0$, ha $x < 0$, és $V(x) = V_0 > 0$, ha $x > 0$ potenciállépcsővel jellemzett külső fizikai mezőben. Keresse meg a $0 < E < V_0$ energiájú szórési állapotokat! Mutassa meg, hogy az R visszaverődési tényező értéke 1, noha a stacionárius állapotokban a részecskének az $x > 0$ félegyenesen (azaz „a potenciállépcső alatt”) a megtalálási valószínűsége nem zérus. Mit mondhatunk a $j_{T,x}$ valószínűségi áramsűrűségről az $x > 0$ félegyenesen?

Megoldás:

A stacionárius Schrödinger-egyenlet explicit alakja:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''_{<} = E\psi, \quad \text{ha } x < 0, \quad (8.75)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''_{>} = (E - V_0)\psi, \quad \text{ha } x > 0. \quad (8.76)$$

Vezessük be a $k = \sqrt{2mE}/\hbar > 0$ és a $\kappa = \sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar > 0$ valós paramétereket. Ekkor a Schrödinger-egyenlet explicit alakja leegyszerűsödik:

$$\psi''_{<} + k^2\psi = 0, \quad \text{ha } x < 0, \quad (8.77)$$

$$\psi''_{>} - \kappa^2\psi = 0, \quad \text{ha } x > 0. \quad (8.78)$$

A negatív és a pozitív félegyenesen ezért a megoldás

$$\psi_{<}(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \equiv \psi_{be}(x) + \psi_v(x), \quad \text{ha } x < 0, \quad (8.79)$$

$$\psi_{>}(x) = Ce^{-\kappa x} + De^{\kappa x}, \quad \text{ha } x > 0. \quad (8.80)$$

Itt $D = 0$ kell legyen, ha megköveteljük, hogy a hullámfüggvény tartson zérushoz az $x \rightarrow \infty$ határesetben. Az $x = 0$ helyen a potenciálnak véges szingularitása van, ezért ott a hullámfüggvény és x szerinti első deriváltja folytonos. Ebből következik, hogy

$$\psi_{<}(0) = \psi_{>}(0) \quad \Rightarrow \quad A + B = C, \quad (8.81)$$

$$\psi'_{<}(0) = \psi'_{>}(0) \quad \Rightarrow \quad A - B = -\frac{\kappa}{ik}C. \quad (8.82)$$

Oldjuk meg ezt az inhomogén lineáris egyenletrendszert A -ra és B -re:

$$A = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\kappa}{ik} \right) C, \quad B = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\kappa}{ik} \right) C. \quad (8.83)$$

A $0 < E < V_0$ energiájú stacionárius állapotok hullámfüggvénye tehát

$$\begin{aligned} \psi_{<}(x) &= \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\kappa}{ik} \right) C e^{ikx} + \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\kappa}{ik} \right) C e^{-ikx} \equiv \psi_{\text{be}}(x) + \psi_{\text{v}}(x) \\ &= C \left[\cos(kx) - \frac{\kappa}{k} \sin(kx) \right], \end{aligned} \quad (8.84)$$

$$\psi_{>}(x) = C e^{-\kappa x}, \quad (8.85)$$

ahol C normálási együttható. (A szórási állapot nem normálható 1-re, csak Dirac-deltás általánosított ortonormáltsági feltétel róható ki az E és $E' \neq E$ energiájú állapotokra!)

A negatív félegyenesen a hullámfüggvény a befutó $\psi_{\text{be}}(x)$ és a visszeveret $\psi_{\text{v}}(x)$ síkhullámok szuperpozíciója, amelyek rendre

$$j_{\text{be},x} = \frac{\hbar k}{m} |A|^2, \quad j_{\text{v},x} = -\frac{\hbar k}{m} |B|^2 \quad (8.86)$$

valószínűségi áramsűrűségűek. A reflexió tényező:

$$R = \left| \frac{j_{\text{v},x}}{j_{\text{be},x}} \right| = \frac{|B|^2}{|A|^2} = \left| \frac{1 + \frac{\kappa}{ik}}{1 - \frac{\kappa}{ik}} \right|^2 = \left| \frac{\kappa + ik}{\kappa - ik} \right|^2 = \frac{\kappa^2 + k^2}{\kappa^2 + k^2} = 1. \quad (8.87)$$

Ez azt jelenti, hogy a befutó anyaghullám 1 valószínűséggel visszaverődik a $0 < E < V_0$ esetben.

A pozitív félegyenesre „behatol” a hullámfüggvény, de exponenciálisan lecseng növekvő $x > 0$ esetén. Könnyen belátható, hogy bár

$$\rho_{>}(x) = |\psi_{>}(x)|^2 = |C|^2 e^{-2\kappa x} \neq 0, \quad (8.88)$$

a „potenciállépcső alatti” tartományban nem jelenik meg zérustól különböző valószínűségi áramsűrűség,

$$j_{>,x}(x) = \frac{i\hbar}{2m} \left(\psi_{>} \frac{d}{dx} \psi_{>}^* - \text{c.c.} \right) = \frac{i\hbar}{2m} |C|^2 \left(-e^{-\kappa x} \kappa e^{-\kappa x} - \text{c.c.} \right) = 0. \quad (8.89)$$

9. gyakorlat

1. A

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2 \quad (9.1)$$

Hamilton-operátorral jellemzett lineáris harmonikus oszcillátor egyik stacionárius állapotának hullámfüggvénye:

$$\psi(x) = \mathcal{N}e^{-\frac{1}{2}\lambda x^2}, \quad \text{ahol } \lambda = \frac{m\omega}{\hbar}. \quad (9.2)$$

- (a) Határozza meg az $\mathcal{N}$ normálási tényező értékét, ha $\|\psi\|^2 = 1$!
- (b) Határozza meg, hogy mekkora a $\psi(x)$ hullámfüggvénnyel jellemzett stacionárius állapot energiája!
- (c) Határozza meg ebben az állapotban x , p_x várható értékét és a Δx és Δp_x szórásokat. Milyen alakot ölt a határozatlansági reláció?
- (d) Határozza meg ebben az állapotban a $\rho(x)$ valószínűségi sűrűséget és a $j_x(x)$ valószínűségi áramsűrűséget!

Megoldás:

- (a) Írjuk ki részletesen a normálási feltételt és végezzük el a Gauss-integrált:

$$1 = \int_{-\infty}^{\infty} dx |\mathcal{N}|^2 e^{-\lambda x^2} = |\mathcal{N}|^2 \sqrt{\frac{\pi}{\lambda}}. \quad (9.3)$$

Innen azt kapjuk, hogy egységnyi abszolút értékű komplex fázisfaktortól eltekintve

$$\mathcal{N} = \left(\frac{\lambda}{\pi}\right)^{1/4} = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}. \quad (9.4)$$

- (b) Mivel $\psi(x)$ stacionárius állapot időtől független hullámfüggvénye, azért megoldása a Hamilton-operátor sajátérték-egyenletének. Az állapot energiáját, azaz az energiasajátértéket úgy kapjuk meg, hogy hattatjuk a Hamilton-operátort a $\psi(x)$ hullámfüggvényre:

$$\hat{H}\psi(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x) + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \psi(x), \quad (9.5)$$

ahol

$$\psi(x) = \mathcal{N}e^{-\frac{1}{2}\lambda x^2}, \quad (9.6)$$

$$\psi'(x) = -\mathcal{N}\lambda x e^{-\frac{1}{2}\lambda x^2} = -\lambda x \psi(x), \quad (9.7)$$

$$\psi''(x) = (-\lambda + \lambda^2 x^2)\psi(x). \quad (9.8)$$

Így azt kapjuk, hogy

$$\begin{aligned} \hat{H}\psi(x) &= \left[-\frac{\hbar^2}{2m}(-\lambda + \lambda^2 x^2) + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \right] \psi(x) \\ &= \left[\frac{\hbar^2}{2m} \frac{m\omega}{\hbar} - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{m^2 \omega^2}{\hbar^2} x^2 + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \right] \psi(x) \\ &= \left[\frac{1}{2}\hbar\omega - \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \right] \psi(x) \\ &= \frac{1}{2}\hbar\omega \psi(x). \end{aligned} \quad (9.9)$$

Látjuk tehát, hogy $\psi(x)$ valóban sajátfüggvény és az $E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$ energia-sajátértékhez tartozik. Ez az oszcillátor alapállapotának az energiája.

(c) Az x helykoordináta és a p_x impulzus várható értéke az alapállapotban:

$$\begin{aligned}\bar{x} &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi^*(x) x \psi(x) = |\mathcal{N}|^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx x e^{-\lambda x^2} = \frac{|\mathcal{N}|^2}{-2\lambda} \int_{-\infty}^{\infty} dx \partial_x e^{-\lambda x^2} \\ &= \frac{|\mathcal{N}|^2}{-2\lambda} \left[e^{-\lambda x^2} \right]_{-\infty}^{\infty} = 0;\end{aligned}\tag{9.10}$$

$$\begin{aligned}\overline{p_x} &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi^*(x) \frac{\hbar}{i} \partial_x \psi(x) = |\mathcal{N}|^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\frac{1}{2}\lambda x^2} \frac{\hbar}{i} \partial_x e^{-\frac{1}{2}\lambda x^2} \\ &= |\mathcal{N}|^2 \frac{\hbar}{i} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\frac{1}{2}\lambda x^2} (-\lambda x) e^{-\frac{1}{2}\lambda x^2} = -|\mathcal{N}|^2 \frac{\hbar}{i} \lambda \int_{-\infty}^{\infty} dx x e^{-\lambda x^2} = 0.\end{aligned}\tag{9.11}$$

(Az integrandusban elvégezve a deriválást $\overline{p_x}$ kiszámítását is visszavezettük az $\int_{-\infty}^{\infty} dx x e^{-\lambda x^2}$ integrál kiszámítására, amelynek értéke zérus: egy páros és egy páratlan függvény szorzatának határozott integrálja.) A harmonikus oszcillátor alapállapotában tehát x és p_x várható értéke egyaránt zérus.

Számoljuk ki most a Δx és Δp_x szórásokat a harmonikus oszcillátor alapállapotában:

$$\begin{aligned}(\Delta x)^2 &= \overline{x^2} - \bar{x}^2 = \overline{x^2} = |\mathcal{N}|^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\frac{1}{2}\lambda x^2} x^2 e^{-\frac{1}{2}\lambda x^2} = |\mathcal{N}|^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx x^2 e^{-\lambda x^2} \\ &= -|\mathcal{N}|^2 \partial_\lambda \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\lambda x^2} = -|\mathcal{N}|^2 \partial_\lambda \sqrt{\frac{\pi}{\lambda}} = |\mathcal{N}|^2 \frac{1}{2} \sqrt{\pi} \lambda^{-3/2} \\ &= \sqrt{\frac{\lambda}{\pi}} \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{\lambda^3}} = \frac{1}{2\lambda};\end{aligned}\tag{9.12}$$

$$\begin{aligned}(\Delta p_x)^2 &= \overline{p_x^2} - \overline{p_x}^2 = \overline{p_x^2} = |\mathcal{N}|^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\frac{1}{2}\lambda x^2} \left(\frac{\hbar}{i} \right)^2 \partial_x^2 e^{-\frac{1}{2}\lambda x^2} \\ &= -|\mathcal{N}|^2 \hbar^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\frac{1}{2}\lambda x^2} (-\lambda + \lambda^2 x^2) e^{-\frac{1}{2}\lambda x^2} \\ &= -|\mathcal{N}|^2 \hbar^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx \left(-\lambda e^{-\lambda x^2} + \lambda^2 x^2 e^{-\lambda x^2} \right) \\ &= +\lambda \hbar^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx |\psi(x)|^2 - \lambda^2 \hbar^2 |\mathcal{N}|^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx x^2 e^{-\lambda x^2} \\ &= \lambda \hbar^2 - \lambda^2 \hbar^2 \overline{x^2} = \lambda \hbar^2 - \frac{\lambda^2 \hbar^2}{2\lambda} = \frac{1}{2} \lambda \hbar^2.\end{aligned}\tag{9.13}$$

A határozatlansági reláció tehát

$$\Delta x \Delta p_x = \sqrt{\frac{1}{2\lambda} \frac{1}{2} \lambda \hbar^2} = \frac{\hbar}{2}\tag{9.14}$$

alakot ölt. A harmonikus oszcillátor alapállapotában tehát az általános érvényű $\Delta x \Delta p_x \geq \hbar/2$ határozatlansági reláció egyenlőség alakjában teljesül.

(d) A harmonikus oszcillátor alapállapotában a valószínűségi sűrűség

$$\rho(x) = |\psi(x)|^2 = |\mathcal{N}|^2 e^{-\lambda x^2}\tag{9.15}$$

Gauss-függvény, ami 1-re van normálva, $\int_{-\infty}^{\infty} dx \rho(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dx |\psi(x)|^2 = 1$. Ezért $\rho(x)dx$ annak a valószínűsége, hogy az alapállapotban a harmonikus oszcillátor potenciálban elhelyezkedő m tömegű részecskét $\rho(x)dx$ valószínűséggel találjuk az $[x, x+dx]$ intervallumban.

A harmonikus oszcillátor alapállapotában a valószínűségi áramsűrűség:

$$\begin{aligned} j_x &= \frac{i\hbar}{2m}(\psi \partial_x \psi^* - \psi^* \partial_x \psi) \\ &= \frac{i\hbar}{2m} |\mathcal{N}|^2 \left(-e^{-\frac{1}{2}\lambda x^2} \lambda x e^{-\frac{1}{2}\lambda x^2} + e^{-\frac{1}{2}\lambda x^2} \lambda x e^{-\frac{1}{2}\lambda x^2} \right) = 0. \end{aligned} \quad (9.16)$$

2. A (9.1) Hamilton-operátorral kapcsolatosan vezesse be az

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\sqrt{\lambda} \hat{x} + \frac{i}{\hbar \sqrt{\lambda}} \hat{p}_x \right), \quad \hat{a}^+ = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\sqrt{\lambda} \hat{x} - \frac{i}{\hbar \sqrt{\lambda}} \hat{p}_x \right) \quad (9.17)$$

léptető operátorokat!

- (a) Mutassa meg, hogy a léptető operátorok nem önadjungáltak!
- (b) Láss be a Heisenberg-féle kanonikus csererelációk alapján, hogy $[\hat{a}, \hat{a}^+] = \hat{I}$!
- (c) Mutassa meg, hogy az $\hat{n} \equiv \hat{a}^+ \hat{a}$ operátor eleget tesz a

$$[\hat{n}, \hat{a}] = -\hat{a}, \quad [\hat{n}, \hat{a}^+] = \hat{a}^+ \quad (9.18)$$

kommutátor-relációknak és, hogy a Hamilton-operátor azonos átalakítással

$$\hat{H} = \left(\hat{n} + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega \quad (9.19)$$

alakra hozható!

- (d) Mi a c_+ és c_- együtthatók értéke az

$$|n+1\rangle = c_+ \hat{a}^+ |n\rangle, \quad |n-1\rangle = c_- \hat{a} |n\rangle \quad (9.20)$$

egyenlőségekben, ha az állapotvektorok 1-re vannak normálva?

- (e) A lineáris harmonikus oszcillátor alapállapota az a $|0\rangle$ állapot, amely eleget tesz az $\hat{a}|0\rangle = 0$ feltételnek. Ebből az oszcillátor n -edik gerjesztett állapota $|n\rangle = \mathcal{N}_n (\hat{a}^+)^n |0\rangle$ utasítással kapható meg. Határozza meg a $\mathcal{N}_n$ normálási tényezőt az $\langle n|n\rangle = 1$ feltételből, ha $\langle 0|0\rangle = 1$.
- (f) Az $\hat{a}$ operátor (9.17) definícióját és a $|0\rangle$ alapállapot hullámfüggvényének $\psi_0(x) = C_0 \exp\left(-\frac{1}{2}\lambda x^2\right)$ alakját felhasználva mutassa meg, hogy $\hat{a}|0\rangle = 0$ valóban teljesül!

Megoldás:

(a) Ez triviális, hiszen $\hat{a}^+ = \hat{a}^\dagger$.

(b)

$$\begin{aligned} [\hat{a}, \hat{a}^+] &= \left[\frac{1}{\sqrt{2}} \left(\sqrt{\lambda} \hat{x} + \frac{i}{\hbar \sqrt{\lambda}} \hat{p}_x \right), \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\sqrt{\lambda} \hat{x} - \frac{i}{\hbar \sqrt{\lambda}} \hat{p}_x \right) \right] = -\frac{1}{2} \frac{i}{\hbar} [\hat{x}, \hat{p}_x] + \frac{1}{2} \frac{i}{\hbar} [\hat{p}_x, \hat{x}] \\ &= -\frac{i}{\hbar} [\hat{x}, \hat{p}_x] = -\frac{i}{\hbar} i \hbar = \hat{I}. \end{aligned} \quad (9.21)$$

(c)

$$[\hat{n}, \hat{a}] = \hat{a}^+ \hat{a} \hat{a} - \hat{a} \hat{a}^+ \hat{a} = \hat{a}^+ \hat{a} \hat{a} - (\hat{I} + \hat{a}^+ \hat{a}) \hat{a} = -\hat{a}, \quad (9.22)$$

$$[\hat{n}, \hat{a}^+] = \hat{a}^+ \hat{a} \hat{a}^+ - \hat{a}^+ \hat{a}^+ \hat{a} = \hat{a}^+ (\hat{I} + \hat{a}^+ \hat{a}) - \hat{a}^+ \hat{a}^+ \hat{a} = \hat{a}^+. \quad (9.23)$$

A Hamilton-operátort úgy alakítjuk át, hogy $\hat{x}$ -ot és $\hat{p}_x$ -ot kifejezzük a léptető operátorok segítségével:

$$\hat{a} + \hat{a}^+ = \sqrt{2\lambda} \hat{x} \quad \Rightarrow \quad \hat{x} = \frac{1}{\sqrt{2\lambda}} (\hat{a} + \hat{a}^+), \quad (9.24)$$

$$\hat{a} - \hat{a}^+ = \frac{i}{\hbar} \sqrt{\frac{2}{\lambda}} \hat{p}_x \quad \Rightarrow \quad \hat{p}_x = \frac{\hbar}{i} \sqrt{\frac{\lambda}{2}} (\hat{a} - \hat{a}^+); \quad (9.25)$$

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \frac{1}{2m} \frac{-\hbar^2 \lambda}{2} (\hat{a} - \hat{a}^+)^2 + \frac{1}{2} \frac{m \omega^2}{2\lambda} (\hat{a} + \hat{a}^+)^2 = \frac{-\hbar \omega}{4} (\hat{a} - \hat{a}^+)^2 + \frac{\hbar \omega}{4} (\hat{a} + \hat{a}^+)^2 \\ &= \frac{\hbar \omega}{2} (\hat{a} \hat{a}^+ + \hat{a}^+ \hat{a}) = \frac{1}{2} \hbar \omega (\hat{I} + \hat{a}^+ \hat{a} + \hat{a}^+ \hat{a}) = \left(\hat{a}^+ \hat{a} + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega \\ &= \left(\hat{n} + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega. \end{aligned} \quad (9.26)$$

(d)

$$\begin{aligned} 1 &= \langle n+1 | n+1 \rangle = |c_+|^2 \langle n | \hat{a} \hat{a}^+ | n \rangle = |c_+|^2 \langle n | \hat{I} + \hat{a}^+ \hat{a} | n \rangle = |c_+|^2 (1+n), \\ \Rightarrow \quad c_+ &= \frac{1}{\sqrt{n+1}}, \end{aligned} \quad (9.27)$$

$$\begin{aligned} 1 &= \langle n-1 | n-1 \rangle = |c_-|^2 \langle n | \hat{a}^+ \hat{a} | n \rangle = |c_-|^2 n \\ \Rightarrow \quad c_- &= \frac{1}{\sqrt{n}}. \end{aligned} \quad (9.28)$$

(Eltekintve egy tetszőleges komplex fázisfaktortól.)

(e) Az előző pont eredménye alapján

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n}} \hat{a}^+ |n-1\rangle = \frac{1}{\sqrt{n(n-1)}} (\hat{a}^+)^2 |n-2\rangle = \dots = \frac{1}{\sqrt{n!}} (\hat{a}^+)^n |0\rangle \quad (9.29)$$

az $\langle n | n \rangle = 1$ feltétellel normált állapotvektor.

(f) Koordináta-reprezentációban azt találjuk, hogy

$$\begin{aligned} \langle x | \hat{a} | 0 \rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\sqrt{\lambda} x + \frac{1}{\sqrt{\lambda}} \frac{d}{dx} \right) C_0 e^{-\frac{1}{2} \lambda x^2} \\ &= \frac{C_0}{\sqrt{2}} \left(\sqrt{\lambda} x - \frac{1}{\sqrt{\lambda}} \lambda x \right) e^{-\frac{1}{2} \lambda x^2} = \frac{C_0}{\sqrt{2}} \left(\sqrt{\lambda} x - \sqrt{\lambda} x \right) e^{-\frac{1}{2} \lambda x^2} = 0 \end{aligned} \quad (9.30)$$

Ezt akartuk belátni.

3. A $H_n(y)$ Hermite-polinomok differenciálegyenlete

$$\frac{d^2 H_n(y)}{dy^2} - 2y \frac{dH_n(y)}{dy} + 2nH_n(y) = 0, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (9.31)$$

Lássa be, hogy az Hermite-polinomok kinyerhetők az

$$\mathcal{F}(y, s) = e^{y^2 - (s-y)^2} = e^{-s^2 + 2sy} \quad (9.32)$$

generáló függvény s változó szerinti Taylor-sorából, mint a

$$\left. \frac{\partial^n \mathcal{F}(y, s)}{\partial s^n} \right|_{s=0} = H_n(y) \quad (9.33)$$

sorfejtési együtthatók.

Megoldás:

Azt szeretnénk belátni, hogy az

$$\mathcal{F}(y, s) = e^{-s^2 + 2sy} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{F_n(y)}{n!} s^n. \quad (9.34)$$

Taylor-sor $F_n(y)$ együtthatói azonosak a $H_n(y)$ Hermite-polinomokkal. Ehhez azt kell belátni, hogy az $F_n(y)$ együtthatófüggvények eleget tesznek a (9.31) differenciálegyenletnek. Képezzük a $\mathcal{F}(y, s)$ generáló függvény explicit alakjának és Taylor-sorfejtett alakjának y és s szerinti parciális deriváltjait, majd a kétféle alakban megkapott parciális deriváltakban s azonos hatványainak összehasonlításával olvassunk ki az $F_n(y)$ függvényekre vonatkozó azonosságokat. A parciális deriváltak:

$$\partial_y \mathcal{F}(y, s) = 2s \mathcal{F}(y, s) = 2 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{F_n(y)}{n!} s^{n+1} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{dF_n(y)}{dy} \frac{s^n}{n!}, \quad (9.35)$$

$$\partial_s \mathcal{F}(y, s) = (-2s + 2y) \mathcal{F}(y, s) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{F_n(y)}{n!} (-2s^{n+1} + 2ys^n) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{F_n(y)}{(n-1)!} s^{n-1}, \quad (9.36)$$

ahol $n \geq 1$. Innen rendre az alábbi azonosságokat olvashatjuk ki:

$$\begin{aligned} 2 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{F_n(y)}{n!} s^{n+1} &= 2 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{nF_{n-1}(y)}{n!} s^n = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{dF_n(y)}{dy} \frac{s^n}{n!}, \\ \Rightarrow 2nF_{n-1}(y) &= \frac{dF_n(y)}{dy}, \end{aligned} \quad (9.37)$$

$$\begin{aligned} -2 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{nF_{n-1}(y)}{n!} s^n + 2y \sum_{n=0}^{\infty} \frac{F_n(y)}{n!} s^n &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{F_{n+1}(y)}{n!} s^n \\ \Rightarrow 2yF_n(y) - 2nF_{n-1}(y) &= F_{n+1}(y), \end{aligned} \quad (9.38)$$

ha $n \geq 1$. Az $n = 0$ esetén $F_n(y) \equiv 1$ adódik a generáló függvényből. A (9.38) segítségével a (9.37) azonosságot

$$\frac{dF_n(y)}{dy} = 2nF_{n-1}(y) = 2yF_n(y) - F_{n+1}(y) \quad (9.39)$$

alakra hozhatjuk. Deriváljuk y szerint a (9.39) azonosság mindkét oldalát, akkor azt kapjuk, hogy

$$\begin{aligned}\frac{d^2 F_n(y)}{dy^2} &= 2F_n(y) + 2y \frac{dF_n(y)}{dy} - \frac{dF_{n+1}(y)}{dy} = 2F_n(y) + 2y \frac{dF_n(y)}{dy} - 2(n+1)F_n(y) \\ &= 2y \frac{dF_n(y)}{dy} - 2nF_n(y),\end{aligned}\tag{9.40}$$

ahol az utolsó előtti egyenlőség felírásakor újra felhasználtuk a (9.37) azonosságot. Végül (9.40)-ből rendezéssel adódik, hogy $F_n(y)$ az alábbi differenciálegyenletet kell kielégítenie:

$$\frac{d^2 F_n(y)}{dy^2} - 2y \frac{dF_n(y)}{dy} + 2nF_n(y) = 0.\tag{9.41}$$

Ez nem más, mint a $H_n(y)$ Hermite-polinomok differenciálegyenlete $n \geq 1$ esetén². Az $n = 0$ esetben $F_0(y) = 1 = H_0(y)$ triviálisan megoldja a differenciálegyenletet.

4. Mutassa meg a (9.32) generáló függvény segítségével, hogy az Hermite-polinomok a

$$H_n(y) = (-1)^n e^{y^2} \frac{\partial^n}{\partial y^n} e^{-y^2}\tag{9.42}$$

azonosságnak tesznek eleget. Induljon ki a generáló függvény

$$\mathcal{F}(y, s) = e^{y^2} e^{-(s-y)^2}\tag{9.43}$$

alakjából, és használja fel, hogy tetszőleges $f(u)$ analitikus függvényből képezett $\bar{f}(y, s) \equiv f(s-y)$ függvény parciális deriváltjaira fennáll a

$$\frac{\partial \bar{f}(y, s)}{\partial s} = -\frac{\partial \bar{f}(y, s)}{\partial y}\tag{9.44}$$

azonosság.

Megoldás:

A (9.44) azonosság ismételt alkalmazásával kapjuk, hogy

$$\frac{\partial^n \bar{f}(y, s)}{\partial s^n} = (-1)^n \frac{\partial^n \bar{f}(y, s)}{\partial y^n}.\tag{9.45}$$

Legyen most $\bar{f}(y, s) = e^{-(s-y)^2}$, akkor azt találjuk, hogy a generáló függvény Taylor-sorának együtthatóiként előállított Hermite-polinomok

$$\begin{aligned}H_n(y) &= \left. \frac{\partial^n \mathcal{F}(y, s)}{\partial s^n} \right|_{s=0} = e^{y^2} \left. \frac{\partial^n}{\partial s^n} e^{-(s-y)^2} \right|_{s=0} = e^{y^2} (-1)^n \left. \frac{\partial^n}{\partial y^n} e^{-(s-y)^2} \right|_{s=0} \\ &= (-1)^n e^{y^2} \frac{\partial^n}{\partial y^n} e^{-y^2}.\end{aligned}\tag{9.46}$$

Ezt akartuk belátni.

²Adott n esetén a másodrendű lineáris differenciálegyenlet 2 független gyöke közül az $|y| \rightarrow \infty$ határesetben a polinomiális korlátosság határfeltételét kielégítő megoldás szolgáltatja a $H_n(y)$ Hermite-polinomot.

5. A (9.42) azonosság segítségével határozza meg $n = 0, 1, 2, 3, 4$ esetén az Hermite-polinomok explicit alakját! Felhasználva, hogy a lineáris harmonikus oszcillátor n -edik gerjesztett állapotának hullámfüggvénye

$$\psi_n(x) = \mathcal{N}_n e^{-\frac{1}{2}\lambda x^2} H_n(\sqrt{\lambda}x), \quad (9.47)$$

határozza meg az alapállapot és az első 4 gerjesztett állapot paritását!

Megoldás:

Az alábbi deriváltakra van szükségünk:

$$\frac{\partial}{\partial y} e^{-y^2} = -2y e^{-y^2}, \quad (9.48)$$

$$\frac{\partial^2}{\partial y^2} e^{-y^2} = \left[-2 - 2y(-2y) \right] e^{-y^2} = (-2 + 4y^2) e^{-y^2}, \quad (9.49)$$

$$\frac{\partial^3}{\partial y^3} e^{-y^2} = \left[8y + (-2 + 4y^2)(-2y) \right] e^{-y^2} = (12y - 8y^3) e^{-y^2}, \quad (9.50)$$

$$\frac{\partial^4}{\partial y^4} e^{-y^2} = \left[12 - 24y^2 + (12y - 8y^3)(-2y) \right] e^{-y^2} = (12 - 48y^2 + 16y^4) e^{-y^2}. \quad (9.51)$$

A keresett Hermite-polinomok:

$$H_0(y) = 1, \quad (9.52)$$

$$H_1(y) = 2y, \quad (9.53)$$

$$H_2(y) = -2 + 4y^2, \quad (9.54)$$

$$H_3(y) = -12y + 8y^3, \quad (9.55)$$

$$H_4(y) = 12 - 48y^2 + 16y^4. \quad (9.56)$$

Nyilvánvalóan a páros (páratlan) n indexű Hermite-polinomok pozitív (negatív) paritásúak. Mivel a harmonikus oszcillátor n -edik gerjesztett állapotának hullámfüggvénye a $H_n(y)$ Hermite-polinom és az $e^{-\frac{1}{2}y^2}$ páros függvény szorzata, azért az n -edik gerjesztett állapot paritása megegyezik $H_n(y)$ paritásával.

6. Határozza meg a (9.47) hullámfüggvény normálási együtthatóját, ha megköveteljük, hogy $\|\psi_n\|^2 = 1$ legyen. Használja fel, hogy az n -edrendű Hermite-polinom vezető rendű tagja $2^n y^n$.

Megoldás:

Térjünk át az $y = \sqrt{\lambda}x$ változóra, akkor a normálási feltétel:

$$1 = \frac{|\mathcal{N}_n|^2}{\sqrt{\lambda}} \int_{-\infty}^{\infty} dy e^{-y^2} [H_n(y)]^2. \quad (9.57)$$

Az integrandusban az egyik $H_n(y)$ tényezőt írjuk át a (9.42) alakba és integráljunk parciálisan:

$$\begin{aligned} 1 &= \frac{|\mathcal{N}_n|^2}{\sqrt{\lambda}} \int_{-\infty}^{\infty} dy e^{-y^2} H_n(y) (-1)^n e^{y^2} \frac{\partial^n}{\partial y^n} e^{-y^2} = \frac{|\mathcal{N}_n|^2}{\sqrt{\lambda}} (-1)^n \int_{-\infty}^{\infty} dy H_n(y) \frac{\partial^n}{\partial y^n} e^{-y^2} \\ &= \frac{|\mathcal{N}_n|^2}{\sqrt{\lambda}} (-1)^n \left\{ \left[H_n(y) \frac{\partial^{n-1}}{\partial y^{n-1}} e^{-y^2} \right]_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} dy \frac{dH_n(y)}{dy} \frac{\partial^{n-1}}{\partial y^{n-1}} e^{-y^2} \right\}, \end{aligned} \quad (9.58)$$

ahol a jobb oldal első tagja eltűnik, mert a $\text{polinom} \times e^{-y^2}$ alakú kifejezések határértéke $|y| \rightarrow \infty$ esetén zérus:

$$1 = -\frac{|\mathcal{N}_n|^2}{\sqrt{\lambda}} (-1)^n \int_{-\infty}^{\infty} dy \frac{dH_n(y)}{dy} \frac{\partial^{n-1}}{\partial y^{n-1}} e^{-y^2}. \quad (9.59)$$

Ismételjük most a parciális integrálást még $(n-1)$ -szer:

$$1 = \frac{|\mathcal{N}_n|^2}{\sqrt{\lambda}} \int_{-\infty}^{\infty} dy \frac{d^n H_n(y)}{dy^n} e^{-y^2}. \quad (9.60)$$

Felhasználva, hogy $H_n(y) = 2^n y^n + \mathcal{O}(y^{n-1})$, azt találjuk, hogy

$$\frac{d^n H_n(y)}{dy^n} = 2^n n!. \quad (9.61)$$

A normálási feltétel így

$$1 = \frac{|\mathcal{N}_n|^2}{\sqrt{\lambda}} \int_{-\infty}^{\infty} dy 2^n n! e^{-y^2} = |\mathcal{N}_n|^2 2^n n! \sqrt{\frac{\pi}{\lambda}} \quad (9.62)$$

alakot ölt. A komplex fázisfaktort 1-nek választva azt kapjuk tehát, hogy

$$\mathcal{N}_n = \sqrt{\frac{1}{2^n n!} \sqrt{\frac{\lambda}{\pi}}}. \quad (9.63)$$

10. gyakorlat

$(n\ell m)$	$R_{n\ell}(r)$	$Y_{\ell m}(\theta, \varphi)$	E_n (eV)
(100)	$2\gamma^{3/2} \cdot e^{-\gamma r}$	$\frac{1}{\sqrt{4\pi}}$	-13,6
(200)	$2\gamma^{3/2}(1 - \gamma r) \cdot e^{-\gamma r}$	$\frac{1}{\sqrt{4\pi}}$	-3,4
(210)	$\frac{2}{\sqrt{3}}\gamma^{5/2}r \cdot e^{-\gamma r}$	$\sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta$	
(21 ± 1)	$\frac{2}{\sqrt{3}}\gamma^{5/2}r \cdot e^{-\gamma r}$	$\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{\pm i\varphi}$	
(300)	$\frac{3}{2}\gamma^{3/2}(3 - 6\gamma r + 2\gamma^2 r^2) \cdot e^{-\gamma r}$	$\frac{1}{\sqrt{4\pi}}$	-1,51
(310)	$\frac{\sqrt{8}}{3}\gamma^{5/2}(2 - \gamma r) \cdot e^{-\gamma r}$	$\sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta$	
(31 ± 1)	$\frac{\sqrt{8}}{3}\gamma^{5/2}(2 - \gamma r) \cdot e^{-\gamma r}$	$\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{\pm i\varphi}$	
(320)	$\sqrt{\frac{8}{45}}\gamma^{7/2}r^2 \cdot e^{-\gamma r}$	$\sqrt{\frac{5}{4\pi}} \left(\frac{3}{2} \cos^2 \theta - \frac{1}{2} \right)$	
(32 ± 1)	$\sqrt{\frac{8}{45}}\gamma^{7/2}r^2 \cdot e^{-\gamma r}$	$\sqrt{\frac{5}{24\pi}} 3 \sin \theta \cos \theta e^{\pm i\varphi}$	
(32 ± 2)	$\sqrt{\frac{8}{45}}\gamma^{7/2}r^2 \cdot e^{-\gamma r}$	$\sqrt{\frac{5}{96\pi}} 3 \sin^2 \theta e^{\pm 2i\varphi}$	

Táblázat: A hidrogénatom alapállapotának és néhány alacsonyan gerjesztett állapotának normált hullámfüggvénye, $\psi_{n\ell m}(r, \theta, \varphi) = R_{n\ell}(r)Y_{\ell m}(\theta, \varphi)$ és energiája, $E_n = -E_0/n^2$, ahol $E_0 \approx 13,6$ eV az alapállapot energiája és $\gamma = \frac{1}{nr_B}$, ahol $r_B = 5,3 \cdot 10^{-9}$ m a Bohr-sugár.

1. Legyen a 2-részecskés rendszer Hamilton-operátora

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_1} \vec{\nabla}_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m_2} \vec{\nabla}_2^2 + U(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|), \quad (10.1)$$

ahol $\vec{r}_1 = (\{x_{1i}\})$ és $\vec{r}_2 = (\{x_{2i}\})$ rendre az m_1 és m_2 tömegű részecske helyzetvektora és

$$\vec{\nabla}_a = \left(\frac{\partial}{\partial x_{a1}}, \frac{\partial}{\partial x_{a2}}, \frac{\partial}{\partial x_{a3}} \right). \quad (10.2)$$

Vezesse be az $\vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2$ relatív helyzetvektort és a tömegközéppont (TKP) $\vec{R}$ helyzetvektorát, és mutassa meg, hogy az $U(r)$ centrális potenciál esetén a kvantummechanikai kéttest-feladat egytest-feladatra egyszerűsödik!

Megoldás:

A relatív helyzetvektor és a TKP helyzetvektorának definíciója:

$$\vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2, \quad \vec{R} = \frac{m_1 \vec{r}_1 + m_2 \vec{r}_2}{m_1 + m_2}. \quad (10.3)$$

Tekintsük a tetszőleges $f(\vec{R}, \vec{r}) \equiv F(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ függvényt, amelynek közvetett deriválásával kapjuk, hogy

$$\vec{\nabla}_1 F = \vec{\nabla}_{\vec{R}} f \cdot \frac{m_1}{m_1 + m_2} + \vec{\nabla}_{\vec{r}} f, \quad \vec{\nabla}_2 F = \vec{\nabla}_{\vec{R}} f \cdot \frac{m_2}{m_1 + m_2} - \vec{\nabla}_{\vec{r}} f. \quad (10.4)$$

Innen leolvashatjuk a

$$\vec{\nabla}_1 \leftrightarrow \frac{m_1}{m_1 + m_2} \vec{\nabla}_{\vec{R}} + \vec{\nabla}_{\vec{r}}, \quad \vec{\nabla}_2 \leftrightarrow \frac{m_2}{m_1 + m_2} \vec{\nabla}_{\vec{R}} - \vec{\nabla}_{\vec{r}} \quad (10.5)$$

megfeleltetést. Ezek segítségével a kinetikus energia operátora:

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m_1} \vec{\nabla}_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m_2} \vec{\nabla}_2^2 &= -\frac{\hbar^2}{2m_1} \left[\frac{m_1}{m_1 + m_2} \vec{\nabla}_{\vec{R}} + \vec{\nabla}_{\vec{r}} \right]^2 - \frac{\hbar^2}{2m_2} \left[\frac{m_2}{m_1 + m_2} \vec{\nabla}_{\vec{R}} - \vec{\nabla}_{\vec{r}} \right]^2 \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m_1} \left[\left(\frac{m_1}{m_1 + m_2} \right)^2 \vec{\nabla}_{\vec{R}}^2 + 2 \frac{m_1}{m_1 + m_2} \vec{\nabla}_{\vec{R}} \vec{\nabla}_{\vec{r}} + \vec{\nabla}_{\vec{r}}^2 \right] \\ &\quad - \frac{\hbar^2}{2m_2} \left[\left(\frac{m_2}{m_1 + m_2} \right)^2 \vec{\nabla}_{\vec{R}}^2 - 2 \frac{m_2}{m_1 + m_2} \vec{\nabla}_{\vec{R}} \vec{\nabla}_{\vec{r}} + \vec{\nabla}_{\vec{r}}^2 \right] \\ &= -\frac{\hbar^2}{2} \frac{m_1 + m_2}{(m_1 + m_2)^2} \Delta_{\vec{R}} - \frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2} \right) \Delta_{\vec{r}} \\ &= -\frac{\hbar^2}{2M} \Delta_{\vec{R}} - \frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta_{\vec{r}}, \end{aligned} \quad (10.6)$$

ahol $M = m_1 + m_2$ a 2-részecskés rendszer teljes tömege, $\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$ pedig az úgynevezett redukált tömeg. A rendszer Hamilton-operátora tehát a TKP kinetikus energiája $\hat{T}^{(TKP)} = -\frac{\hbar^2}{2M} \Delta_{\vec{R}}$ operátorának és a

$$\hat{H}^{(1)} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta_{\vec{r}} + U(r) \quad (10.7)$$

egy-részecskés Hamilton-operátornak az összege: $\hat{H} = \hat{T}^{(TKP)} + \hat{H}^{(1)}$. Az időtől független Schrödinger-egyenlet

$$\hat{H} \Psi(\vec{R}, \vec{r}) = E^{(tot)} \Psi(\vec{R}, \vec{r}) \quad (10.8)$$

megoldásai tehát szeparálhatók: $\Psi(\vec{R}, \vec{r}) = \phi(\vec{R}) \psi(\vec{r})$, ahol $\phi(\vec{R})$ a TKP szabad mozgását leíró hullámfüggvény, amelyre

$$\hat{T}^{(TKP)} \phi(\vec{R}) = E^{(TKP)} \phi(\vec{R}), \quad (10.9)$$

azaz

$$-\frac{\hbar^2}{2M} \Delta_{\vec{R}} \phi(\vec{R}) = E^{(TKP)} \phi(\vec{R}), \quad (10.10)$$

és amelynek megoldásai

$$\phi(\vec{R}) \propto \exp\left(\frac{i}{\hbar} \vec{P} \cdot \vec{R}\right) \quad (10.11)$$

alakú de Broglie-hullámok, amelyek az

$$E^{(TKP)} = \frac{\vec{P}^2}{2M} \quad (10.12)$$

energia-sajátértékhez tartoznak. A relatív mozgás $\psi_E(\vec{r})$ hullámfüggvényei a

$$\hat{H}^{(1)}\psi_E(\vec{r}) = E\psi_E(\vec{r}), \quad (10.13)$$

azaz

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta_{\vec{r}}\psi_E(\vec{r}) = E\psi_E(\vec{r}) \quad (10.14)$$

sajátértékegyenlet megoldásai, ahol az E sajátértékek spektruma általában diszkrét és folytonos tartományt tartalmazhat. Az utóbbi sajátérték-feladat egy egytest-feladat. A rendszer teljes energiája

$$E^{(tot)} = E^{(TKP)} + E. \quad (10.15)$$

2. A hidrogénatomban mozgó elektron Hamilton-operátora

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\hbar^2 \ell^2}{2mr^2} - \alpha \frac{e^2}{r}, \quad (10.16)$$

ahol m jó közelítéssel az elektron nyugalmi tömege.

- (a) Milyen jó kvantumszámokkal jellemezhetők a stacionárius állapotok és miért?
- (b) Vezesse be a Bohr-sugarat,

$$r_B = \frac{\hbar^2}{m\alpha e^2} \approx 5,3 \cdot 10^{-9} \text{ m} \quad (10.17)$$

és az alapállapot

$$-E_0 = -\frac{\mu\alpha^2 e^4}{2\hbar^2} \approx -13,6 \text{ eV} \quad (10.18)$$

energiáját. Mutassa meg, hogy az

$$E' = \frac{E}{2E_0}, \quad r' = \frac{r}{r_B}, \quad R'_{E',\ell}(r') = \frac{R_{E,\ell}(r)}{r_B^2} \quad (10.19)$$

átskálázás után az $R'_{E',\ell}(r')$ radiális hullámfüggvény az alábbi radiális Schrödinger-egyenletnek tesz eleget:

$$\frac{d^2 R'_{E',\ell}(r')}{dr'^2} + \frac{2}{r'} \frac{dR'_{E',\ell}(r')}{dr'} + \frac{\ell(\ell+1)}{r'^2} R'_{E',\ell}(r') + 2 \left(E' + \frac{1}{r'} \right) R'_{E',\ell}(r') = 0. \quad (10.20)$$

- (c) Mutassa meg, hogy a kötött állapotok radiális hullámfüggvénye a potenciál centrumától távol exponenciálisan lecseng, és hogy minél nagyobb az állapot gerjesztési energiája, annál „távolabbra nyúlik ki” a hullámfüggvény.

Megoldás:

- (a) A $\hat{H}$ Hamilton-operátor felcserélhető az $\hat{\ell}^2$, az $\hat{\ell}_z$ és az $\vec{s}_z$ operátorokkal:

$$[\hat{H}, \hat{\ell}^2] = 0, \quad [\hat{H}, \hat{\ell}_z] = 0, \quad [\hat{H}, \hat{s}_z] = 0. \quad (10.21)$$

Ebből következik, hogy ezeknek a mennyiségeknek van közös sajátfüggvény-rendszerük, ψ_{E,ℓ,m,m_s} :

$$\hat{H}\psi_{E,\ell,m,m_s} = E\psi_{E,\ell,m,m_s}, \quad (10.22)$$

$$\hat{\ell}^2\psi_{E,\ell,m,m_s} = \hbar^2\ell(\ell+1)\psi_{E,\ell,m,m_s} \quad (10.23)$$

$$\hat{\ell}_z\psi_{E,\ell,m,m_s} = \hbar m\psi_{E,\ell,m,m_s}, \quad (10.24)$$

$$\hat{s}_z\psi_{E,\ell,m,m_s} = \frac{1}{2}\hbar\psi_{E,\ell,m,m_s}. \quad (10.25)$$

A jó kvantumszámok tehát az E energia, az ℓ mellékkvantumszám, az $m = -\ell, \ell+1, \dots, \ell-1, \ell$ mágneses kvantumszám és az $m_s = -\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}$ spinvetület. A kötött állapotokhoz $E < 0$ tartozik (mert az $U = -\alpha e^2/r < 0$ potenciális energia $r \rightarrow \infty$ esetén nullához tart); ezek az állapotok diszkrétnek,

$$E_n = -\frac{E_0}{n^2} \quad (10.26)$$

és az $n = 1, 2, \dots$ főkvantumszámmal jellemezhetők. A szórási állapotokban $E \geq 0$ és folytonosan változhat, értéke az elektron kinetikus energiája a potenciál centrumától végtelen távol.

- (b) Keressük az időtől független Schrödinger-egyenlet megoldását szeparált alakban:

$$\psi_{E,\ell,m}(r, \theta, \varphi) = R_{E,\ell}(r)Y_{\ell m}(\theta, \varphi), \quad (10.27)$$

ahol $Y_{\ell m}(\theta, \varphi)$ a gömbfelületi függvények:

$$\hat{\ell}^2 Y_{\ell m}(\theta, \varphi) = \hbar^2\ell(\ell+1)Y_{\ell m}(\theta, \varphi), \quad (10.28)$$

$$\hat{\ell}_z Y_{\ell m}(\theta, \varphi) = \hbar m Y_{\ell m}(\theta, \varphi). \quad (10.29)$$

Ekkor a

$$\hat{H}\psi_{E,\ell,m} = E\psi_{E,\ell,m} \quad (10.30)$$

Schrödinger-egyenletből az $R_{E,\ell}(r)$ radiális hullámfüggvényre az alábbi differenciálegyenletet kapjuk:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\hbar^2\ell(\ell+1)}{2mr^2} - \alpha \frac{e^2}{r} \right] R_{E,\ell}(r) = E R_{E,\ell}(r). \quad (10.31)$$

Helyettesítsünk $r = r_B r'$ -t a Hamilton-operátor egyes tagjaiba:

$$\Delta_r = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) = \frac{1}{r_B^2} \frac{1}{r_B} r_B^2 \frac{1}{r_B} r_B \Delta_{r'} = \frac{1}{r_B^2} \Delta_{r'}, \quad (10.32)$$

$$\frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2mr^2} = \frac{1}{r_B^2} \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2mr'^2}, \quad (10.33)$$

$$-\alpha \frac{e^2}{r} = -\alpha \frac{e^2}{r' r_B} = -\frac{m\alpha^2 e^4}{\hbar^2 r'} = -\frac{2E_0}{r'}, \quad (10.34)$$

továbbá vegyük figyelembe, hogy

$$\frac{1}{r_B^2} = \frac{m^2 \alpha^2 e^4}{\hbar^4} = 2E_0 \frac{m^2}{\hbar} \quad (10.35)$$

és

$$R = r_B^2 R' = \frac{\hbar^2}{m 2E_0} R'. \quad (10.36)$$

Ekkor a radiális Schrödinger-egyenlet

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{m}{\hbar^2} 2E_0 \Delta_{r'} + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{m}{\hbar^2} 2E_0 \frac{\ell(\ell+1)}{r'^2} - \frac{2E_0}{r'} \right] \frac{\hbar^2}{m 2E_0} R' = 2E_0 E' \frac{\hbar^2}{m 2E_0} R', \quad (10.37)$$

$$\left[-\Delta_{r'} + \frac{\ell(\ell+1)}{r'^2} - \frac{2}{r'} \right] R' = 2E' R', \quad (10.38)$$

$$\left[\Delta_{r'} - \frac{\ell(\ell+1)}{r'^2} + 2 \left(E' + \frac{1}{r'} \right) \right] R' = 0. \quad (10.39)$$

Írjuk ki részletesen a $\Delta_{r'}$ operátort:

$$\Delta_{r'} = \frac{1}{r'^2} \frac{\partial}{\partial r'} \left(r'^2 \frac{\partial}{\partial r'} \right) = \frac{2}{r'} \frac{\partial}{\partial r'} + \frac{\partial^2}{\partial r'^2}. \quad (10.40)$$

Ezt felhasználva megkapjuk a radiális Schrödinger-egyenlet (10.20) alakját, ahol R' -t az E' és ℓ kvantumszámok indexelik.

- (c) A kötött állapotok $E' < 0$ energia-sajátértékeihez tartoznak. Ha a radiális Schrödinger-egyenlet $r \rightarrow \infty$ határesetben mutatott aszimptotikus megoldására vagyunk kíváncsiak, akkor az $1/r'$ -vel és az $1/r'^2$ -tel arányos tagokat elhagyhatjuk, mivel R' és deriváltja korlátos kell maradjon az aszimptotikus tartományban a négyzetes integrálhatóság miatt. A potenciál centrumától aszimptotikusan távoli tartományban a radiális hullámfüggvény ezért a

$$\frac{d^2 R'}{dr'^2} \approx -2E' R' \quad (10.41)$$

differenciálegyenletnek tesz eleget. Ennek független megoldásait $R' \propto e^{\beta r'}$ ($\beta \in \mathbb{R}$) alakban keresve azt találjuk, hogy $\beta = \pm \sqrt{-2E'}$ lehet, azonban csak a $\beta < 0$ gyök szolgálat négyzetesen integrálható megoldást:

$$R' \propto \exp\left(-\sqrt{-2E'} r'\right) \equiv \exp\left(-\frac{r'}{r_c}\right). \quad (10.42)$$

Látjuk, hogy a hullámfüggvény a centrumtól távol exponenciálisan lecseng. A lecsengést az

$$r_c = \frac{1}{\sqrt{-2E'}} \quad (10.43)$$

karakterisztikus távolság jellemzi. Minél nagyobb a gerjesztési energia, annál kisebb az állapot energiájának abszolút értéke, $-E'$, azaz annál nagyobb az r_c karakterisztikus távolság, annál messzebbre elnyúlik a hullámfüggvény „farka” a centrumtól.

3. Határozza meg a hidrogénatomban az s , p és d elektronállapotok paritását! Használja fel a gömbfelületi függvények

$$Y_{\ell m}(\theta, \varphi) = (-1)^{m+|m|} i^\ell \left[\frac{2\ell+1}{4\pi} \frac{(\ell-|m|)!}{(\ell+|m|)!} \right]^{1/2} P_\ell^{|m|}(\cos \theta) e^{im\varphi} \quad (10.44)$$

alakját, ahol a

$$P_\ell^m(\cos \theta) = \sin^m \theta \left(\frac{d}{d \cos \theta} \right)^m P_\ell(\cos \theta) \quad (10.45)$$

asszociált Legendre-polinomok a

$$P_\ell(\cos \theta) = \frac{1}{2^\ell \ell!} \left(\frac{d}{d \cos \theta} \right)^\ell (\cos^2 \theta - 1)^\ell \quad (10.46)$$

Legendre-polinomok általánosításai.

Megoldás:

A hidrogénatom elektronjának hullámfüggvénye stacionárius állapotban $\psi_{n\ell m}(r, \theta, \varphi) = R_{n\ell}(r)Y_{\ell m}(\theta, \varphi)$ alakú. Az $\vec{r} \rightarrow -\vec{r}$ tértükrözés során $(\theta, \varphi) \rightarrow (\pi - \theta, \varphi + \pi)$ módon változnak a gömbi szögek. A paritást az határozza tehát meg, hogy hogyan transzformálódik az $Y_{\ell m}(\theta, \varphi)$ gömbfelületi függvény, amelyből tértükrözés után $Y_{\ell m}(\pi - \theta, \varphi + \pi)$ lesz. Mivel

$$\cos(\pi - \theta) = -\cos \theta, \quad \sin(\pi - \theta) = \sin \theta \quad (10.47)$$

azért tértükrözés során $P_\ell(\cos \theta)$ szorozódik $(-1)^\ell$ -nel, $P_\ell^{|m|}(\cos \theta)$ szorozódik $(-1)^{\ell-m}$ -nel, $e^{im\varphi}$ -ből $e^{im(\varphi+\pi)} = (-1)^m e^{im\varphi}$ lesz, úgyhogy végül $Y_{\ell m}(\theta, \varphi)$ szorozódik $(-1)^{\ell-m}(-1)^m = (-1)^\ell$ -nel, azaz

$$Y_{\ell m}(\pi - \theta, \pi + \varphi) = (-1)^\ell Y_{\ell m}(\theta, \varphi). \quad (10.48)$$

Következésképpen a páros (páratlan) ℓ -lrel jellemzett állapotok paritása pozitív (negatív). Az s és d állapotok tehát pozitív paritásúak, a p állapotok pedig negatív paritásúak.

4. A hidrogénatomban az elektron kötött állapotát a

$$\psi_{n\ell m}(r, \theta, \varphi) = R_{n\ell}(r)Y_{\ell m}(\theta, \varphi) \quad (10.49)$$

hullámfüggvény írja le, ahol $n = 1, 2, \dots$ a főkvantumszám, $\ell = 0, 1, \dots, n - 1$ a mellékvantumszám és $m = -\ell, \ell + 1, \dots, \ell - 1, \ell$ a mágneses kvantumszám. (Az elektron spinjét nem vettük figyelembe.) Határozza meg annak a $w_{n\ell m}(r, \theta, \varphi)dV$ valószínűségét, hogy az elektront a helymérés az $\vec{r} = (r, \theta, \varphi)$ hely körüli dV térfogatelemben találja, és annak a $\mathcal{P}_{n\ell}(r)r^2dr$ valószínűségét, hogy az elektront az r és $r + dr$ sugarú gömbfelületek közti tartományban találjuk valahol. Jellemezze az alapállapot és a legalacsonyabban gerjesztett állapot esetében a $\mathcal{P}_{n\ell}(r)r^2$ valószínűségi sűrűséget; használja a táblázatot!

Megoldás:

A térfogatelem gömbi polárkoordinátás alakja: $dV = r^2 dr \sin \theta d\theta d\varphi$. Az

$$1 = \int_0^\infty dr \int_0^\pi d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi r^2 |\psi_{n\ell m}(r, \theta, \varphi)|^2 \quad (10.50)$$

normálási feltételből következik, hogy

$$\begin{aligned} w_{n\ell m}(r, \theta, \varphi)dV &= |\psi_{n\ell m}(r, \theta, \varphi)|^2 r^2 dr \sin \theta d\theta d\varphi = |\psi_{n\ell m}(r, \theta, \varphi)|^2 r^2 dr d\Omega \\ &= |R_{n\ell}(r)|^2 |Y_{\ell m}(\theta, \varphi)|^2 r^2 dr d\Omega, \end{aligned} \quad (10.51)$$

ahol $d\Omega = \sin \theta d\theta d\varphi$ a 3-dimenziós elemi térszög. Ha a $w_{n\ell m}(r, \theta, \varphi)dV$ valószínűséget integráljuk a teljes térszögre, akkor megkapjuk annak a valószínűségét, hogy az elektront az r és az $r + dr$ sugarú koncentrikus gömbfelületek közt találjuk:

$$\begin{aligned} \mathcal{P}(r)r^2 dr &= \int_{4\pi} d\Omega |R_{n\ell}(r)|^2 |Y_{\ell m}(\theta, \varphi)|^2 r^2 dr = |R_{n\ell}(r)|^2 r^2 dr \int_{4\pi} d\Omega |Y_{\ell m}(\theta, \varphi)|^2 \\ &= |R_{n\ell}(r)|^2 r^2 dr, \end{aligned} \quad (10.52)$$

mert a gömbfelületi függvények ortonormáltak és így

$$\int_{4\pi} d\Omega |Y_{\ell m}(\theta, \varphi)|^2 = \int_0^\pi \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi |Y_{\ell m}(\theta, \varphi)|^2 = 1. \quad (10.53)$$

(Megjegyzés: azért mondjuk, hogy a teljes térszög 4π térszög, mert $\int_0^\pi \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi = 4\pi$.)

Az $1s$ állapotban:

$$\mathcal{P}_{1s}(r)r^2 = 4\gamma^3 r^2 e^{-2\gamma r}, \quad (10.54)$$

ahol $\gamma = 1/r_B$. Ennek zérushelye van $r = 0$ -ban és exponenciálisan nullához tart az $r \rightarrow \infty$ határesetben, továbbá egyetlen maximuma van az $r = r_B$ helyen:

$$0 = \frac{\partial}{\partial r} (r^2 e^{-2\gamma r}) = (2r - 2\gamma r^2) e^{-2\gamma r}, \quad r = 1/\gamma = r_B. \quad (10.55)$$

A $2s$ állapotban:

$$\mathcal{P}_{2s}(r)r^2 = 4\gamma^3 r^2 (1 - \gamma r)^2 e^{-2\gamma r}, \quad (10.56)$$

ahol $\gamma = 1/2r_B$. Ennek zérushelyei vannak $r = 0$ -ban és $r = 2r_B$ helyen, ahol egyúttal minimuma is van a sűrűségfüggvénynek, az $r \rightarrow \infty$ határesetben exponenciálisan tart nullához,

és maximuma van az $r = r_{\pm}$ helyeken,

$$\begin{aligned}
0 &= \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 (1 - \gamma r)^2 e^{-2\gamma r} \right) = \left(2r(1 - \gamma r)^2 - 2\gamma r^2(1 - \gamma r) - 2\gamma r^2(1 - \gamma r)^2 \right) e^{-2\gamma r} \\
&= 2r(1 - \gamma r) \left((1 - \gamma r) - \gamma r - \gamma r(1 - \gamma r) \right) e^{-2\gamma r} = 2r(1 - \gamma r)(1 - 3\gamma r + \gamma^2 r^2) e^{-2\gamma r} \\
\Rightarrow r_{\pm} &= \frac{3\gamma \pm \sqrt{9\gamma^2 - 4\gamma^2}}{2\gamma^2} = \frac{3 \pm \sqrt{5}}{2\gamma} \approx 0,38r_B \text{ és } 2,6r_B.
\end{aligned} \tag{10.58}$$

A maximumok értékei a középponttól távolodva csökkennek.

A $2p$ állapotokban:

$$\mathcal{P}_{2p}(r)r^2 = \frac{4}{3}\gamma^5 r^4 e^{-2\gamma r}, \tag{10.59}$$

ahol $\gamma = 1/2r_B$. Ennek zérushelye van $r = 0$ -ban, és zérushoz tart $r \rightarrow \infty$ -ben, továbbá egyetlen maximummal rendelkezik az $r = 4r_B$ helyen:

$$0 = \frac{\partial}{\partial r} \left(r^4 e^{-2\gamma r} \right) = \left(4r^3 - 2\gamma r^4 \right) e^{-2\gamma r} = 2r^3(2 - \gamma r) e^{-2\gamma r}, \tag{10.60}$$

$$\Rightarrow r = 2/\gamma = 4r_B. \tag{10.61}$$

5. A táblázat alapján igazolja, hogy például a $\psi_{100}(r, \theta, \varphi)$ hullámfüggvény valóban helyesen van normálva!

Megoldás:

A $\|\psi_{100}\|^2$ koordináta-reprezentációban részletesen kiírva:

$$\|\psi_{100}\|^2 = \int_0^\infty dr r^2 \int_0^\pi \sin \theta d\theta \int_0^\pi d\varphi 4\gamma^3 e^{-2\gamma r} \frac{1}{4\pi} = 4\gamma^3 \int_0^\infty dr r^2 e^{-2\gamma r}. \tag{10.62}$$

Az itt szereplő radiális integrált több lépésben kaphatjuk meg:

$$\int_0^\infty dr e^{-2\gamma r} = \left[\frac{e^{-2\gamma r}}{-2\gamma} \right]_0^\infty = \frac{1}{2\gamma}, \tag{10.63}$$

$$\int_0^\infty dr r e^{-2\gamma r} = -\frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial \gamma} \frac{1}{2\gamma} = \frac{1}{4\gamma^2}, \tag{10.64}$$

$$\int_0^\infty dr r^2 e^{-2\gamma r} = -\frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial \gamma} \frac{1}{4\gamma^2} = \frac{1}{4\gamma^3}. \tag{10.65}$$

Azt kapjuk tehát, hogy

$$\|\psi_{100}\|^2 = 4\gamma^3 \frac{1}{4\gamma^3} = 1, \tag{10.66}$$

vagyis a ψ_{100} hullámfüggvény helyesen van normálva.

6. A táblázat alapján határozza meg, hogy az $1s$ állapotban a hidrogénatom elektronjának mekkora a hely- és az impulzusbizonytalansága! Induljon ki abból, hogy stacionárius állapotban az elektronfelhő nem végez haladó mozgást, azaz $\vec{p} = 0$.

Megoldás:

Az $|100\rangle$ stacionárius állapotban a helybizonytalanság négyzete

$$(\Delta r)^2 = \langle 100 | \hat{r}^2 - \bar{r}^2 | 100 \rangle, \quad (10.67)$$

az impulzusbizonytalanság négyzete pedig

$$(\Delta p)^2 = \langle 100 | \hat{p}^2 - \bar{p}^2 | 100 \rangle = \langle 100 | \hat{p}^2 | 100 \rangle. \quad (10.68)$$

Határozzuk meg először, hogy átlagosan milyen távolságra van az elektron az atom magjától:

$$\bar{r} = \int_0^\infty dr r^3 4\gamma^3 e^{-2\gamma r}, \quad (10.69)$$

majd ezután a (10.67) egyenlőség jobb oldalát közvetlenül kiszámíthatjuk:

$$(\Delta r)^2 = \int_0^\infty dr r^4 4\gamma^3 e^{-2\gamma r} - \bar{r}^2. \quad (10.70)$$

A 10. gyakorlat 5. feladatában már elkezdttük a hasonló szerkezetű integrálok kiszámítását (ld. a (10.63)-(10.65) egyenlőségeket!) A (10.65) egyenlőség mindkét oldalát még kétszer deriválva γ szerint, kapjuk, hogy

$$\int_0^\infty dr r^3 e^{-2\gamma r} = -\frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial \gamma} \frac{1}{4\gamma^3} = \frac{3}{8\gamma^4}, \quad (10.71)$$

$$\int_0^\infty dr r^4 e^{-2\gamma r} = -\frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial \gamma} \frac{3}{8\gamma^4} = \frac{3}{4\gamma^5}. \quad (10.72)$$

Ezeket felhasználva, azt kapjuk, hogy

$$\bar{r} = 4\gamma^3 \frac{3}{8\gamma^4} = \frac{3}{2\gamma} = \frac{3}{2} r_B, \quad (10.73)$$

$$(\Delta r)^2 = 4\gamma^3 \frac{3}{4\gamma^5} - \bar{r}^2 = \frac{3}{\gamma^2} - \frac{9}{4\gamma^2} = \frac{3}{4} r_B^2. \quad (10.74)$$

A (10.68) szórásnégyzet meghatározását visszavezetjük az elektron $\hat{T} = \hat{p}^2/2m$ kinetikus energiája várható értékének a kiszámítására:

$$(\Delta p)^2 = \langle 100 | \hat{p}^2 | 100 \rangle = 2m \langle 100 | \hat{T} | 100 \rangle. \quad (10.75)$$

A kinetikus energia operátora

$$\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta = -\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\hat{\ell}^2}{2mr^2} \right]. \quad (10.76)$$

Az $|100\rangle$ állapotban $\ell = 0$, úgyhogy a második tag várható értékének kifejezésében

$$\langle 100 | \hat{\ell}^2 | 100 \rangle = \langle 100 | \hbar^2 \ell(\ell+1) | 100 \rangle = 0 \quad (10.77)$$

áll, vagyis csak az első tag ad a várható értékhez nem nulla járulékot:

$$\begin{aligned}
\langle 100|\hat{T}|100\rangle &= -\frac{\hbar^2}{2m} \int_0^\infty dr \, r^2 R_{10}(r) \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} R_{10}(r) \right) \\
&= -\frac{\hbar^2}{2m} \int_0^\infty dr R_{10}(r) \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} R_{10}(r) \right) \\
&= -\frac{\hbar^2}{2m} 4\gamma^3 \int_0^\infty dr e^{-\gamma r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial e^{-\gamma r}}{\partial r} \right) \\
&= \frac{\hbar^2}{2m} 4\gamma^4 \int_0^\infty dr e^{-\gamma r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 e^{-\gamma r} \right) \\
&= \frac{\hbar^2}{2m} 4\gamma^4 \int_0^\infty dr e^{-2\gamma r} (2r - \gamma r^2) \\
&= \frac{\hbar^2}{2m} 4\gamma^4 \left(2 \frac{1}{4\gamma^2} - \gamma \frac{1}{4\gamma^3} \right) \\
&= \frac{\hbar^2}{2m} \gamma^2,
\end{aligned} \tag{10.78}$$

ahol az utolsó előtti egyenlőség felírásakor felhasználtuk a (10.64) és a (10.65) integrálokat. Végül tehát az impulzusbizonytalanság négyzetére azt kapjuk, hogy

$$(\Delta p)^2 = 2m \langle 100|\hat{T}|100\rangle = \hbar^2 \gamma^2 = \frac{\hbar^2}{r_B^2}. \tag{10.79}$$

A Heisenberg-féle határozatlansági reláció a hidrogénatom alapállapotában (1s állapotában) tehát a

$$\Delta p \, \Delta r = \frac{\hbar}{r_B} \frac{\sqrt{3}}{2} r_B = \frac{\sqrt{3}}{2} \hbar \tag{10.80}$$

alakban teljesül. Ez magyarázza meg, hogy miért nem esik bele az elektron az atommagba, minél közelebb kerül ugyanis átlagosan az elektronfelhő az atommaghoz, annál nagyobb lesz az elektron impulzusának a szórásnégyzete, azaz kinetikus energiájának várható értéke, noha az elektronfelhő nem végez haladó mozgást (ellentétben a Bohr-modell feltevésével). Ez a tisztán kvantumfizikai természetű „nyüzsgésből” származó impulzusbizonytalanság az, ami a határozatlanság elve alapján távol tudja tartani az elektront az atommagtól a Coulomb-vonzás dacára.

Hivatkozások

- [1] Geszti T., *Kvantummechanika*, (Typotex, Budapest, 2007).
- [2] W. Greiner, *Theoretische Physik IV: Quantenmechanik I*, (Harri Deutsch, Frankfurt am Main, 1984).
- [3] F. Constantinescu, E. Magyari, *Kvantummechanika. Feladatok*, (Tankönyvkiadó, Budapest, 1972).