Kvanttimekaniikka I A (FYSA231), Kevät 2010

Harj 2.

1. a) Lineaariselle operaattorille $\hat{A}$ pätee:

$$\hat{A}(c_1\psi_1 + c_2\psi_2) = c_1\hat{A}\psi_1 + c_2\hat{A}\psi_2$$

missä c_1 ja c_2 ovat mielivaltaisia kompleksivakioita ja ψ_1 ja ψ_2 ovat mielivaltaisia aaltofunktioita. Tutki mitkä seuraavien relaatioiden määrittelemät operaattorit ovat lineaarisia:

$$\hat{A}_1\psi(x) = x^3\psi(x),\ \hat{A}_2\psi(x) = x\frac{d}{dx}\psi(x)$$

$$\hat{A}_3\psi(x) = \frac{d}{dx}\psi(x) + a,\ \hat{A}_4\psi(x) = \int_{-\infty}^{x} dx'[\psi(x')x']$$

b) Osoita, että seuraavat kommutaatiorelaatiot pätevät mielivaltaisille operaattoreille $\hat{A}$, $\hat{B}$ ja $\hat{C}$.

i) $[\hat{A}, \hat{B}] = -[\hat{B}, \hat{A}]$.

ii) $[\hat{A}, \hat{B} + \hat{C}] = [\hat{A}, \hat{B}] + [\hat{A}, \hat{C}]$.

iii) $[\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] = [\hat{A}, \hat{B}]\hat{C} + \hat{B}[\hat{A}, \hat{C}]$.

2. a) Mielivaltaista yksiulotteista liikettä kuvaavassa tilassa $\psi(t, x)$ liikemäärä-operaattorin odotusarvo on

$$\langle\hat{p}\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(t, x)\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\psi(t, x)dx.$$

Suorita osittaisintegrointi. Sen tuloksena saat hermiittisyyden määritelmän mukaisen integraalin sekä integroidun termin. Totea, että jälkimmäisen on oltava nolla, jotta $\hat{p}$ on hermiittinen. Tulos merkitsee aaltofunktioita koskevaa yleistä reunaehtoa – mikä se on? Huomaa myös, että $\hat{p}$:n imaginaari-i on välttämättömyys hermiittisyydelle.

b) Kvanttimekaniikan liikeyhtälö on ajasta riippuva Schrödingerin yhtälö

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(t, \vec{x}) = \hat{H}\psi(t, \vec{x})$$

missä $\hat{H}$ on energiaoperaattori eli Hamiltonin operaattori. H on hermiittinen – miksi? Kokonaistodennäköisyys, jonka arvoksi tavallisesti normitetaan 1, on $\int\psi^*(t, \vec{x})\psi(t, \vec{x})d^3\vec{x}$ koko avaruuden yli integroituna. Oleta, että integraalin arvo ei välttämättä ole ajasta riippumaton vakio. Todista Schrödingerin yhtälön avulla, että se on vakio:

$$\frac{\partial}{\partial t}\int\psi^*(t, \vec{x})\psi(t, \vec{x})d^3\vec{x} = 0.$$

3. Alueeseen $|x| \leq a$ rajoitetun hiukkasen yksiulotteista liikettä kuvaa aaltofunktio
$$\psi(x) = N \cos\left(\frac{x\pi}{2a}\right),$$
missä N on normitus vakio.
   a) Määritä N. Onko se yksikäsitteinen?
   b) Mikä on todennäköisyys, että hiukkanen on alueessa $0 \leq x \leq a$.
   c) Mikä on todennäköisyys, että hiukkanen on alueessa $-a/2 \leq x \leq a/2$.
4. Ratkaise äärettömän syvä potentiaalikuoppa (aaltofunktio ja energiatilat), kun potentiaali V(x) määritellään seuraavasti:
$$V(x) = \begin{cases} 0, & kun \ -a \leq x \leq a \\ \infty, & kun\ x < -a \ tai \ a < x \end{cases} .$$
Huomaa, että nyt joudut käymään parilliset ja parittomat ratkaisut erikseen läpi, muutoin lasku menee samaan tyyliin kuin luennolla.
5. Vetyatomin perustilan normitettu aaltofunktio on
$$\psi(\vec{r}) = (\pi a_0^3)^{-1/2} e^{-r/a_0},$$
missä $a_0 = 0.0529$ nm.

a) Laske todennäköisyys, että elektroni on a_0 säteisen pallon sisällä. Integroi numeerisesti esim. laskimella tai tietokoneella.

b) Laske r:n odotusarvo.