KVANTUM

1. előadás (09.10.)

Katz Sándor

bodri.elte.hu/QM

vizsga

<u>Bevezetés</u>: Történeti előzmények

19. sz. vége: klf. elm. valtak

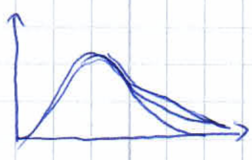
néhány kérdés: 1) fotonok problémái

a) fekete test sugárzás:

T hőmérsékletű egyensúlyban levő EM sugárzás energiaeloszlása: $\rho(\nu,T) = ?$

ahol $\rho(\nu,T)d\nu$: energiasűrűség a $(\nu, \nu+d\nu)$ frekvenciatartományban

mérés alapján:



Vegyünk egy L^3 méretű dobozt! Ebben $\underline{E}$, $\underline{B}$ tér

$$|\underline{E}|,|\underline{B}| \sim e^{i\underline{q}\underline{r}} e^{-i\omega t}$$

HF: periodikus

$$B(x+L) = B(x)$$
$$E(x+L) = E(x)$$

$$e^{i\underline{q}\underline{r}} e^{-i\omega t} = e^{i(q_x x+q_y y+q_z z)} e^{-i\omega t} = e^{i(q_x(x+L)+q_y y+q_z z)} e^{-i\omega t}$$

$$\Rightarrow e^{iq_x L} = 1 \Rightarrow q_x L = n_x 2\pi$$

hasonló módon q_y és q_z is. Tehát $\underline{q} = \frac{2\pi}{L}\underline{n}$ ahol

$\underline{n} = (n_x, n_y, n_z)$ egészek $\Rightarrow \lambda = \frac{2\pi}{|\underline{q}|}$ $\quad \nu = \frac{c}{\lambda} = \frac{c|\underline{q}|}{2\pi} = \frac{c|\underline{n}|}{L}$

Számítsuk meg a módusok számát $[\nu, \nu+d\nu]$ között, és az ekvipartíció miatt u.a. energia jut rájuk.

$N(n)dn$ az n és $n+dn$ közötti változók száma $\quad n \gg 1$-re

a ténylegesen a pontok száma: $N(n)dn = 4\pi n^2 dn = 4\pi \left(\frac{L\nu}{c}\right)^2 \frac{L}{c} d\nu =$

$$= 4\pi \frac{L^3}{c^3} \nu^2 d\nu$$

Minden frekiben kétféle polarizáció van, tehát ennek a 2-szerese kell

Minden módusra kT energia jut $\Rightarrow E(\nu,T)d\nu = 8\pi \frac{L^3}{c^3} \nu^2 kT d\nu$

a sűrűség: $\underline{\rho(\nu,T)d\nu = 8\pi kT \frac{\nu^2}{c^3} d\nu}$ Rayleigh-Jeans-formula

kis frekire stimmel, nagyra nem

+ az integrálja ∞ (UV katasztrófa)

Planck módosította: talált egy formulát, ami stimmelt

$$\rho(\nu,T)\,d\nu = \frac{8\pi h}{c^3}\,\frac{\nu^3 d\nu}{\exp\left(\frac{h\nu}{kT}\right)-1} \qquad h = 6{,}65\cdot 10^{-34}\ \mathrm{Js}$$

$\frac{h\nu}{kT} \ll 1$ -nél ez az előző képlet.

Planck nem a sugárzás kvantáltságát tette fel, hanem az anyagét, de Einstein óta tudjuk, hogy a sugárzás is az, így általában egyszerűbb a levezetés

TFH: ν frekvenciájú módus energiája: $E_n = n h \nu$

emiatt az $\bar{E} = kT$ nem lesz jó. helyett Boltzmann eloszlás: $p(E) \sim e^{-\beta E}$

ahol $\beta = \frac{1}{kT}$

Folytonos esetben: $\bar{E} = \dfrac{\int_0^\infty E e^{-\beta E} dE}{\int_0^\infty e^{-\beta E} dE} = \frac{1}{\beta} = kT$ ennek valóban

Diszkrét esetben: $\bar{E} = \dfrac{\sum_n E_n e^{-\beta E_n}}{\sum_n e^{-\beta E_n}} = ?$

$$\left[\ \sum_n e^{-\beta E_n} = \sum_n \left(e^{-\beta h\nu}\right)^n = \frac{1}{1-e^{-\beta h\nu}}\right.$$

$$\left. -\frac{d}{d\beta}\left(\sum_n e^{-\beta E_n}\right) = \sum_n E_n e^{-\beta E_n} = h\nu \frac{e^{-\beta h\nu}}{\left(1-e^{-\beta h\nu}\right)^2}\ \right]$$

tehát $\bar{E} = \dfrac{h\nu\, e^{-\beta h\nu}}{1-e^{-\beta h\nu}}$ ezt kell beírni kT helyett.

$$d\nu\,\rho(\nu,T) = 8\pi h\nu \frac{1}{e^{\beta h\nu}-1}\,\frac{\nu^2}{c^3}\,d\nu \qquad \checkmark$$

b) fotoelektromos hatás: anyagot világítunk fénnyel, ebben az anyagból kilépnek elektronok

azt gondolták, hogy az EM impulzus kilépi az e^--t

várakozás: a kilökődés az intenzitástól függ.

Tapasztalat: nem az intenzitás, hanem a frekvencia számít

Van egy ν_{min} frekv., ahol kijönnek az e^--k, és az energia arányos a $(\nu - \nu_{min})$-nel

ha elfogadjuk a sugárzás kvantáltságát, akkor $E_n = n h\nu$ és az 1 egység $E = h\nu$, és akkor tud kilökődni, ha $h\nu \geq E_{kötési}$

ez + a Compton-szórás arra utal, hogy a fényt részecskeként is el lehet képzelni $\Rightarrow$ fotonok.

2/ Atommodell

Spektrumszerkezet

azt már tudták, hogy az atomok spektruma nem túl szabályos

egyszerűen két mennyiség különbségeként leírni

+ Rutherford óta tudják, hogy az atomban a + és − töltések nem egyenletes eloszlásúak.

bolygó modell: az atommag körül bármely keringhet az é, de az é gyorsul, ezért be kéne zuhanni az atommagba

=> miért stabil az atom?

KVANTUM

2. előadás (09.13.)

Bohr azt javasolta, hogy ezek E_n diszkrét energiaszintek lehetségesek
két hely közötti átmenet során $\nu = \frac{E_n - E_m}{h}$ freki bocsátódik ki

Hogyan kvantáljunk? Intuíció: Kaptunk egy h értéket, és már csak nincs több kvantummal kapcsolatos állandó!

Mivel $[h]$: impulzus momentum, kvantáljuk az $\bar{e}$ impulzus momentumát

Feltevés: $mvr = n\hbar$ ahol $\hbar = \text{const} \cdot h$

$$m\frac{v^2}{r} = \frac{Ze^2}{r^2}$$ az Coulombi erő miatt $\left(\frac{1}{4\pi\varepsilon_0} = 1\right)$

$$\Rightarrow \quad v = \frac{Ze^2}{n\hbar}$$

$$E = \frac{mv^2}{2} - \frac{Ze^2}{r} = -\frac{Z^2e^4 m}{2n^2\hbar^2} \sim \frac{1}{n^2}$$

$$\boxed{\nu = \frac{Z^2 e^4 m_e}{2\hbar^2 h}\left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2}\right)}$$ ez egyezik a kísérletekkel)

$\hbar$ meghatározása klasszikus limeszből: n nagy $\to n-1$ átmenetnél ν az $\bar{e}$ körfrekvenciája

ebből $\Rightarrow \hbar = \frac{h}{2\pi}$ (HF)

probléma: miért pont körpálya?

ennek a megoldása a Sommerfeld-féle kvantálási feltétel

$$\oint p_a \, dq_a = n_a h \quad \forall a\text{-ra}$$

körmozgásra: $\oint p_a \, dq_a = \int_0^{2\pi} mvr \, d\varphi = 2\pi mvr \overset{!}{=} nh$ ✓

mi az oka a kvantáltságnak?

a fotonra viselkedett hullámként és részecskeként. Lehetséges ez a többi részecskével is? (pl e^-)

de Broglie: $E = h\nu$ Planck miatt

$E = |\underline{p}|c$ specrel miatt

$\Rightarrow |\underline{p}| = \frac{E}{c} = \frac{h\nu}{c} = \frac{h}{\lambda} = \hbar|\underline{k}|$ ← ez volt az EM hullám diszperziós relációja.

TFH: ez minden részecskére igaz.

kvantálási feltétel

pálya hossza: $n\lambda$

kör esetén: $2\pi r = n\lambda \implies 2\pi r = n\frac{2\pi\hbar}{|p|} \implies mvr = n\hbar$

de a síkhullám a szabad mozgást írja le, általánosítani kell kötött állapotra.

Schrödinger:

Ha $\psi(\underline{r},t) \sim e^{i(\underline{k}\underline{r}-\omega t)}$ síkhullám, akkor igaz rá a alábbi 2 egyenlet:

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = E\psi \quad \text{és} \quad -i\hbar\underline{\nabla}\psi = \underline{p}\psi$$

felírva a $E-p$ relációt nemrelativisztikus mozgásokra: $E = \frac{p^2}{2m}$

$$(1)\quad i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi$$ ennek a megoldása pont az, amiből kiindultunk

ha az időfüggést leválasztjuk: $\psi(\underline{r},t) = \psi(\underline{r})\, e^{-\frac{iE}{\hbar}t}$

beírva: $E\psi(\underline{x})\, e^{-i\frac{E}{\hbar}t} = \left[-\frac{\hbar}{2m}\Delta\psi(\underline{r})\right] e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi(\underline{r}) = E\psi(\underline{r})$$ időfüggetlen, szabad Schr.-egyenlet

általánosítás kötött állapotra:

szabad esetben $E = \frac{p^2}{2m}$

kötött esetben $E = \frac{p^2}{2m} + V(x)$

Ezt kéne valahogy beírni az (1)-be

tudjuk: $\frac{p^2}{2m} \to -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2$

$$\frac{p^2}{2m} + V(x) \to \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(x)\right)$$

Tehát a Schrödinger-egyenlet:

$$\boxed{\begin{aligned} &i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi + V(\underline{r})\psi && \text{időfüggő} \\ &-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi + V(\underline{r})\psi = E\psi && \text{időfüggetlen} \end{aligned}}$$

Az időfüggő egyenletnek tetszőleges KF esetén $\exists$ megoldás

Az időfüggetlennél, ha $\hat{H}\psi = E\psi$ alak $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\underline{r})$, akkor ez egy sajátérték egyenlet, aminek nem mindig van korrekt megoldása

ez a oka a kvantáltságnak.

Mi a ψ jelentése?

eleinte $|\psi|^2$ vmi intenzitás $\Rightarrow$ azt gondolták, hogy ψ vmi Dirac-delta sűrűség

DE

Born kimutatta, hogy szórás esetén a ψ egyenletesen szétszóródnak

A detektorok viszont csak egész számú e^--t tudnak érzékelni

Born-féle interpretáció: $|\psi(x)|^2 d^3x$ az e^- megtalálási valószínűsége a d^3x térrészben

Ennek akkor van értelme, ha $\int |\psi(x)|^2 d^3x = 1$

Mivel a Schr.-egyenlet lineáris, csak tetszőlegesen normálható, ha $\int |\psi|^2 d^3x$ véges $\Rightarrow$ L^2 fv-k tere

azt kell megnézni, hogy mennyi a $i\hbar \frac{d}{dt} \int |\psi|^2 d^3x$. Ha 0, akkor az e^- megmarad

$$i\hbar \frac{d}{dt} \int |\psi|^2 d^3x = \frac{d}{dt} \int \psi \, i\hbar \, \psi^* \, d^3x = \int \left(i\hbar \frac{\partial \psi^*}{\partial t}\right) \psi \, d^3x + \int \psi^* \left(i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}\right) d^3x$$

$$= \int \left(\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi^* - V\psi^*\right) \psi \, d^3x + \int \psi^* \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + V\psi\right) d^3x =$$

$$= \frac{\hbar^2}{2m} \int \left((\nabla^2 \psi^*) \psi - \psi^* \nabla^2 \psi\right) d^3x = \frac{\hbar^2}{2m} \int \nabla \left((\nabla \psi^*) \psi - \psi^* (\nabla \psi)\right) d^3x = \text{parciálisan}$$

$$= \frac{\hbar}{2m} \oint \left((\nabla \psi^*) \psi - \psi^* (\nabla \psi)\right) d\underline{F} = \text{mivel } \psi \in L^2 = 0 \quad \checkmark$$

KVANTUM

3. előadás (09. 17.)

A valószínűség: $i\hbar \frac{d}{dt}\int |\psi|^2 d^3x$

Ennek meg kell maradnia.

Kontinuitás: $\frac{d}{dt}|\psi|^2 + \mathrm{div}\,\underline{j} = 0$ ahol $\underline{j} = -\frac{i\hbar}{2m}\left(\psi^*\underline{\nabla}\psi - \psi\underline{\nabla}\psi^*\right)$

valószínűségi áram sűrűség

A várható érték:

$$\langle \underline{x}\rangle = \int \underline{x}\,|\psi|^2 d^3x$$

$$\langle x_i\rangle = \int x_i\,|\psi|^2 d^3x$$

$$\langle x_i^4\rangle = \int x_i^4\,|\psi|^2 d^3x$$

$$\langle f(\underline{x})\rangle = \int \psi^*\, f(\underline{x})\,\psi\, d^3x$$

Mi az impulzus várható értéke?

mivel vezethető, mint síkhullám: $-i\hbar\underline{\nabla}\psi = p\psi$

$$\langle p_i\rangle = \int \psi^*\left(-i\hbar\underline{\nabla}\psi\right)d^3x$$

Kérdés: $m\frac{d}{dt}\langle x_i\rangle \overset{?}{=} \langle p_i\rangle$

$$m\frac{d}{dt}\langle x_i\rangle = m\frac{d}{dt}\int x_i|\psi|^2 d^3x = i\frac{\hbar}{2}\int x_i\partial_j\left(\psi^*\partial_j\psi - \psi\partial_j\psi^*\right)d^3x =$$

$$= i\frac{\hbar}{2}\underbrace{\int\partial_j\left(x_i\psi^*\partial_j\psi - x_i\psi\,\partial_j\psi^*\right)d^3x}_{\substack{\text{teljes divergencia}\\ \Rightarrow \text{ eltűnik}}} - \frac{i\hbar}{2}\int\underbrace{(\partial_j x_i)}_{\delta_{ij}}\left(\psi^*\partial_j\psi - \psi\partial_j\psi^*\right)d^3x$$

$$= -\frac{i\hbar}{2}\int\left(\psi^*\partial_i\psi - \psi\partial_i\psi^*\right)d^3x = -i\hbar\int\psi^*\partial_i\psi\, d^3x + i\frac{\hbar}{2}\int\left(\psi^*\partial_i\psi + \psi\partial_i\psi^*\right)d^3x =$$

$$= \langle p_i\rangle + i\frac{\hbar}{2}\underbrace{\int\partial_i(\psi^*\psi)\,d^3x}_{\substack{\text{teljes gradiens}\\ \Rightarrow 0}}$$

$$\Rightarrow \underline{\langle f(\underline{x},\underline{p})\rangle = \int\psi^*\, f(\underline{x}, -i\hbar\underline{\nabla})\,\psi\, d^3x}$$

<u>Szuperpozíció elve</u>: Mivel a Schr.-egyenlet lineáris, ezért, ha ψ_1 és ψ_2 megoldás, akkor $\alpha_1\psi_1 + \alpha_2\psi_2$ is tetsz. $\alpha_1, \alpha_2 \in \mathbb{C}$-re

$\Rightarrow$ A megoldások lineáris teret alkotnak

összeadás: $(\psi_1+\psi_2)(x) = \psi_1(x) + \psi_2(x)$; számmal szorzás: $(\alpha_1\psi)(x) = \alpha_1\psi(x)$

sk. szorzás: $(\psi_1|\psi_2) = \langle\psi_1|\psi_2\rangle = \int\psi_1^*(x)\,\psi_2(x)\,d^3x$

$\Rightarrow$ Hilbert-tér

skalárszorzat tulajdonságai:

$\langle \psi_1 + \psi_2 | \psi_3 \rangle = \langle \psi_1 | \psi_3 \rangle + \langle \psi_2 | \psi_3 \rangle$

$\langle \psi_1 | \psi_2 + \psi_3 \rangle = \langle \psi_1 | \psi_2 \rangle + \langle \psi_1 | \psi_3 \rangle$

$\langle \psi_1 | \lambda \psi_2 \rangle = \lambda \langle \psi_1 | \psi_2 \rangle$

$\langle \lambda \psi_1 | \psi_2 \rangle = \lambda^* \langle \psi_1 | \psi_2 \rangle$

operátorok

$A: \psi \to A\psi \in \mathcal{H}$ pl.: $\psi(x) \to x\psi(x)$

$\psi(x) \to -i\hbar \nabla \psi(x)$

HF: megnézni, hogy mindkettő lineáris

összeadás: $(A_1 + A_2)\psi = A_1\psi + A_2\psi$

sz. szorzás: $(\lambda A_1)\psi = \lambda (A_1 \psi)$

szorzás: $(A_1 A_2)\psi = A_1 (A_2 \psi)$

HF: lásd be, hogy az x és a $-i\hbar\nabla$ nem kommutatív.

kommutátor: $[A_1, A_2] = A_1 A_2 - A_2 A_1$

adjungálás: $\langle A\psi_1 | \psi_2 \rangle = \langle \psi_1 | A^+ \psi_2 \rangle$

$\forall A$-hoz létezik A^+, hogy ez igaz legyen $\forall \psi_1 \psi_2$-re.

$(A_1 + A_2)^+ = A_1^+ + A_2^+$

$(\lambda A)^+ = \lambda^* A^+$

$(A_1 A_2)^+ = A_2^+ A_1^+$

$A^{++} = A$

HF: ezeket belátni

HF: lásd be, hogy x és $i\hbar\nabla$ önadjungált

Hamilton-operátor: $\hat{H} = \frac{p^2}{2m} + V(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(x)$

Eddig a ψ csak x-től függött, pedig t-től is függhet

$\psi(x,t)$ olyan, miután $\psi(x) \in \mathcal{H}$, és ez minden t-re igaz. Sőt most a Schr.-egyenlet írja le:

$$\underline{i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H}\psi}$$

Stacionárius megoldások:

csak a megoldások, ahol faktorizálódik a hely és idő.

$\psi(x,t) = \psi(x)\, f(t)$

Beírva:

$$i\hbar\, \psi(x) \frac{df}{dt} = f(t)\, \hat{H}\psi(x)$$

$$i\hbar \frac{1}{f}\frac{df}{dt} = \frac{1}{\psi(x)} \hat{H}\psi(x) \quad \Leftarrow \text{ ez konst.}$$

$$\Rightarrow \quad i\hbar \frac{1}{f}\frac{df}{dt} = E \quad (1) \quad ; \quad \frac{1}{\psi}\hat{H}\psi = E \quad (2)$$

(1)-ből: $\frac{df}{dt} = -\frac{i}{\hbar} E f \Rightarrow f(t) = \text{konst}\; e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$

↳ ezt beleolvasztjuk ψ-be

(2)-ből: $\hat{H}\psi = E\psi$ ← Ez az időfüggetlen Schr.-egyenlet, ami a $\hat{H}$ operátor sajátérték-egyenlete.

Mivel $\hat{H}$ önadjungált, sajátértékei valósak.

Tehát a stacionárius megoldás: $\psi(\underline{x},t) = \psi(\underline{x})\, e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$ ahol $\hat{H}\psi(\underline{x}) = E\psi(\underline{x})$

$\int |\psi|^2 d^3x = 1$.

Schrödinger-egyenlet megoldásai 1D-ben

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial t} + V(x)\psi \qquad \text{ahol } V: \mathbb{R} \to \mathbb{R}$$

normálás: $\int_{-\infty}^{\infty} |\psi|^2 dx = 1$

időfüggetlen egyenlet: $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x)$

1) Szabad részecske. $V(x) = 0$

$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} = E\psi$ könnyű: $\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$ ahol $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$

$E > 0$-ra van csak megoldás.

időfüggő egyenlet megoldása:
$$\psi(x,t) = A\, e^{ik\left(x - \frac{\hbar k}{2m}t\right)} + B e^{-ik\left(x + \frac{\hbar k}{2m}t\right)}$$
$$= A\, e^{ik\left(x - \frac{p}{2m}t\right)} + B e^{-ik\left(x + \frac{p}{2m}t\right)}$$

ez egy hullám, melynek sebessége $v = \frac{p}{2m} = \frac{v_{klassz}}{2}$

probléma: nem normálható ☹

$\Rightarrow$ nem létezik szabad részecske

De egyszerű jó bázisnak + Ae^{ikx}-t interpretálható úgy, mint $|A|^2$ intenzitású részecskenyaláb.

~~viszont ez időfüggetlenek miatt~~

Az, hogy az időfüggetlen egyenletnek nincs megoldása nem azt jelenti, hogy az időfüggőnek nincs.

Általános megoldás az összes ilyen érték lineárja,

$$\Psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \phi(k)\, e^{i\left(kx - \frac{\hbar k^2}{2m} t\right)}\, dk$$ ez már normálható

pl.: $t = 0$

$$\Psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \phi(k)\, e^{ikx}\, dk$$ és

ebből $$\phi(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(x)\, e^{-ikx}\, dx$$

Tehát tetsz. KF-fel megadhatom $\phi(k)$-t, ebből pedig meg tudjuk oldani az időfüggést.

A múlt óra miatt pedig ha kezdetben Ψ normált volt, az is marad.

KVANTUM

4. előadás (09. 24.)

$$\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \phi(k)\, e^{i\left(kx - \frac{\hbar k^2}{2m} t\right)}\, dk$$

$t = 0$-ra épp FT ahol $\phi(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x,0)\, e^{-ikx}\, dx$

$\Rightarrow$ tetszőleges $\phi(x)$ kF-ne, ami normálható folytatható az időfejlődés normálhatóság $\Rightarrow$ hullámcsomag

A megoldásban két sebesség van: csoportsebesség és fázissebesség

$$v_f = \frac{\omega}{k} = \frac{\hbar k^2}{2m} \cdot \frac{1}{k} = \frac{\hbar k}{2m} = \frac{p}{2m} = \frac{v_{kl}}{2}$$

$$v_{csop} = \frac{d\omega}{dk} = \frac{d}{dk}\left(\frac{\hbar k^2}{2m}\right) = \frac{\hbar k}{m} = v_{kl}$$

DE mivel $\omega(k)$ nem konst, a hullámcsomag szétfolyik

gyakran konkrétan kiszr. a hullámcsomag szétfolyását

Határozatlansági relációk: $(\sigma_x)^2 = \langle \Delta x^2 \rangle = \langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle = \langle x^2 - 2x\langle x \rangle + \langle x \rangle^2 \rangle =$

$$= \langle x^2 \rangle - 2\langle x \rangle \langle x \rangle + \langle x \rangle^2 = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2$$

$(\sigma_p)^2 = \langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2$

korlátlan k síkhullám: $\sigma_p^2 = 0$, $\sigma_x^2 = \infty$

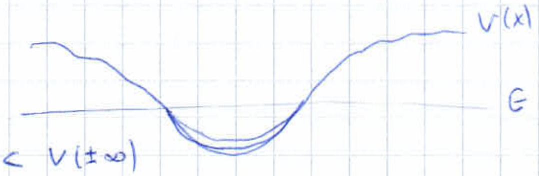
a maximálisan lokalizált véges eset: $\psi(x,t) = \delta(x - x_0)$ $\sigma_p = \infty$ $\sigma_x^2 = 0$

$\phi(x) =$ konst.

Gaussra: $\sigma_x \sigma_p = \frac{\hbar}{2}$, ált. hullámcsomagra: $\sigma_x \sigma_p \geq \frac{\hbar}{2}$

$V \neq 0$ megoldásai

1. kötött állapot



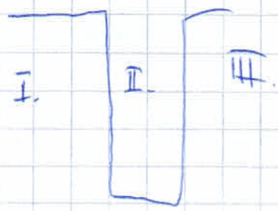
feltétele: $E < V(\pm\infty)$

2. minden más: szórásállapot

Fontos állítások:
- kötött állapotnál létezik normálható m.o. határozott E-vel. (diszkrét E-kre)
- szórási állapotban nem létezik normálható m.o.

Kötött állapotok

① $V = \begin{cases} 0 & \text{ha } 0<x<a \\ \infty & \text{else} \end{cases}$



I. és III.-ban $\psi = 0$
mert $V=\infty$ esetén
bármely E esetén csak 0 lehet

II. szabad Schr.-egyenlet.

Állítás: ha V véges és folytonos $\Rightarrow$ ψ, ψ', ψ'' folytonos

V véges és ugrik $\Rightarrow$ ψ, ψ' folytonos, ψ'' ugrik

V divergál $\Rightarrow$ ψ folyt, ψ' ugrik

Jelen esetben $\psi(0) = \psi(a) = 0$

Mivel $\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$ ahol $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$ fix E esetén

$\Rightarrow A + B = 0 \Rightarrow B = -A \Rightarrow \psi(x) = A(e^{ikx} - e^{-ikx}) = C\sin(kx)$

$\Rightarrow C\sin(ka) = 0 \Rightarrow$ $C = 0$ ez unalmas és amúgy nem normálható

$\sin(ka) = 0 \Rightarrow ka = n\pi$ ahol $n \in \mathbb{Z} \setminus \{0\}$

de ha $n = -m$, akkor a $-$ beleolvad a C-be.

$\Rightarrow k = \frac{n\pi}{a} \Rightarrow E = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2} n^2$

a normálásra $\int |\psi_n|^2 dx = 1 \Rightarrow |C|^2 \cdot \frac{a}{2} = 1 \Rightarrow |C| = \sqrt{\frac{2}{a}}$

és C fázisát nem határozza meg semmi

Állítás: Minden 1D-s kötött állapotban ψ csomópontjainak a száma $n-1$

② Harmonikus oszcillátor.

$V(x)=\frac{1}{2}m\omega^2x^2$ $\qquad \forall E>0$ kötött állapot

Analitikus módszer:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2\psi=E\psi$$

legyen: $\xi=\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\,x$

$$\frac{d^2\psi}{d\xi^2}=(\xi^2-K)\psi \qquad \text{ahol } K=\frac{2E}{\hbar\omega}$$

(1. lépés) nézzük meg mit csinál ψ a végtelenben, mert az kell a normálhatósághoz

$\xi^2\to\infty$: $\frac{d^2\psi}{d\xi^2}=\xi^2\psi$ ennek a megoldása nagy ξ^2-re

$$\psi(\xi\to\pm\infty)=Ae^{\frac{\xi^2}{2}}+Be^{-\frac{\xi^2}{2}}$$

mert $\psi''(\xi\to\pm\infty)=A\xi^2e^{\frac{\xi^2}{2}}+Ae^{\frac{\xi^2}{2}}+B\xi^2e^{-\frac{\xi^2}{2}}-Be^{-\frac{\xi^2}{2}}$

$$\approx\xi^2\left(Ae^{\frac{\xi^2}{2}}+Be^{-\frac{\xi^2}{2}}\right)$$

Ahhoz, hogy normálható legyen $A=0$ és $B\neq0$

(2. lépés) válasszuk le az aszimptotikus viselkedést

$$\psi(\xi)=h(\xi)e^{-\frac{\xi^2}{2}}$$

$$\frac{d\psi}{d\xi}=\frac{dh}{d\xi}e^{-\frac{\xi^2}{2}}-\xi h(\xi)e^{-\frac{\xi^2}{2}}$$

$$\frac{d^2\psi}{d\xi^2}=\frac{d^2h}{d\xi^2}e^{-\frac{\xi^2}{2}}-\frac{dh}{d\xi}\xi e^{-\frac{\xi^2}{2}}-he^{-\frac{\xi^2}{2}}-\xi\frac{dh}{d\xi}e^{-\frac{\xi^2}{2}}+\xi^2he^{-\frac{\xi^2}{2}}=$$

$$=\left(\frac{d^2h}{d\xi^2}-2\frac{dh}{d\xi}\xi-(1-\xi^2)h\right)e^{-\frac{\xi^2}{2}}$$

beírva az egyenletbe:

$$\frac{d^2h}{d\xi^2}-2\frac{dh}{d\xi}\xi+(\xi^2-1)h=(\xi^2-K)h$$

$$\frac{d^2h}{d\xi^2}-2\xi\frac{dh}{d\xi}+(K-1)h=0$$

keressük h-t hatványsor alakban

$h=\sum_{j=0}^{\infty}a_j\xi^j$ ekkor: $\qquad \frac{dh}{d\xi}=\sum_{j=0}^{\infty}a_j\,j\,\xi^{j-1}$

$$\frac{d^2h}{d\xi^2}=\sum_{j=0}^{\infty}a_j\,j(j-1)\xi^{j-2}=\sum_{i=0}^{\infty}a_{i+2}(i+2)(i+1)\xi^i$$

beírva: $\sum_{j=0}^{\infty}\xi^j\left(a_{j+2}(j+2)(j+1)-2a_j\,j+(K-1)a_j\right)=0 \quad \forall\xi$-re

$$\Rightarrow a_{j+2}(j+2)(j+1)+[(K-1)-2j]a_j=0 \quad \forall j=0,1,2\dots\text{-re}$$

$$\Rightarrow a_{j+2}=\frac{2j-(K-1)}{(j+2)(j+1)}a_j$$

Konzekvencia: a_0 és a_1 tetszőleges (2-odrendű egyenlet), a többi pedig ebből jön

Szedjük szét: $h(\xi)=h_{\text{páros}}(\xi)+h_{\text{páratlan}}(\xi)$

Nézzük meg, hogy ψ biztos normálható-e;

de itt csak a_j számít nagy j-re.

$$a_{j+2} = \frac{2j}{j^2} a_j = \frac{2}{j} a_j \Rightarrow \text{ a } j=2k\text{-ra} \quad a_k = \frac{1}{k!} \text{ lenne}$$

$$\text{tehát} \quad a_j \approx C\frac{1}{\left(\frac{j}{2}\right)!} \Rightarrow h_{\text{páros}}(\xi) = \sum_{j=2k} a_j \xi^j = \sum_{k=0}^{\infty} a_{2k}\xi^{2k} \approx \sum \frac{C}{k!}\xi^{2k}$$

$$= C\sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!}(\xi^2)^k = Ce^{\xi^2}$$

páratlanra u.a.

Ez baj, mert így $\psi(\xi\to\infty) \approx C e^{\frac{\xi^2}{2}}$ az előbb kizárt egyenlet visszatérhetett (a galád)

A trükk, hogy a rekurziós képletben valahol hirtelen lenullázom a_j-t, így lesz $h(\xi)$ véges polinom.

ekkor $h(\xi)e^{-\frac{\xi^2}{2}}$ biztos lecseng.

KVANTUM

5. előadás (09.27.)

A harmonikus oszcillátort keressük
$\psi(\xi) = h(\xi)\, e^{-\frac{\xi^2}{2}}$ alakban keressük

Azt kaptuk, hogy $h(\xi \to \infty) \sim C e^{\xi^2} \Rightarrow \psi(\xi)$ nem normálható

Emiatt az egyetlen megoldás, ha h véges polinom.

Azaz $\exists j$, melyre $a_j = 0$ és $a_{j+1} = 0$, és emiatt $a_{j<} = 0$

$$a_{j+2} = \frac{2j+1-k}{(j+1)(j+2)} a_j$$ mikor lesz a számláló 0, $\Rightarrow 2n+1-k=0$

fix k esetén csak 1db j megoldás, de ez csak minden 2. eh.-t 0-z ki

$\Rightarrow$ vagy az összes páros, vagy az összes páratlan 0, a másik pedig adott indextől

Akkor van normálható megoldás, ha $k = 2n+1 \Rightarrow \frac{2E}{\hbar\omega} = 2n+1 \Rightarrow$

$\Rightarrow E_n = \hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)$ az energia itt is kvantált

$\psi_n(\xi) = h_n(\xi)\, e^{-\frac{\xi^2}{2}}$ ahol $h_n(\xi)$ polinom rekurzióval kapható

$$a_{j+2} = \frac{2(j-n)}{(j+1)(j+2)} a_j$$

Az első néhány

$n=0$ páros $\Rightarrow$ $a_1 = 0$, $a_2 = 0$ $\Rightarrow \psi_0(\xi) = a_0\, e^{-\frac{\xi^2}{2}}$

$n=1$ páratlan $\Rightarrow$ $a_0 = 0$, $a_3 = 0$ $\Rightarrow \psi_1(\xi) = a_1\, \xi\, e^{-\frac{\xi^2}{2}}$

$n=2$ páros $\Rightarrow$ $a_1 = 0$, $a_2 = -2a_0$ $\Rightarrow \psi_2(\xi) = a_0(1-2\xi^2)\, e^{-\frac{\xi^2}{2}}$

⋮ ⋮

Úgy kell normálni, hogy $\|\psi\|^2 = 1$ legyen, de a polinomokat külön szokás normálni úgy, hogy a legnagyobb tag eh-ja 2^n legyen.

$H_n(\xi) = 2^n \xi^n + \dots$: Hermite-polinomok

belátható, hogy ψ-re: $\psi(x) = \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} H_n(\xi)\, e^{-\frac{\xi^2}{2}}\, e^{i\varphi}$ ← fázis tényező gyak. fölösleges

energia: $E_n = \hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)$

b) Algebrai megoldás:

új alak: $\frac{1}{2m}\left[\underbrace{\left(\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}\right)}_{u}^2+\underbrace{(m\omega x)}_{v}^2\right]\psi = E\psi$

Azt tudjuk, hogy $u^2+v^2=(u-iv)(u+iv)$ (ha u és v kommutál, de itt nem.

Ezért nézzük meg, mi a különbség:

$$a_\pm := \frac{1}{\sqrt{2m}}\left(\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx} \pm i m\omega x\right)$$

$$(a_- a_+)f(x) = \frac{1}{2m}\left(\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx} - im\omega x\right)\left(\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}+im\omega x\right) =$$

$$= \frac{1}{2m}\left[\left(\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}\right)^2 f(x) + \frac{1}{2m}(m\omega x)^2 f(x) - im\omega x\frac{\hbar}{i}\frac{df}{dx}(x) + im\omega\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}(x f(x))\right] =$$

$$= \frac{1}{2m}\left[\left(\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}\right)^2 + (m\omega x)^2\right]f(x) - \frac{1}{2}\omega\hbar x\frac{df}{dx} + \frac{1}{2}\omega\hbar x\frac{df}{dx} + \frac{1}{2}\omega\hbar f(x) =$$

$$= \left(\frac{1}{2m}\left[\left(\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}\right)^2 + (m\omega x)^2\right] + \frac{1}{2}\hbar\omega\right)f(x)$$

Tehát a Schrödinger-egyenlet: $\left(a_- a_+ - \frac{1}{2}\hbar\omega\right)\psi = E\psi$

HF a másik fordán: $\left(a_+ a_- + \frac{1}{2}\hbar\omega\right)\psi = E\psi$ (HF: ellenőrizni)

kivonva: $(a_+a_- - a_-a_+ + \hbar\omega)\psi = 0 \Rightarrow [a_+, a_-]\psi = -\hbar\omega\psi$

vagyis $[a_+, a_-] = -\hbar\omega\mathbb{1}$ Fordítva: $[a_-, a_+] = \hbar\omega\mathbb{1}$

Állítás: Ha ψ megoldása a Schrödinger egyenletnek E energiával, akkor az $a_+\psi$ is megoldás $E+\hbar\omega$ energiával, és $a_-\psi$ is megoldás $E-\hbar\omega$ energiával.

Bizonyítás: $\left(a_+a_- + \frac{1}{2}\hbar\omega\right)a_+\psi = a_+a_-a_+\psi + \frac{1}{2}\hbar\omega a_+\psi =$

$$= a_+\left(a_-a_+ + \frac{1}{2}\hbar\omega\right)\psi = a_+\left(a_+a_- + \hbar\omega + \frac{1}{2}\hbar\omega\right)\psi = a_+\hbar\omega\psi + a_+E\psi =$$

$$= (\hbar\omega + E)a_+\psi$$

HF: bizonyítani a másikat □

$\Rightarrow$ Ha találunk egy megoldást, akkor a $\pm\hbar\omega$ egységekben változtatható.

a_+, a_-: léptető operátor

HF Állítás: Ha ψ normálható, akkor $a_+\psi$ is az, és $\int_{-\infty}^{\infty}|a_-\psi|^2 dx$ véges (tehát 0.)

HF Bi: HF (Azt kell kihasználni, hogy $a_+^\dagger = a_-$.)

Ez alapján a_--szal lépegetve, E negatívvá válna, de az nem lehet, tehát kell egy olyan ψ_0 alapmegoldás, amire $a_-\psi_0 = 0$.

$$\frac{1}{\sqrt{2m}}\left(\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx} - i\omega m x\right)\psi_0 = 0$$

$$\frac{d\psi_0}{dx} = -\frac{m\omega}{\hbar}x\,\psi_0(x) \Rightarrow \psi_0(x) = C\,e^{-\frac{m\omega}{\hbar}\frac{x^2}{2}}$$ (ezt kaptuk a analitikus esetben is)

ellenőrzés: $$(a_+a_- + \tfrac{1}{2}\hbar\omega)\psi_0 = a_+\underbrace{a_-\psi_0}_{0} + \tfrac{1}{2}\hbar\omega\psi_0 = \tfrac{1}{2}\hbar\omega\psi_0$$

Tehát $\underline{E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega}$

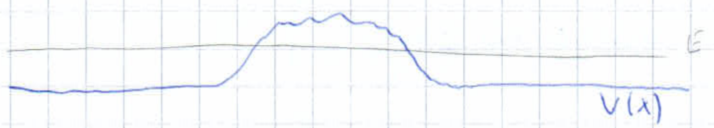
Ebből az összes állapot meghatározható: $\psi_n = (a_+)^n\psi_0$

$$E_n = \hbar\omega\left(n+\tfrac{1}{2}\right)$$

HF: mutasd meg, hogy ez u.a. mint az analitikus megoldás rekurziója HF

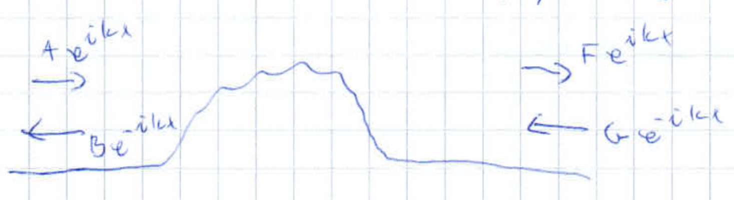
(3) 1D szórás: $(V(x\to\pm\infty) < E$, de $V(x_0) < E)$

Egyszerűség kedvéért $V(x\to\pm\infty) = 0$ és $E>0$



Két szélen síkhullám ⇒ A síkhullám nem normálható, tehát a korrekt megoldás az lenne, hogy egy $t\to-\infty$-ben szórnánk egy hullámcsomagot, megoldjuk az időfüggő Schr.-t, és megnéznénk $t\to\infty$-t.

praktikus megoldás:
- Ha folyamatosan jönnek a részecskék (az egyik sem normálható, így a síkhullám: $Ae^{\pm ikx}$ az $|A|^2$ intenzitású nyaláb leírása.
- Azt mondjuk, hogy az egy végtelen rendszer, és minél messzebb van végig, annál jobban hasonlít a síkhullámra.



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

A, B, F, G között lineáris összefüggést

$\psi(x\to-\infty) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$ A, G bemenő

$\psi(x\to\infty) = Fe^{ikx} + Ge^{-ikx}$ B, F kimenő

Állítás: Ha a 4-ből 2-t tudunk, a többi kiszámítható

Mivel a Schr. lineáris, ezért A, B, F, G között lineáris a kapcsolat;

$$\begin{pmatrix} B \\ F \end{pmatrix} = \underline{\underline{S}} \begin{pmatrix} A \\ G \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ G \end{pmatrix}$$ $\underline{\underline{S}}$: szórás mátrix

Mivel a Schr. megtartja a valószínűséget, a két oldal normája azonos:

$$|B|^2 + |F|^2 = |A|^2 + |G|^2$$ más szóval: S unitér.

Ha egyik oldalról a másik: $\begin{pmatrix} F \\ G \end{pmatrix} = \underline{\underline{T}} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix}$ ahol $\underline{\underline{T}}$ transzfer mátrix.

Mivel a bemenőket mi választjuk meg, legyen $G = 0$!

Ekkor $B = S_{11} A \qquad F = S_{21} A$

a valség megmaradás miatt: $\underbrace{\frac{|B|^2}{|A|^2}}_{R} + \underbrace{\frac{|F|^2}{|A|^2}}_{T} = 1$

R: reflexiós eh.

T: transzmissziós eh.

Konkrét feladat: V ismeretében adjuk meg $\underline{\underline{S}}$-t!

Legegyszerűbb példa: ha $V(x) = 0 \Rightarrow \underline{\underline{S}} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$

1) Véges potenciál gödör

$$V(x) = \begin{cases} -V_0 & -a < x < a \\ 0 & \text{else} \end{cases}$$

A megoldás: $\psi_I(x) = A e^{ikx} + B e^{-ikx}$ (1.)

$$\psi_{II}(x) = C \sin(\ell x) + D \cos(\ell x)$$

$$\psi_{III}(x) = F e^{ikx} + G e^{-ikx}$$

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

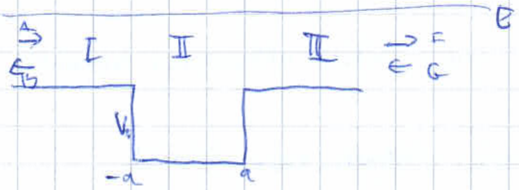
$\ell = \frac{\sqrt{2m(E+V_0)}}{\hbar}$

ψ és ψ' folytonos a-ban és $-a$-ban.

Ez 4 feltétel $\Rightarrow$ 4 ismeretlen

KVANTUM

6. előadás (10.01.)



$$\psi_I(x) = Ae^{ikx}+Be^{-ikx} \qquad k=\frac{1}{\hbar}\sqrt{2mE}$$

$$\psi_{II}(x) = C\sin(\ell x)+D\cos(\ell x) \qquad \ell=\frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(E+V_0)}$$

$$\psi_{III}(x) = Fe^{ikx}$$

4 határfeltétel: $\psi, \frac{d\psi}{dx}$ $-a, a$-ban folytonos.

(1) $Ae^{-ika}+Be^{ika} = -C\sin(\ell a)+D\cos(\ell a)$

(2) $C\sin(\ell a)+D\cos(\ell a) = Fe^{ika}$

(3) $ikAe^{-ika}-ikBe^{ika} = C\ell\cos(\ell a)+D\ell\sin(\ell a)$

(4) $C\ell\cos(\ell a)-D\ell\sin(\ell a) = ikFe^{ika}$

B, C, D, F-re ez 4 lineáris egyenlet, mindegyik A-val kifejezni! HF

$$F = \frac{e^{-2ika}}{\cos(2\ell a)-i\frac{\sin(2\ell a)}{2k\ell}(k^2+\ell^2)}A \implies T=\frac{|F|^2}{|A|^2}= \dots \quad \text{HF}$$

$$R = 1-T = \frac{|B|^2}{|A|^2} \text{ stb.} \quad \text{HF}$$

HF

Állítás: a szórásállapotokból megkaphatók a kötött állapotok ha $-V_0<E<0$.

$k \to ik$ egy.

Milyen feltétel a normálhatóság, azt hogy fogalmazzuk?

akkor egy ψ normálható, ha $A=G=0$, és emellett is igaz

$\begin{pmatrix}B\\F\end{pmatrix} = S\begin{pmatrix}A\\G\end{pmatrix}$ itt $B, F \neq 0$, de $A=G=0$

csak úgy lehet, ha S divergál.

S pólusai komplex impulzusnál adják a kötött állapotot.

Jelenleg S mind a 4 eleme egyszerre divergál

pl.: $S_{11} = \dfrac{e^{2ika}}{\cos(2\ell a)-i\frac{\sin(2\ell a)}{2k\ell}(k^2+\ell^2)}$ ez akkor divergál, ha

$\cos(2\ell a) = i\frac{\sin(2\ell a)}{2k\ell}(k^2+\ell^2)$ valós k, ℓ esetén ez nem jön, de ha $k=ik$

$$\cos(2\ell a) = \cancel{i}\frac{\sin(2\ell a)}{2k\ell}(\ell^2-k^2) \implies \operatorname{ctg}(2\ell\cdot a) = \frac{\ell^2-k^2}{2k\ell}$$

ennek vannak diszkrét megoldásai.

Schrödinger-egyenlet 3D-ben

$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi + V(\underline{x})\psi(\underline{x}) = E\psi(\underline{x})$ most csak kötött állapotokat keresünk

parciális lineáris differenciálegyenlet. Megoldás: változók szeparálásával

Pl.: $\psi(x,y,z) = X(x)Y(y)Z(z)$ Ez működik: - szabad részecskére

- 3D-s oszcillátor $V(x,y,z)=\frac{1}{2}\omega^2(x^2+y^2+z^2)$ ez HF

HF

- téglatestbe zárt részecske

A többiben általános ismeretek:

Ha egy $\hat{A}$ operátor $[\hat{H},\hat{A}]$ és $\hat{H}$-val ismerem a s.é. rendszerét, akkor ψ_n-k megválaszthatók úgy, hogy azok $\hat{A}$-nak is sajátállapotai legyenek.

Keressünk minél több, egymással kommutáló operátort! (ez most 3 lesz)

Állítás: Az impulzusmomentum kommutál $\hat{H}$-val, ha V csak r-től függ

Biz: $\underline{L} = \underline{r}\times\underline{p}$ volt. $L_i = \varepsilon_{ijk} x_j p_k$

kvantumban: $\hat{L}_i = -i\hbar\,\varepsilon_{ijk} x_j \partial_k$

állítások: $[\hat{L}_i, \hat{x}_j] = i\hbar\,\varepsilon_{ijk}\hat{x}_k$

$[\hat{L}_i, \hat{p}_j] = i\hbar\,\varepsilon_{ijk}\hat{p}_k$

$\Rightarrow$ bármely $\hat{v}_i(\underline{x},\underline{p})$-vel: $[\hat{L}_i, \hat{v}_j] = i\hbar\,\varepsilon_{ijk}\hat{v}_k$

HF

biz: HF

konkrétan $\underline{v} = \underline{r}\times\underline{p}$-re: $[\hat{L}_i, \hat{L}_j] = i\hbar\,\varepsilon_{ijk}\hat{L}_k$

állítás: $[\hat{L}_i, v^2] = 0$

biz: $L_i v_j v_j - v_j v_j L_i = L_i v_j v_j - v_j L_i v_j + v_j L_i v_j - v_j v_j L_i =$

$= [L_i, v_j]v_j + v_j[L_i, v_j] = i\hbar\,\varepsilon_{ijk} v_k v_j + v_j\, i\hbar\,\varepsilon_{ijk} v_k =$

$= i\hbar\,\varepsilon_{ijk}(v_k v_j + v_j v_k) = 0$

szimmetrikus

$\Rightarrow [\hat{L}_i, \hat{p}^2] = 0$ és $[L_i, r^2]$ $\Rightarrow$ $V(r) = V(r^2)$ $\Rightarrow$ $[L_i, V(r)] = 0$

$\Rightarrow [\hat{L}_i, \hat{H}] = 0$

Minden vektor^2-tel kommutál, így $[L_i, L^2] = 0$

A 3 operátor, ami jó lesz: $\hat{H}, \hat{L}^2, \hat{L}_3$

Célszerűn áttérni gömbi polárkoordinátákra:

$$x = x_1 = r \sin\vartheta \cos\varphi \qquad \varphi \in [0, 2\pi)$$
$$y = x_2 = r \sin\vartheta \sin\varphi \qquad \vartheta \in [0, \pi]$$
$$z = x_3 = r \cos\vartheta \qquad r \in [0, \infty)$$

Ezzel kifejezzük $\hat{L}$-eket: $L_i = -i\hbar\, \varepsilon_{ijk}\, x_j\, \partial_k$

$$\hat{L}_1 = i\hbar\left(\sin\varphi \frac{\partial}{\partial\vartheta} + \operatorname{ctg}\vartheta \cos\varphi \frac{\partial}{\partial\varphi}\right)$$

$$\hat{L}_2 = i\hbar\left(-\cos\varphi \frac{\partial}{\partial\vartheta} + \operatorname{ctg}\vartheta \sin\varphi \frac{\partial}{\partial\varphi}\right)$$

$$\hat{L}_3 = -i\hbar \frac{\partial}{\partial\varphi}$$

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2\left[\frac{1}{\sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial\vartheta}\left(\sin\vartheta \frac{\partial}{\partial\vartheta}\right) + \frac{1}{\sin^2\vartheta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right]$$

Vegyük észre, hogy csak ϑ és φ szerinti deriváltakat tartalmaz!

$$\Delta = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2 \frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2}\left[\frac{1}{\sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial\vartheta}\left(\sin\vartheta\frac{\partial}{\partial\vartheta}\right) + \frac{1}{\sin^2\vartheta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right] = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) - \frac{\hat{L}^2}{\hbar^2 r^2}$$

Beírva ezeket a Schr.-be:

$$\left[-\frac{\hbar}{2m}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{\hat{L}^2}{2mr^2}\right]\psi(r,\vartheta,\varphi) + V(r)\psi(r,\vartheta,\varphi) = E\cdot\psi(r,\vartheta,\varphi)$$

a szögekre csak $\hat{L}^2$ hat, tehát, ha találunk olyan ψ-t, ami $\hat{L}^2$ sajátállapota, akkor az egyenlet leegyszerűsödik 1D-be.

Mik $\hat{L}^2$ sajátállapotai?

TFH $V(r)$ nem nagyon szinguláris van! (kevésbé, mint $\frac{1}{r^2}$)

Ekkor ψ analitikus az origóban $\Rightarrow$ sorba fejthető.

$\psi(x_1, x_2, x_3) = \sum_{ijk} c_{ijk}\, x_1^i\, x_2^j\, x_3^k$ A legkisebb rendű nem 0 egy legyen ℓ!

gömbi nyelven: mivel minden x_i r-rel arányos, ezért $\psi(r\to 0, \vartheta, \varphi) \simeq r^\ell\, Y(\vartheta,\varphi)$

Tehát a Schr. $r \to 0$ esetén:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) r^\ell Y(\vartheta,\varphi) + \frac{r^\ell}{2m}\hat{L}^2 Y(\vartheta,\varphi) + \underbrace{r^2 V(r)\, r^\ell Y(\vartheta,\varphi)}_{\to 0} = \underbrace{E\, r^2 r^\ell Y(\vartheta,\varphi)}_{\to 0}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\ell(\ell+1)\, r^\ell Y(\vartheta,\varphi) + \frac{r^\ell}{2m}\hat{L}^2 Y(\vartheta,\varphi) = 0$$

$$L^2 Y = \hbar\, \ell(\ell+1)\, Y \quad \Rightarrow \quad L^2 \text{ sajátértékei a } \hbar\,\ell(\ell+1)$$

(a sajátállapotokat ebből még nem kaptuk, mert ez még csak $r \to 0$ esetén jó.)

Mivel $\hat{L}^2$ és $\hat{L}_3$ kommutál, $Y(\vartheta,\varphi)$ lehet van $\hat{L}_3$ saját altérben. Legyen a hozzá tartozó s. é. m!

$$-i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}Y(\vartheta,\varphi)=\hbar m Y(\vartheta,\varphi)$$ ← elsőrendű, lineáris, triviális diffegyenlet

$$\Rightarrow Y(\vartheta,\varphi)=e^{im\varphi}P_\ell^m(\vartheta)$$

Mivel φ szög, ezért m kvantált: $im0=im2\pi \Rightarrow m\in\mathbb{Z}$

Keressük Ψ-t, ahol $\Psi(r,\vartheta,\varphi)=R(r)Y(\vartheta,\varphi)$ és $\hat{L}^2Y(\vartheta,\varphi)=\hbar^2\ell(\ell+1)Y(\vartheta,\varphi)$

$\hat{L}_3Y(\vartheta,\varphi)=\hbar mY(\vartheta,\varphi)$

Írjuk fel a Schr.-t:

$$-\frac{\hbar^2}{2mr^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)RY+\frac{\hat{L}^2}{2mr^2}RY+V(r)RY=ERY$$

$$-\frac{\hbar^2}{2mr^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)RY+\frac{\hbar^2\ell(\ell+1)}{2mr^2}RY+V(r)RY=ERY \qquad /\cdot\frac{1}{Y}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2mr^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)R+\left[V(r)+\frac{\hbar^2\ell(\ell+1)}{2mr^2}\right]R=ER$$ ez már csak r-től függ

$$u(r):=rR(r)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2mr^2}\frac{d^2u}{dr^2}+\underbrace{\left[V(r)+\frac{\hbar\ell(\ell+1)}{2mr^2}\right]}_{V_{eff}(r)}u=Eu$$

Folyt köv

KVANTUM

7. előadás (10.04.)

Gömbszimmetrikus potenciálban vizsgáljuk a Schr.-t:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi + V(r)\psi = E\psi$$

Keressük $\hat{L}^2$ sáf.-t, amik $\hat{L}_z$ s.á.-i is:

$$\hat{L}^2\psi = \hbar^2 \ell(\ell+1)\psi \qquad \ell \geq 0, \text{ egész}$$

$$\hat{L}_z\psi = \hbar m \psi \qquad m \text{ egész.}$$

$$\hat{H}\psi = E\psi$$

$\psi(r,\vartheta,\varphi) =: R(r)Y(\vartheta,\varphi)$ ahol $\hat{L}^2 Y(\vartheta,\varphi) = \hbar\ell(\ell+1)Y(\vartheta,\varphi)$

$$\hat{L}_z Y(\vartheta,\varphi) = \hbar m Y(\vartheta,\varphi)$$

Ezzel, a Schr.-t visszavezettük a 1D-s esetre:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2u}{dr^2} + \underbrace{\left[V(r) + \frac{\hbar^2\ell(\ell+1)}{2mr^2}\right]}_{V_{eff}}u = Eu \qquad \text{és } \psi(r,\vartheta,\varphi) = \frac{u(r)}{r}Y(\vartheta,\varphi)$$

Hogyan akarjuk normálni:

$\int |\psi|^2 d^3x = 1$ átírva u-ra!

$$\int |R(r)Y(\vartheta,\varphi)|^2 r^2\,dr\,d\Omega = \underbrace{\int |Y(\vartheta,\varphi)|^2 d\Omega}_{Y\text{-t úgy normáljuk, hogy ez 1 legyen}} \cdot \int \underbrace{|R(r)|^2 r^2}_{|u|^2} dr \overset{!}{=} 1$$

Két normálási feltétel $\int |Y|^2 d\Omega \overset{!}{=} 1$

$\int |u|^2 dr \overset{!}{=} 1$ (Ez persze konvenció, hiszen elegendő annyi, hogy a két integrál szorzata 1)

Gömbfüggvények

Keressük $Y(\vartheta,\varphi)$ amelyre $\hat{L}^2 Y(\vartheta,\varphi) = \hbar^2\ell(\ell+1)Y$ 1)

$\hat{L}_z Y(\vartheta,\varphi) = \hbar m Y$ 2)

Y helyett keressük $r^\ell Y$-t: $\quad r^\ell Y = \sum_{\substack{e_1,e_2,e_3 \\ e_1+e_2+e_3=\ell}} \alpha_{e_1e_2e_3} x_1^{e_1}x_2^{e_2}x_3^{e_3}$

Állítás: 1) $\iff \Delta(r^\ell Y) = 0$ ez HF

$$x_\pm := x_1 \pm i x_2 = r\sin\vartheta\underbrace{(\cos\varphi \pm i\sin\varphi)}_{e^{\pm i\varphi}}$$

$$r^\ell Y = \sum_{\substack{\nu_+\nu_- c_3 \\ \nu_++\nu_-+c_3=\ell}} \beta_{\nu_+\nu_-c_3}\, x_+^{\nu_+} x_-^{\nu_-} x_3^{c_3} = \sum_{\substack{\nu_+\nu_- c_3 \\ \nu_++\nu_-+c_3=\ell}} r^\ell (\sin\vartheta)^{\nu_++\nu_-} e^{i(\nu_+-\nu_-)\varphi} (\cos\vartheta)^{c_3}$$

$L_3 = -i\hbar \frac{\partial}{\partial\varphi}$ tehát:

$$\hat{L}_3 r^\ell Y = -i\hbar \frac{\partial}{\partial\varphi}\left(r^\ell Y(\vartheta,\varphi)\right) = \hbar(\nu_+-\nu_-) r^\ell Y(\vartheta,\varphi) \stackrel{!}{=} \hbar m r^\ell Y$$

$$\Rightarrow \nu_+ - \nu_- = m$$

m maximális, ha ν_+ maximális és $\nu_- = 0$

m minimális, ha $\nu_+ = 0$ és ν_- minimális

$m_{max} = \ell$ és $m_{min} = -\ell \Rightarrow$ m-re $2\ell+1$ értéket vehet fel.

HF

Áll: felhasználva, hogy $\Delta(r^\ell Y) = 0$ és kifejezve az adalékos feltételeken, azt kapjuk, hogy minden $\beta_{\nu_+\nu_-c_3}$ adott a $\nu_+\nu_- c_3$ fv-e.

pl.: $\ell = 0,\ m = 0 \Rightarrow \nu_+ = \nu_- = c_3 = 0 \Rightarrow Y_\ell^m = Y_0^0 = \text{const} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$

$\ell = 1,\ m = 1 \Rightarrow \nu_+ = 1\ \nu_- = 0\ c_3 = 0 \Rightarrow r Y_1^1 = \beta_{100}\, r \sin\vartheta\, e^{i\varphi}$

ahol $\beta_{100} = \sqrt{\frac{3}{8\pi}}$

HF

HF: $\ell = 2\quad m = 0$

Általánosan: $Y_\ell^m(\vartheta,\varphi) = P_\ell^m(\vartheta)\, e^{im\varphi}$ ahol $P_\ell^m(\vartheta)$ asszociált Legendre-fv-k:

$$: -\frac{1}{\sin\vartheta}\frac{d}{d\vartheta}\left(\sin\vartheta \frac{dP}{d\vartheta}\right) - \frac{m^2}{\sin^2\vartheta} P = \ell(\ell+1)P$$

ha $m = 0$: $P_\ell^0(\vartheta) = P_\ell(\vartheta)$ Legendre-polinomok

$Y_\ell^m(\vartheta,\varphi)$ fv-ek (gömbfv-ek) ortonormált H-teret a szögfüggő fv-ek halmazán

$$\int Y_\ell^{m*}(\vartheta,\varphi)\, Y_{\ell'}^{m'}(\vartheta,\varphi)\, d\Omega = \delta_{\ell\ell'}\delta_{mm'}$$

Y_ℓ^m paritása: $(-1)^\ell$

$$Y_\ell^m(\pi-\vartheta, \varphi+\pi) = (-1)^\ell Y_\ell^m(\vartheta,\varphi)$$

Schr.-egyenlet konkrét radiális tabvak:

H-atom (H-szerű)

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{r}$$

akkor lesz kötött állapot, ha $E<0$

$$\Psi(r,\vartheta,\varphi) = \frac{u(r)}{r} Y_e^m(\vartheta,\varphi)$$

radiális egyenlet: $$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2u}{dr^2} - \frac{Z^2e^2}{r}u + \frac{\hbar^2 e(e+1)}{2mr^2}u = Eu$$

Legyen $k^2 = -\frac{2mE}{\hbar}$

$$-u'' + \left[-\frac{2mZ}{r\hbar^2}e^2 + \frac{e(e+1)}{r^2}\right]u = -k^2 u$$

$\rho := kr$ $\quad \xi :=$ ami a első tagban van $= \frac{2mZe^2}{k\hbar^2}$

$$-\frac{d^2u}{d\rho^2} + \left[-\frac{\xi}{\rho} + \frac{e(e+1)}{\rho^2}\right]u = -u$$

Tudjuk, hogy $\rho \to 0$ esetén: $u(\rho) \approx \rho^{e+1}$

továbbá: $\rho \to \infty$ esetén: $\frac{d^2u}{d\rho^2} \approx u \Rightarrow u \sim e^{\pm\rho}$ $\quad$ mivel $e^{+\rho}$ nem normálható $u \sim e^{-\rho}$

Keressük u-t a alábbi alakban:
$$u(\rho) = \rho^{e+1} e^{-\rho} F(\rho)$$

Ekkor: $$\frac{du}{d\rho} = (e+1)\rho^e e^{-\rho}F(\rho) - \rho^{e+1}e^{-\rho}F(\rho) + \rho^{e+1}e^{-\rho}\frac{dF}{d\rho} = \rho^{e+1}e^{-\rho}\left[\frac{(e+1)}{\rho}F - F + \frac{dF}{d\rho}\right]$$

$$\frac{d^2u}{d\rho^2} = \left(-\frac{e+1}{\rho^2}F + \frac{e+1}{\rho}F' - F' + F''\right)\rho^{e+1}e^{-\rho} + \left(\frac{e+1}{\rho}F - F + F'\right)\frac{(e+1)}{\rho}\rho^{e}e^{-\rho} - \left(\frac{e+1}{\rho}F - F + F'\right)\rho^{e+1}e^{-\rho} =$$

$$= \rho^{e+1}e^{-\rho}\left[\left(-\frac{e+1}{\rho^2} + \frac{(e+1)^2}{\rho^2} - \frac{e+1}{\rho} - \frac{e+1}{\rho} + 1\right)F + \left(\frac{e+1}{\rho} - 1 + \frac{e+1}{\rho} - 1\right)F' + F''\right]$$

$$= \rho^{e+1}e^{-\rho}\left[\left(\frac{e(e+1)}{\rho^2} - \frac{2(e+1)}{\rho} + 1\right)F + \left(\frac{2(e+1)}{\rho} - 2\right)F' + F''\right]$$

Beírva a Schr.-be:

$$\left[\frac{e(e+1)}{\rho^2} - \frac{2(e+1)}{\rho} + 1\right]F + \left(\frac{2(e+1)}{\rho} - 2\right)F' + F'' = -\frac{\xi}{\rho}F + \frac{e(e+1)}{\rho^2}F + F$$

$$F'' + \left(2\frac{e+1}{\rho} - 2\right)F' + \frac{\xi - 2(e+1)}{\rho}F = 0$$

Hatványsor közelítés:

$$F(\rho) = \sum_{j=0}^{\infty} a_j \rho^j \qquad \text{ahol } a_0 \neq 0$$

$$\frac{F}{\rho} = \sum_{j=0}^{\infty} a_j \rho^{j-1} \qquad \frac{F'}{\rho} = \sum_{j=0}^{\infty} a_j j \rho^{j-2} = \sum_{j=1}^{\infty} a_{j+1} (j+1) \rho^{j-1}$$

$$F'' = \sum_{j=0}^{\infty} a_{j+1} j (j+1) \rho^{j-1}$$

$$\sum_{j=0}^{\infty} \rho^{j-1} \left[a_{j+1} j (j+1) + 2(\ell+1) a_{j+1} (j+1) - 2 a_j j + (\xi - 2\ell - 2) a_j \right] = 0 \qquad \forall \rho\text{-ra}$$

Ez rekurziót ad a_j-re: $a_{j+1} = \dfrac{-\xi + 2\ell + 2 + 2j}{j(j+1) + 2(\ell+1)(j+1)}$

a kezdő érték 0, ha $a_0 \neq 0$

$F(\rho \to \infty) = ?$ ehhez $a_{j \to \infty}$: $a_{j+1} \approx \frac{2}{j} a_j$ tehát $a_{j \gg 1} \approx C \frac{2^j}{j!}$

ekkor $F(\rho \to \infty) = C \sum_{j=0}^{\infty} \frac{2^j}{j!} \rho^j = C e^{2\rho}$ pont mint az oszcillátornál.

$\Rightarrow$ a_j valahol útközben lenullázódik

$\exists j$: $2j + 2\ell + 2 - \xi = 0 \Rightarrow \xi = 2(\underbrace{j + \ell + 1}_{n}) = 2n \qquad n = 1, 2, 3 \ldots$ főkvantumszám

$\Rightarrow$ akkor véges a hatványsor, ha $\xi = 2n$
mivel $n > \ell$: $\ell = 0, 1, \ldots n-1$

$$\Rightarrow \frac{2mZe^2}{\kappa \hbar^2} = 2n \Rightarrow \frac{\kappa^2 \hbar^4}{m^2 Z^2 e^4} = \frac{1}{n^2} \Rightarrow -\frac{2mE}{\hbar^2} \frac{\hbar^4}{m^2 Z^2 e^4} = \frac{1}{n^2}$$

$$\Rightarrow \underline{E = -\frac{m Z^2 e^4}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2}}, \quad R = \frac{mZe^2}{\hbar^2} \frac{1}{n} = \frac{1}{na} \quad \text{ahol } a \text{ a Bohr-sugár}$$

KVANTUM

7. előadás (10.08)

Előző óráról:

A H-atom hullámfüggvényeiben $F(\rho)$ kell

asszociált Laguerre-polinomok : $L^{2l+1}_{n-l-1}(2\rho)$

a polinom fokszáma $n-l-1$

pl.: $n-l-1=0 \qquad F(\rho)=1$

$n-l-1=1 \qquad F(\rho)=1-\frac{1}{l+1}\rho$

Összefoglalva:

$\hat{H}\psi = E\psi$

ψ 3 kvantumszámtól függ

n: főkvantumszám $\quad n=1,2,3\ldots \qquad E\sim\frac{1}{n^2}$

l: mellék kvantumszám; $\quad l=0,\ldots n-1$

m: mágneses kvantumszám : $\quad m: -l,-l+1\ldots l-1,l$

Mivel az energia csak n-től függ, az energia degenerált lesz, hiszen adott n-re

$$\sum_{l=0}^{n-1}(2l+1)=n^2$$ db állapot van

$n=1$ alapállapot $1s$

$n=2 \qquad l=0 \qquad l=1$

$\qquad 2s \qquad 2p$

$n=3 \qquad l=0 \qquad l=1$

$\qquad 3s \qquad 3p \qquad 3d$

2 test probléma

valóságban a proton is mozoghat
$$V(|r_e - r_m|) = -\frac{e^2}{|r_e - r_m|}$$

redukált tömeg $\mu = \frac{m_e m_m}{m_e + m_m}$

többrészecskés QM: $\psi(\underline{x}) \to \psi(\underline{x}_e, \underline{x}_N)$

mindkét részecskére az imp új koord operátor: $\hat{p}_e = -i\hbar \nabla_e$

$p_M = -i\hbar \nabla_m$

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_e^2}{2m_e} + \frac{\hat{p}_M^2}{2m_m} + V(|x_e - x_m|)$$

Legyen $\underline{r} := (\underline{r}_e - \underline{r}_m)$ $\quad \underline{R} := \frac{m_e \underline{r}_e + m_m \underline{r}_m}{m_e + m_m}$

$$\hat{p} := \mu\left(\frac{\hat{p}_e}{m_e} - \frac{\hat{p}_m}{m_m}\right) \qquad \hat{\underline{P}} = \hat{p}_1 + \hat{p}_m$$

Állítás: $\hat{p} = -i\hbar \nabla_r$

HF $\quad \hat{P} = -i\hbar \nabla_R$

$$\hat{H} = \frac{-\hbar^2}{2\mu}\nabla_r^2 - \frac{\hbar^2}{2(m_e+m_m)}\nabla_R^2 + V(|\underline{r}|)$$

Schr-egyenlet az új változókban:
$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla_r^2\psi(\underline{r},\underline{R}) - \frac{\hbar^2}{2(m_e+m_m)}\nabla_R^2\psi(\underline{r},\underline{R}) + V(r)\psi(\underline{r},\underline{R}) = E(\underline{r},\underline{R})$$

Keressük a megoldást:
$$\psi(\underline{r},\underline{R}) = \psi_1(\underline{r})\psi_2(\underline{R}) \quad \text{alakban.}$$

Beírva:
$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{(\Delta\psi_1)}{\psi_1} - \frac{\hbar^2}{2(m_e+m_m)}\frac{(\Delta\psi_2)}{\psi_1} + V(r) = E \ldots$$

mindkét változótól függő rész konstans.

(1): $-\frac{\hbar^2}{2(m_e+m_m)}\Delta\psi_2 = E_{TKP}\psi_2$ $\quad$ ez a szabad Schrödinger

$$\psi_2 = c \cdot e^{ikR} \qquad E_{TKP} = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

(2): $-\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta\psi_1 + V(r)\psi_1 = \underbrace{(E - E_{TKP})}_{\varepsilon}\psi_1$ $\quad$ ez pont a H-atom Schr-egyenlete.

akkor van megoldás, ha $\varepsilon = -\frac{\mu Z^2 e^4}{2\hbar^2}\frac{1}{n^2}$

A teljes energia: $E = \varepsilon + E_{TKP} = \frac{\hbar^2 K^2}{2(m_e + m_m)} - \frac{\mu Z^2 e^4}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2}$

A spektrálvizsgálatok során az első tag kiesik, tehát csak ε-tól függ, ami csak μ-től függ.

Ezt ki lehet mérni: $\mu = 0{,}99945\ m_e$ $\quad {}^1H$

$\mu = 0{,}99973\ m_e$ $\quad {}^2H$

Kvantummechanika általános elvei

A Schr.-egyenletben a $\psi(x)$-ben a koordinátának valami kitüntetett szerepe van, mivel a $|\psi|^2$ a koordináta eloszlását adja meg.

Az kéne, hogy ne legyen semmilyen fizikai ~~[illegible]~~ mennyiségnek ilyen szerepe

Dirac, Neumann-féle modell.

- Állapotok:

  A szuperpozíció elvét kéne átültetni, és, hogy már egész komplex legyen.
  $\Rightarrow$ A fizikai állapotok egy komplex skalárok feletti vektortér.

  A valószínűséghez szükség van egy skalárszorzatra, ami összekapcsolja az állapotokat

Vektortér + skalárszorzat + teljesség (a határban) = Hilbert-tér

1. posztulátum: Egy fizikai rendszer lehetséges állapotait ~~egy~~ komplex $\mathcal{H}$ Hilbert-tér elemei reprezentálják.

$\psi \in \mathcal{H}$ nem feltétlen fv.

$\phi_i \in \mathcal{H}$ bázis $\Leftrightarrow$ fiz. mennyiség lehetséges állapotai

$$\psi = \sum_i \alpha_i \phi_i \qquad \psi' = \sum_i \alpha_i' \phi_i \qquad \text{akkor} \quad \begin{aligned} \alpha_i &= (\phi_i, \psi_i) \\ \alpha_i' &= (\phi_i, \psi_i') \end{aligned}$$

ekkor: $$(\psi, \psi') = \sum_i \frac{(\phi_i, \psi)^* (\phi_i, \psi')}{(\phi_i, \phi_i)}$$

KVANTUM

9. óra (10.11.)

Interpretációs posztulátum:

Ha a rendszer $\psi \in \mathcal{H}$ állapotban van, annak valószínűsége, hogy egy mérés után ϕ_i állapotba kerül

$$P(\psi \to \phi_i) = \frac{|(\phi_i, \psi)|^2}{(\psi,\psi)(\phi_i,\phi_i)}$$

Mivel $(\psi,\psi) = \sum_i \frac{(\phi_i,\psi)^*(\phi_i,\psi)}{(\phi_i,\phi_i)} = \sum_i \frac{|(\phi_i,\psi)|^2}{(\phi_i,\phi_i)} = \sum_i (\psi,\psi) P(\psi \to \phi_i)$ $\forall \psi$-re

ezért $\sum_i P(\psi \to \phi_i) = 1$ tehát a valószínűség értelmes

Észrevétel: $\psi \to \alpha\psi$, $\phi_i \to \beta\phi_i$ -re a $P(\psi \to \phi_i)$ nem változik

$\Rightarrow$ ψ és $\alpha\psi$ állapot nem különbözik $\Rightarrow$ érdemes normálni

Legyen $|\psi|^2 = (\psi,\psi) = 1$ $\forall\psi$-re!

Ekkor $(\psi,\psi') = \sum_i (\phi_i,\psi)^*(\phi_i,\psi') = \sum_i \alpha_i^* \alpha_i'$

$P(\psi \to \phi_i) = |(\phi_i,\psi)|^2$

Ha egy bázisra $(\phi_i,\phi_j) = \delta_{ij}$ az egy ON. bázis.

Tehát adott állapotot többen ψ-vel le;

Azt a $\{\psi' \in \mathcal{H} \mid \psi' = e^{i\phi}\psi,\ (\psi,\psi)=1,\ \psi \in \mathcal{H}\}$ halmazt sugárnak hívjuk.

$\Rightarrow$ A fizikai állapotokat a Hilbert-tér sugarai reprezentálják.

Következmény: Egy olyan trafó, ami az állapotot önmagába viszi, nem feltétlen viszi a vektort is önmagába (pl.: feles spinű részecskék.)

Dirac-jelölés: $(\psi_1,\psi_2) =: \langle\psi_1|\psi_2\rangle$ braket

$\langle\psi_1|$ bra, $|\psi_2\rangle$ ket $\leftarrow$ duális terek

$|\psi_1\rangle = \alpha_n^{(1)}|\phi_n\rangle$, $|\psi_2\rangle = \alpha_n^{(2)}|\phi_n\rangle$ ahol $\alpha_n^{(1)} = \langle\phi_n|\psi_1\rangle$ és $\alpha_n^{(2)} = \langle\phi_n|\psi_2\rangle$

$$\langle\psi_1|\psi_2\rangle = \sum_n \alpha_n^{*(1)}\alpha_n^{(2)} = \sum_n \langle\psi_1|\phi_n\rangle\langle\phi_n|\psi_2\rangle = \langle\psi_1|\underbrace{\sum_n |\phi_n\rangle\langle\phi_n|}_{\mathbb{1}\text{ operátor}}|\psi_2\rangle$$

Folytonos állapotok:

ahol csak egy folytonos paraméterrel jellemezhetjük egy rendszert:

$\phi_i \to \phi_\xi$ vagy kvalitás, vagy ξ diszkretizáljuk, majd $d\xi \to 0$.

normálás: $(\phi_\xi, \phi_{\xi'}) = \delta(\xi - \xi')$

kifejtés: $\psi = \int \alpha_\xi \phi_\xi \, d\xi$ ahol $\alpha_\xi = (\phi_\xi, \psi)$

$(\psi, \psi') = \int \alpha_\xi^* \alpha_\xi \, d\xi$

valószínűség: $dP(\psi \to \phi_\xi) = |(\phi_\xi, \psi)|^2 d\xi$

pl.: hely

ϕ_x: hely sajátállapot

$\psi \in \mathcal{H}$-ra: $\psi = \int \alpha_x \phi_x \, dx$ ahol $\alpha_x = (\phi_x, \psi)$

$dP(\psi \to \phi_x) = |(\phi_x, \psi)|^2 dx = |\alpha_x|^2 dx$

$\Rightarrow \alpha_x = \psi(x)$ az eddigi hullámfv.-k a hely szerinti kifejtés volt.

2. posztulátum: $\forall$ fizikai mennyiség egy Hermitikus operátor

operátor: $\mathcal{H} \to \mathcal{H}$ leképezés

$\hat{A}, \hat{B} : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$

szorzat: $(\hat{A}\hat{B})\psi = \hat{A}(\hat{B}\psi)$

kommutátor: $[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$

sz. szorzat: $(\alpha \hat{A})\psi = \alpha \cdot (\hat{A}\psi)$

összeadás: $(\hat{A} + \hat{B})\psi = \hat{A}\psi + \hat{B}\psi$

nulloperátor: $\exists 0 : 0\psi = 0 \quad \forall \psi$-re

- $0\hat{A} = \hat{A}0 = 0$
- $\hat{A} + 0 = \hat{A}$
- $\alpha 0 = 0$

egység operátor: $\exists \mathbb{1} : \mathbb{1}\psi = \psi \quad \forall \psi$-re

- $\mathbb{1}\hat{A} = \hat{A}\mathbb{1} = \hat{A}$

linearitás: $\hat{A}(\alpha \psi_1 + \beta \psi_2) = \alpha \hat{A}\psi_1 + \beta \hat{A}\psi_2$

adjungált: $(\psi_1, \hat{A}^+ \psi_2) = (\hat{A}\psi_1, \psi_2)$

- $A^{++} = A$
- $(AB)^+ = B^+ A^+$
- $(\alpha \hat{A})^+ = \alpha^* \hat{A}^+$
- $(\hat{A} + \hat{B})^+ = \hat{A}^+ + \hat{B}^+$

mátrix mint való repr.: $A_{ij} = (\phi_i, \hat{A}\phi_j)$ ha ϕ ONB.

HF: $(\hat{A}\hat{B})_{ij} = \sum_k A_{ik} B_{kj}$

folyt. esetben: $A_{\xi'\xi} = \int A_{\xi'\xi''} B_{\xi''\xi} \, d\xi''$

sajátérték probléma: $\hat{A}\psi = a\psi \quad a \in \mathbb{C}$

ha $\hat{A}^+ = \hat{A}$: $\hat{A}\phi_i = a_i\phi_i$ ahol $a_i \in \mathbb{R}$
ϕ_i ONB $\forall i$-re.

$\hat{A}$ teljesen adott $\Longleftrightarrow$ ϕ_i s.á.-k
a_i s.é.-k ismertek

a 2. posztulátum értelme: A mennyiségnek van egy állapota és egy mért értéke $\Longleftrightarrow$
$\Longleftrightarrow$ hermitikus operátor.

a_i mérésének valószínűsége: $P(a_i) = P(\psi \to \phi_i) = |(\phi_i, \psi)|^2$

Ez alapján a várható érték: $\langle \hat{A} \rangle_\psi = \sum_i P(\psi \to \phi_i)\, a_i = \sum_i |(\phi_i, \psi)|^2 a_i = \sum_i (\phi_i, \psi)^* (\phi_i, \psi)\, a_i =$

$$= \sum_{ij} (\psi, \phi_i)\delta_{ij} a_j (\phi_j, \psi) = \sum_{ij} (\psi, \phi_i)(\phi_i, \phi_j)\, a_j (\phi_j, \psi) =$$

$$= \sum_{ij} \psi_i^* A_{ij} \psi_j =$$

$$= \sum_{ij} \psi_i^* A_{ij} \psi_j = (\psi, \hat{A}\psi) = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle$$

operátorok fv-i:

$\hat{A}\phi_i = a_i\phi_i \Rightarrow \hat{A}^n \phi_i = a_i^n \phi_i \Rightarrow$ tetsz. fv-re: $f(\hat{A})\phi_i = f(a_j)\phi_i$

$\Rightarrow$ ha $\psi = \sum_i \alpha_i \phi_i$

$$f(\hat{A})\psi = \sum_i f(\hat{A})\alpha_i\phi_i = \sum_i \alpha_i f(a_i)\phi_i = f(a_i)\psi$$

$\Rightarrow$ általában: $\langle f(\hat{A}) \rangle_\psi \neq f(\langle \hat{A} \rangle)$

Cauchy – Schwartz – egyenlőtlenség:

$\forall\, \psi, \psi' \in \mathcal{H}$-ra: $|(\psi', \psi)|^2 \leq |\psi|^2 |\psi'|^2$

$=$ ha $\psi = \psi'\alpha$

KVANTUM

10. előadás (10.15.)

Határozatlansági reláció:

$\psi \in \mathcal{H} \qquad \|\psi\|^2 = 1$

$\hat{A}$ és $\hat{B}$ mennyiségek várható értéke: $\langle A\rangle_\psi = \langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle$

$\langle B\rangle_\psi = \langle\psi|\hat{B}|\psi\rangle$

Def: Mennyiség szórása: $\Delta_\psi \hat{A} = \sqrt{\langle (A-\langle A\rangle_\psi)^2\rangle_\psi}$ A szórása a ψ állapotban

$\psi_A := (A - \langle A\rangle \mathbb{1})\psi$ ekkor $\Delta_\psi A = \sqrt{(\psi_A, \psi_A)}$

Írjuk be ezeket a CBS-egyenlőtlenségbe:

$$|(\psi_A, \psi_B)| \le (\Delta_\psi A)(\Delta_\psi B)$$

bal oldal: $(\psi_A, \psi_B) = ((A-\langle A\rangle)\psi, (B-\langle B\rangle)\psi) = (\psi, (A-\langle A\rangle_\psi)(\hat{B}-\langle B\rangle_\psi)\psi) =$

$$= (\psi, AB\psi) + \langle A\rangle_\psi\langle B\rangle_\psi - \langle B\rangle_\psi(\psi, A\psi) - \langle A\rangle(\psi, B\psi) =$$

$$= (\psi, AB\psi) - \langle A\rangle_\psi\langle B\rangle_\psi$$

$\forall\ \mathbb{C}$ számra: $|(\psi_A, \psi_B)| \ge |\mathrm{Im}(\psi_A, \psi_B)|$

$$\ge \mathrm{Im}(\psi, AB\psi) = \frac{1}{2i}\left[(\psi, AB\psi) - (\psi, AB\psi)^*\right] = \frac{1}{2i}\left[(\psi, AB\psi) - (AB\psi, \psi)\right] =$$

$$= \frac{1}{2i}\left[(\psi, AB\psi) - (\psi, BA\psi)\right] = \frac{1}{2i}(\psi, [A,B]\psi)$$

$$|\mathrm{Im}(\psi, AB\psi)| = \frac{1}{2}|(\psi, [A,B]\psi)|$$

$$\Rightarrow \boxed{(\Delta_\psi A)(\Delta_\psi B) \ge \frac{1}{2}|(\psi, [\hat{A},\hat{B}]\psi)|}$$

Ha $[\hat{A},\hat{B}] = 0 \Rightarrow$ lehet mindkét mennyiség határozott, szórása 0.

Ha $[\hat{A},\hat{B}] \neq 0$, $\Rightarrow$ nem lehet mindkét mennyiség egyszerre meghatározott

pl.: $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar\mathbb{1}$

Spur (trace)

Def: legyen φ_i bázis $\mathcal{H}$-n! $\hat{A}$ operátor $\mathcal{H}$-n

$$\mathrm{Tr}\,\hat{A} = \sum_i (\varphi_i, A\varphi_i)$$

Áll: Ha $\mathrm{Tr}\,\hat{A}$ létezik, akkor nem függ a bázistól.

trace tulajdonságai:

$$Tr(\alpha\hat A + \beta\hat B) = \alpha\, Tr\,\hat A + \beta\, Tr\,\hat B$$

$$Tr(A^+) = (Tr\,A)^*$$

$$Tr(A_1 A_2 A_3 \cdots A_n) = Tr(A_n A_1 \cdots A_{n-1})$$

~~végig~~

érdekesség:

Ha d véges: $Tr([\hat x,\hat p]) = Tr(\hat x\hat p - \hat p\hat x) = Tr(\hat x\hat p) - Tr(\hat p\hat x) = 0$

$$Tr([\hat x,\hat p]) = Tr(i\hbar 1\!\!1) = i\hbar d$$

$\Rightarrow$ ez a kommutátor reláció véges dimenziójú H-n nem megvalósítható

Operátorok állapotokkal:

diád: $\psi,\phi \in \mathcal{H}$ két állapot, $[\psi,\phi^+]$ operátor (Dirac-kal: $|\psi\rangle\langle\phi|$)

$[\psi,\phi^+]\chi = \psi(\phi,\chi)$ Dirac jelölés: $(|\psi\rangle\langle\phi|)|\chi\rangle = |\psi\rangle\langle\phi|\chi\rangle$

adjungált: $[\psi,\phi^+] = [\phi,\psi^+]$

diádok szorzata is diád: $(|\psi_1\rangle\langle\psi_2|)(|\psi_3\rangle\langle\psi_4|) = \langle\psi_2|\psi_3\rangle\, |\psi_1\rangle\langle\psi_4|$

spec. eset: $|\phi\rangle\langle\phi|$ ahol $|\phi|^2=1$

ekkor $|\phi\rangle\langle\phi|$ projektor

ha ϕ_i bázis:

$|\phi_i\rangle\langle\phi_i|\psi\rangle = c_i|\phi_i\rangle$ ahol $\sum_i c_i|\phi_i\rangle = |\psi\rangle$

Összes átírás: $\sum_i |\phi_i\rangle\langle\phi_i|\psi\rangle = \sum_i c_i|\phi_i\rangle = |\psi\rangle$

$$\Rightarrow \sum_i |\phi_i\rangle\langle\phi_i| = 1\!\!1$$

Hasonlóan, ha $|\phi_i\rangle$ egy $\hat A$ herm. op. sajátállapotai:

$$\sum_i a_i|\phi_i\rangle\langle\phi_i|\psi\rangle = \sum_i c_i|A\phi_i\rangle = A\sum_i c_i|\phi_i\rangle = A|\psi\rangle$$

$$\Rightarrow \sum_i a_i|\phi_i\rangle\langle\phi_i| = \hat A$$

Áll: $f(A) = \sum_i f(a_i)|\phi_i\rangle\langle\phi_i|$

kevert állapot:

Sokszor nem tudjuk pontosan, milyen állapotban van a rendszer, de annyit tudunk, hogy milyen $\psi_n \in \mathcal{H}$ állapotban van a rendszer, és az ezekhez tartozó valószínűségeket: $\sum_n p_n = 1$

Ezért definiálni egy sűrűség operátort:

$$\rho = \sum_n p_n |\psi_n\rangle\langle\psi_n|$$

Ezzel már minden kiszámolható.

Pl.: mi a valószínűsége, hogy mérés után a rendszer $|\phi_i\rangle$ állapotban van?

$$P(\rho \to \phi_i) = \sum_n p_n P(\psi_n \to \phi_i) = \sum_n p_n |\langle\phi_i|\psi_n\rangle|^2 = \sum_n p_n \langle\phi_i|\psi_n\rangle\langle\psi_n|\phi_i\rangle =$$

$$= \langle\phi_i|\rho|\phi_i\rangle$$

Várható érték:

$$\langle\hat{A}\rangle_\rho = \sum_{i,n} p_n a_i \langle\phi_i|\psi_n\rangle\langle\psi_n|\phi_i\rangle = \sum_{i,n} p_n \langle\phi_i|\psi_n\rangle\langle\psi_n|\hat{A}\phi_i\rangle =$$

$$= \sum_i \langle\phi_i|\hat{\rho}\hat{A}|\phi_i\rangle = \mathrm{Tr}(\hat{\rho}\hat{A})$$

Viszont ρ felírása diadokkal nem egyértelmű (de a különböző alakok ekvivalensek)

ρ minden s. é. interpretálható valószínűségként

$\Rightarrow$ minden sajátértéke valós és $0 \leq \lambda_i \leq 1$

$\Rightarrow \sum_i \lambda_i = 1$

tiszta állapot: $\rho = \begin{pmatrix} 1 & & \\ & 0 & \\ & & 0 \end{pmatrix}$

kevert állapot: az összes többi

Neumann-entrópia: $S[\rho] = -k_B \mathrm{Tr}(\rho \ln \rho) = -k_B \sum_{\rho_i \neq 0} \rho_i \ln \rho_i$

azt méri, hogy mennyire kevert az állapot

Pl.: kanonikus eloszlás:

$$\hat{H}|\phi_i\rangle = E_i|\phi_i\rangle$$

nem mennyire a pontos állapotot, de T hőmérsékletű: $p(\phi_i) \sim e^{-\beta E_i}$

HF

$$p(\phi) = \frac{e^{-\beta E_i}}{\sum_i e^{-\beta E_i}} \Rightarrow \hat{\rho} = \sum_i \frac{e^{-\beta E_i}}{\sum_j e^{-\beta E_j}} |\phi_i\rangle\langle\phi_i| \underset{HF}{=} \frac{e^{-\beta \hat{H}}}{\mathrm{Tr}\, e^{-\beta \hat{H}}}$$

Szimmetriák

Láttuk:

- állapotok $\psi \in \mathcal{H}$ vektorok / nyalábok
- fizikai mennyiségek hermitikus operátorok
- mérés: $\hat{A}$ mérésekor eredmény egy sajátérték: a_i

  a mérés után ϕ_i állapot.

  adott érték mérésének valség: $P(\psi \to \phi_i) = |\langle \phi_i | \psi \rangle|^2$

kérdés: egyes fiz. mennyiségekhez milyen operátorok tartoznak?

melyik között milyen kapcsolat van?

két féle út: - klasszikus kvantálás (majd a félév végefelé)

- szimmetriák

Szimmetria elve: A fizikai megfigyelések függetlenek a megfigyelőtől

Szimmetria transzformációk: - eltolások

- forgatások
- tükrözések (?)

elvárás: a eltranszformált rendszerben legyen minden valség u.a.

azaz: $\psi \to \psi'$, $\phi_i \to \phi_i'$

$$|(\phi_i, \psi)|^2 = |(\phi_i', \psi')|^2$$

KVANTUM

11. előadás (10.18.)

Szimmetria trafó követelménye: $\psi \to \psi'$, $\phi_i \to \phi_i'$ $\Rightarrow P(\psi \to \phi_i) = P(\psi' \to \phi_i')$

$$\Rightarrow |(\phi_i, \psi)|^2 = |(\phi_i', \psi')|^2$$

A legegyszerűbb, ha $(\phi_i, \psi) = (\phi_i', \psi')$

ha $\psi \to \psi' = \hat{U}\psi$

$\phi_i \to \phi_i' = \hat{U}\phi_i$ és a követelmény $(\hat{U}\phi_i, \hat{U}\psi) = (\phi, \psi)$

$$(\phi_i, \hat{U}^+\hat{U}\psi) = (\phi_i, \psi)$$

Tehát a feltétel: $\hat{U}^+\hat{U} = 1\!\!1$ ← unitér operátor

Mivel a trafó invertálható: $U^{-1}U = 1\!\!1 \Rightarrow U^{-1} = U^+$
$\exists U^{-1}$

van-e más lehetőség?

Wigner-tétel: Minden szimmetria transzformációra 2 lehetőség van:

① U unitér lineáris trafó, és $\forall \psi \in \mathcal{H}$-ra: $\psi \to \psi' = U\psi$
ahol $U^+ = U^{-1} \Rightarrow$ a sk. szorzat megmarad

② U antilineáris antiunitér trafó.

$$U(\alpha\psi_1 + \beta\psi_2) = \alpha^* U\psi_1 + \beta^* U\psi_2$$

és ha U^+-t így definiáljuk:

$$(U^+\phi, \psi) = (\phi, U\psi)^*$$

ekkor az antiunitérség: $U^+U = 1\!\!1$.

ilyenkor a sk. szorzat: $(U\phi, U\psi) = (\phi, \psi)^*$.

nem bizonyítjuk.

A ② lehetőség csak diszkrét szimmetriáknál merülhet fel (pl.: időszimmetria)

A szimmetria trafók csoportot alkotnak $\Rightarrow$ ábrázolások csoporttal.

Mostantól folytonos, és az egységgel összefüggő szimmetriákkal foglalkozunk.
$\Rightarrow$ Értelmezhető a „kicsi" transzformáció („kellően értelmezhető" kotz)
amik linearizálhatók az egység körül: $\hat{U}_\varepsilon = 1\!\!1 + i\varepsilon\hat{T} + \mathcal{O}(\varepsilon^2)$

az unitaritás feltétele: $(1 - i\varepsilon\hat{T}^+)(1 + i\varepsilon\hat{T}^+) + \mathcal{O}(\varepsilon^2) = 1\!\!1 \Rightarrow$

$$\Rightarrow 1\!\!1 + i\varepsilon(\hat{T} - \hat{T}^+) + \mathcal{O}(\varepsilon^2) = 1\!\!1 \Rightarrow \hat{T} = \hat{T}^+$$

TFH a transzformáció jellemezhető 1 paraméterrel (α)

egyen $\varepsilon = \frac{\alpha}{N}$ ahol $N \to \infty$

$$\hat{U}(\alpha) = \hat{U}(\varepsilon)^N = \left(1 + i\frac{\alpha}{N}\hat{T}\right)^N \to e^{i\alpha T}$$

$\hat{T}$: a szimmetria generátora.

Mivel a fizikai mennyiségek hermitikusak, $\hat{T}$ is lehet az:

Állítás: Minden folytonos szimmetriához létezik $\hat{T}$ hermitikus operátor és fizikai mennyiség.

Operátorok várható értéke szimmetriánál:

$$\langle\hat{A}\rangle = (\psi, \hat{A}\psi) \to (\hat{U}\psi, \hat{A}\hat{U}\psi) = (\psi, \hat{U}^+\hat{A}\hat{U}\psi) = (\psi, \underbrace{\hat{U}^{-1}\hat{A}\hat{U}}_{\hat{A}'}\psi)$$

filozófiai kérdés, hogy a trafó az állapotot változtatja, vagy a mennyiséget, de a várható érték nem változik.

$\hat{A} \to \hat{A}' = \hat{U}^{-1}\hat{A}\hat{U}$ Ez a hozzárendelés az $\hat{A}$ operátor legfontosabb tulajdonságait megtartja.

- szorzás:

$$\hat{A}'\hat{B}' = \hat{U}^{-1}\hat{A}\hat{U}\hat{U}^{-1}\hat{B}\hat{U} = \hat{U}^{-1}\hat{A}\hat{B}\hat{U} = (\hat{A}\hat{B})'$$

- összeadás:

$$\hat{A}' + \hat{B}' = \hat{U}^{-1}\hat{A}\hat{U} + \hat{U}^{-1}\hat{B}\hat{U} = \hat{U}^{-1}(\hat{A}+\hat{B})\hat{U} = (\hat{A}+\hat{B})'$$

- sajátérték probléma:

$$\hat{A}' = \hat{U}^{-1}\hat{A}\hat{U} \Rightarrow \quad \hat{A}\phi_i = a_i\phi_i \to \hat{A}'\phi_i' = a_i'\phi_i'$$

ahol $\phi_i' = \hat{U}^{-1}\phi_i$

$a_i' = a_i$

- kis trafó esetén a megváltozás:

$$\hat{A}' = \hat{U}^{-1}\hat{A}\hat{U} = (1 - i\varepsilon\hat{T})\hat{A}(1 - i\varepsilon\hat{T}) = \hat{A} - i\varepsilon[\hat{T}, \hat{A}] + \mathcal{O}(\varepsilon^2)$$

$\Rightarrow$ Ha $\hat{T}$ és $\hat{A}$ kommutál, akkor A mennyiség a $\hat{T}$ által generált szimmetriában megmaradó mennyiség.

$\hat{A}$ lehet maga is generátor $\Rightarrow$ ilyenkor a szimmetriát Lie-algebrájuk adja.

Konkrét szimetriák

- Térbeli eltolás:

részecske rendre $\underline{r}_i$

eltolás hatására: $\underline{r}_i \to \underline{r}_i' = \underline{r}_i + \underline{a}$ ahol $\underline{a}$ konstans vektor.

Mivel ez szimetria, $\exists \hat U$ unitér operátor: $\psi \in \mathcal{H}$
$\psi \to U\psi$

Milyen tulajdonságokat tudunk mondani U-ra?
a koordináták várható értéke tolódjon el!

$\langle \psi, \hat{\underline{R}}_n \psi \rangle \to \langle \psi, \hat{\underline{R}}_n \psi \rangle + \underline{a}$

$\hat U^{-1}(\underline{a}) \hat{\underline{R}}_n \hat U(\underline{a}) = \hat{\underline{R}}_n + \underline{a}\,\mathbb{1}$

Kis tagjára: $U(\underline{a}) = \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar}\sum_i a_i \hat p_i$ (ahol $\hat T_i := -\frac{1}{\hbar}\hat p_i$)

$$\hat R_{n_i} \to \hat R_{n_i}' = \left(\mathbb{1} + \frac{i}{\hbar}\sum_j a_j \hat p_j\right)\hat R_{n_i}\left(\mathbb{1} - \frac{i}{\hbar}\sum_j a_j \hat p_j\right) \overset{!}{=} \hat R_{n_i} + a_i \mathbb{1}$$

$$\hat R_{n_i} - \frac{i}{\hbar}\sum_i a_i [\hat R_{n_i}, \hat p_j] \overset{!}{=} R_{n_i} + a_i \mathbb{1}$$

$\sum_j a_j [\hat R_{n_i}, \hat p_j] = i\hbar a_i \mathbb{1}$ $\forall$ kész $\underline{a}$-ra $\Rightarrow$

$\Rightarrow [\hat R_{n_i}, \hat p_j] = i\hbar \delta_{ij} \mathbb{1}$ (jéé, az impulzus pont ilyen)

VÉH $\hat p_i$ minden részecske $\hat R_{n_i}$-jével ugyanúgy kommutál: $\hat p_i$ a teljes impulzus

Szétbontható a részecskékre: $\hat p_i = \sum_n \hat p_{n_i}$ ahol $[\hat R_{n_i}, \hat p_{m_j}] = i\hbar\delta_{ij}\delta_{nm}\mathbb{1}$

de $\hat p_{m_i}$ nem-tartozik semilyen nem triviális szimetriába.

Mivel a koordináták kommutálnak, ezért az impulzus komponensek is kommutálnak:

$[\hat p_i, \hat p_j] = 0$: $U(\underline{a})U(\underline{b}) = U(\underline{b})U(\underline{a}) = U(\underline{a}+\underline{b})$

Tehát létezik közös s.v. rendszerük, amiből: $U(\underline{a}) = e^{-\frac{i}{\hbar}\sum_j \hat p_j a_j} = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{\underline{p}}\underline{a}}$

Legyen 1db részecske, és ϕ_x helyállapot: $\hat{\underline{R}}\phi_x = x\phi_x$

$U(\underline{x})\phi_0 = \phi_x$ (HF)

$U(\Delta\underline{x})\phi_x = \phi_{x+\Delta x}$

$\left(\mathbb{1} - \frac{i}{\hbar}\hat p\,\Delta\underline{x}\right)\phi_x = \phi_{x+\Delta x}$

$-\frac{i}{\hbar}\hat p\,\Delta\underline{x}\,\phi_x = \phi_{x+\Delta x} - \phi_x$

$\hat p_i \phi_x = i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\phi_x$ Mivel a hullámfv: $\psi(\underline{x}) = (\phi_{\underline{x}}, \psi)$

$\hat p_i \psi(\underline{x}) = \left(i\hbar\frac{\partial}{\partial x_i}\phi_{\underline{x}}, \psi\right) = -i\hbar\left(\frac{\partial}{\partial x_i}\phi_{\underline{x}}, \psi\right) = -i\hbar\psi(\underline{x})$

de jó, hogy u.a. kaptuk, mint korábban

Egy tetszőleges helyállapotot leírunk, mint a 0 állapot eltoltja:

$$\phi_{\underline{x}} = U(\underline{x})\phi_0 = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{\underline{p}}\underline{x}}\ \phi_0$$

Nézzük meg $\hat{p}$ sajátállapotait:

$$\psi_{\underline{p}}:\ \hat{p}_i\psi_{\underline{p}} = p_i\psi_{\underline{p}}$$

$$(\psi_{\underline{p}},\phi_{\underline{x}}) = (\psi_{\underline{p}}, e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{\underline{p}}\underline{x}}\ \phi_0) = (e^{\frac{i}{\hbar}\hat{\underline{p}}\underline{x}}\psi_{\underline{p}},\phi_0) = (e^{\frac{i}{\hbar}\underline{p}\underline{x}}\psi_{\underline{p}},\phi_0) =$$

$$= e^{-\frac{i}{\hbar}\underline{p}\underline{x}}(\psi_{\underline{p}},\phi_0)$$

Normáljuk $\psi_{\underline{p}}$-t úgy, hogy $(\psi_{\underline{p}},\phi_0) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \Rightarrow (\psi_{\underline{p}},\phi_{\underline{x}}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{-\frac{i}{\hbar}\underline{p}\underline{x}}$

Konjugálva: $(\phi_{\underline{x}},\psi_{\underline{p}}) = \psi_{\underline{p}}(\underline{x}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{\frac{i}{\hbar}\underline{p}\underline{x}}$

Ez azért is jó normálás, mert: $(\psi_{\underline{p}'},\psi_{\underline{p}}) = \int\frac{1}{(2\pi\hbar)^3} e^{\frac{i}{\hbar}(\underline{p}-\underline{p}')\underline{x}}\, d^3\underline{x} = \delta^{(3)}(\underline{p}-\underline{p}')$

KVANTUM

12. előadás (10.25.)

- Időeltolás: $t \to t+\tau$

keressünk egy ennek megfelelő unitér leképezést:

$\exists\, U(\tau): \psi(t+\tau) = \hat U(\tau)\psi(t)$

kis τ-ra: $\hat U(\tau) = 1 - \frac{i}{\hbar}\hat H\tau + O(\tau^2)$

nagy exponenciálisan: $U(\tau) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat H\tau}$

Ez alapján, ha ismerjük $\psi(t=0)$-t akkor tetsz. $\psi(t)$ előállítható:

$\psi(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat H t}\psi(0)$ (ezt már az első órában igazoltuk!)

Sőt azt is igazoltuk, hogy $(\psi(t),\phi(t)) = (\psi(0),\phi(0))$ spec: $|\psi|^2(t) = |\psi|^2(0)$

$\hat U$ unitérség $\Longleftrightarrow$ $\hat H$ hermitikus $\Longleftrightarrow$ valószínűség megmaradás.

Lederiváljuk $\psi(t)$-t. $\frac{d\psi(t)}{dt} = -\frac{i}{\hbar}\hat H\psi(t) \Rightarrow i\hbar\frac{d\psi}{dt} = \hat H\psi$

Ez pont a Schrödinger, de ψ itt nem hullámfüggvény, hanem Hilbert-tér eleme.

Eddig feltettük, hogy $\psi \to \hat U\psi$, de létezik más, ekvivalens leírás:

fizikai jelentése csak az operátorok mátrixelemeinek van: $(\psi,\hat A\phi)$ (spec, ha $A=1$)

A kérdés, hogy mi transzformálódik?

$t \to t+\tau$

$$(\psi,\hat A\phi) \to (\hat U(t)\psi, \hat A\,\hat U(t)\phi) = (\psi, \underbrace{\hat U^{-1}(\tau)\hat A\hat U(\tau)}_{\hat A_H(\tau)}\phi)$$

intuíció: nem az állapot változik, hanem a fizikai mennyiség.

önkényes, hogy $U(\tau)$ az állapotokra vagy az operátorokra hat (vagy mindkettőre).

- Ha $U(\tau)$ az állapotokra hat: Schrödinger-kép
- Ha $U(\tau)$ az operátorokra hat: Heisenberg-kép.

Fontos példa: $\hat A = \hat H$

$$\hat A_H(\tau) = U^{-1}(\tau)\hat H U(\tau) = e^{\frac{i}{\hbar}\hat H\tau}\hat H e^{-\frac{i}{\hbar}\hat H\tau} = \hat H e^{\frac{i}{\hbar}\hat H\tau}e^{-\frac{i}{\hbar}\hat H\tau} = \hat H$$

$\Rightarrow$ A Hamilton-operátor mindkét képben azonos.

$$\hat A_H(\tau+\Delta\tau) = \hat U^{-1}(\Delta\tau)\underbrace{\hat U^{-1}(\tau)\hat A\,\hat U(\tau)}_{\hat A_H(\tau)}\hat U(\Delta\tau) = \left(1+\frac{i}{\hbar}\hat H\Delta\tau\right)\hat A_H(\tau)\left(1-\frac{i}{\hbar}\hat H\Delta\tau\right) =$$

$$= \hat A_H(\tau) + \frac{i}{\hbar}\Delta\tau\left[\hat H, \hat A_H(\tau)\right] + O(\Delta\tau^2) \Rightarrow \frac{d\hat A_H(\tau)}{d\tau} = \frac{i}{\hbar}\left[\hat H, \hat A_H(\tau)\right]$$

Ez a Schrödinger-egyenlet a Heisenberg-képben

Következmény: Ha $\hat{A}_H$ operátor kommutál $\hat{H}$-val, akkor $\frac{d\hat{A}_H}{dt}=0 \Rightarrow$

$\Rightarrow \frac{d}{dt}(\psi, \hat{A}\phi)=0 \Rightarrow$ a fizikai mennyiség időben megmarad.

Az ilyen mennyiségek általában szimmetriák generátorai $\Rightarrow$

$\Rightarrow$ ha U egy olyan szimmetria, amely felcserélhető az időeltolással (pl.: eltolás, forgatás):

$$U e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} U \Rightarrow e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} = U^{-1} e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} U \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar}\hat{H}t + \frac{1}{2}\left(\frac{i}{\hbar}\right)^2 \hat{H}^2 t^2 + \dots = U^{-1}\left(1 - \frac{i}{\hbar}\hat{H}t + \frac{1}{2}\left(\frac{i}{\hbar}\right)^2 \hat{H}^2 t + \dots\right) U$$

Wigner-tétel szerint U unitér, vagy antiunitér

Ha unitér, akkor könnyű a átalakítás.

$$1 - \frac{i}{\hbar}\hat{H}t + \frac{1}{2}\left(\frac{i}{\hbar}\right)^2 \hat{H}^2 t^2 + \dots = 1 - \frac{i}{\hbar}(U^{-1}HU)t + \frac{1}{2}\left(\frac{i}{\hbar}\right)^2 (U^{-1}\hat{H}U)^2 t + \dots \quad \forall t\text{-re}$$

$\hookrightarrow \hat{H}^n = (U^{-1}HU)^n \Rightarrow [\hat{U}, \hat{H}] = 0 \Rightarrow$ ha $U(\varepsilon) = \mathbb{1} + i\varepsilon\hat{T} + O(\varepsilon^2)$ akkor $[\hat{H}, \hat{T}] = 0$

pl.: láttuk, hogy $\hat{L}$ megmarad.

Ha antiunitér, akkor kicsit bonyolult

$$\mathbb{1} - \frac{i}{\hbar}\hat{H}t + \frac{1}{2}\left(\frac{i}{\hbar}\right)^2 \hat{H}^2 t^2 + \dots = \mathbb{1} + \frac{i}{\hbar}(U^{-1}HU)t + \frac{1}{2}\left(\frac{i}{\hbar}\right)^2 (\hat{U}^{-1}\hat{H}\hat{U})^2 t^2 + \dots \quad \forall t\text{-re}$$

ebből: $\hat{H} = -\hat{U}^{-1}\hat{H}\hat{U}$ viszont ez ellentmondás, hiszen a s.é.-knek ugyanazoknak kell lenniük.

megmenthető, ha t előjele is megfordul:

$t \to -t$

$H \to U^{-1}HU$

tehát ha U antilineáris és antiunitér, akkor időtükrözést is kell csinálnunk.

$U\psi(t) = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} U\psi(0)$ de ez ekvivalens azzal, hogy $\hat{H} = U^{-1}HU$

[Ennek azért nézz utána vizsga előtt, kösz!]

nem minden szimmetria cserélhető fel a $\hat{H}$-val, pl.: Galilei-szimmetria:

$x \to x + vt$

$t \to t$

ehhez ugyan létezik unitér ábrázolás, aminek generátora $\hat{K}$ hermit., de $[\hat{H}, \hat{K}] \neq 0$

A forgatásokat is megvizsgáljuk, de előtte:

<u>Spin</u>

A Schr.-egyenlet megoldása centrális potenciálra helyesen megadja az energia szinteket, de a darabszámot nem.

Alkálifémek esetén elég $1\bar{e}$-t vizsgálni egy centrális potenciállal (nem a Coulomb, mert a belső $\bar{e}$-k belezavarnak)

Emiatt E függ n-től és l-től is.

A Sch.-egyenlet jóslata szerint $E(n,l)$ energiából $2l+1$ db kell legyen.
a valóságban azonban s pályán ($l=0$) 1 db van,
a többi duplán szerepel minden, kis felhasadással.

Pauli azt mondta, hogy van még egy kvantumszám (s), ami 2 értéket vehet fel.

Uhlenbeck és Goudsmit szerint ez az $\bar{e}$ saját impulzus momentuma (forgó töltött gömb)

LS csatolás: ha $l \neq 0$, akkor van pálya impulzus momentum, emiatt van mágneses tér és ez kölcsönhat a saját imp. momentummal

Ez kb. jó eredményt ad, de van 2 probléma:

- Ha ez tényleg impulzus momentum, ($\underline{r} \times \underline{p}$) akkor ez olyan, mint l: egész, tehát $2s+1 \neq 2$.

- ki lehet számolni milyen gyorsan forog, és ez túl gyors, mert a felületi sebesség $< c$, ebből az elektron sugára: $r_e > 2 \cdot 10^{-11}$ cm.
ez már ki tudták zárni akkor is

HF hogy miért akkor lehetne adódnia az imp. momentumnak ez lenni

Megoldás: a klasszikus kép félrevezető, számolni kell a forgatásokat.

KVANTUM

13. előadás (11.05.)

Forgatások

$x_i \to \sum_j R_{ij} x_j$ akkor, ha a sk. szorzat megmarad: $\underline{x}\,\underline{y} = \underline{x}'\underline{y}'$

$\sum_i \left(\sum_j R_{ij} x_j \sum_l R_{il} x_l \right) = \sum_i x_i y_i \Rightarrow \sum_i R_{ij} R_{ik} = \delta_{kj}$ (ortogonális transzf.)

Ha a forgatás szimmetriája a rendszernek, akkor létezik unitér ábrázolás.

$\exists\, \hat{U}(R) : \forall \psi \in \mathcal{H}$-ra: $\psi \to \hat{U}(R)\psi$

$$\hat{A} \to \hat{U}(R)^{-1} \hat{A}\, \hat{U}(R)$$

Ha $R = R_1 R_2$ is forgatás (mert csoport)

akkor $\hat{U}(R) = \hat{U}(R_1 R_2) = \hat{U}(R_1)\hat{U}(R_2)$ de $[\hat{U}(R_1), \hat{U}(R_2)] \neq 0$

Ha $\hat{U}(R)$ egy forgatás reprezentációja, akkor $\forall\, \underline{\hat{v}}$ vektor mennyiségre

$$\hat{U}^{-1}(R)\, \hat{v}_i\, \hat{U}(R) = \sum_j R_{ij} \hat{v}_j$$

Mit jelent a kis forgatás a mátrixok nyelvén?

$R = \mathbb{1} + \omega$ ahol $R_{ij} = \delta_{ij} + \omega_{ij}$ és $\omega_{ij} \ll 1$ $\forall i,j$-re.

az ortogonalitás miatt: $(\mathbb{1} + \omega^T)(\mathbb{1} + \omega) = \mathbb{1} \Rightarrow \mathbb{1} + \omega^T + \omega + \mathcal{O}(\omega^2) = \mathbb{1}$

$\Rightarrow \omega + \omega^T = 0 \Rightarrow \omega_{ij} = -\omega_{ji}$ (3 független paraméter)

kis transzf.:

$\hat{U}(\mathbb{1} + \omega) = \mathbb{1} + \frac{i}{2\hbar} \sum_{ij} \omega_{ij} \hat{J}_{ij} + \mathcal{O}(\omega^2)$ (J is antiszim., 3 független van)

$$\left(\mathbb{1} - \frac{i}{2\hbar} \sum_{jk} \omega_{jk} \hat{J}_{jk}\right) \hat{v}_i \left(\mathbb{1} + \frac{i}{2\hbar} \sum_{jk} \omega_{jk} \hat{J}_{jk}\right) = \sum_j (\delta_{ij} + \omega_{ij}) \hat{v}_j$$

$$\frac{i}{2\hbar} \sum_{jk} \omega_{jk} [\hat{v}_i, \hat{J}_{jk}] = \sum_j \omega_{ij} \hat{v}_j = \sum_k \omega_{ik} \hat{v}_k = \sum_{jk} \omega_{jk} \delta_{ij} \hat{v}_k$$

$$\Rightarrow \frac{i}{2\hbar} [\hat{v}_i, \hat{J}_{jk}] = \frac{1}{2} (\delta_{ij} \hat{v}_k - \delta_{ik} \hat{v}_j)$$

$$[\hat{v}_i, \hat{J}_{jk}] = -i\hbar (\delta_{ij} v_k - \delta_{ik} v_j)$$

Mi történik $U(\mathbb{1} + \omega)$-val egy másik forgatás hatására:

$$\hat{U}^{-1}(R')\hat{U}(\mathbb{1} + \omega)\hat{U}(R') = \hat{U}(R'^{-1}(\mathbb{1} + \omega)R') = \hat{U}(\mathbb{1} + R'^{-1}\omega R') = \hat{U}(\mathbb{1} + R'^T \omega R')$$

$$\Rightarrow \hat{U}^{-1}(R')\left(\mathbb{1} + \frac{i}{2\hbar} \sum_{jk} \omega_{jk} \hat{J}_{jk}\right)\hat{U}(R') = \mathbb{1} + \frac{i}{2\hbar} \sum_{jk} (R'^T \omega R')_{jk} J_{jk}$$

HF $\Rightarrow \hat{U}^{-1}(R') \hat{J}_{jk}\, \hat{U}(R') = R'_{jl} R'_{km} J_{lm} \Rightarrow \hat{J}$ kétindexes tenzor

Legyen R' is kicsi forgatás: $R' = 1\!\!1 + \omega'$

$$\hat U(R') = 1\!\!1 + \frac{i}{2\hbar}\sum_{jk} \omega_{jk}\hat J_{jk}$$

Az előzőbe beírva, megkaphatók J-k kommutátora:

$$\frac{i}{\hbar}\left[\hat J_{ij},\hat J_{kl}\right] = -\delta_{il}\delta_{kj} + \delta_{ik}\hat J_{lj} + \delta_{jk}\hat J_{il} - \delta_{jl}\hat J_{ik}$$

egyszerűbb jelölés: $\hat J_1 = \hat J_{23}$, $\hat J_2 = \hat J_{31}$, $\hat J_3 = \hat J_{12}$ azaz $\hat J_i = \frac{1}{2}\varepsilon_{ijk} J_{jk}$

és $\omega_i = \frac{1}{2}\varepsilon_{ijk}\omega_{jk}$

ezekkel a kommutátorok:

$$\left[\hat J_i, \hat v_j\right] = i\hbar \sum_k \varepsilon_{ijk}\hat v_k$$

$$\left[\hat J_i, \hat J_j\right] = i\hbar \sum_k \varepsilon_{ijk}\hat J_k$$

$\hat J_i$ a 3D forgatások generátorai $\Longrightarrow$ impulzusmomentum 3 komponense

mivel a forgatás kommutál az idővel $[J_i, \hat H] = 0$

korábban az impulzusmomentum $\hat L = \hat r \times \hat p \Rightarrow [\hat L_i, \hat L_j] = i\hbar\varepsilon_{ijk}\hat L_k$

de a két másképp definiált operátor-család nem feltétlen u.a.: $\hat J_i \neq \hat L_i$

$\hat S := \hat J - \hat L$ spin.

belátható: $[\hat S_i, \hat L_j] = 0$

$[\hat S_i, \hat S_j] = i\hbar\varepsilon_{ijk}\hat S_k \Rightarrow$ S impulzusmomentum

$[\hat S_i, \hat x_j] = [\hat S_i, \hat p_j] = 0 \Rightarrow$ S x-től és p-től is független (a részecske belső tulajdonsága)

Keressük J^2 és J_3 spektrumát.

Állítás: $[J^2, J_i] = 0$

Legyenek a sajátértékek $|jm\rangle$ úgy, hogy $J^2|jm\rangle = \hbar^2 j(j+1)|jm\rangle$

$J_3|jm\rangle = \hbar m|jm\rangle$

Legyenek $\hat J^\pm = \hat J_1 \pm i\hat J_2$ $\quad (\hat J^+)^+ = \hat J^-$

$$[\hat J_3, \hat J^+] = [\hat J_3, \hat J_1 \pm i\hat J_2] = [\hat J_3, \hat J_1] \pm i[\hat J_3, \hat J_2] = i\hbar\hat J_2 \pm i(-i\hbar\hat J_1) = \pm\hbar\hat J^\pm$$

Mivel $|jm\rangle$ sajátállapot volt, ezért $J^\pm|jm\rangle$ is az lesz.

$$J^2\left(J^\pm|jm\rangle\right) = J^\pm\left(J^2|jm\rangle\right) = J^\pm j(j+1)|jm\rangle = j(j+1)J^\pm|jm\rangle$$

$$J_3\left(J^+|jm\rangle\right) = \left(J^+J_3 + [J_3, J^+]\right)|jm\rangle = J^+\hbar m|jm\rangle + \hbar J^+|jm\rangle = \hbar(m+1)\left(J^+|jm\rangle\right)$$

(HF) $J_3\left(J_-|jm\rangle\right)$ hasonlóan

Tömören: $J^+|jm\rangle = \alpha_+|j, m+1\rangle$

$$J^-|jm\rangle = \alpha_-|j, m-1\rangle$$

tetsz. $|jm\rangle$-re:

$$\hbar\left(j(j+1) - m^2\right) = \langle jm|J^2 - J_3^2|jm\rangle = \langle jm|J_1^2 + J_2^2|jm\rangle \geq 0$$

$$\Rightarrow m^2 \leq j(j+1) \Rightarrow -\sqrt{j(j+1)} \leq m \leq \sqrt{j(j+1)}$$

így tud végét érni a léptetés, ha valahol a 0-t kapjuk.

$$J^+|j\, m_{ax}\rangle = 0$$

$$J^-|j\, m_{in}\rangle = 0$$

$$J^-J^+ = (J_1 - iJ_2)(J_1 + iJ_2) = J_1^2 + J_2^2 + i[J_1, J_2] = J_1^2 + J_2^2 - \hbar J_3 = J^2 - J_3^2 - \hbar J_3$$

$$J^+J^- = J^2 - J_3^2 + \hbar J_3$$

$$J^-J^+|j\, m_{ax}\rangle = \left(J^2 - J_3^2 - \hbar J_3\right)|j\, m_{ax}\rangle = \hbar^2\left(j(j+1) - m_{ax}^2 - m_{ax}\right) \stackrel{!}{=} 0$$

$$m_{ax} = j \qquad m_{ax} = -j-1$$

$$J^+J^-|j\, m_{in}\rangle = \left(J^2 - J_3^2 + \hbar J_3\right)|j\, m_{in}\rangle = \hbar^2\left(j(j+1) - m_{in}^2 + m_{in}\right) \stackrel{!}{=} 0$$

$$m_{in} = j+1 \qquad m_{in} = -j$$

mivel $m_{ax} > m_{in} \Rightarrow \begin{matrix} m_{ax} = j \\ m_{in} = -j \end{matrix} \Rightarrow m_{ax} - m_{in} = 2j \in \mathbb{Z} \Rightarrow$ j egész vagy féligegész

$$j = 0, \tfrac{1}{2}, 1, \tfrac{3}{2}, 2, \tfrac{5}{2}, \ldots$$

$m = -j, -j+1 \ldots j-1, j$ $\quad 2j+1$ lehetőség

KVANTUM

14. előadás (11.08.)

Keressük J^2 és J_3 sajátértékek rendszerét (ismétlés)

$$J^2 |jm\rangle = \hbar j(j+1) |jm\rangle$$

$$J_3 |jm\rangle = \hbar m |jm\rangle$$

$J^{\pm} := J_1 \pm i J_2 \qquad J^{\pm} |jm\rangle = \alpha_{\pm} |j\, m\pm 1\rangle$

akkor, hogy $|m| < |j|$, az kell, hogy $2j \in \mathbb{N}$

$m \in \{-j, -j+1, \dots, j-1, j\}$

A normálás: $\langle jm | j'm'\rangle = \delta_{jj'} \delta_{mm'}$

Mivel $J^- J^+ = J^2 - J_3^2 - \hbar J_3$ szerint

$$|\alpha_+|^2 = |J^+|jm\rangle|^2 = \langle J^+ jm | J^+ jm\rangle = \langle jm | J^- J^+ | jm\rangle = \langle jm | J^2 - J_3^2 - \hbar J_3 | jm\rangle =$$
$$= \hbar^2 (j(j+1) - m^2 - m)$$

$|\alpha_-|^2$ ugyanígy $\implies \alpha_+ = \hbar \sqrt{j(j+1) - m(m+1)}$

$$\alpha_- = \hbar \sqrt{j(j+1) - m(m-1)}$$

ha $m = j$ akkor $\alpha_+ = 0$
ha $m = -j$ akkor $\alpha_- = 0$. ✓

Mivel $[J^2, J_i] = 0$ és J_i az R forgatás generátora szerint $[J^2, U(R)] = 0 \quad \forall R$-re.

$\implies$ A forgatások nem keverik össze J sajátállapotait $\implies$

$\implies$ $\mathcal{H}$ szétesik egymásra ortogonális szektorokra, melyekben j fix, és a forgatások nem visznek át egyikből a másikba.

Tehát adott $\psi \in \mathcal{H}$ esetén, felírható $\psi = \begin{pmatrix} \psi_{j=0} \\ \psi_{j=1/2} \\ \psi_{j=1} \\ \vdots \end{pmatrix}$ alakban.

Ekkor a forgatás operátor blokkdiagonális:

$$U(R)\psi = \begin{pmatrix} \left(U_{j=0}\right) & & & \\ & \left(U_{j=\frac{1}{2}}\right) & & \\ & & \left(U_{j=1}\right) & \\ & & & \ddots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_{j=0} \\ \psi_{j=\frac{1}{2}} \\ \psi_{j=1} \\ \vdots \end{pmatrix}$$

Az olyan ábrázolásokat, ahol $\exists$ olyan bázis, ahol $\forall\, U(R)$ blokkdiagonális redukálhatónak nevezzük.
Ha egy ábrázolás nem írható fel így, az irreducibilis.

Forgatások irreducibilis ábrázolásai:

A teljes $\mathcal{H}$-n a különböző j-kre biztos felbomlik, tehát vizsgáljunk olyan altereket, ahol j fix. TFH ennek az altérnek a dim-je véges.

Ez j-re $m \in \{-j, -j+1, \dots, j-1, j\}$ lehet, és $|j\, m\rangle$-ek egyenként ortog.-k, tehát a $\dim \geq 2j+1$. Belátható, hogy egyenlő.

$j = 0 \Rightarrow d = 1 \Rightarrow J_i = 0,\ U(R) = \mathbb{1} \quad U\Psi = \Psi$

triviális ábrázolás.

$j = \frac{1}{2} \Rightarrow d = 2,\ m = \pm\frac{1}{2}$

korábban ilyet nem láttunk de lehet-e rajta ilyen?

J_1, J_2, J_3 2x2-es hermitikus mátrixok.

Legyen a bázis olyan, hogy J_3 diagonális. Mivel sajátértékei $\pm\frac{1}{2}$.

$$J_3 = \hbar \begin{pmatrix} 1/2 & \\ & -1/2 \end{pmatrix}, \quad |j=\tfrac{1}{2}\ m=\tfrac{1}{2}\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |j=\tfrac{1}{2}, m=-\tfrac{1}{2}\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

mi van a J_1 és J_2? $J^\pm$-t egyszerűbb ez, hiszen

$$J^+\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \hbar\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad J^+\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = 1\hbar\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad J^-\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = 1\cdot\hbar\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad J^-\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \hbar\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow J^+ = \hbar\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad J^- = \hbar\begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

ezekből: $J_1 = \hbar\begin{pmatrix} & 1/2 \\ 1/2 & \end{pmatrix}, \quad J_2 = \hbar\begin{pmatrix} & -i/2 \\ i/2 & \end{pmatrix}$

Ezek pont a Pauli-mátrixok: $J_i = \frac{\hbar}{2}\sigma_i$

$\boxed{\text{Spinor ábrázolás}}$

Egy tetsz. forgatás leírása:

$$U(1+\omega) = \mathbb{1} + \frac{i}{\hbar}\,\underline{\omega}\,\underline{J} \Rightarrow U(R) = e^{\frac{i}{\hbar}\underline{\omega}\,\underline{J}}$$

ha $\underline{\omega} \parallel \omega_3$ $\quad U(1+\omega) = \mathbb{1} + \frac{i}{\hbar}\omega_3 J_3$

vagy forgatásnál: $R = \begin{pmatrix} \cos\varphi & \sin\varphi & \\ -\sin\varphi & \cos\varphi & \\ & & 1 \end{pmatrix} \Rightarrow U(R) = e^{\frac{i}{\hbar}\varphi J_3}$

belátható, hogy $U(n_z, \varphi=2\pi) = -\mathbb{1}$, tehát a 2π forgatásnál nem az egység, hanem a (-1) operátor tartozik

$j = 1 \Rightarrow d = 3,\ m \in \{-1, 0, 1\}$

$$J_3 = \hbar\begin{pmatrix} 1 & & \\ & 0 & \\ & & -1 \end{pmatrix}, \quad J^+ = \hbar\begin{pmatrix} 0 & \sqrt{2} & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{2} \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad J^- = \hbar\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ \sqrt{2} & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{2} & 0 \end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow J_2 = \frac{\hbar}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} & 1 & \\ 1 & & 1 \\ & 1 & \end{pmatrix} \quad J_3 = \frac{\hbar}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} & -i & \\ i & & -i \\ & i & \end{pmatrix}$$

$\boxed{\text{vektor ábrázolás}}$

ez a valódi 3D-s forgatás, csak fura bázisban

Az eljárás tetszőleges j-re működik, de miért jó ez nekünk?

A múltkor láttuk, hogy $[\hat{x}_i, \hat{S}_j] = [\hat{p}_i, \hat{S}_j] = 0$

$\Rightarrow$ $\hat{S}_i$ sajátállapotait ($S^2, \hat{S}_3$ közös s. állapotait) $\hat{x}_i, \hat{p}_i$ nem rontja el.

fordítva is igaz: $\hat{x}_i, \hat{p}_i$ állapotokat $\hat{S}_j$ nem rontja el.

$\Rightarrow$ $\mathcal{H}$-t nézzük $2s+1$ vektoron, ahol s fix és ezekben az impulzus és a hely nem vész ki.

$$\psi \to |\psi\rangle = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \vdots \\ \psi_{2s+1} \end{pmatrix}$$

Ezeken $\hat{x}$ és $\hat{p}$ komponensenként hat, $\hat{S}_i$ pedig $(2s+1)\times(2s+1)$ méretű mátrixokkal.

Tehát a teljes $\mathcal{H}$-n $\hat{X} = \hat{x} \otimes \begin{pmatrix} 1 & \\ & 1 \end{pmatrix}$, $\hat{P} = \hat{p} \otimes \begin{pmatrix} 1 & \\ & 1 \end{pmatrix}$, $\hat{S}_i = \mathbb{1} \otimes \hat{S}_i$ $\quad s = \frac{1}{2}$ esetén.

Tehát a Hamilton operátor felírása bonyolódik.

Ha semmi nem hat kölcsön a spinnel:

$$\hat{H} = \left(\frac{\hat{p}^2}{2m} + V\right) \otimes \begin{pmatrix} 1 & \\ & 1 \end{pmatrix} \quad \text{ami eddig.}$$

Ha van a spinnel kölcsönhatás (pl. külső $\underline{B}$ tér):

$$\delta H = \frac{\underline{L} e}{2m} \underline{B} + \frac{\underline{S} e}{2m} \underline{B}\, g_e$$

klasszikus mágneses momentum

a spinre extra LH, ahol g_e az elektron giromágneses faktora ($g_e \approx 2$)

$$\hat{H} = \left(\frac{\hat{p}}{2m} + V + \frac{e}{2m} \underline{L}\underline{B}\right) \otimes \begin{pmatrix} 1 & \\ & 1 \end{pmatrix} + \frac{e}{2m} \frac{\hbar}{2} g_e\, \mathbb{1} \otimes (B_i \sigma_i)$$

Impulzusmomentumok összeadása

Láttuk, hogy $\hat{\underline{J}} = \hat{\underline{L}} + \hat{\underline{S}}$. Mik $\hat{\underline{J}}$ sajátállapotai?

általánosabban: J' és J'' két független impulzusmomentum, azaz $[J'_i, J''_j] = 0$.

$\hat{\underline{J}} := \hat{\underline{J}}' + \hat{\underline{J}}''$ Fejezzük ki $\hat{J}_3$ és $\hat{J}^2$ sajátállapotait $\hat{\underline{J}}'$ és $\hat{\underline{J}}''$ s. állapotaival.

Mivel J' és J'' független, J'^2, J'_3, J''^2, J''_3 közül mindegyik mindegyikkel kommutál $\Rightarrow$

$\Rightarrow$ J közös s.v. rendszerünk. $\Rightarrow$ $\mathcal{H}$ szétesik két részre:

$|j' m' j'' m''\rangle \to |j' m'\rangle \otimes |j'' m''\rangle$ (jelölés $|j' m'\rangle |j'' m''\rangle$)

DE nem lehet a teljes J_3 és J^2 operátorok s. rendszere egyből, ezek már nem kommutálnak J'^2 és J'_3-mal, bonyolódik a helyzet.

Mi kommutál mivel?

$J^2, J_3, J'^2, J'_3, J''^2, J''_3$. Az utolsó 4 egyszerre igaz

$$J^2 = J'^2 + J''^2 + 2J'J'' \Rightarrow$$

$$\Rightarrow [J^2, J'^2] = \overset{0}{[J'^2, J'^2]} + \overset{0}{[J''^2, J'^2]} + [2J'J'', J'^2] =$$

$$= 2\left[\sum_i J'_i J''_i , J'^2\right] = 0$$

$$[J^2, J''^2] = \text{u.a.} = 0$$

$$[J^2, J'_3] = [J'^2, J'_3] + [J''^2, J'_3] + [2J'J'', J'_3] =$$

$$= 2\left[\sum_i J'_i J''_i , J'_3\right] = 2\sum_i J'_i [J''_i, J'_3] \neq 0$$

feladat: írjuk fel J^2, J_3, J'^2, J''^2 közös s. állapotait, mint az a lehető legtöbbek, aminek van közös.

Ez tulajdonképpen bázistranszformáció $\mathcal{H}$-n, és a kifejtési eh-kat keressük.

állítás: $|jm\rangle = \sum_{m', m''} C_{j'j''}(jm, m', m'') \, |j'm'\rangle \, |j''m''\rangle$

Clebsch-Gordan-eh-k, ezeket keressük.

olyan j-ket tudunk megkapni, ami:

$$|j' - j''| \leq j \leq j' + j''$$

KVANTUM

15. előadás (11.12.)

$J = J' + J''$

$\underbrace{J^2, J_3, J'^2}, J''^2, J'_3, J''_3$

Ezek kommutálnak, új lineáris rendszert keresünk: $|j'\, m'\rangle |j''\, m''\rangle$

$|j\, m\rangle = \sum_{m'm''} C_{j'j''}(j, m; m', m'') \, |j'\, m'\rangle |j''\, m''\rangle$

Állítás:

$C_{j'j''} \neq 0 \Rightarrow |j' - j''| \leq j \leq j' + j''$

pl.: $j' = 1 \quad j'' = \frac{1}{2} \qquad j \in \{\frac{1}{2}, \frac{3}{2}\}$

$j' = 3, \quad j'' = 2 \qquad j \in \{1, 2, 3, 4, 5\}$

$C \neq 0 \Rightarrow m' + m'' = m$

$J_3 |j\, m\rangle = \hbar m |j\, m\rangle = \sum_{m'm''} C_{j'j''}(j\, m, m', m'') \hbar (m' + m'') \, |j'\, m'\rangle |j''\, m''\rangle$

bizonyítás konstrukcióval

$m = m' + m''$

mivel $|m'| \leq j'$ és $|m''| \leq j'' \Rightarrow |m| \leq |m'| + |m''| \leq j' + j''$

$m \in \{-j, \dots j\} \quad m_{max} = j \Rightarrow j \leq j' + j''$

ehhez egyenlőség egy féle képpen: ha $j = j' + j''$ és $m = m_{max} \Rightarrow m' = j'$, $m'' = j''$

maximális állapot: $j = j'' + j'$, $m = j$ $\Rightarrow$ 1 db állapotban van

$|j = j' + j'' \quad m = j\rangle = 1 \overset{C}{\cdot} |j'\, m' = j'\rangle |j''\, m'' = j''\rangle$

$C_{j'j''}(j = j' + j'', m = j, m'\, m'') = \delta_{m'j'} \delta_{m''j''} \quad |j\, m\rangle = \sum_{m'm''} C_{j'j''}(j\, m, m', m'') \, |j'\, m'\rangle |j''\, m''\rangle$

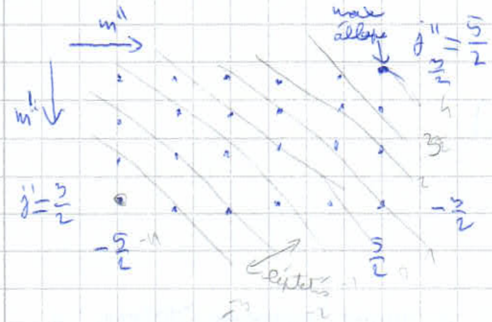
A többit a léptető operátorokkal kapjuk meg.

$|j = j' + j'' \quad m = j\rangle = |j'\, m' = j'\rangle |j''\, m'' = j''\rangle \qquad J^- = J'^- + J''^-$

$\alpha_- |j' + j'', m = j - 1\rangle = (J'^- + J''^-) |j'\, j'\rangle |j''\, j''\rangle = \alpha_- |j'\, j' - 1\rangle |j''\, j''\rangle + \alpha_- |j'\, j'\rangle |j''\, j'' - 1\rangle$

$\hbar \sqrt{j(j+1) - j(j-1)} \, |j' + j'', j' + j'' - 1\rangle = \hbar \sqrt{j'(j'+1) - j'(j'-1)} \, |j'\, j' - 1\rangle |j''\, j''\rangle + \hbar \sqrt{j''(j''+1) - j''(j''-1)} \, |j'\, j'\rangle |j''\, j'' - 1\rangle$

$c |j' + j'' \quad j' + j'' - 2\rangle = c_1 |j'\, j' - 2\rangle |j''\, j''\rangle + c_2 |j'\, j' - 1\rangle |j''\, j'' - 1\rangle + c_3 |j'\, j'\rangle |j''\, j'' - 2\rangle$



HF

HF: $\sum_{j=|j'-j''| \dots j'+j''} (2j+1) = (2j'+1)(2j''+1)$

Wigner – Eckart – tétel

def $2j+1$ db $\hat{O}^m_j$ operátort $m \in \{-j \dots j\}$ j spinű operátor

Ha $[J_3, O^m_j] = \hbar m O^m_j$ és

$[J_\pm, O^m_j] = \alpha_\pm O^{m\pm1}_j$,

akkor

$$\langle j m | O^{m''}_{j''} | j' m' \rangle = C_{j' j''}(jm, m' m'') \langle j \| O \| j' \rangle$$

ahol $\langle j \| O \| j' \rangle$ redukált mátrixelem nem függ m-től.

pl.: - skalár operátor $j=0$ $m=0$ $[S, \hat{J}_i] = 0$

- vektor operátor $\hat{V}_i \to V^0 = V_3$, $V^{\pm1} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{V}_1 \pm i\hat{V}_2)$

$V^0, V^{\pm1}$ teljesítik.

A kövi óra elején mondott pár példát, de lusta vagyok leírni, majd videóból megnézem.

KVANTUM

16. előadás (11. 19.)

Azonos részecskék

Tapasztalat: minden e⁻ azonos, azaz csak a helyük és spinjük komponensei határozzák meg őket,
+ az egyes elektronokat nem lehet felcímkézni, hisz ha megtudnánk, az egy új tulajdonság lenne.

Ez minden részecskére így van.

Egy többrészecske kvantumállapot egyértelműen megadható, ha pl. ∀ részecskének megadjuk a helyét és spinjét

pl.: 2 részecskénél: $\psi_{x_1 m_1, x_2 m_2}$: de az indexek sorrendje nem számít, mert az u.a. állapot (rotációval u.a. sugár)

$$\psi_{x_2 m_2, x_1 m_1} = \alpha\, \psi_{x_1 m_1, x_2 m_2}$$

meg lehet mutatni, hogy α csak a részecske típusától függ

$$\alpha = \pm 1$$

az $\alpha = 1$ részecskéket a bozonok
az $\alpha = -1$ részecskéket fermionoknak hívják

Speciel + QFT miatt a fermionok spinje feles, a bozonok egész

Összetett részecskéknél is:
páratlan fermion + tetsz. bozon → fermion
páros fermion + tetsz. bozon → bozon.

HF: ezek konzisztensek az imp. mom. összeadással HF

Kiegészítés: ld.:
egy összetett rendszer hullámfv.-e az alkotó részecskék tulajdonságaitól függ:

$\psi(\underline{x}_1, \underline{x}_2) = \alpha\, \psi(\underline{x}_2, \underline{x}_1)$

egyenlőre egymással nem k.hatú részecskék azonos potenciálban a ill b sajátállapota

$$\psi_a(x),\ \psi_b(x):\ \int_{-\infty}^{\infty} |\psi_a(x)|^2 dx = 1,\ \int_{-\infty}^{\infty} |\psi_b(x)|^2 dx = 1,\ \int_{-\infty}^{\infty} \psi_a^*(x)\,\psi_b(x)\,dx = 0$$

Mi a két részecske hullámfv. együtt?
1) Ha két részecske nem azonos, meg tudjuk őket különböztetni, tehát:

$$\psi(x_1, x_2) = \psi_a(x_1)\,\psi_b(x_2)$$

2) Ha a két részecske azonos, és bozonok:

$$\psi(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\psi_a(x_1)\psi_b(x_2) + \psi_a(x_2)\psi(x_1)\right)$$

3) Ha a két részecske azonos és fermion:

$$\psi(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\psi_a(x_1)\psi_b(x_2) - \psi_a(x_2)\psi(x_1)\right)$$

Határozzuk meg $\langle (\hat{x}_1 - \hat{x}_2)^2 \rangle$ -t mindhárom esetben:

$$\langle (x_1 - x_2)^2 \rangle = \langle x_1^2 \rangle + \langle x_2^2 \rangle - 2\langle x_1 x_2 \rangle$$

1) $\psi = \psi_a \psi_b$

$$\langle x_1^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x_1^2 |\psi|^2 dx_1 dx_2 = \int x_1^2 |\psi_a(x_1)|^2 |\psi_b(x_2)|^2 dx_1 dx_2 = \langle x^2 \rangle_a$$

$\langle x_2^2 \rangle = \langle x^2 \rangle_b$ ugyanígy

$$\langle x_1 x_2 \rangle = \int x_1 x_2 |\psi_a(x)|^2 |\psi_b(x)|^2 dx_1 dx_2 = \langle x \rangle_a \langle x \rangle_b$$

$$\underline{\langle (x_1 - x_2)^2 \rangle = \langle x^2 \rangle_a + \langle x^2 \rangle_b - 2\langle x \rangle_a \langle x \rangle_b}$$

2-3)

$$\psi(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\psi_a(x_1) \psi_b(x_2) \pm \psi_a(x_2) \psi_b(x_1) \right)$$

$$\langle x_1^2 \rangle = \int x_1^2 |\psi(x_1, x_2)|^2 dx_1 dx_2 = \frac{1}{2} \int \Big(x_1^2 |\psi_a(x_1)|^2 |\psi_b(x_2)|^2 + |\psi_a(x_2)|^2 |\psi_b(x_1)|^2 \pm$$
$$\pm x_1^2 \psi_a^*(x_1) \psi_b^*(x_2) \psi_a(x_2) \psi(x_1) \pm x_1^2 \psi_a^*(x_2) \psi_b^*(x_1) \psi_a(x_1) \psi_b(x_2) \Big) dx_1 dx_2$$

az utolsó sor a x_2-re való integrálás miatt 0.

$$= \frac{1}{2} \left(\langle x^2 \rangle_a + \langle x^2 \rangle_b \right)$$

$$\langle x_2^2 \rangle = \frac{1}{2} \left(\langle x^2 \rangle_a + \langle x^2 \rangle_b \right)$$

$$\langle x_1 x_2 \rangle = \frac{1}{2} \int \Big(\underbrace{x_1 |\psi_a(x_1)|^2 x_2 |\psi_b(x_2)|^2}_{\frac{1}{2}\langle x \rangle_a \langle x \rangle_b} + \underbrace{x_2 |\psi_a(x_2)|^2 x_1 |\psi_b(x_1)|^2}_{\frac{1}{2}\langle x \rangle_a \langle x \rangle_b} \pm \underbrace{x_1 \psi_a^*(x_1) \psi_b(x_1) x_2 \psi_b^*(x_2) \psi_a(x_2)}_{\frac{1}{2}|\langle x \rangle_{ab}|^2} \pm$$
$$\pm \underbrace{x_1 \psi_a^*(x_1) \psi_a(x_1) x_2 \psi_a^*(x_2) \psi_b(x_2)}_{\frac{1}{2}|\langle x \rangle_{ab}|^2} \Big) dx_1 dx_2$$

ahol $\langle x \rangle_{ab} = \int \psi_a^*(x)\, x\, \psi_b(x) dx$

$$\underline{\langle (x_1 - x_2)^2 \rangle = \langle x^2 \rangle_a + \langle x^2 \rangle_b - 2\langle x \rangle_a \langle x \rangle_b \mp |\langle x \rangle_{ab}|^2}$$

Itt mondott egy hosszabb történeti példát, ami lehet, hogy kell.

Hartree-közelítés

Ennek fő közelítése, hogy a Hamilton részecskénként hat.

$$(H\psi)(x_1 \dots x_n) = \int H^{eff}_{x_1 x_1'} \psi(x_1', x_2 \dots x_n)\, dx_1' + \int H^{eff}_{x_2 x_2'} \psi(x_1, x_2' \dots x_n)\, dx_2' +$$
$$+ \dots \int H^{eff}_{x_n x_n'} \psi(x_1, x_2 \dots x_n')\, dx_n'$$

Ilyenkor a H sajátállapota szorzat alakban írható

$$\psi(x_1 \dots x_n) = \psi_{i_1}(x_1)\psi_{i_2}(x_2) \dots \psi_{i_n}(x_n) \qquad \text{ahol} \quad H^{eff}\psi_a(x) = E_a \psi_a(x)$$

~~A~~ működik vele jól, de minden 2 x_i cseréjére nem ~~...~~ saját állapot,

tehát tudjuk szimmetrizálni a permutációk lin. kombjaként

$$\psi(x_1, x_2 \dots x_n) = \sum_P \delta_P\, \psi_{i_1}(x_{P_1})\psi_{i_2}(x_{P_2}) \dots \psi_{i_n}(x_{P_n})$$

ahol P az ~~...~~ n-edrendű permutációk

$$\delta_P = \begin{cases} \text{párosra} & 1 \\ \text{páratlanra} & -1 \end{cases} \qquad \delta_P \text{ egy determináns lesz.}$$

KVANTUM

17. előadás (11.19.)

$$\Psi(x_1, x_2 \ldots x_n) = \sum_P \delta_P \, \psi_{i_1}(x_{P_1}) \, \psi_{i_2}(x_{P_2}) \cdots \psi_{i_n}(x_{P_n})$$

P: a számok permutációja.

$$\delta_P = \begin{cases} +1 & \text{bozonra} \\ +1 & \text{fermionra, ha } P \text{ páros} \\ -1 & \text{fermionra ha } P \text{ páratlan} \end{cases}$$

$$\Psi(x_1 \ldots x_n) = \begin{vmatrix} \psi_{i_1}(x_1) & \psi_{i_1}(x_2) & \cdots & \psi_{i_1}(x_n) \\ \psi_{i_2}(x_1) & \cdots & & \psi_{i_2}(x_n) \\ \vdots & & & \vdots \\ \psi_{i_n}(x_1) & \cdots & & \psi_{i_n}(x_n) \end{vmatrix}$$ Slater-determináns

Ha bármely kettő van u.a. akkor $\det = 0$

Pauli-elv: nem lehet kettő részecske 1 állapotban fermionokra.

Bozonokra nincs ilyen megkötés, akár valószínűbb is lehet.

(ez olyan sok részecske esetében a Bose–Einstein kondenzáció)

Pauli-elv + H atom spektruma (kis módosításokkal) → periódusos rendszer

$$\left.\begin{aligned} l &= 0, \ldots n-1 \\ m_l &= -l \ldots l \\ m_s &= \pm\tfrac{1}{2} \end{aligned}\right\} 2n^2 \text{ állapot}$$

E_n nagy n-re egyre kevésbé tiszta Coulomb, egyre jobban függ l-től.

Sorban töltődnek fel az állapotok E szerint, de nem végig a főkvantumszám szerint.

1s	2 állapot
2s 2p	8 állapot
3s 3p	8 állapot
4s 3d 4p	18 állapot
5s 4d 5p	18 állapot
6s 4f 5d 6p	32 állapot
7s 5f 6d 7p	

Általában a legkülső e^--k vesznek részt KH-ban, ezért ezek adják meg a kémiai tulajdonságot.

Tükrözés

3 féle tükrözés: P: tértükrözés
T: időtükrözés
C: töltés konjugálás

T: láttuk, hogy antiunitér módon ábrázolódik (ha van egyáltalán)

P: paritás / tértükrözés

$\underline{x} \to -\underline{x}$, $t \to t$

Ha szimmetria $\exists \hat{P}$ unitér operátor, ahol: $\hat{P}\hat{\underline{x}}\hat{P} = -\hat{\underline{x}}$

$\hat{P}\hat{\underline{x}}\hat{P}^{-1} = -\hat{\underline{x}}$

Ha ez szimmetria, akkor kommutál a Hamiltonival.

$[\hat{P}, \hat{H}] = 0 \Rightarrow$ létezik közös s. é. rendszer

$\hat{H}\psi_i = E_i \psi_i$

$\hat{H}\hat{P}\psi_i = \hat{P}\hat{H}\psi_i = \hat{P}E_i\psi_i = E_i(\hat{P}\psi_i)$

Ha E_i-k különbözőek, akkor (pl.: 1D-ben) $\hat{P}\psi_i = \text{konst}\,\psi_i$

De mivel $\hat{P}^2 = \mathbb{1} \Rightarrow \hat{P}\psi_i = \pm\psi_i$

$\Rightarrow$ nem degenerált spektrum esetén, ha a potenciál szimmetrikus, akkor $\forall \psi_i$ páros vagy páratlan.

H atomnál láttuk, hogy $j = l \pm \frac{1}{2}$, de l nem megmaradó, akkor miért ezzel indexeltük? Azért, mert a $\hat{P}$ kommutál $\hat{H}$-val, és a paritást l adja meg.

(mint, ha már megszüntettük volna minden degenerációt, és a kül l-ek kül E tartozik.)

1956: A gyenge KH (pl.: β-bomlás) sérti a tértükrözést.

Sőt, maximálisan sérül

Azt hitték, hogy a CP viszont szimmetria, de a '60-as években az is kiderült hogy nem szimmetria (de ez már csak kicsit)

Jelenleg úgy gondoljuk, hogy a CPT szimmetria, de ebből az következne, hogy a T nem szimmetria.

Közelítő módszerek

Időfüggetlen perturbációszámítás

Legyen $\hat{H}^{(0)}$ olyan Hamilton-operátor, melynek ismerjük a s.é.p. megoldását:

$$\hat{H}^0 |\psi_n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)} |\psi_n^{(0)}\rangle$$

Mi történik, ha H^0-t kicsit megváltoztatjuk?

$$\hat{H} = \hat{H}^0 + \lambda \hat{H}' \qquad \text{ahol } \lambda \ll 1, \ \hat{H}' \sim \hat{H}^0$$

(nem túl jól definiált, de ha helyesen definiáljuk, akkor működne is.)

1) nincs degeneráció: $E_n^0 \neq E_m^0$ ha $m \neq n$

Keressük $\hat{H}|\psi_n\rangle = E_n|\psi_n\rangle$ megoldását

keressük a megoldást λ szerint sorfejtve!

$$E_n = E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \ldots = \sum_{j=0}^{\infty} \lambda^j E_n^{(j)}$$

$$|\psi_n\rangle = |\psi_n^{(0)}\rangle + \lambda |\psi_n^{(1)}\rangle + \lambda^2 |\psi_n^{(2)}\rangle + \ldots$$

első rendben:

$$(H^0 + \lambda H')(|\psi_n^{(0)}\rangle + \lambda |\psi_n^{(1)}\rangle + \lambda^2 |\psi_n^{(2)}\rangle + \ldots) = (E_n^0 + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \ldots)(|\psi_n^{(0)}\rangle + \lambda |\psi_n^{(1)}\rangle + \ldots)$$

$O(\lambda)$-ig:

$$H^{(0)}|\psi_n^{(0)}\rangle + \lambda H^{(0)}|\psi_n^{(1)}\rangle + \lambda \hat{H}'|\psi_n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)}|\psi_n^{(0)}\rangle + \lambda E_n^{(1)}|\psi_n^{(0)}\rangle + \lambda E_n^{(0)}|\psi_n^{(1)}\rangle$$

$$H^{(0)}|\psi_n^{(1)}\rangle + H'|\psi_n^{(0)}\rangle = E_n^{(1)}|\psi_n^{(0)}\rangle + E_n^{(0)}|\psi_n^{(1)}\rangle \qquad / \cdot \langle\psi_n^{(0)}|$$

$$\underbrace{\langle\psi_n^{(0)}|\hat{H}^{(0)}|\psi_n^{(1)}\rangle}_{E_n^{(0)}\langle\psi_n^{(0)}|\psi_n^{(1)}\rangle} + \langle\psi_n^{(0)}|H'|\psi_n^{(0)}\rangle = E_n^{(1)} + E_n^{(0)}\langle\psi_n^{(0)}|\psi_n^{(1)}\rangle$$

$$\underline{E_n^{(1)} = \langle\psi_n^{(0)}|H'|\psi_n^{(0)}\rangle}$$

mi a $|\psi_n^{(1)}\rangle$?

$$(H^{(0)} - E_n^{(0)})|\psi_n^{(1)}\rangle = -(H' - E_n^{(1)})|\psi_n^{(0)}\rangle$$

Írjuk fel $\psi_n^{(1)}$-t $|\psi_n^{(0)}\rangle$ bázisban: $|\psi_n^{(1)}\rangle = \sum_m c_{nm}|\psi_m^{(0)}\rangle$

$$(\hat{H}^{(0)} - E_n^{(0)})\sum_m c_{nm}|\psi_m^{(0)}\rangle = -(H' - E_n^{(1)})|\psi_n^{(0)}\rangle$$

$$\sum_m c_{nm}(E_m^{(0)} - E_n^{(0)})|\psi_m^{(0)}\rangle = -(H' - E_n^{(1)})|\psi_n^{(0)}\rangle$$

(ha $n \neq m$ akkor a baloldal 0, tehát elég $n \neq m$-re számolni)

$$\sum_m c_{nm}(E_m^{(0)} - E_n^{(0)})\delta_{m\ell} = -\langle\psi_\ell^{(0)}|H'|\psi_n^{(0)}\rangle + E_n^{(1)}\delta_{\ell n}$$

$$c_{n\ell}(E_\ell^{(0)} - E_n^{(0)}) = -\langle\psi_\ell^{(0)}|H'|\psi_n^{(0)}\rangle + E_n^{(1)}\delta_{\ell n}$$

ha $\ell = n$ akkor $\forall$ oldal 0.

ha $n \neq \ell$ $\quad \underline{c_{n\ell} = \dfrac{\langle\psi_\ell^{(0)}|H'|\psi_n^{(0)}\rangle}{E_n^{(0)} - E_\ell^{(0)}}}$

KVANTUM
18. előadás (11.22.)

Az elsőrendű korrekció:

$$\psi_n^{(1)} = \sum_{m\neq n} c_{nm} |\psi_m^{(0)}\rangle \qquad \text{ahol} \qquad c_{nm} = \frac{\langle \psi_m^{(0)} | \hat{H}' | \psi_n^{(0)} \rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}$$

Mennyi c_{nn}?

A normálás miatt $|\psi_n\rangle = |\psi_n^{(0)}\rangle + \lambda |\psi_n^{(1)}\rangle + \mathcal{O}(\lambda^2)$

$$\underbrace{\langle \psi_n | \psi_n \rangle}_{1} = \underbrace{\langle \psi_n^{(0)} | \psi_n^{(0)} \rangle}_{1} + \lambda \langle \psi_n^{(0)} | \psi_n^{(1)} \rangle + \lambda \langle \psi_n^{(1)} | \psi_n^{(0)} \rangle + \mathcal{O}(\lambda^2)$$

$$\Rightarrow \mathrm{Re} \langle \psi_n^{(0)} | \psi_n^{(1)} \rangle = 0 \Rightarrow \mathrm{Re} \sum_m c_{nm} \underbrace{\langle \psi_n^{(0)} | \psi_m^{(0)} \rangle}_{\delta_{nm}} = 0 \Rightarrow c_{nn} = 0$$

A c_{nn} tetszőleges képzetes szám lehet, de ha $c_{nn}=0$-t választjuk, nem tévedünk mellé

2. rendben

$$\hat{H}' |\psi_n^{(1)}\rangle + \hat{H}^{(0)} |\psi_n^{(2)}\rangle = E_n^{(0)} |\psi_n^{(2)}\rangle + E_n^{(1)} |\psi_n^{(1)}\rangle + E_n^{(2)} |\psi_n^{(0)}\rangle \qquad / \cdot \langle \psi_n^{(0)}|$$

$$\langle \psi_n^{(0)} | \hat{H}' | \psi_n^{(1)} \rangle + \underbrace{\langle \psi_n^{(0)} | \hat{H}^{(0)} | \psi_n^{(2)} \rangle}_{E_n^{(0)} \langle \psi_n^{(0)} | \psi_n^{(2)} \rangle} = E_n^{(0)} \langle \psi_n^{(0)} | \psi_n^{(2)} \rangle + E_n^{(1)} \langle \psi_n^{(0)} | \psi_n^{(1)} \rangle + E_n^{(2)}$$

$$E_n^{(2)} = \langle \psi_n^{(0)} | \hat{H}' | \psi_n^{(1)} \rangle - E_n^{(1)} \langle \psi_n^{(0)} | \psi_n^{(1)} \rangle =$$

$$= \sum_{m\neq n} c_{nm} \langle \psi_n^{(0)} | \hat{H}' | \psi_m^{(0)} \rangle - \underbrace{E_n^{(1)} \sum_{m\neq n} c_{nm} \underbrace{\langle \psi_n^{(0)} | \psi_m^{(0)} \rangle}_{\delta_{nm}}}_{0} =$$

$$= \sum_{m\neq n} \frac{\langle \psi_m^{(0)} | \hat{H}' | \psi_n^{(0)} \rangle \langle \psi_n^{(0)} | \hat{H}' | \psi_m^{(0)} \rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} = \sum_{m\neq n} \frac{|\langle \psi_m^{(0)} | \hat{H}' | \psi_n^{(0)} \rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}$$

Ezt már általában nem egyszerű kiszámítani, mert az összes energia kell hozzá, ellentétben az elsőrenddel

Érdekesség: $n=1$-re $E_m^{(0)} > E_n^{(0)} \Rightarrow E_1^{(2)} < 0$.

Az alapállapot mindig lefelé korrigál

Pl. végtelen potenciálgödör: $V^{(0)}(x) = \begin{cases} 0 & \text{ha } 0<x<a \\ \infty & \text{else} \end{cases} \Rightarrow \psi_n^{(0)}(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a} x\right)$

$$E_n^{(0)} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} n^2$$

$H' = \Delta V$

$$E_n^{(1)} = \langle \psi_n^{(0)} | H' | \psi_n^{(0)} \rangle = \Delta V \int \psi_n^{(0)*}(x) \psi_n^{(0)}(x) dx = \Delta V$$

$\Rightarrow$ Eltolódik az energiaspektrum, és a 2. korrekciótól mind 0.

HF: Mi van, ha csak 0 és $\frac{a}{2}$ között toljuk el

HF

2) van degeneráció

A elsőrendű energiakorrekció kiszámolásánál nem volt 0-val osztás, de az állapotot már nem tudjuk kiszámolni. Mi a hiba?

Az volt, hogy $E_n = E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \dots$

$|\lambda_n\rangle = |\psi_n^{(0)}\rangle + \lambda |\psi_n^{(1)}\rangle + \dots$

· A sorfejtés lényege, hogy a valós állapotok csak kicsit térnek el a közelítéstől.

DE, ha van degeneráció, akkor $|\psi_n\rangle$ egy tetszőleges altérből választottuk (nem egyértelmű), de a korrekciónál már lehet, hogy ez lesz, ezért a sorfejtésnek csak akkor van értelme, ha $|\psi_n^{(0)}\rangle$-t jól választottuk meg.

problémás lépés: $c_{ne}(E_n^{(1)} - E_e^{(1)}) = \langle \psi_e^{(0)}|\hat{H}'|\psi_n^{(0)}\rangle \qquad n \neq e$

ez csak akkor konzisztens, ha a ~~jobb~~ ~~bal~~ jobb oldal is 0.

Mivel $E_n^{(0)} = E_e^{(0)}$, ezért saját altér van, és $\psi_n^{(0)}, \psi_e^{(0)}$ megválasztásában van szabadságunk; bármilyen $\alpha|\psi_e^{(0)}\rangle + \beta|\psi_n^{(0)}\rangle$ jó.

A problémán külön kezelendő a degenerált altérben:

Legyen $|\phi_i\rangle$ $i = 1 \dots k$ egy degenerált altér lineárisan független vektorai:

$$\hat{H}^{(0)}|\phi_i^{(0)}\rangle = E^{(0)}|\phi_i^{(0)}\rangle$$

Legyen $W_{mn} := \langle \phi_m^{(0)}|\hat{H}'|\phi_n^{(0)}\rangle \in \mathbb{C}^{k \times k}$

akkor lenne jó, ha W diagonális, tehát olyan helyettesítést kell tenni, amivel diagonalizálható.

Mivel $\hat{H}$ hermitikus ezért W is az $\Rightarrow \exists$ k db sajátérték és sajátvektor λ_i, $\underline{e}^{(i)}$

$$\sum_m W_{nm} e_m^{(i)} = \lambda^{(i)} e_n^{(i)} \quad \text{és} \quad \sum_n e_n^{(i)*} e_n^{(j)} = \delta_{ij}$$

Legyen $|\chi_i^{(0)}\rangle := \sum_n e_n^{(i)} |\phi_n^{(0)}\rangle$

Ezekkel már jó, hiszen

$$\langle \chi_i^{(0)}|\hat{H}'|\chi_j^{(0)}\rangle = \sum_{n,m} e_n^{(i)*} e_m^{(j)} \overbrace{\langle \phi_n^{(0)}|\hat{H}'|\phi_m^{(0)}\rangle}^{W_{nm}} = \sum_n e_n^{(i)*} \sum_m W_{nm} e_m^{(j)} =$$

$$= \sum_n e_n^{(i)*} \lambda^{(j)} e_n^{(j)} = \lambda^{(j)} \delta_{ij}$$

Tanulság: $|\chi_i^{(0)}\rangle$ tényleg a jó bázis a degenerált altéren.

· Az energia elsőrendű korrekciója W diagonális elemei, azaz $\lambda^{(i)}$-k

$\Rightarrow$ ha $W \neq$ konst. $\mathbb{1}$, akkor az energiakorrekciók különbözőek ennek legalábbis kivéve ha deg.

„A perturbáció feloldja a degenerációt" (Ez általában a szimmetria sérülése miatt van.)

W diagonalizálása nem mindig egyszerű, ezért van egy hasznos állítás:

Legyen $\hat A$ egy olyan hermitikus operátor amely $[\hat A, \hat H^{(0)}]=0$ és $[\hat A, \hat H']=0$
(tehát a degenerált altéren $\exists$ $H^{(0)}$, A-val közös $|\phi_i\rangle$ s. f. rendszere)
és $\hat A|\phi_i\rangle = a_i|\phi_i\rangle$ ahol a_i-k nem degeneráltak, akkor $|\phi_i\rangle$ jó bázis.

Bizonyítás:

$$0 = \langle\phi_i|[\hat A, \hat H']|\phi_j\rangle = \langle\phi_i|\hat A \hat H'|\phi_j\rangle - \langle\phi_i|\hat H' \hat A|\phi_j\rangle =$$

$$= (a_i - a_j)\langle\phi_i|\hat H'|\phi_j\rangle$$

$i \neq j$-re $\langle\phi_i|\hat H'|\phi_j\rangle = 0$ $\square$

Általánosan, amit nem részletezünk:

- H atom spektrumának felhasadása

eredetileg ψ^m_{nje} sajátállapota $\hat H, \hat J^2, \hat L^2, \hat S^2, \hat J_3$ operátoroknak is, és $E_n \sim \frac{1}{n^2}$

A Hamilton tartalmazta a Coulomb- és a kinetikus tagot.

Figyelembe vehetjük még a relativisztikus korrekciókat és L meg S kölcsönhatását.
Ekkor E függ n-től és j-től, (l, m még degenerált) finom felhasadás

hiperfinom felhasadás: figyelembe vesszük a mag véges méretét és spinjét

Lamb shift (QED): itt már l-től is függ

Végül tényleges degeneráció csak m-ben van, ami a forgatási szimmetria következménye

Zeeman-effektus

E szintek felhasadása külső mágneses tér hatására

a) gyenge tér: $\Delta E_B \ll E_{ff}$

b) erős tér $\Delta E_B \gg E_{ff}$
Paschen-Back-effektus

általános esetben $\hat H = H^{(0)} + \underbrace{\Delta \hat H_{ff} + \Delta \hat H_B}_{\hat H'}$
ezt meg lehet csinálni, de nem olyan egyszerű

a esetben ismertnek tekintjük a finom felhasadás eredményét: $H^{0} = H^{(0)} + \Delta H_{ff}$, $E^{(0)}_{nj}$.

b esetben egyszerűen elhagyjuk: $\Delta H_{ff} \approx 0$

A mágneses energia változása:

$$\Delta \hat{H}_B = -\underline{\mu}\,\underline{B} \qquad \text{ahol} \quad \underline{\mu} = \underline{\mu}_L + \underline{\mu}_S = -\frac{e}{2m}\left(\hat{\underline{L}} + g_e \hat{\underline{S}}\right)$$

g_e: giromágneses faktor

$$H' = \Delta H_B = \frac{e}{2m}\left(\hat{\underline{L}} + g\,\hat{\underline{S}}\right)\underline{B}$$

A perturbálatlan energiaszintek:

	H atom	alkáli fémek
gyenge tér	E_{nj}	E_{nje}
erős tér	E_n ← HF	E_{ne} ← ezt fogjuk órán számolni

HF

a) gyenge tér alkáli fémekre

$E^{(0)}_{nje}$, csak m-ben van degeneráció

$$W_{mm'} = \frac{e}{2m}\underline{B}\,\langle njem|\,\underline{L} + g_e\underline{S}\,|njem'\rangle \in \mathbb{C}^{(2j+1)\times(2j+1)}$$

KVANTUM

19. előadás (11.26.)

Gyenge tér, $\overset{\text{alkalmas feltétel}}{\vee}$ esetén E_{nje} van, m-ben van degeneráció.

$$W_{m'm} = \frac{e}{2m} B \langle n j e m' | L + g_e S | n j e m \rangle$$

Wigner-Eckart-tételből $L + g_e S$ vektor, J is vektor

$$\langle n j e m' | L + g_e S | n j e m' \rangle = g_{nje} \langle n j e m' | J | n j e m \rangle$$

g_{nje}: Landé-faktorok

Állítás: $\langle n j e m' | (L + g_e S) J | n j e m \rangle = g_{nje} \langle n j e m' | J^2 | n j e m \rangle$

Ui.: $J_i | n j e m \rangle = \sum_{m''} \alpha_{m''} | n j e m'' \rangle$ tölteni HF

(HF)

Landé faktorok meghatározása:

jobb oldal: $g_{nje} \langle n j e m' | \hbar^2 j(j+1) | n j e m \rangle = g_{nje} \hbar j(j+1) \delta_{mm'}$

bal oldal: $\langle n j e m' | L J | n j e m \rangle + g_e \langle n j e m' | S J | n j e m \rangle =$

$$\left[\begin{aligned} J = L + S &\Rightarrow J - L = S \\ & J^2 + L^2 - 2JL = S^2 \\ & JL = \tfrac{1}{2}(-S^2 + J^2 + L^2) \end{aligned} \right]$$

$$= \frac{1}{2} \delta_{mm'} \left(-\frac{1}{2}\left(\frac{3}{2}\right) + j(j+1) + e(e+1) \right) + g_e \frac{1}{2} \delta_{mm'} \hbar^2 \left(j(j+1) + \frac{1}{2}\frac{3}{2} - e(e+1) \right)$$

Azaz: $\frac{1}{2}\left[2j(j+1) + (g_e - 1)\left[j(j+1) + \frac{3}{4} - e(e+1) \right] \right] = g_{nje}\, j(j+1)$

$$g_{nje} = 1 + (g_e - 1) \frac{j(j+1) + \frac{3}{4} - e(e+1)}{2 j(j+1)}$$

ha $g_e = 1$ Zeeman-eff

$g_e \neq 1$ anomális Zeeman.

Ugyanis $W_{m'm} = \frac{eB}{2m} \langle n j e m' | \hat{L} + g_e \hat{S} | n j e m \rangle = \frac{eB}{2m} g_{nje} \langle n j e m' | \hat{J} | n j e m \rangle$

Legyen $B \parallel e_z$, B mutatja z irányba $\Rightarrow B \hat{J} = B \hat{J}_3$

$$W_{m'm} = \frac{eB}{2m} g_{nje} \langle n j e m' | \hat{J}_3 | n j e m \rangle = \frac{eB}{2m} g_{nje} \hbar m \delta_{m'm}$$

$\Rightarrow \Delta E_m = \frac{eB}{2m} g_{nje} \hbar m \Rightarrow$ Az adott színképvonal $2j+1$ részre hasad.

b)

erős tér, közelítés: csak σ_{H_Z}-től függ.

érdemes az eredeti bázist használni: (L^2, L_z, S^2, S_z közös s. állapot rendszer)

$|n, l, m_l, m_s\rangle$ degenerált m_l, m_s-ben.

$$W_{m_l' m_s' m_l m_s} = \frac{eB}{2m} \langle n l m_l' m_s' | \hat{\underline{L}} + g_e \hat{\underline{S}} | n l m_l m_s \rangle = \quad (B \text{ megint } +z \text{ irányú})$$

$$= \frac{eB}{2m} \langle n l m_l' m_s' | \hat{L}_z + g_e \hat{S}_z | n l m_l m_s \rangle = \frac{eB}{2m} (\hbar m_l + g_e \hbar m_s) \delta_{m_l' m_l} \delta_{m_s' m_s}$$

Stark-effektus

az atomok E-szintjeinek felhasadása külső homogén $\underline{E}$-térben

$-e$ töltésű részecske a ϕ skalárpotenciálban: $\Delta \hat{H} = -e\phi$

gömbszimmetrikus potenciál: $\phi(\underline{r}) = -\underline{E}\,\underline{r}$ jó választás, a tere ~~homogén~~ konstans

$\Delta \hat{H} = e \underline{E}\,\underline{r}$ legyen $\underline{E}$ $+z$ irányú $\Rightarrow \Delta \hat{H} = e E \hat{x}_3$

Mivel $[\hat{x}_3, \hat{J}_3] = 0 \Rightarrow \hat{x}_3 |j m\rangle = \text{konst} |j m\rangle$

ebből: $\langle \dots m' | \hat{x}_3 | \dots m \rangle \sim \delta_{mm'} \Rightarrow$ csak azonos m-ek között van 0 a mátrixelem.

$e E \langle n' j' l' m' | \hat{x}_3 | n j l m \rangle$

n-től mindig függ az energia.

j-től ↗ gyenge térnél igen ↘ erős térnél nem

l-től ↗ H atomnál nem ↘ alkáli fémeknél igen

HF — Az $\hat{x}_3$ paritása -1, mert ha $\hat{P}|\psi\rangle = \pm|\psi\rangle$, akkor $\hat{P}\hat{x}_3|\psi\rangle = \mp \hat{x}_3|\psi\rangle$ HF

Mivel $|n j l m\rangle$ paritása l-től függ: $(-1)^l$

ezért $\hat{x}_3 |n j l m\rangle$ paritása $(-1)^{l+1}$

$\Rightarrow$ ha $l = l'$ akkor a mátrixelem 0.

De ha l-től függ az energia, akkor a mátrixelemek csak n.a.-ra az l-hez tartozó, tehát a teljes mátrix $0 \Rightarrow$ alkáli fémeknél nincs elsőrendű korrekció

a: gyenge tér σ_{H_Z} ↖ közelítés

b: erős tér σ_H ↙

a)

E_{nj}.

$\langle n j l' m | \hat{x}_3 | n j l m \rangle$ Mivel $l \neq l'$ és $l = j \pm \frac{1}{2}$
$l' = j \pm \frac{1}{2}$

ezért két lehetőség van: $l = l' \pm 1$

$\langle n j, j+\frac{1}{2}, m | \hat{x}_3 | n j, j-\frac{1}{2}, m \rangle$ a másik ennek a komplex konjugáltja

Mi legyen n, j ?

$n = 1 \quad l = 0 \quad \times$

$n = 2 \quad l = 0, 1$

$j = \frac{1}{2} \quad l = 0, 1 \quad \checkmark$ ← itt már van elsőrendű korrekció, a másik két helyen nincs

$j = \frac{3}{2} \quad l = 1 \quad \times$

$\langle n=2, j=\frac{1}{2}, l=0, m=\pm\frac{1}{2} | \hat{x}_3 | n=2, j=\frac{1}{2}, l=1, m=\pm\frac{1}{2} \rangle$

impulzus momentum összeadás (legyen $m = \frac{1}{2}$)

$|j=\frac{1}{2}, l=0, m=\frac{1}{2}\rangle = |l=0, m_l=0\rangle \, |s=\frac{1}{2}, m_s=\frac{1}{2}\rangle$

$|j=\frac{1}{2}, l=1, m=\frac{1}{2}\rangle = C_{1\frac{1}{2}}(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}; 0, \frac{1}{2}) |l=1\ m_l=0\rangle |s=\frac{1}{2}\ m_s=\frac{1}{2}\rangle +$
$+ C_{1\frac{1}{2}}(\frac{1}{2}\frac{1}{2}; 1 -\frac{1}{2}) |l=1\ m_l=1\rangle |s=\frac{1}{2}\ m_s=-\frac{1}{2}\rangle$

mivel $[\hat{x}_3, \hat{L}_3] = 0$ $\hat{x}_3$ m_l-t nem változtatja meg

$\Rightarrow$ a mátrixelem: $\langle \cdots | \hat{x}_3 | \cdots \rangle = C_{1\frac{1}{2}}(\frac{1}{2}\frac{1}{2}, 0\ \frac{1}{2}) \langle l=0, m_l=0 | \langle s=\frac{1}{2}, m_s=\frac{1}{2} | \hat{x}_3$
$|l=1, m_l=0\rangle |s=\frac{1}{2}\ m_s=\frac{1}{2}\rangle$

Mivel $[\hat{x}_3, \hat{S}] = 0$ ezért a spin rész 1-et ad.

A Clebsch-Gordan-eh: $C_{1\frac{1}{2}}(\frac{1}{2}\frac{1}{2} 0 \frac{1}{2}) = -\frac{1}{\sqrt{3}}$

a mátrixelem: $-\frac{1}{\sqrt{3}} \langle n=2, l=0, m_l=0 | \hat{x}_3 | n=2, l=1, m_l=0 \rangle$

Emlékeztetés: a H-atom sajátállapotai: $\psi_{nl}^m(r, \vartheta, \varphi) = R_{nl}(r)\, Y_l^m(\vartheta, \varphi)$

a mátrixelem: $-\frac{1}{\sqrt{3}} \int r \cos\vartheta\, R_{20}^*(r)\, Y_0^0(\vartheta,\varphi)\, R_{21}(r)\, Y_1^0(\vartheta,\varphi)\, d^3x =: -\frac{1}{\sqrt{3}} I$

belátható, hogy I valós.

A nem 0 mátrixelemek: $\underbrace{(n=2, j=\frac{1}{2}) \quad l=0,1 \quad m=\pm\frac{1}{2}}$ 4 állapot $\Rightarrow W \in \mathbb{C}^{4\times4}$

$\langle l=0\ m=\frac{1}{2} | \hat{x}_3 | l=1, m=\frac{1}{2} \rangle = -\frac{1}{\sqrt{3}} I$

$\langle l=1, m=\frac{1}{2} | \hat{x}_3 | l=0, m=\frac{1}{2} \rangle = -\frac{1}{\sqrt{3}} I$

$\langle l=0, m=-\frac{1}{2} | \hat{x}_3 | l=1, m=-\frac{1}{2} \rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}$

↑ és ennek a konj.

$$W = \frac{eEI}{\sqrt{3}} \quad \begin{array}{cc|cccc} & l & 0 & 1 & 0 & 1 \\ & m & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \\ \hline 0 & \frac{1}{2} & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 1 & \frac{1}{2} & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{1}{2} & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & -\frac{1}{2} & 0 & 0 & 1 & 0 \end{array}$$

A sajátértékei: $\pm \frac{eEI}{\sqrt{3}}$

sajátvektorai: $\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\1\\0\\0\end{pmatrix}$ $\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\-1\\0\\0\end{pmatrix}$ $\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}0\\0\\1\\1\end{pmatrix}$ $\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}0\\0\\1\\-1\end{pmatrix}$

A jó bázis:

$$|A\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|n=2, j=\tfrac{1}{2}, l=0, m\rangle + |n=2, j=\tfrac{1}{2}, l=1, m\rangle\right)$$

$$|B\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\ldots \quad - \quad \ldots \right)$$

I kiszámításához:

$$R_n(r) = R_n(\rho) = \rho^{l} e^{-\rho} F_{nl}(\rho) \qquad \text{ahol } \rho = \frac{r}{na}, \text{ a: Bohr-sugár}$$

$$F_{21} = \text{konst}$$

$$F_{20} = \text{konst}(1-\rho)$$

$$Y_0^0 = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$$

$$Y_1^0 = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos\vartheta$$

HF ezzel kiintegrálható HF

$$I = -3a$$

Gyenge térre két felé hasad az energia. $\Delta E = \pm\sqrt{3}\, eEa$

KVANTUM

20. előadás (11.29.)

b) E_n (erős Tér)

degeneráció: $2n^2$

bázisnak érdemes n.n-t választani: L^2, L_3, S^2, S_3 közös sajátállapotait

$$|n\,l\,m_l\,m_s\rangle = |n\,l\,m_l\rangle\,|\tfrac{1}{2}\,m_s\rangle$$

mátrixelemek: $W = eE\langle n\,l'\,m_l'\,m_s'|\hat{x}_3|n\,l\,m_l\,m_s\rangle = eE\,\delta_{m_l'm_l}\delta_{m_s'm_s}\langle n\,l'\,m_l\,m_s|\hat{x}_3|n\,l\,m_l\,m_s\rangle$

2 féle $\neq 0$ tag: $l=1,\ l'=0$
$l=0,\ l'=1$ (ja, most előbb az $n=2$-t nézzük, de nem tudom miért)

$$\underbrace{\langle n=2, l=1, m_l=0|\hat{x}_3|n=2, l=0, m_l=0\rangle}_{-3a}$$ ill. a konjugáltja.

HF: felírni a teljes 8×8-as mátrixot
a sajátértékei ± 1 és $\Delta E = \pm 3aeE$

HF

Variációs módszer

Az alapállapoti energia meghatározásában hasznos.

Állítás: $E_1 \le \dfrac{\langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle}$ ahol $\psi\in\mathcal{H}$

= fennáll, ha $|\psi\rangle = |\phi_1\rangle$

$E_1 \le \langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle$ ha $\psi\in\mathcal{H}$, $|\psi|^2=1$

Biz: Legyenek a Ts állapotok $|\phi_n\rangle$: $\hat{H}|\phi_n\rangle = E_n|\phi_n\rangle$

$\exists c_n: |\psi\rangle = c_n|\phi_n\rangle$

$$\langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle = \sum_{n,m} c_n^* c_m\langle\phi_n|\hat{H}|\phi_m\rangle = \sum_{n,m} c_n^* c_m E_m\langle\phi_n|\phi_m\rangle = \sum_n |c_n|^2 E_n \ge$$

$$\ge \sum_n c_n E_1 = E_1|\psi|^2$$

Következmény: valahány folytonos paraméterrel paraméterezzük $|\psi\rangle$-t, ezekkel kifejezzük ezt $\langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle$-t, és ennek a minimuma lesz E_1

$$E_1 \le \min_{\alpha_1\cdots\alpha_n}\frac{\langle\psi(\alpha_1\cdots\alpha_n)|\hat{H}|\psi(\alpha_1\cdots\alpha_n)\rangle}{|\psi(\alpha_1\cdots\alpha_n)|^2}$$

Vajon lehet-e korlátot adni E_2-re is?

Igen, de milyen feltétellel: $E_2 \leq \frac{\langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle}{|\psi|^2}$ ha $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ és $\langle\phi_1|\psi\rangle = 0$

HF

HF: Bizonyítás

Azért hívjuk variációs módszernek, mert ha
$S = \frac{\langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle}{|\psi|^2}$ akkor a $\delta S = 0$ feltétel a Schr.-egyenletet adja.

HF

(HF feladat)

Példák:

1) 1D-s harmonikus oszcillátor

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V} \qquad T = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}$$

$$V = \frac{1}{2} m\omega^2 x^2$$

próbafv: $\psi_b(x) = A e^{-bx^2}$

HF

HF: b-fv-ben minimalizálni

lépések:
- normálás
- $\langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle$ kiszámítása b függvényében
- minimum megkeresése

2 He atom

$Z=2$: $2\,p^+$, $2\,n^0$, $2\,e^-$

elhanyagoljuk:
- mag mozgását
- finom felhasadás (spinnel nem kell foglalkozni)

Mivel a 2db e^- spinje lehet különböző, nem kell ψ-t antiszimmetrizálni

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}(\nabla_1^2 + \nabla_2^2) - e^2\left(\frac{2}{r_1} + \frac{2}{r_2} - \frac{1}{|\underline{r}_1 - \underline{r}_2|}\right) \qquad \left(V_{ee} := \frac{e^2}{|\underline{r}_1 - \underline{r}_2|}\right)$$

Mi legyen a próbafv? Ha V_{ee} nem lenne ott, akkor két független H-atom lenne.
$\psi_1(\underline{r}_1, \underline{r}_2) = \psi_{10}^0(\underline{r}_1)\psi_{10}^0(\underline{r}_2)$ lenne, ahol $\psi_{10}^0(\underline{r}) = \frac{Z^3}{\pi a^3} e^{-\frac{Zr}{a}}$ és $E_n = -\frac{e^2 Z^2}{2n^2 a}$

Tehát próbafv: $\psi_0(r_1 r_2) = \frac{8}{\pi a^3} e^{-2\frac{r_1 + r_2}{a}}$

Mi a $\hat{H}|\psi_0\rangle$?

$$\hat{H}|\psi_0\rangle = 8E_1^H \psi_0 + V_{ee}\psi_0$$

$$E_1^{He} \leq \langle\psi_0|\hat{H}|\psi_0\rangle = 8E_1^H + \langle V_{ee}\rangle_{\psi_0}$$

Az integrál egy bonyolult integrál.

$$\langle\Psi_0|V_{ee}|\Psi_0\rangle = e^2\left(\frac{8}{\pi a^3}\right)^2 \int \frac{e^{-4\frac{r_1+r_2}{a}}}{|\underline{r}_1-\underline{r}_2|}\, d^3r_1\, d^3r_2 = *$$

Először r_2 szerint integrálunk. Ha z tengely $\underline{r}_1$ irányú, akkor a polárisban felírva:

$$\int d^3r_2 = \int r_2^2\, dr_2 \sin\vartheta\, d\vartheta\, d\varphi$$

továbbá: $|r_1-r_2| = \sqrt{r_1^2+r_2^2-2r_1r_2\cos\vartheta}$

$$* = e^2\left(\frac{8}{\pi a^3}\right)^2 \int e^{-\frac{4r_1}{a}} \int \frac{e^{-4\frac{r_2}{a}}}{\sqrt{r_1^2+r_2^2-2r_1r_2\cos\vartheta}}\, r_2^2 \sin\vartheta\, dr_2\, d\vartheta\, d\varphi\, d^3r_1 =$$

$$= e^2\left(\frac{8}{\pi a^3}\right)^2 \int_{\underline{r}_1} e^{-\frac{4r_1}{a}} \int_{r_2=0}^{\infty} r_2^2 e^{-4\frac{r_2}{a}} \int_{\vartheta=0}^{\pi} \frac{1}{\sqrt{r_1^2+r_2^2-2r_1r_2\cos\vartheta}} \sin\vartheta\, d\vartheta\, dr_2\, d^3r_1 \cdot \overbrace{\int_{\varphi=0}^{2\pi} d\varphi}^{2\pi} = *$$

Mivel $\displaystyle\int_0^{\pi} \frac{1}{\sqrt{r_1^2+r_2^2-2r_1r_2\cos\vartheta}} \sin\vartheta\, d\vartheta = \int_{-1}^{1} \frac{1}{\sqrt{r_1^2+r_2^2-2r_1r_2u}}\, du =$

$$= \frac{1}{r_1r_2}\left[\sqrt{r_1^2+r_2^2-2r_1r_2u}\right]_1^{-1} = \frac{1}{r_1r_2}\left(r_1+r_2-|r_1-r_2|\right) =$$

$$= \begin{cases} \frac{2}{r_1} & \text{ha } r_1>r_2 \\ \frac{2}{r_2} & \text{ha } r_2>r_1 \end{cases}$$

szerint a r_2 szerinti integrál felbontható:

$$* = 2\pi e^2\left(\frac{8}{\pi a^3}\right)^2 \int_{\underline{r}_1} e^{-\frac{4r_1}{a}} \left[\int_{r_2=0}^{r_1} \frac{2r_2^2}{r_1} e^{-\frac{4r_2}{a}}\, dr_2 + \int_{r_2=r_1}^{\infty} 2r_2 e^{-\frac{4r_2}{a}}\, dr_2\right] d^3r_1 = *$$

innentől csak $\int x^n e^{ax}\,dx$ alakú integrálok vannak, amik parciálissal kezelhetők.

A további számolás technikai, ezért HF

HF

Az eredmény:

$$\langle\Psi_0|V_{ee}|\Psi_0\rangle = * = \frac{5}{4a}e^2 = -\frac{5}{2}E_1^H$$

Tehát a He atom energiája:

$$E_1^{He} \le \left(8-\frac{5}{2}\right)E_1^H = \frac{11}{2}E_1^H$$

Lehet-e ezt javítani?

Fizikai kép: az egyik elektron úgy érzi, mint ha a másik e^- leárnyékolná a magot.

ötlet: az új próbafv legyen ugyanaz, de $Z=2$ helyett legyen általános Z!

$$\Psi_1(r_1,r_2) = \frac{Z^3}{\pi a^3} e^{-Z(r_1+r_2)/a}, \quad E_1^{He} \le \langle\Psi_1|\hat{H}|\Psi_1\rangle_Z$$

Ezt már könnyű kiszámolni :

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\nabla_1^2 + \nabla_2^2\right) - e^2\left(\frac{Z}{r_1} + \frac{Z}{r_2}\right) + e^2\left(\frac{Z-2}{r_1} + \frac{Z-2}{r_2} + \frac{1}{|r_1 - r_2|}\right)$$

$$\hat{H}\psi_1 = 2Z^2 E_1^H \psi_1 + e^2\left(\frac{Z-2}{r_1} + \frac{Z-2}{r_2} + \frac{1}{|r_1 - r_2|}\right)\psi_1$$

$$\langle \psi_1 | \hat{H} | \psi_1 \rangle = 2Z^2 E^H + 2(Z-2)e^2\left\langle \frac{1}{r} \right\rangle + \langle \psi_1 | V_{ee} | \psi_1 \rangle$$

Mivel $e^2\left\langle \frac{1}{r}\right\rangle = e^2 \frac{Z}{a} = -2ZE_1^H$

$\langle \psi_1 | V_{ee} | \psi_1 \rangle =$ u.a. m. előbb, csak $\frac{2}{a} \to \frac{Z}{a}$

olyan mintha $a \to \frac{2}{Z} a$

Ha végig számoljuk : $\langle \psi_1 | V_{ee} | \psi_1 \rangle = -\frac{5Z}{4} E_1^H$

$$\langle \psi_1 | \hat{H} | \psi_1 \rangle_Z = \left(2Z^2 - 2Z(2Z-4) - \frac{5Z}{4}\right) E_1^H = \left(-2Z^2 + \frac{27}{4}Z\right) E_1^H$$

Ez ott minimális, ahol $Z = \frac{27}{16} \approx 1{,}69$

Visszaírva $\langle \psi_1 | \hat{H} | \psi_1 \rangle = \frac{729}{128} E_1^H \geq E_1^{He}$

$E_1^H = -13{,}6\ eV$

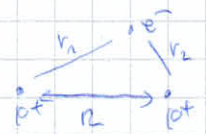
$\Rightarrow E_1^{He} \leq -77{,}5\ eV$

a valóság $E_1^{He} = -78{,}975\ eV$

KVANTUM

21. előadás (12.03.)

H molekula ion



Ha a variációs módszerrel találunk kötött állapotot, akkor ok, de ha nem, akkor csak nem biztos, hogy megfelelő próbafv.-t használtunk

A Hamiltonoperátor felírható

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta - e^2\left(\frac{1}{r_1}+\frac{1}{r_2}\right)$$

Próbafv.: legyen a két H atom szuperpozíciója.

$$\Psi = A\left(\psi_g(r_1)+\psi_g(r_2)\right) \qquad \text{ahol} \quad \psi_g(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}}e^{-\frac{r}{a}} \qquad 1s \text{ állapot}$$

$$\Psi = \frac{A}{\sqrt{\pi a^3}}\left(e^{-\frac{r_1}{a}}+e^{-\frac{r_2}{a}}\right)$$

1. lépés: normálás: $|\Psi|^2 = |A|^2\int\left(|\psi_g(r_1)|^2+|\psi_g(r_2)|^2+2\psi_g(r_1)\psi_g(r_2)\right)d^3r$

Azt tudjuk, hogy $\int|\psi_g(r_1)|\,d^3r_1 = 1$

$$\int\psi_g(r_1)\psi_g(r_2)\,d^3r =: I$$

$$r_1 = |r| = r$$

$$r_2 = \sqrt{r^2+R^2-2rR\cos\vartheta}$$

$$I = \frac{1}{\pi a^3}\int e^{-\frac{r_1+r_2}{a}}d^3r = \frac{1}{\pi a^3}\int_0^{2\pi}d\varphi\int_0^{\infty}r^2\int_0^{\pi}\sin\vartheta\, e^{-\frac{r}{a}}e^{-\frac{1}{a}\sqrt{r^2+R^2-2rR\cos\vartheta}}\,d\vartheta\, dr$$

Ha $y := \sqrt{r^2+R^2-2rR\cos\vartheta} \Rightarrow 2y\,dy = 2rR\sin\vartheta\,d\vartheta$

$$I = \frac{1}{\pi a^3}\int_0^{2\pi}d\varphi\int_0^{\infty}r^2dr\int_{|r-R|}^{r+R}\frac{1}{rR}\,y\,e^{-\frac{r}{a}}e^{-\frac{y}{a}}\,dy = \text{kiintegrálható} =$$ HF

$$= e^{-R/a}\left(1+\left(\frac{R}{a}\right)+\frac{1}{3}\left(\frac{R}{a}\right)^2\right)$$

$$\hat{H}\Psi = A\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta - e^2\left(\frac{1}{r_1}+\frac{1}{r_2}\right)\right]\left(\psi_g(r_1)+\psi_g(r_2)\right) = \underbrace{A E_1^H\psi_g(r_1) + A E_1^H\psi_g(r_2)}_{E_1^H\Psi} - Ae^2\frac{1}{r_1}\psi_g(r_2) - Ae^2\frac{1}{r_2}\psi_g(r_1)$$

Ebből:

$$\langle\Psi|\hat{H}|\Psi\rangle = E_1^H - |A|^2e^2\int\left(\psi_g(r_1)+\psi_g(r_2)\right)\left(\frac{1}{r_1}\psi_g(r_2)+\frac{1}{r_2}\psi_g(r_1)\right)d^3r = \text{kiszámolható} =$$ HF

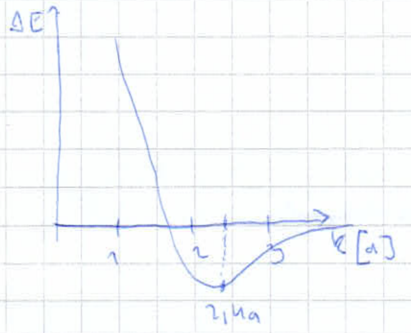
$$= E_1\left(1+2\,\frac{D+X}{1+I}\right) \qquad \text{ahol} \qquad D = \frac{a}{R}-\left(1+\frac{a}{R}\right)e^{-2R/a}$$

$$X = \left(1+\frac{R}{a}\right)e^{-R/a}$$

Az energiához hozzáadjuk még a két proton Coulomb-energiáját.

$$E(R) = E_1^H\left[\left(1+2\,\frac{D+X}{1+I}\right)-\frac{2a}{R}-1\right]$$

Ha ez negatív, akkor ~~ad~~ tud létezni kötött állapot, amiben kisebb az energia



$\Delta E_{min} \approx 0{,}15\,E_1^H$

<u>WKB közelítés</u> (Wentzel, Kramers, Brillouin)

ötlet: $V = \text{konst} \Rightarrow$ megoldás síkhullám: $A e^{\pm ikx}$ $E > V$

$A e^{\pm kx}$ $E < V$

Ha V „lassan változik" elsődleges megoldás: $A \to A(x)$

$kx \to \phi(x)$ modulált síkhullám

<u>Klasszikus eset $E \gg V$</u>

keressük a megoldást $A(x)e^{i\phi(x)}$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} + V(x)\psi = E\psi \Rightarrow \frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{2m}{\hbar^2}(E-V)\psi = -\frac{p^2}{\hbar^2}\psi$$

Beírva a keresett alakot:

$$\psi = A(x)e^{i\phi(x)} \quad \text{alak } A \text{ és } \phi \text{ valós}$$

$$\frac{d\psi}{dx} = A'e^{i\phi} + i\phi' A e^{i\phi}$$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = A''e^{i\phi} + iA'\phi' e^{i\phi} + i\phi'' A e^{i\phi} + iA'\phi' e^{i\phi} - \phi'^2 A e^{i\phi} =$$

$$= e^{i\phi}\left(A'' - \phi'^2 A + 2iA'\phi' + i\phi'' A\right)$$

$$A'' - \phi'^2 A + 2iA'\phi' + i\phi'' A = -\frac{p^2}{\hbar^2}A$$ ez elvileg a Sch.-egy.

képzetes rész: $2A'\phi' + \phi'' A = 0 \Rightarrow 2AA'\phi' + A^2\phi'' = 0 \Rightarrow (A^2\phi')' = 0$

valós rész: $\frac{p^2}{\hbar^2}A + A'' - \phi'^2 A = 0$

a képzetes részből: $A^2\phi' = \text{konst} = c'^2 \Rightarrow A = \frac{c'}{\sqrt{\phi'}}$

A valós rész általában nem megoldható, de most jön a közelítés:

Ha V lassan változik, A is $\Rightarrow$ A''-t elhagyjuk.

$$\frac{p^2}{\hbar^2}A - \phi'^2 A = 0 \Rightarrow \phi'^2 = \frac{p^2}{\hbar^2} \Rightarrow \phi' = \pm\frac{p}{\hbar}$$

$$\phi(x) = \pm\frac{1}{\hbar}\int p(x')\,dx' + \text{konst}$$

$$A(x) = \frac{C'}{\sqrt{\phi'}} = \frac{C''}{\sqrt{p(x)}}$$

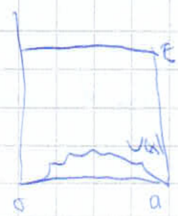
Tehát a megoldás: $\psi(x) = \frac{A}{\sqrt{p(x)}} e^{\pm\frac{i}{\hbar}\int p(x')\,dx'}$

ha $V \gg E$ formálisan u.a., de összevágja alakulatú dolgokat:

$$\psi(x) = \frac{C}{\sqrt{|p(x)|}} e^{\pm\frac{1}{\hbar}\int^{x} |p(x')|\,dx'}$$

Ált. meg.: $\psi(x) = \frac{A}{\sqrt{p(x)}}e^{i\phi(x)} + \frac{B}{\sqrt{p(x)}}e^{-i\phi(x)} = \frac{C}{\sqrt{p(x)}}\cos\phi(x) + \frac{D}{\sqrt{p(x)}}\sin\phi(x)$ ahol $\phi(x) = \frac{1}{\hbar}\int_0^x p(x)\,dx$

határfeltételek: • $\psi(0) = 0$ $\quad \phi(0) = 0$



$$\psi(0) = \frac{C}{\sqrt{p(0)}} = 0 \Rightarrow C = 0$$

• $\psi(a) = 0 \Rightarrow \psi(a) = \frac{D}{\sqrt{p(a)}}\sin\phi(a) \doteq 0 \Rightarrow$

$$\Rightarrow \sin\phi(a) = 0 \Rightarrow \phi(a) = n\pi \Rightarrow \frac{1}{\hbar}\int_0^a p(x')\,dx' = n\pi$$

ezt a feltételt kaptuk (Sommerfeld)

A WKB csak akkor jó, ha $E \gg V$ vagy $E \ll V$.

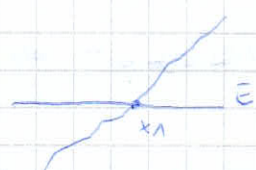
Ha $E \approx V$ akkor $p(x) \approx 0 \Rightarrow$ értelmetlen a formula

A fordulópont környékén rossz a WKB.

DE ha itt lehet linearizálni és azt meg lehet oldani: Airy-fv.-ek.

Azokhoz kell összeilleszteni a WKB megoldásokat

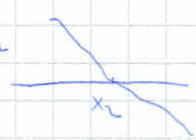
A kapott formulák:



$$\psi(x) = \frac{D}{\sqrt{|p(x)|}} e^{-\frac{1}{\hbar}\int_{x_1}^{x} |p(x')|\,dx'} + \frac{E}{\sqrt{|p(x)|}} e^{\frac{1}{\hbar}\int_{x_1}^{x} |p(x')|\,dx'} \qquad x > x_1$$

$$\psi(x) = \frac{2D}{\sqrt{p(x)}}\sin\left(\frac{1}{\hbar}\int_x^{x_1} p(x')\,dx' + \frac{\pi}{4}\right) + \frac{E}{\sqrt{p(x)}}\cos\left(\ldots + \frac{\pi}{4}\right) \qquad x < x_1$$

ha



akkor

$$\psi(x) = \frac{D'}{\sqrt{|p(x)|}} e^{-\frac{1}{\hbar}\int_x^{x_2} |p(x')|\,dx'} + \frac{E'}{\sqrt{|p(x)|}} e^{\frac{1}{\hbar}\int_x^{x_2} |p(x')|\,dx'} \qquad x < x_2$$

$$\psi(x) = \frac{2D'}{\sqrt{|p(x)|}}\sin\left(\frac{1}{\hbar}\int_{x_2}^{x} p(x')\,dx' + \frac{\pi}{4}\right) + \frac{E'}{\sqrt{p(x)}}\cos\left(\frac{1}{\hbar}\int_{x_2}^{x} p(x')\,dx' + \frac{\pi}{4}\right)$$

a 2. verzióit említette de ezt nem kell megtanulni [videó]

KVANTUM

12. előadás (12.06.)

Időfüggő perturbációszámítás

$$\hat{H}\psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}$$

ha $\hat{H}$ időfüggetlen, akkor $\psi(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}\psi_n$

és $\psi(0) = \psi_n$

ha $\psi(0)$ n.á., akkor az ismertek időben

$\psi(t) = \sum_n c_n e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}\psi_n$ alakban írjuk fel!

c_n-eket KF-ből megkaptuk, mert $\psi(0) = \sum_n c_n \psi_n$.

Mi van, ha fenn egy időfüggő perturbáció?

Legyen egy nem zárt rendszerünk!

$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}'(t)$ ahol H_1 „kicsi"

Legyenek $\hat{H}_0\psi_n = E_n\psi_n$ bázis!

de az időfüggés miatt a sajátállapotok az időben elvándorolnak

Meg kell nézni, hogy $H'(t)$ hova viszi H_0 s.á.-it:

$$\hat{H}'(t)\psi_n = \sum_m d_{mn}(t)\psi_m \implies d_{mn}(t) = \langle \psi_m | \hat{H}'(t) | \psi_n \rangle$$

A Schr.-egyenlet megoldása:

$$\psi(t) = \sum_n c_n(t)\psi_n e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}$$

beírva: $\left(\hat{H}_0 + \hat{H}'(t)\right)\sum_n c_n(t) e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}\psi_n = i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}$

JO: $i\hbar\frac{\partial \psi}{\partial t} = i\hbar\sum_n \left(c_n'(t)\psi_n e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t} - \frac{i}{\hbar}E_n c_n(t)\psi_n e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}\right) =$

$$= i\hbar\sum_n \frac{\partial c_n}{\partial t}e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}\psi_n + \underline{\sum_n c_n(t)E_n e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}\psi_n}$$

BO: $\underline{\sum_n c_n(t)e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}E_n\psi_n} + \sum_n c_n(t)e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}\hat{H}'(t)\psi_n$

Tehát
$$i\hbar\sum_n\frac{\partial c_n}{\partial t}e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}\psi_n = \sum_{n,m}c_n(t)e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}d_{mn}(t)\psi_m$$
$$= \sum_{n,m}c_m(t)e^{-\frac{i}{\hbar}E_m t}d_{nm}(t)\psi_n$$
$$= \sum_{n,m}c_m(t)e^{-\frac{i}{\hbar}(E_m-E_n)t}d_{nm}(t)e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}\psi_n$$

A két oldal minden tagja külön egyenlő.

Az egyenlet minden tagjára ek. is egyenlő:

$$i\hbar \frac{dc_n(t)}{dt} = \sum_m c_m(t)\, e^{-\frac{i}{\hbar}(E_m-E_n)t}\, d_{nm}(t) \quad \leftarrow \text{ez még egzakt egyenlet,}$$

megoldási módszerek:

- iteratív eljárás,

1) $c_m(t)$ konstans a jobb oldalon $\Rightarrow$ $c_n \sim H'(t)$ a bal oldalon.

2) az új c_n-t beírjuk a jobb oldalba $\Rightarrow$ új $c_n \sim H'^2$

⋮

valahol meg kell állni

Az elsőrend:
$$i\hbar \frac{\partial c_n^{(1)}}{\partial t} = \sum_m e^{\frac{i}{\hbar}(E_n-E_m)t}\, d_{nm}(t)\, c_m^{(0)}(0)$$

$$\Rightarrow \boxed{c_n^{(1)}(t) = c_n^{(0)}(0) - \frac{i}{\hbar}\sum_m \int_0^t e^{\frac{i}{\hbar}(E_n-E_m)t'}\, d_{nm}(t')\, c_m^{(0)}(0)}$$

Pl.: monokromatikus perturbáció: $\hat{H}'(t) = \hat{U}e^{-i\omega t} + \hat{U}^{+}e^{i\omega t}$ $\qquad \omega > 0$

$$d_{mn}(t) = H'_{mn}(t) = U_{mn}e^{-i\omega t} + U_{nm}^{*}e^{i\omega t}$$

A fenti integrál:
$$\int_0^t e^{\frac{i}{\hbar}(E_n-E_m)t'}\, d_{nm}(t')\,dt' = \int_0^t e^{\overbrace{\frac{i}{\hbar}(E_n-E_m)}^{=\hbar\omega_{nm}}t'}\left(U_{nm}e^{-i\omega t'} + U_{mn}^{*}e^{i\omega t'}\right)dt' =$$

$$= U_{nm}\int_0^t e^{i(\omega_{nm}-\omega)t'}dt' + U_{mn}^{*}\int_0^t e^{i(\omega_{nm}+\omega)t'}dt' =$$

$$= \frac{U_{nm}}{i(\omega_{nm}-\omega)}\left(e^{i(\omega_{nm}-\omega)t}-1\right) + \frac{U_{mn}^{*}}{i(\omega_{nm}+\omega)}\left(e^{i(\omega_{nm}+\omega)t}-1\right)$$

Ez alapján tehát:
$$c_n^{(1)}(t) = c_n^{(0)}(0) - \frac{1}{\hbar}\sum_m\left[\frac{U_{nm}\left(e^{i(\omega_{nm}-\omega)t}-1\right)}{\omega_{nm}-\omega} + \frac{U_{mn}^{*}\left(e^{i(\omega_{nm}+\omega)t}-1\right)}{\omega_{nm}+\omega}\right]c_m^{(0)}(0)$$

ha a kezdeti feltétel: $c_1(0) = 1$ és $c_n(0) = 0$ $n>1$-re

$\Psi(0) = \Psi_1$

$$\Rightarrow c_n^{(1)}(t) = c_n^{(0)}(0) - \frac{1}{\hbar}\left[\frac{U_{n1}\left(e^{i(\omega_{n1}-\omega)t}-1\right)}{\omega_{n1}-\omega} + \frac{U_{1n}^{*}\left(e^{i(\omega_{n1}+\omega)t}-1\right)}{\omega_{n1}+\omega}\right]c_1^{(0)}(0)$$

mivel $e^x - 1 \approx x + \frac{x^2}{2} + \dots$

ezért akkor a nevező egyszerűsödik és t-ben lineárisan indul.

$\Rightarrow$ nagy t-re az fog dominálni, ha $\omega_{n1}\pm\omega$ kicsi

Két lehetőség van

1) $\omega_{n1}-\omega$ kicsi $\to$ $\omega_{n1}\approx\omega$

$E_n - E_1 \approx \omega\hbar$

$$c_n(t\to\infty)\simeq -\frac{1}{\hbar}U_{n1}\frac{e^{i(\omega_{n1}-\omega)t}-1}{\omega_{n1}-\omega}$$

Mi a valószínűsége annak, hogy ψ_1-ből indulva ψ_n-be jutok?

$$P(1\to n)=|c_n(t)|^2=\frac{1}{\hbar^2}\left|U_{n1}\frac{e^{i(\omega_{n1}-\omega)t}-1}{(\omega_{n1}-\omega)^2}\right|^2=\frac{4}{\hbar^2}|U_{n1}|^2\frac{\sin^2\left(\frac{\omega_n-\omega}{2}t\right)}{(\omega_n-\omega)^2}=*$$

viszont, hogy $\frac{2}{\pi}\frac{\sin^2\frac{xt}{2}}{x^2t}\to\delta(x)$, ezért

$$*=\frac{4}{\hbar^2}|U_{n1}|^2\frac{\pi}{2}t\,\delta(\omega_{n1}-\omega)=\frac{2\pi t}{\hbar^2}|U_{n1}|^2\delta\left(\frac{E_n-E_1}{\hbar}-\omega\right)=\frac{2\pi t}{\hbar}|U_{n1}|^2\delta(E_n-E_1-\hbar\omega)$$

Ez $t\to\infty$-re értendő, tehát a mennyiség,

ami $\frac{P}{t}$ az időegységre jutó valószínűség.

$\Rightarrow$ Akkor fog átmenni a nagyobb energiájú állapotba, ha a perturbáció frekvenciájában gerjesztjük

Fermi-féle aranyszabály

<u>abszorpció</u>

2) $\omega_{n1}+\omega$ kicsi $\to$ $E_n-E_1+\hbar\omega\approx 0$

az előzőhöz hasonlóan:

$$P(1\to n)=\frac{2\pi}{\hbar}|U_{n1}|^2\delta(E_n-E_1+\hbar\omega)$$

itt viszont, csak az energiaszint alá megy

<u>indukált emisszió</u>

Hatom + fény

amikor $\underline{E}$ és $\underline{B}$ is van, akkor az erő $\underline{E}+\frac{1}{c}\underline{v}\times\underline{B}$

ha $v/c \ll 1$, akkor elég $\underline{E}$-vel foglalkozni

Ha $\underline{E}$ síkhullám: $\underline{E}(\underline{x})\sim e^{i(\underline{k}\underline{x}-\omega t)}$, $\lambda\sim 1000\,Å$ $\Rightarrow$ a térbeli függéstől tekintsünk el!

$\Rightarrow \underline{E}(\underline{x},t)=\underline{E}(t)\sim e^{-i\omega t}$ Mivel $\underline{E}$ térben konstans $\phi=-\underline{r}\underline{E}$

$\hat{H}'(t)=-e\phi=+e\hat{\underline{x}}\underline{E}$

KVANTUM

23. előadás (12.10.)

$$H' = e\,\underline{E}\,\underline{r}\,e^{-i\omega t} + \text{adjungált} = e\underline{E}\,\underline{r}\left(e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}\right)$$

$$H'_{nm} = e\sum_i E_i \langle n|\hat{x}_i|m\rangle\left(e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}\right)$$

abszorpció esetén átmenet valószínűség: $1 \to n$

$$\frac{1}{t}P(1\to n) = \frac{2\pi}{\hbar}\left|e\sum_i E_i \langle 1|\hat{x}_i|n\rangle\right|^2 \delta(E_n - E_1 - \hbar\omega)$$

kiválasztási szabályok; mikor lesz a mátrixelem $\neq 0$?

$\langle 1|x_i|n\rangle$ vagy általában: $\langle n\,j\,l\,m|x_i|n'\,j'\,l'\,m'\rangle \neq 0$ tehát $n = n'$.

$\hat{x}_3$: mivel $[\hat{J}_3, \hat{x}_3] = 0 \Rightarrow m = m'$

$\hat{x}_1\hat{x}_2$: $[\hat{J}_3, \hat{x}_1] = i\hbar\,\hat{x}_2$

$[\hat{J}_3, \hat{x}_2] = -i\hbar\,x_1$

$$i\hbar\langle n\,j\,l\,m|\hat{x}_2|n'\,j'\,l'\,m'\rangle = \langle m|[\hat{J}_3, \hat{x}_1]|m'\rangle =$$

$$= \langle m|\hat{J}_3\hat{x}_1|m'\rangle - \langle m|\hat{x}_1\hat{J}_3|m'\rangle = \hbar(m-m')\langle m|\hat{x}_1|m'\rangle$$

ugyanígy: $i\hbar\langle m|\hat{x}_1|m'\rangle = \hbar(m'-m)\langle m|\hat{x}_2|m'\rangle = \hbar(m'-m)(-i)(m-m')\langle m|\hat{x}_1|m'\rangle$

$$\Rightarrow \langle m|\hat{x}_1|m'\rangle = (m'-m)^2\langle m|\hat{x}_1|m'\rangle \Rightarrow (m'-m)^2 = 1$$

ha a mátrixelem $\neq 0$.

ezt eddig: $\Delta m = \pm 1$

Tehát a mágneses kvantumszám változása: $\Delta m = 0, \pm 1$

$\to$ l-re:

$\langle n\,j\,l\,m|\hat{x}_i|n'\,j'\,l'\,m'\rangle \neq 0$ milyen l-l' esetén

paritás miatt $l = l'$

Állítás: $[L^2, [L^2, \hat{x}_i]] = 2\hbar^2(\hat{x}_i L^2 + L^2\hat{x}_i)$ 4F

jobboldal: $2\hbar^2\langle l|x_i L^2 + L^2 x_i|l'\rangle = 2\hbar^4\left(l(l+1) + l'(l'+1)\right)$

baloldal: $\langle l|L^2[L^2, x_i]|l'\rangle - \langle$ ez így kifejtve

Véletlen szerű perturbáció
(pl. kísérleti megvalósítás)

$H'(T)$ véletlenszerűen függ t-től, de a korreláció csak az időkülönbségtől függjön.

$$\overline{H'_{nm}(t_1)\, H'^{*}_{nm}(t_2)} = f_{nm}(t_1-t_2)$$

Legyen $c_n(0)=\delta_{n1}$

$$c_n(t) = -\frac{i}{\hbar}\int_0^t H'_{n1}(t')\, e^{i\omega_{n1}t'}\,dt'$$

$$P(1\to n) = \frac{1}{\hbar^2}\int_0^t\int_0^t H'_{n1}(t_1)\, H'^{*}(t_2)\, e^{i\omega_{n1}(t_1-t_2)}\,dt_2\,dt_1$$

Átlagolás:

$$\overline{P(1\to n)} = \frac{1}{\hbar^2}\int_0^t\int_0^t f_{n1}(t_1-t_2)\, e^{i\omega_{n1}(t_1-t_2)}\,dt_2\,dt_1$$

Érdemes f-et Fourierezni:

$$f_{n1}(t_1-t_2) = \int_{-\infty}^{\infty} F_{n1}(\omega)\, e^{-i\omega(t_1-t_2)}\,d\omega$$

$$\overline{P(1\to n)} = \frac{1}{\hbar^2}\int_0^t\int_0^t\int_{-\infty}^{\infty} F_{n1}(\omega)\, e^{i(\omega_{n1}-\omega)(t_1-t_2)}\,d\omega\,dt_2\,dt_1 =$$

HF

$$= \frac{1}{\hbar^2}\int_{-\infty}^{\infty} F_{n1}(\omega)\left|\int_0^t e^{i(\omega_{n1}-\omega)t'}\,dt'\right|^2 = \text{HF}$$

$$= \frac{4}{\hbar^2}\int F_{n1}(\omega)\,\frac{\sin^2\left((\omega_{n1}-\omega)\frac{t}{2}\right)}{(\omega_{n1}-\omega)^2}\,d\omega = \frac{2\pi}{\hbar^2}\,t\,F_{n1}(\omega_{n1})$$

$$\hookrightarrow \frac{\pi}{2}\,t\,\delta(\omega_{n1}-\omega)$$

tehát

$$\overline{\Gamma(1\to n)} = \frac{1}{t}\,P(1\to n) = \frac{2\pi}{\hbar^2}\,F_{n1}(\omega_{n1})$$

Az a szint lesz gerjesztődni, amire a spektrum tartalmaz.

Hatása termikus EM térben:

$$H_{nm}(t) = \sum_i e\,E_i(t)\,\langle n|\,\hat{x}_i\,|m\rangle$$

E-re:

$$\overline{E_i(t_1)\,E_j(t_2)} = \delta_{ij}\int_{-\infty}^{\infty} P(\omega)\, e^{-i\omega(t_1-t_2)}\,d\omega$$

Mivel E-k valósak és szimmetrikusak, ezért $P(\omega)=P(-\omega)=P^{*}(\omega)$

$$\overline{H_{nm}(t_1)\,H^{*}_{nm}(t_2)} = e^2\,|\langle n|\,\underline{x}\,|m\rangle|^2\int_{-\infty}^{\infty} P(\omega)\,e^{-i\omega(t_1-t_2)}\,d\omega$$

$$F(\omega) = e^2\,|\langle n|\,\underline{x}\,|m\rangle|^2\,P(\omega)$$

$$\overline{\Gamma(n\to m)} = \frac{2\pi}{\hbar^2}\,e^2\,|\langle n|\,\underline{x}\,|m\rangle|^2\,P(\omega_{nm})$$

ahol $P(\omega)$ a EM energiasűrűség kapcsolata

EM hullámokra $|E|=|B|$ energiasűrűség $u = \frac{\varepsilon_0}{2}(E^2+B^2) = \varepsilon_0 E^2 = \frac{E^2}{4\pi}$ (mert $4\pi\varepsilon_0=1$)

Átlagos E sűrűség:

$$\frac{\overline{E^2}}{4\pi} = \frac{\overline{\sum E_i(t) E_i(t)}}{4\pi} = \frac{3}{4\pi}\int_{-\infty}^{\infty} P(\omega)d\omega = \frac{3}{2\pi}\int_0^{\infty} P(\omega)d\omega$$

De mivel tudjuk, hogy $u = \int_0^{\infty} \rho(\omega)d\omega$ ezért

$$P(\omega) = \frac{2\pi}{3}\rho(\omega)$$

$$\overline{\Gamma(n\to m)} = \frac{4\pi^2 e^2}{3\hbar^2}|\langle n|\underline{x}|m\rangle|^2 \rho(\omega_{nm})$$

$m>n$: abszorpció

$m<n$: emisszió

VÉH: $\Gamma(n\to m) = \Gamma(m\to n)$

Spontán emisszió, Einstein-féle A, B együtthatók

Legyenek H atomok EM sugárzásban (feketetest)

E eloszlás $\rho(\omega)$

1 és n közötti átmenetek:
- abszorpció
- indukált emisszió
- spontán emisszió

A részecskék száma a két állapotban: N_1, N_n és T hőmérsékletű egyensúlyban.

Egyensúly miatt: $N_i \sim e^{-\beta E_i}$ $\quad \beta = \frac{1}{kT}$

$$\frac{N_n}{N_1} = \frac{e^{-\beta E_n}}{e^{-\beta E_1}} = e^{-\beta\hbar\omega_{n1}}$$

Mérlegegyenlet:

$$\frac{dN_n}{dt} = \underset{\text{spontán}}{-AN_n} - \underset{\text{ind. emisszió}}{B_{n1}N_n\rho(\omega_{n1})} + \underset{\text{abszorpció}}{B_{1n}N_1\rho(\omega_{n1})} \underset{\text{e.s. miatt}}{=} 0$$

$$0 = -AN_n - B_{n1}N_n\rho(\omega_{n1}) + B_{1n}N_n e^{\beta\hbar\omega_{n1}}\rho(\omega_{n1})$$

$$A = (-B_{n1} + B_{1n}e^{\beta\hbar\omega_{n1}})\rho(\omega_{n1})$$

Láttuk, hogy $B_{n1} = B_{1n} = \frac{4\pi^2 e^2}{3\hbar^2}|\langle 1|\underline{x}|n\rangle|^2$

$$A = \frac{4\pi^2 e^2}{3\hbar^2}|\langle 1|\underline{x}|n\rangle|^2(-1+e^{\beta\hbar\omega_{n1}})\rho(\omega_{n1})$$

és eloszlás: $\rho(\nu) = \frac{8\pi h}{c^3}\frac{\nu^3}{e^{\frac{h\nu}{kT}}-1} \Rightarrow \rho(\omega) = \frac{\hbar}{\pi^2 c^3}\frac{\omega^3}{e^{\beta\hbar\omega}-1}$

$$\Rightarrow A = \frac{4e^2}{3\hbar c^3}\omega^3|\langle 1|\underline{x}|n\rangle|^2$$

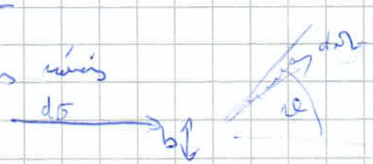
Érdekes: - a folyamatot nem értjük, mégis kiszámoltuk az értékét
- nem függ T-től

KVANTUM

24. előadás (12.13.)

Szóráselmélet

Klasszikus szórás



Azaz
Az a felület, melyről jövő anyag $d\Omega$ szögben megy el: $d\sigma$
Nyilván $d\sigma \sim d\Omega$

differenciális hatáskeresztmetszet: $\frac{d\sigma}{d\Omega}(\theta, \varphi)$

gömbszimmetrikus potenciál esetén nincs φ függés

Teljes hatáskeresztmetszet: $\sigma = \int \frac{d\sigma}{d\Omega}\, d\Omega = 2\pi \int \frac{d\sigma}{d\Omega} \sin\theta\, d\theta$ (ha gömbszimmetrikus)

szemléletes jelentés: céltárgy látszó területe

HF pl.: kemény gömb: $\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{R^2}{4}$ $\quad \sigma = R^2\pi$

Kvantum

Feltételezések: $V(r)$ gömbszimmetrikus potenciál, véges hatótávolság ($V(r) = 0$ ha $r > R$)

$\hat{H} = \hat{H}_0 + V(r)$ ahol $\hat{H}_0$ a szabad Hamilton-operátor

A korrekt az lenne, ha az időfüggő Schr.-t oldanánk meg hullámcsomagokra
de ez komplex

$\Rightarrow$ Azt csináljuk, mint 1D-ben: Az időfüggetlent oldjuk meg.

stacionárius megoldás: $H\psi = E\psi \quad E > 0$

ψ nem normálható, de nem baj, mert ugyanúgy interpretáljuk, mint 1D-s esetben: hullám amplitúdó

Érdemes gömbi polárban dolgozni a centrális potenciál miatt

Azt is tudjuk, hogy a megoldás: $\psi_l^m(r, \theta, \varphi) = \frac{u_{El}(r)}{r} Y_l^m(\theta, \varphi)$

ahol $$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2 u_l}{dr^2} + \left(V(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}\right) u_l(r) = E\, u_l(r)$$

DE a spec HF-ek miatt a valódi megoldás ilyenek lineáris komb-ja lesz:

$$\psi(r, \theta, \varphi) = \sum_{lm} a_{lm} \frac{u_l(r)}{r} Y_l^m(\theta, \varphi)$$

Mivel $V(r)$ forgásszimmetrikus z-re: $\Psi(r,\vartheta,\varphi) = \sum_l a_l \frac{u_l(r)}{r} P_l(\cos\vartheta)$

Hogy viselkedjen Ψ az $r\to\infty$-ben?

- Legyen egy bejövő nyaláb z irányból: $A e^{ikz}$

+ szórt hullám

$r\to\infty$ esetén a egyenlet: $V(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} = 0 \to$ szabad részecske

$$u_l(r\to\infty) = A e^{ikr} + B e^{-ikr} \Rightarrow \frac{u_l(r)}{r} P_l(\cos\vartheta) \overset{r\to\infty}{=} \left(A\frac{e^{ikr}}{r} + B\frac{e^{-ikr}}{r}\right) P_l(\cos\vartheta)$$

Általában:
$$\Psi_f(r,\vartheta) \overset{r\to\infty}{=} \Big(\underset{\substack{\uparrow\\ \text{kifutó}\\ \text{g.h.}}}{A\frac{e^{ikr}}{r}} + \underset{\substack{\uparrow\\ \text{bejövő}\\ \text{g.h.}}}{B\frac{e^{-ikr}}{r}}\Big) \underbrace{\sum_l a_l P_l(\cos\vartheta)}_{\substack{f(\vartheta)\\ \uparrow\\ \text{csak szögfüggő rész}}}$$

Tehát a határfeltétel: Ne legyen bejövő gömbhullám!

A feladat teljes megfogalmazása:

Megoldani a Schr.-egyenletet $V(r)$ potenciállal az alábbi HF mellett:

$$\Psi(r\to\infty,\vartheta) = A\left(e^{ikz} + f(\vartheta)\frac{e^{ikr}}{r}\right)$$

(ha nem forgásszimmetrikus z-re, akkor $f(\vartheta) \to f(\vartheta,\varphi)$)

Kényelmesebb alak:

$$\Psi(r\to\infty,\vartheta) = A\left(e^{i\frac{p}{\hbar}z} + f_p(\vartheta)\frac{e^{i\frac{p}{\hbar}r}}{r}\right)$$

Kevés olyan problémát ismerünk, amit exaktul meg lehet oldani.

Ami érdekel minket: Mi a hatáskeresztmetszet?

időegység alatt bejövő részecskék száma: $dN = j_{be}\, d\sigma = j_{be} \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega$

$$\Rightarrow \frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{1}{j_{be}} \frac{dN}{d\Omega}$$

A részecske megmaradás miatt $dN = j_{ki}\, dF = j_{ki}\, r^2 d\Omega$

$$\Rightarrow \frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{j_{ki}}{j_{be}} r^2$$

az az alak szerint jó választás, mert QM-ben: $\underline{j} = -\frac{i\hbar}{2m}\left(\Psi^*\underline{\nabla}\Psi - \Psi\underline{\nabla}\Psi^*\right)$

$$j_{be} = -\frac{i\hbar}{2m}\left(A^* e^{-ikz} A\, ik\, e^{ikz} - A e^{ikz} A^*(-ik) e^{-ikz}\right) = \frac{p}{m}|A|^2$$

$$(j_{ki})_r = -\frac{i\hbar}{2m}\left|\Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial r} - \frac{\partial\Psi^*}{\partial r}\Psi\right| = \frac{p}{mr^2}|A|^2 |f_p(\vartheta)|^2$$

$$\Rightarrow \boxed{\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f_p(\vartheta)|^2}$$

ahol $\Psi_{ki} = A f_p(\vartheta) \frac{e^{ikr}}{r}$

kiemelte az a kérdés, hogy hogy oldjuk meg a Sch.-egyenletet

Két módszer van:

1) Alacsony energián: parciális hullám analízis.

a teljes megoldás $\psi = \sum_{\ell=0}^{\infty} a_\ell \frac{u_\ell}{r} P_\ell(\cos\vartheta)$

aszimptotikus alak: $A\left(e^{ikz} + f(\vartheta)\frac{e^{ikr}}{r}\right)$

ezt kifejtjük $f(\vartheta) = \sum_\ell f_\ell (2\ell+1) P_\ell(\cos\vartheta)$ alakban

fix ℓ-re megoldható $f_\ell \to \frac{d\sigma}{d\Omega}$

közelítés: csak $\ell=0$ s hullám közelítés (gyakorlaton...)

$\ell=1$ p hullám ...

⋮

Ezt időhiány miatt nem fejti ki és nem kell tudni.

2) Nagy energiás szórás (Born-közelítés)

$E \gg V$

az időfüggetlen Schr.: $-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi + V\psi = E\psi$

$k^2 := \frac{2mE}{\hbar^2} \Rightarrow (\Delta^2 + k^2)\psi(x) = Q(x)$ ahol $Q = \frac{2m}{\hbar^2}V\psi$

ez olyan, mint egy inhomogén diff.egyenlet.

ált. m.o.: homogén m.o. + inhomogén egyik megoldása

Green-fv: $(\Delta^2 + k^2)\, G(\underline{x}) = \delta^{(3)}(\underline{x})$

Mivel ez éppen a Helmholtz-egyenlet a Green-fv:

$$G(\underline{x}) = -\frac{e^{ik|\underline{x}|}}{4\pi|\underline{x}|}$$

Ekkor az ált m.o.: $\psi(\underline{x}) = \psi_0(\underline{x}) - \frac{m}{2\pi\hbar^2}\int \frac{e^{ik|\underline{x}-\underline{x}_0|}}{|\underline{x}-\underline{x}_0|} V(\underline{x}_0)\psi(\underline{x}_0)\, d^3x_0$

ez szép és jó, de a jobb oldalon is szerepel ψ.

Ez nem más, mint a Schr.-egyenlet integrális alakja:

Lippmann-Schwinger-egyenlet.

Ha V kicsi, akkor az integrál csak egy kis korrekciót ad →

→ szukcesszív approximáció.

ezt iteratív: $\psi^{(0)}(\underline{x}) = \psi_0(\underline{x})$

$n \geq 1$-re: $\psi^{(n)}(\underline{x}) = \underbrace{\psi_0 + \int g V \psi^{(n-1)}}_{\text{Born-sor}}$

Mi legyen ψ_0?

$V=0$ esetén szabad részecske $\Rightarrow \psi_0 = A e^{ikz}$ (azaz a bejövő síkhullám.

A Born-közelítés, azaz a Born-sorban első tagja szerint:

$$\psi(\underline{x}) = A e^{ikz} - A\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int \frac{e^{ik|\underline{x}-\underline{x}_0|}}{|\underline{x}-\underline{x}_0|} V(\underline{x}_0)\, e^{ikz_0}\, d^3x_0$$

Mi a határkonvertálást? Egyértelmű jó-e a HF?

Mivel $|x|\to\infty$ érdekel, de $|x_0|<R$ mert az integrálban

$$\Rightarrow \frac{|x_0|}{|x|} \to 0$$

sorfejtés: $|\underline{x}-\underline{x}_0| = \sqrt{(\underline{x}-\underline{x}_0)^2} = \sqrt{x^2+x_0^2-2\underline{x}\,\underline{x}_0} \approx |x| - \frac{\underline{x}\,\underline{x}_0}{|\underline{x}|}$

$$k|\underline{x}-\underline{x}_0| = kx - \underbrace{\frac{k\underline{x}}{|\underline{x}|}}_{=:\underline{k}}\underline{x}_0 = kr - \underline{k}\,\underline{x}_0$$

eredményt kapjuk: $\frac{e^{ik|\underline{x}-\underline{x}_0|}}{|\underline{x}-\underline{x}_0|} \approx \frac{e^{i(kr-\underline{k}\,\underline{x})}}{r} = \frac{e^{ikr}}{r}e^{-i\underline{k}\,\underline{x}_0}$

Tehát:

$$\psi(\underline{x}) = A\left(e^{ikz} - \frac{m}{2\pi\hbar^2}\frac{e^{ikr}}{r}\int V(\underline{x}_0)\, e^{i(kz_0-\underline{k}\,\underline{x}_0)}\, d^3x_0\right)$$

bejövő hullám   kimenő gömbhullám

$$\Rightarrow f(\vartheta) = \frac{m}{2\pi\hbar^2}\int V(x_0)\, e^{i(kz_0-\underline{k}\,\underline{x}_0)}\, d^3x_0$$

Tehát az teljesen tudja a HF-t.

Ha a bejövő részecske impulzusa $\underline{k}' = k\underline{e}_z$ úgy az, akkor $kz_0 = \underline{k}'\,\cancel{\underline{x}_0}$

$$\Rightarrow f(\vartheta) = \frac{m}{2\pi\hbar^2}\int V(x_0)\, e^{i(\underline{k}'-\underline{k})\underline{x}_0}\, d^3x_0 = \frac{m}{2\pi\hbar^2}\int V(x_0)\, e^{i\underline{\kappa}\,\underline{x}_0}\, d^3x_0$$

ahol $\underline{\kappa}$ azt mondja meg mennyivel változott az impulzus

impulzus átadás: $-\underline{\kappa}\hbar$.

$|\underline{\kappa}| = 2k\sin\frac{\vartheta}{2}$

Ha integrálunk a z-tengely $\underline{\kappa}$-val pl., akkor $\underline{\kappa}\,\underline{x}_0 = \kappa r_0\cos\vartheta_0$

$$f(\vartheta) = -\frac{m}{\hbar^2}\int_{-1}^{1}\int_0^\infty V(r_0)\, e^{i\kappa r_0\cos\vartheta_0}\, r_0^2\, dr_0\, d(\cos\vartheta_0) =$$

$$= -\frac{2m}{\hbar^2\kappa}\int_0^\infty V(r_0)\sin(\kappa r_0)\, r_0\, dr_0 \qquad \text{ahol } \kappa = 2k\sin\frac{\vartheta}{2}$$

pl. Yukawa: $V(r) = \beta\frac{e^{-\mu r}}{r} \Rightarrow f(\vartheta) = -\frac{2m\beta}{\hbar(\mu^2+\kappa^2)}$

HF

Coulomb: $\mu\to 0$, $\beta = e^2$ $\quad f(\vartheta) = \frac{e^2}{4E\sin^2\frac{\vartheta}{2}}$