Feladat:

Egydimenziós térben lakó, m tömegű részecske a $[0, a]$ intervallumba van bezárva (az intervallumon belül a részecske potenciális energiája nulla, azon kívül végtelen).

a) Határozzuk meg a részecske energia-sajátállapotait és a hozzájuk tartozó energiaértékeket!
b) Mutassuk be a konkrét példán, hogy a különböző energiákhoz tartozó energia-sajátállapotok ortogonálisak egymásra!
c) Bizonyítsuk be, hogy ha a részecske valamelyik energia-sajátállapotban tartózkodik, akkor helyének várható értéke a doboz középpontja!
d) A részecske állapotfüggvénye egy adott pillanatban az alábbi:

$$\Psi(x) = \begin{cases} -A \cdot \left(x - \frac{a}{2}\right)^2 + B & \text{ha } 0 < x < a \\ 0 & \text{egyébként} \end{cases}$$

Határozzuk meg az A, B konstansokat úgy, hogy az állapotfüggvény folytonos és normált legyen! Egyértelmű-e mindkét konstans értéke?

e) Állítsuk elő a fenti állapotot az energia-sajátállapotok szuperpozíciójaként! Mekkora a valószínűsége, hogy a részecske energiáját megmérve az alapállapoti energiát kapjuk? Mekkora az energia várható értéke?

Megoldás:

a) Folytonos állapotfüggvényeket keresünk, amelyek a $[0, a]$ intervallumon kívül (és ezért az intervallum végpontjaiban is) nulla értéket vesznek fel. A $[0, a]$ intervallum belsejében a potenciális energia operátora nulla, így a részecske Hamilton-operátora:

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

A Hamilton-operátor φ sajátfüggvényei (az energia-sajátállapotok) és E sajátértékei (a lehetséges energiaértékek) az időfüggetlen Schrödinger-egyenlet megoldásával kaphatók meg:

$$\hat{H}\varphi = E \cdot \varphi$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{d^2\varphi}{dx^2} = E \cdot \varphi$$

A megoldásokat keressük $\varphi(x) = Acos(kx) + Bsin(kx)$ alakban! Ezt a Schrödinger-egyenletbe helyettesítve a következőre jutunk:

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m}[Acos(kx) + Bsin(kx)] = E \cdot [Acos(kx) + Bsin(kx)]$$

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m} = E$$

$$k = \pm \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

Az A, B konstansokra nem kaptunk megkötést. A k-ra kapott kifejezésből a $\pm$ jelet elhagyhatjuk. Ez nem csorbítja az általánosságot (nem szűkíti a kapott megoldások körét), ugyanis a $k \to -k$ előjel-változtatásnak ugyanaz az eredménye, mint ha B előjelét változtatnánk meg. Az általános megoldás tehát:

$$\varphi(x) = Acos\left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}x\right) + Bsin\left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}x\right)$$

A megoldást most illesztjük a $\varphi(0) = \varphi(a) = 0$ határfeltételekhez:

$$\begin{cases} A = 0 \\ A\cos\left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}a\right) + B\sin\left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}a\right) = 0 \end{cases}$$

Ebből az egyenletrendszerből meghatározhatók a lehetséges energiák:

$$\sin\left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}a\right) = 0$$

$$\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}a = n \cdot \pi \qquad (n \in \mathbb{Z})$$

$$E = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2} \cdot n^2$$

Mivel az energia kifejezésében n^2 szerepel, így az n szám lehetséges értékeit a nemnegatív egészekre korlátozhatjuk. Kizárható még az $n = 0$ eset is, ekkor ugyanis φ-re a konstans nulla függvény adódik, amely nem állapotfüggvény (és definíció szerint nem lehet sajátfüggvénye semmilyen operátornak).

A továbbiakban a lehetséges energiaértékeket és az energia-sajátfüggvényeket n értéke alapján indexszel fogjuk ellátni. Így beszélhetünk az n-edik energia-sajátállapotról, n-et pedig az energia-sajátállapothoz tartozó **kvantumszám**nak hívhatjuk. A φ_n energia-sajátfüggvény alakja:

$$\varphi_n(x) = B\sin\left(\frac{n \cdot \pi \cdot x}{a}\right)$$

A B együtthatóra a normálási feltétel a következő megkötést adja:

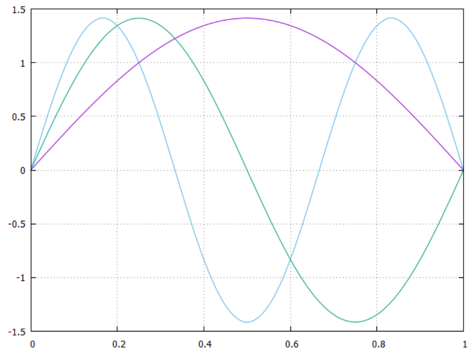
$$1 = \int_{-\infty}^{\infty} |\varphi_n(x)|^2 dx = |B|^2 \cdot \int_0^a \sin^2\left(\frac{n \cdot \pi \cdot x}{a}\right) dx = |B|^2 \cdot \int_0^a \frac{1}{2}\left[1 - \cos\left(\frac{2n \cdot \pi \cdot x}{a}\right)\right] dx = \frac{1}{2}a|B|^2$$

$$|B| = \sqrt{\frac{2}{a}}$$

A B együtthatónak tehát csak az abszolútértéke meghatározott. Ez nem meglepő, mert a rendszer sajátfüggvénye egy komplex fázisfaktor erejéig mindig önkényes. Az n-edik normált energia-sajátfüggvény és a hozzá tartozó energia-sajátérték tehát így írható (δ_n tetszőleges valós konstans):

$$\varphi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \cdot e^{i\delta_n} \cdot \sin\left(\frac{n \cdot \pi \cdot x}{a}\right) \qquad E_n = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2} \cdot n^2$$

Az első három energia-sajátfüggvényt $a = 1$ esetén az alábbi ábra szemléleti (lila az állapállapot, zöld az első gerjesztett állapot, világoskék a második gerjesztet állapot függvényének grafikonja; a fázisszöget mindegyik esetben nullának választottuk):



b) Az n-edik és az m-edik energia-sajátállapot skaláris szorzata:

$$\langle \varphi_n, \varphi_m \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_n^*(x)\varphi_m(x)dx = \int_0^a \sqrt{\tfrac{2}{a}} \cdot e^{-i\delta_n} \cdot sin\left(\frac{n \cdot \pi \cdot x}{a}\right) \sqrt{\tfrac{2}{a}} \cdot e^{i\delta_m} \cdot sin\left(\frac{m \cdot \pi \cdot x}{a}\right) dx$$

$$= \tfrac{2}{a} e^{i(\delta_m - \delta_n)} \int_0^a sin\left(\frac{n \cdot \pi \cdot x}{a}\right) \cdot sin\left(\frac{m \cdot \pi \cdot x}{a}\right) dx$$

A fenti kifejezésben szereplő integrál értéke két parciális integrálás elvégzésével határozható meg. Ha bevezetjük az $A = \frac{n \cdot \pi}{a}$, $B = \frac{m \cdot \pi}{a}$ jelöléseket, a következőket írhatjuk:

$$I = \int_0^a sin(A \cdot x) \cdot sin(B \cdot x)dx = \int_0^a \frac{d}{dx}\left[-\frac{1}{A}cos(A \cdot x)\right] \cdot sin(B \cdot x)dx$$

$$= \left[-\frac{1}{A}cos(A \cdot x) \cdot sin(B \cdot x)\right]_0^a - \int_0^a \left[-\frac{1}{A}cos(A \cdot x)\right] \cdot \frac{d}{dx}[sin(B \cdot x)]dx$$

$$= -\frac{1}{A}cos(A \cdot a) \cdot sin(B \cdot a) + \int_0^a \frac{1}{A}cos(A \cdot x) \cdot B \cdot cos(B \cdot x)dx =$$

$$= -\frac{1}{A}cos(A \cdot a) \cdot sin(B \cdot a) + \int_0^a \frac{B}{A} \cdot \frac{d}{dx}\left[\frac{1}{A}sin(A \cdot x)\right] \cdot cos(B \cdot x)dx$$

$$= -\frac{1}{A}cos(A \cdot a) \cdot sin(B \cdot a) + \left[\frac{B}{A^2} \cdot sin(A \cdot x) \cdot cos(B \cdot x)\right]_0^a$$

$$- \int_0^a \frac{B}{A^2} \cdot sin(A \cdot x) \cdot \frac{d}{dx}[cos(B \cdot x)]dx$$

$$= -\frac{1}{A}cos(A \cdot a) \cdot sin(B \cdot a) + \frac{B}{A^2} \cdot sin(A \cdot a) \cdot cos(B \cdot a)$$

$$+ \int_0^a \frac{B^2}{A^2} \cdot sin(A \cdot x) \cdot sin(B \cdot x)dx$$

$$= -\frac{1}{A}cos(A \cdot a) \cdot sin(B \cdot a) + \frac{B}{A^2} \cdot sin(A \cdot a) \cdot cos(B \cdot a) + \frac{B^2}{A^2} \cdot I$$

Az integrál I értékére egy algebrai egyenlet kaptunk, amelyből $A \neq B$ (tehát $n \neq m$) esetén I kifejezhető:

$$I = -\frac{1}{A}cos(A \cdot a) \cdot sin(B \cdot a) + \frac{B}{A^2} \cdot sin(A \cdot a) \cdot cos(B \cdot a) + \frac{B^2}{A^2} \cdot I$$

$$\left(1 - \frac{B^2}{A^2}\right) \cdot I = -\frac{1}{A}cos(A \cdot a) \cdot sin(B \cdot a) + \frac{B}{A^2} \cdot sin(A \cdot a) \cdot cos(B \cdot a)$$

$$I = \frac{-\frac{1}{A}cos(A \cdot a) \cdot sin(B \cdot a) + \frac{B}{A^2} \cdot sin(A \cdot a) \cdot cos(B \cdot a)}{1 - \frac{B^2}{A^2}}$$

$$I = \frac{-\frac{a}{n \cdot \pi}cos(n \cdot \pi) \cdot sin(m \cdot \pi) + \frac{a \cdot m}{n^2 \cdot \pi} \cdot sin(n \cdot \pi) \cdot cos(m \cdot \pi)}{1 - \frac{m^2}{n^2}}$$

Látható, hogy a számlálóban szereplő összeg mindkét tagja nulla, így $I = 0$. Ebből következik, hogy $\langle \varphi_n, \varphi_m \rangle = 0$.

c) Az n-edik energia-sajátállapotban tartózkodó részecske helyének várható értéke:

$$\bar{x} = \langle \varphi_n, \hat{x}\varphi_n \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_n^*(x) \cdot x \cdot \varphi_n(x) dx$$

$$= \int_0^a \sqrt{\tfrac{2}{a}} \cdot e^{-i\delta_n} \cdot sin\left(\frac{n \cdot \pi \cdot x}{a}\right) \cdot x \cdot \sqrt{\tfrac{2}{a}} \cdot e^{i\delta_n} \cdot sin\left(\frac{n \cdot \pi \cdot x}{a}\right) dx$$

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

$$- \tfrac{1}{a} \int_0^a x \cdot cos\left(\frac{2n \cdot \pi \cdot x}{a}\right) dx = \frac{1}{a} \cdot \left[\frac{x^2}{2}\right]_0^a - \frac{1}{a} \int_0^a x \cdot \frac{d}{dx}\left[\frac{a}{2n \cdot \pi} sin\left(\frac{2n \cdot \pi \cdot x}{a}\right)\right] dx$$

$$= \frac{a}{2} - \frac{1}{a}\left[x \cdot \frac{a}{2n \cdot \pi} sin\left(\frac{2n \cdot \pi \cdot x}{a}\right)\right]_0^a + \frac{1}{a} \int_0^a \frac{dx}{dx} \cdot \left[\frac{a}{2n \cdot \pi} sin\left(\frac{2n \cdot \pi \cdot x}{a}\right)\right] dx$$

$$= \frac{a}{2} + \frac{1}{2n \cdot \pi} \int_0^a sin\left(\frac{2n \cdot \pi \cdot x}{a}\right) dx = \frac{a}{2} + \frac{1}{2n \cdot \pi} \cdot \left[-\frac{a}{2n \cdot \pi} cos\left(\frac{2n \cdot \pi \cdot x}{a}\right)\right]_0^a = \frac{a}{2}$$

A részecske helykoordinátájának várható értéke tehát $\frac{a}{2}$, azaz a $[0, a]$ intervallum középpontja. Ez összhangban van a rendszer szimmetriájából adódó várakozással.

d) Az állapotfüggvény akkor lesz folytonos, ha teljesülnek az alábbiak:

$$\lim_{x \to 0^+} \Psi(x) = \lim_{x \to 0^+} \left[-A \cdot \left(x - \frac{a}{2}\right)^2 + B\right] = 0$$

$$\lim_{x \to a^-} \Psi(x) = \lim_{x \to a^-} \left[-A \cdot \left(x - \frac{a}{2}\right)^2 + B\right] = 0$$

Mindkét fenti kifejezés ugyanarra vezet:

$$B = A \cdot \frac{a^2}{4}$$

A két konstans értékére a normálási feltétel újabb megszorítást ad:

$$\sqrt{\langle \Psi, \Psi \rangle} = 1$$

$$\langle \Psi, \Psi \rangle = 1$$

$$\int_0^a \left[-A^* \cdot \left(x - \frac{a}{2}\right)^2 + A^* \cdot \frac{a^2}{4}\right] \cdot \left[-A \cdot \left(x - \frac{a}{2}\right)^2 + A \cdot \frac{a^2}{4}\right] dx = 1$$

$$\int_0^a A^* \cdot A \cdot (-x^2 + ax)^2 dx = 1$$

$$|A|^2 \cdot \int_0^a (x^4 - 2ax^3 + a^2x^2) dx = 1$$

$$|A|^2 \cdot \left[\frac{x^5}{5} - \frac{ax^4}{2} + \frac{a^2x^3}{3}\right]_0^a = 1$$

$$|A|^2 \cdot \left(\frac{a^5}{5} - \frac{a^5}{2} + \frac{a^5}{3}\right) = 1$$

$$|A|^2 \cdot \frac{a^5}{30} = 1$$

$$|A| = \frac{\sqrt{30}}{a^{5/2}}$$

Az A együttható komplex fázisa persze most is önkényesen választható, azaz A ilyen alakban adható meg:

$$A = \frac{\sqrt{30}}{a^{5/2}} \cdot e^{i\delta}$$

A B konstans értéke:

$$B = A \cdot \frac{a^2}{4} = \frac{\sqrt{30}}{a^{5/2}} \cdot e^{i\delta} \cdot \frac{a^2}{4} = \frac{1}{4} \cdot \sqrt{\frac{30}{a}} \cdot e^{i\delta}$$

e) A feladat első része abban áll, hogy meghatározzuk a $\Psi(x)$ állapotfüggvény energia-sajátfüggvények szerinti kifejtésében szereplő c_m együtthatókat:

$$\Psi(x) = \sum_{m=1}^{\infty} c_m \cdot \varphi_m(x)$$

Szorozzuk meg az egyenletet $\varphi_n^*(x)$-szel, és integráljunk a teljes számegyenesre! (Másképpen kifejezve: szorozzuk meg balról skalárisan az egyenlet mindkét oldalát φ_n-nel!)

$$\int_{-\infty}^{\infty} \varphi_n^*(x) \cdot \Psi(x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_n^*(x) \cdot \left(\sum_{m=1}^{\infty} c_m \cdot \varphi_m(x)\right) dx = \sum_{m=1}^{\infty} c_m \cdot \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_n^*(x) \cdot \varphi_m(x) dx$$
$$= \sum_{m=1}^{\infty} c_m \cdot \delta_{nm} = c_n$$

A c_n együttható tehát egy integrál formájában írható fel:

$$c_n = \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_n^*(x) \cdot \Psi(x) dx = \int_0^a \varphi_n^*(x) \cdot \Psi(x) dx$$

A $\Psi(x)$ függvény az $[0, a]$ intervallum középpontjára nézve szimmetrikus. A $\varphi_n(x)$ függvény ugyanerre a pontra nézve szimmetrikus, ha n páratlan, és antiszimmetrikus, ha n páros. Így az összes olyan c_n együttható nulla lesz, amelynek n indexe páros. A páratlan indexű együtthatók kiszámításához el kell végeznünk az integrálást:

$$c_n = \int_0^a \varphi_n^*(x) \cdot \Psi(x) dx = \int_0^a \sqrt{\frac{2}{a}} \cdot e^{-i\delta_n} \cdot sin\left(\frac{n \cdot \pi \cdot x}{a}\right) \cdot \left[-\frac{\sqrt{30}}{a^{\frac{5}{2}}} \cdot e^{i\delta} \cdot \left(x - \frac{a}{2}\right)^2 + \frac{1}{4} \cdot \sqrt{\frac{30}{a}} \cdot e^{i\delta}\right] dx$$
$$= -e^{i(\delta-\delta_n)} \cdot \frac{\sqrt{60}}{a^3} \int_0^a \cdot sin\left(\frac{n \cdot \pi \cdot x}{a}\right) \cdot \left(x - \frac{a}{2}\right)^2 dx + e^{i(\delta-\delta_n)} \cdot \frac{\sqrt{60}}{4a} \int_0^a \cdot sin\left(\frac{n \cdot \pi \cdot x}{a}\right) dx$$

Az első integrál kiszámításához kétszer egymás után kell parciálisan integrálnunk. A második integrál közvetlenül kiszámítható. Végül a következőt kapjuk:

$$c_n = e^{i(\delta-\delta_n)} \cdot \sqrt{60} \cdot \frac{4}{n^3 \cdot \pi^3}$$

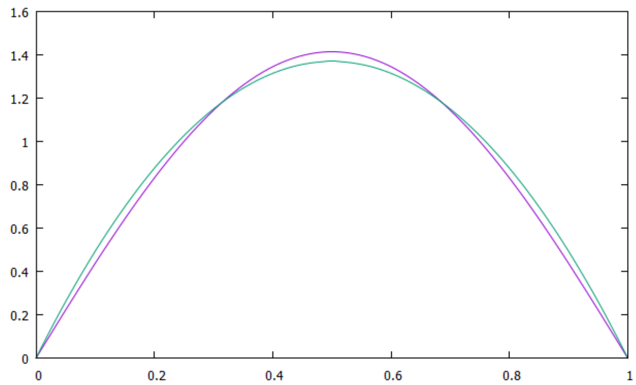
Az egyértelműség kedvéért válasszuk mind δ, mind az összes δ_n fázisszög értékét nullának. Ekkor a c_n együtthatók így írhatók:

$$c_n = \begin{cases} \dfrac{\sqrt{60} \cdot 4}{n^3 \cdot \pi^3} & \text{ha } n \text{ páratlan} \\ 0 & \text{ha } n \text{ páros} \end{cases}$$

A következő feladat, hogy megadjuk annak valószínűségét, hogy a részecske energiáját megmérve az alapállapoti energiát kapjuk. Az alapállapot kvantumszáma $n = 1$, így a keresett valószínűség:

$$P(E_1) = |\langle \varphi_1, \Psi \rangle|^2 = |c_1|^2 = \frac{960}{\pi^6} \approx 0.998555 = 99.8555\%$$

Látható, hogy szinte biztosan az alapállapoti energiát fogjuk mérni, tehát a Ψ „kevert” állapotban az alapállapot dominál. Ezt szemléltetendő ábrázoljuk az alapállapot és a Ψ állapot függvényét közös koordináta-rendszerben (lila a $\varphi_1(x)$, zöld a $\Psi(x)$ függvény grafikonja, a értékét 1-nek választottuk):



Hátra van még az energia várható értékének meghatározása. Az előbbiek alapján azt várjuk, hogy ez jóval közelebb lesz az alapállapoti $E_1 = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$ energiához, mint az első gerjesztett állapot $E_2 = 4E_1$ energiájához. Az egyik lehetőség, hogy kiszámítjuk az alábbi összeget:

$$\bar{E} = \sum_{n=1}^{\infty} E_n \cdot P(E_n) = \sum_{n=1}^{\infty} E_n \cdot |c_n|^2$$

Gyorsabban elvégezhető azonban az alábbi integrál kiszámítása:

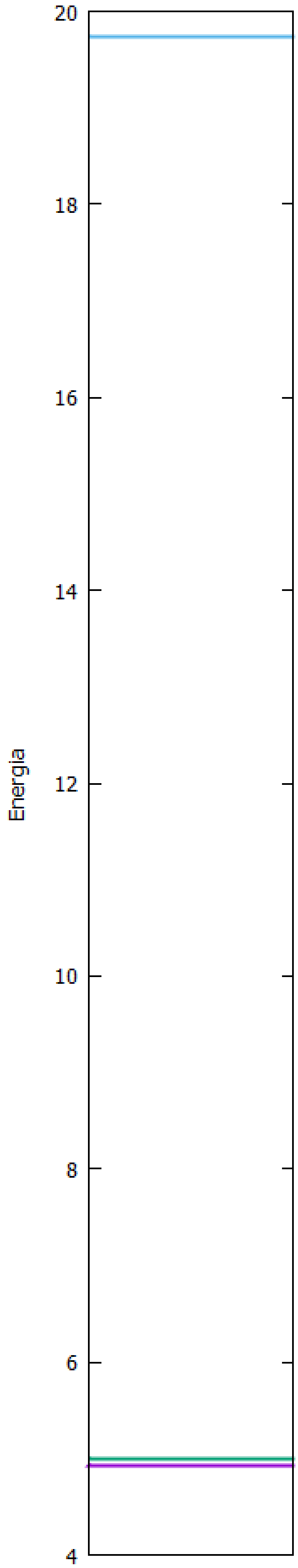
$$\bar{E} = \langle \Psi, \hat{H}\Psi \rangle = \int_0^a \left[-\frac{\sqrt{30}}{a^{\frac{5}{2}}} \cdot \left(x - \frac{a}{2}\right)^2 + \frac{1}{4} \cdot \sqrt{\frac{30}{a}} \right] \cdot \left(\frac{-\hbar^2}{2m}\right) \frac{d^2}{dx^2} \left[-\frac{\sqrt{30}}{a^{\frac{5}{2}}} \cdot \left(x - \frac{a}{2}\right)^2 + \frac{1}{4} \cdot \sqrt{\frac{30}{a}} \right] dx$$

$$= \int_0^a \left[-\frac{\sqrt{30}}{a^{\frac{5}{2}}} \cdot \left(x - \frac{a}{2}\right)^2 + \frac{1}{4} \cdot \sqrt{\frac{30}{a}} \right] \cdot \frac{\hbar^2}{m} \cdot \frac{\sqrt{30}}{a^{\frac{5}{2}}} dx$$

Az integrandus egy másodfokú függvény, amely közvetlenül integrálható. Az eredmény

$$\bar{E} = \frac{5\hbar^2}{ma^2}$$

Az alábbi ábra szemlélteti $E_1 = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$ (lila csík), $E_2 = \frac{2\pi^2\hbar^2}{ma^2}$ (világoskék csík) és $\bar{E} = \frac{5\hbar^2}{ma^2}$ (zöld csík) egymáshoz való viszonyát (a skála egysége $\frac{\hbar^2}{ma^2}$):



20
18
16
14
Energia
12
10
8
6
4