13. tétel

A kvantumm. elméleti háttere

Köm. sug. → kvantált fiz. mennyiségek, pl. EM tér

1) Val. ért.:

— $|E|^2 \approx I$ ~ részecskeszám

Davisson-Germer-kís.:

e^-, n^0, ... -nak is hullámtul.!

• de intenzitást csökkentjük → 1 rész. is interferál magával! ~~mindig egész~~

~~(→ hogy lehet ez? ⇒ hullámfv. e^--t detektálunk~~

a részecskéket hullámfv. írja le

• A hullámfv. amplitúdója mit mond meg? Mindig csak 1 részecskét detektálunk ⇒ valószínűségi értelmezés

— Max Born (Koppenhága) → $\Psi(q,t)$ ($E(q,t)$ analógiájára) hullámfv.,

$|\Psi(q,t)|^2$ → val. eloszlás (sűrűségfv.), azaz $|\Psi(q,t)|^2 dq$ megadja, hogy t időpill.-ban a q koord. hely dq körny.-ben mekkora val.-el tartózkodik

q több rész. esetén lehet $q = \{\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots \vec{r}_N\}$

• A részecskét valahol biztos megtaláljuk ⇒ normálási feltétel: $\int |\Psi(q,t)|^2 dq = 1$ teljes tér

• ha a hfv. nem normálható ⇒ $\frac{|\Psi(q_1,t)|^2}{|\Psi(q_2,t)|^2}$ adja a megtal. val. arányát

(pl. síkhullám)

→ szuperpoz. elve: ha Ψ_1 és Ψ_2 h.fv. ⇒ $\Psi = a_1\Psi_1 + a_2\Psi_2$ is lehetséges hfv., a norm.: $|a_1|^2 + |a_2|^2 = 1$

→ Koppenhagen axiómák:

- A fizikai mennyiségeknek fizikai operátorok felelnek meg (l. később: hermitikus op.-ok), ~~melyek~~ ~~egy fiz. menny.~~ mérésük eredménye ~~csak~~ egy fiz. csak az operátor valamely sajátértéke lehet. (pl. imp. op. (koord. repr.) $-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}=\hat{p}_x$, $\hat{x}=x$.)
- Ha többszöri mérést végzünk, és a rsz. sajátállapotban van, mely fiz. op. ahhoz tartozó s.értéket mérjük (1 val.-el), ha nincs s.állapotban, a hfv.-t ki kell fejteni a s.-||-ek bázisán, és a kifejtési együttók négyzetei adják az adott s.érték mérésének vsz.-eit

A mennyiség:

$$|\Psi\rangle=\sum_n c_n|\varphi_n\rangle$$

$$P(A=a_n)=|c_n|^2 \leftarrow \text{normált együttók esetén}$$

⇓

várható érték: $|\Psi\rangle=\sum_n c_n|\varphi_n\rangle$

$$\Rightarrow\langle\hat{A}\rangle=\langle\Psi|A|\Psi\rangle=\sum_n c_n^*\langle\varphi_n|\cdot\hat{A}\sum_l c_l|\varphi_l\rangle=$$

$$=\sum_n\sum_l c_n^* c_l\underbrace{\langle\varphi_n|\varphi_l\rangle}_{\delta_{nl}}a_l=\sum_n c_n^* c_n\cdot a_n=\sum_n|c_n|^2\cdot a_n$$

(folyt. eset (koord. repr.): $\cancel{\int\Psi^*\hat{A}\Psi\,dV}$ $\langle\Psi|A|\Psi\rangle=\int\Psi^*\hat{A}\Psi\,dV$)

- Mértékinvariancia:

$\Psi(q)$ és $\Psi(q)e^{i\varphi}$ hfv. fizikai szempontból egyenértékű, mert $|\,|^2$-ük megegyezik ⇒ globális $U(1)$ invariancia $\left(\mathcal{L}=\frac{1}{2}\partial_k\Psi^*\partial^k\Psi-V(\varphi^*\varphi)\right)$

(lokálissá tehető $+A^k j_k$ taggal) A^k $j_k(\varphi)$ transzf. alatt rögzített

2) Mat. alapok (milyen op. felelhet meg fiz. menny.-nek?)

- ~~skalárszorz.: $\langle a|b\rangle$, ortonormált bázis ($\langle e_k|e_l\rangle=\delta_{kl}$), $\sum|e_k\rangle\langle e_k|=1$ telj.~~

→ Várható érték valós! ⇒ $\langle F\rangle=\langle F^*\rangle$ ⇒ $\left(\int\Psi^*(\hat{F}\cdot\Psi)\,dq\right)^*=\int(F^+\Psi)^*\Psi\,dq\,)^*=$

$\cancel{\Rightarrow\left(\int\Psi^*\hat{F}\Psi\,dq\right)^*=\int(\hat{F}\Psi)^*\Psi\,dq=\int(F^+\Psi)^*\Psi\,dq=}$

$=\int\Psi^*(F^+\Psi)\,dq$

adjungált def.:

- $(\langle\Psi|F|\Psi\rangle=\langle\Psi|F\Psi\rangle=\langle F^+\Psi|\Psi\rangle)$ $\quad\Leftarrow\quad\hat{F}=\hat{F}^+$
- adjungált op. s.értékei is valósak: $\langle\lambda|A|\lambda\rangle=\lambda\langle\lambda|\lambda\rangle=\lambda$
- s.vektorai teljes ortonormált rsz.-t alkotnak $\boxed{-2-}$ $\lambda^*=\langle\lambda|A|\lambda\rangle^*=\langle A^+\lambda|\lambda\rangle^*=\langle\lambda|A^+\lambda\rangle=\langle\lambda|A|\lambda\rangle=\lambda$

3) ~~[illegible]~~ kanonikus formalizmust tovább visszük ~~és~~ és ~~[illegible]~~ megkövetéljük a kan. relációk teljesülését:

$$p_k = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k}$$

Heisenberg-féle felcserélési relációk (k. rendsz.-től függetlenül)

$[p_k, q_l] = \frac{\hbar}{i} I \cdot \delta_{kl}$ $\qquad [\hat{A}, B] = AB - BA$ (kommut.)

$[p_k, p_l] = 0$ $\qquad [p_k, q_k] f = \left(\frac{i}{\hbar}\partial_k x_k - \frac{i}{\hbar} x_k \partial_k\right) f = \frac{i}{\hbar}\left(f + x_k \cancel{\partial_k f} - \cancel{x_k \partial_k f}\right) = \frac{i}{\hbar} I$

$[q_k, q_l] = 0$

(l. később)

$$\dot{\hat{F}} = \frac{\partial \hat{F}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar}[\hat{H}, \hat{F}] \Rightarrow \text{kvantum P.-zj. } \{f, g\} = \frac{i}{\hbar}[f, g]$$

Poisson-zárójelek:

$$\frac{dF}{dt} = \frac{\partial F}{\partial t} + \{H, F\}_{kl} \quad \text{ahol} \quad \{a, b\} = \sum_k \frac{\partial b}{\partial q_k}\frac{\partial a}{\partial p_k} - \frac{\partial b}{\partial p_k}\frac{\partial a}{\partial q_k}$$

~~Poisson-zárójel tul.-ai: $\{f, g\} = -\{g, f\}$~~

Poisson-zárójelek tul.: $\qquad$ ~~$\{af, konst\} = 0$~~

$\{f, g\} = -\{g, f\}$

$\vdots$

$\{q_i, q_j\}^{kl} = 0$ $\qquad \{q_i, q_j\}^{kv} = 0$

$\{p_i, p_j\}^{kl} = 0$ $\qquad \{p_i, p_j\}^{kv} = 0$

$\{q_i, p_j\}^{kl} = -\delta_{ij}$ $\qquad \{q_i, p_j\}^{kv} = -\delta_{ij}$

$\Rightarrow$ kanonikus kvantálás: ha van klassz. megfelelője a m.-nek $\Rightarrow$ kv. P.-zj. = kl. P.-zj.

4) Reprezentációk:

- absztrakt Hilbert tér $\to |\Psi\rangle$ $\to$ ezen is lehet dolg. (l. oszcillátor) felcserélési rel.
- reprezentációk $\to$ $\langle q|\Psi\rangle = \Psi(q)$ koord. repr. $\to L^2$-tér

folytonos
$$\begin{cases} \Psi(q) = \int \Psi(q')\,\delta(q-q')\,dq' \\ \langle p|\Psi\rangle = \Psi(p) \end{cases}$$

$\updownarrow$ Fourier-tr. (L^2-en int. fv.-ek tere)

imp. repr. (síkhullám $\to L^2$-tér felbontás)

mátrixrepr. (diszkrét) pl. vmely operátor (tip. Hamilton) ~~ofm~~ sajátállapotai szerint $\to l^2$ tér

$\cancel{\langle q_k|\Psi\rangle = |\Psi_k\rangle}$ $\langle \varphi_k|\Psi\rangle = c_k$

$|\Psi\rangle = \sum_k c_k |\varphi_k\rangle$ (teljesség)

állapot	koord. ~~imp.~~ repr.	imp. repr.
adott imp.	$\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{\frac{i p_0 r}{\hbar}}$	$\delta(p-p_0)$
adott koord.	$\delta(\underline{r}-\underline{r}_0)$	$\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{-\frac{i p r}{\hbar}}$
tetsz. áll.	$\Psi(\underline{r})$	$\Psi(\underline{r})$ Fourier-tr

- koord. repr. szeretjük, mert itt az operátor diff. operátorok, a Schr.-egyenlet diff. egyenlet $\to$ egzaktul megoldható problémákat sokszor itt oldják meg
(programozás $\to$ mátrix repr.)
(véges bázis)

$\hookrightarrow$ koord. repr.-ban: folytonos, $\in L^2$, egyértékű $\to$ reguláris fv.

5) Schrödinger-egyenlet

Green-operátor: időbeli fejl. lin. operátora

$\hat{G}(t) \cdot |\Psi(0)\rangle = |\Psi(t)\rangle$

$t_1 \quad t_2 \quad t_3 \longrightarrow t$ Ha a tr. független attól, hogy milyen kezdőponthoz képest történik (időeltolási szimm.)

$|\Psi(t_2)\rangle = \hat{G}(t_2 - t_1)\,|\Psi(t_1)\rangle$

$|\Psi(t_3)\rangle = \hat{G}(t_3 - t_2)\,|\Psi(t_2)\rangle$

$|\Psi(t_3)\rangle = \hat{G}(t_3 - t_1)\,|\Psi(t_1)\rangle$

$\Rightarrow \hat{G}(t_3 - t_1) = \hat{G}(t_3 - t_2) \cdot \hat{G}(t_2 - t_1)$

$t_3 - t_2 := b \qquad t_2 - t_1 := a$

$a + b = t_3 - t_1$

$\Rightarrow \hat{G}(a+b) = \hat{G}(b) \cdot \hat{G}(a)$

$\Rightarrow$ időfejlődés 1 paraméteres Lie-csoport: $\hat{G}(t) = e^{\hat{B}t}$ $\quad \hat{B}$: csoport generátora (Lie-alg. eleme)

Mivel a normálás $\forall$ időpillanatra fennáll $\Rightarrow \langle\Psi(t)|\Psi(t)\rangle = \langle\Psi(0)|G^{+}G|\Psi(0)\rangle = \langle\Psi(0)|\Psi(0)\rangle = 1$

$\Rightarrow G^{+}G = \underline{1} \Rightarrow G^{+} = G^{-1} \rightarrow$ uniter op.

$\hat{B} \cdot e^{t\hat{B}} = \frac{d}{dt}\hat{G}(t)$ (formálisan)

$\hat{B} = \frac{d}{dt}\hat{G}(t)\Big|_{t=0}$

$\hat{G}^{-1} = ?$

$G(t_1 - t_1) = \hat{G}(0) = I$

$\hat{G}(t_1) \cdot \hat{G}(-t_1) = I$

$\Rightarrow \hat{G}(-t) = \hat{G}^{-1}(t) = \hat{G}^{+}(t)$

$G^{-1}(t) = e^{-\hat{B}t} = \left(e^{\hat{B}t}\right)^{+} = e^{\hat{B}^{+}t} \Rightarrow -B = B^{+}$ (antiherm.)

$\Rightarrow$ legyen $C := iB \,(\cdot(-1)) \Rightarrow C^{+} = +iB^{+} = -iB = C \Rightarrow C^{+} = C$ (herm.)

$\Rightarrow \hat{H} := \hbar \cdot \hat{C} \quad \Rightarrow \hat{H}^+ = \hat{H}$

$\Rightarrow \hat{G}(t) |\Psi(0)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} \cdot |\Psi(0)\rangle = |\Psi(t)\rangle$

$\Rightarrow \boxed{i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(t)\rangle = \hat{H} |\Psi(t)\rangle}$ Schr.-egyenlet

~~áll.~~ Belátható, hogy $\hat{H}$ a Hamilton-op. (időeltolás során megmaradó mennyiség ↓ (szimm.esetén) $\hat{G}(t)$ generátora) = konst. energia

megoldás: megkeressük $\hat{H}$ s.é.-eit:

$$\hat{H} |\varphi_k\rangle = E_k |\varphi_k\rangle$$

$$\Rightarrow \hat{H} = \sum_k E_k |\varphi_k\rangle\langle\varphi_k|$$

$$e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} = \sum_k e^{-\frac{i}{\hbar}E_k t} |\varphi_k\rangle\langle\varphi_k|$$

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_k e^{-\frac{i}{\hbar}E_k t} |\varphi_k\rangle \underbrace{\langle\varphi_k | \Psi(0)\rangle}_{c_k \text{ elb}}$$

7!) Határozatlansági -elv

$\hat{A}, \hat{B}$ önadj. op., $[\hat{A}, \hat{B}] := i\hat{C}$

↑ $\hat{C}$ is önadj.

(emlék.
$\langle A \rangle = \langle \Psi | \hat{A} | \Psi \rangle$)

~~$\Delta\hat{A} = \hat{A} - \langle A \rangle$~~ $\Delta\hat{A} = \hat{A} - \langle\hat{A}\rangle$

$\langle|\Delta\hat{A}|^2\rangle = (\Delta A)^2 \rightarrow \Delta A \text{ (szórás)} = \sqrt{\langle|\Delta\hat{A}|^2\rangle} = \sqrt{\langle\hat{A}^2\rangle - \langle A\rangle^2}$

$\langle(\alpha\Delta\hat{A} + i\Delta\hat{B})\Psi | (\alpha\Delta A + i\Delta B)\Psi\rangle \geq 0$ (mert $\in \mathcal{H}$ tér)

$\Delta A, \Delta B$ önadj.

$\langle\Psi| (\alpha\Delta A - i\Delta B)(\alpha\Delta A + i\Delta B) |\Psi\rangle = \langle\Psi| \alpha^2\Delta A^2 + B^2 + i\alpha \underbrace{[\Delta A, \Delta B]}_{= [A,B] = i\hat{C}} |\Psi\rangle \geq 0$

$\langle\Psi| \alpha^2(\Delta A)^2 + (\Delta B)^2 - \alpha\hat{C} |\Psi\rangle$

Minimum: (α fv.-ében)

$$2\alpha\langle(\Delta A)^2\rangle - \langle\hat{C}\rangle = 0$$

$$\alpha = \frac{\langle\hat{C}\rangle}{2\langle(\Delta A)^2\rangle}$$

$$\Rightarrow \langle\Psi| \frac{C^2}{4(\Delta A)^{2}}\cancel{(\Delta A)^2} + (\Delta B)^2 - \frac{\langle C\rangle}{2(\Delta A)^2} C |\Psi\rangle \geq 0$$

$$\langle\Psi|(\Delta B)^2|\Psi\rangle \geq \langle\Psi|\frac{C}{2(\Delta A)}|\Psi\rangle^2$$

$$\langle(\Delta B)^2\rangle\langle(\Delta A)^2\rangle \geq \frac{\langle C\rangle^2}{4}$$

$$\langle\Delta B\rangle\langle\Delta A\rangle \geq \frac{|\langle C\rangle|}{2}$$

---

spec. eset $\hat{A} = \hat{x}$ $\hat{B} = \hat{p}_x$ $[\hat{A},\hat{B}] = \frac{\hbar}{i} = i\hat{C}$

$$-\hbar = \hat{C}$$

$$\Rightarrow \Delta x \, \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}$$

6) Schrödinger-kép / Heisenberg-kép:

- Schr.-kép $\to$ 5. pont $\Psi_S(q,t) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\,\Psi_S(q,0)$ időfejlődés a hfv.-en

$$\hat{G}(t) = S(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}$$

- Heisenberg-kép: időfejlődés $\to$ operátorok

$$\Psi_H(q) := S^{-1}(t)\,\Psi_S(q,t) = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\cdot\Psi(q,t)$$

$$\Rightarrow \langle A\rangle = \langle\Psi(q,t)|\hat{A}_S|\Psi(q,t)\rangle = \langle\Psi(q,t)\,e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\cdot|\underbrace{e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\cdot\hat{A}_S\cdot e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}}_{\hat{A}_H}|\Psi(q,t)\rangle$$

– ~~az~~ operátorok időderiváltja:

• Schr.-kép: $\dfrac{d\hat{A}}{dt}$ ~~$= \frac{d}{dt}\langle A\rangle$~~ $\Rightarrow \left\langle \dfrac{d\hat{A}}{dt}\right\rangle := \dfrac{d}{dt}\langle \hat{A}\rangle =$

$$= \frac{d}{dt}\langle\Psi|\hat{A}|\Psi\rangle = \left\langle \frac{d\Psi}{dt}\right| A|\Psi\rangle +$$

$$+ \left\langle \Psi \left| \frac{\partial A}{\partial t}\right|\Psi\right\rangle + \left\langle \Psi |A| \frac{\partial\Psi}{\partial t}\right\rangle =$$

konjugálás miatt

$$= + \frac{i}{\hbar}\langle H\Psi|A|\Psi\rangle - \frac{i}{\hbar}\langle\Psi|A|H\Psi\rangle +$$

$$\frac{dA}{dt} = \frac{\partial A}{\partial t} + \frac{i}{\hbar}[H,A] \quad \Leftarrow \quad + \left\langle\Psi\left|\frac{\partial A}{\partial t}\right|\Psi\right\rangle = -\frac{i}{\hbar}\langle\Psi|[H,A]|\Psi\rangle + \left\langle\Psi\left|\frac{\partial A}{\partial t}\right|\Psi\right\rangle$$

$\Downarrow$

• Heis.-kép: $\dfrac{dA_H}{dt} = \dfrac{d}{dt}\left(S^{-1}\cdot A_S S\right) = \left(\dfrac{d}{dt}S^{-1}\right)\cdot A_S\cdot S + S^{-1}\cdot\dfrac{\partial A_S}{\partial t}\cdot S + S^{-1}\cdot A_S\cdot\dfrac{\partial S}{\partial t} =$

$$= \frac{i}{\hbar} H\cdot S^{-1}\cdot A S - \frac{i}{\hbar} S^{-1}\cdot A H\cdot S = -\frac{i}{\hbar}[A,H] = \frac{i}{\hbar}[H,A]$$

$S = e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}$

$\Rightarrow$ ha $[A,H]=0 \Rightarrow A$ időben állandó, pl. $\hat{H}$ ilyen

$\Rightarrow \hat{H}_S(t) = \hat{H}_H(t) = \text{áll}$

8) Energia-idő határozatlansági elv

$$\frac{d}{dt}\langle\hat{A}\rangle = \left\langle\Psi_H\right| \frac{i}{\hbar}[\hat{H},A]\left|\Psi_H\right\rangle$$

hat. l. el. alapján:

$$\Delta A\cdot\Delta E \geq \frac{1}{2}\left|\langle[A,\hat{H}]\rangle\right| = \frac{\hbar}{2}\left|\frac{d}{dt}\langle A\rangle\right|$$

$$\frac{\Delta A}{\frac{d\langle A\rangle}{dt}} := \tau_A \Rightarrow \quad \Delta E\cdot\tau_A \geq \frac{\hbar}{2}$$

τ_A-k minimumát vesszük (kül. A-kra) $\Rightarrow \tau \Rightarrow \Delta E\cdot\tau \geq \dfrac{\hbar}{2}$ τ miniv. mennyis. (állapot élettartama)

9) Hullámcsomag

hullámcsomag ⇒ Schr. egyenlet síkhullám mo.-inak (pl. szabad eset) folyt. szuperpozíciója (Fourier-int.)

$$\Psi(x,t) = \int_{-\infty}^{+\infty} c(k)\, e^{i(kx-\omega t)}\, dk$$

Ott lesz nagy az $\int$ értéke, ahol az exp. tag nem túl erősen oszcillál ⇒

⇒ a kitevő ≈ konst. (k-ban)

$$\Rightarrow \frac{\partial}{\partial k}\left(kx - \omega(k)t\right) = x - \frac{\partial \omega}{\partial k}\cdot t = 0$$

$$x = \underbrace{\frac{\partial \omega}{\partial k}}_{v_{csop}} t \qquad \text{ha } \hbar\omega = \frac{p^2}{2m} \quad \hbar k = p$$

$$\frac{\partial \omega}{\partial k} = \frac{\hbar k}{m} = \frac{p}{m} \qquad \omega = \frac{p^2}{2m\hbar} = \frac{\hbar k^2}{2m}$$

10) Imp. mom. operátor

$\underline{L} = \underline{r} \times \underline{p}$ → $\underline{r}$ és p operátorokat beírva

$$L_i = \varepsilon_{ijk}\, r_j\, p_k$$

pl. $L_z = \frac{\hbar}{i}\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right) = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial \varphi}$

$$\left[\hat{L}_i, \hat{L}_k\right] = i\hbar \underbrace{\varepsilon_{ike}}_{\varepsilon_{eik}} \hat{L}_e \qquad (\underline{L}\times\underline{L} = i\hbar\, \underline{L})$$

$$\hat{L}^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2$$

$\left[\hat{L}^2, \hat{L}_i\right] = 0 \Rightarrow$ van közös s.f.-rendszer

L_z-re: $\lambda = \hbar m$

$$\psi_m = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{imf}$$

L^2-re: $\lambda = \hbar^2 l(l+1)$ (degenerált)

$$\psi_{l,m} = Y_{lm}(\vartheta,\varphi)$$

11) <u>Schr.-egyenlet -szeparálása:</u>

centrális potenciálban $\quad \underline{r} = \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$

TKP ~~szeparálása~~ leválá: $\quad \underline{r} = \underline{r}_1 - \underline{r}_2$

- $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_1}\Delta_1 - \frac{\hbar^2}{2m_2}\Delta_2 + U(r) \qquad r = |\underline{r}_1 - \underline{r}_2|$ relatív koord.

~~belátható~~ levezethető, hogy: $\Psi = \varphi(\underline{R})\cdot\psi(\underline{r}) \qquad \underline{R} = \frac{m_1\underline{r}_1 + m_2\underline{r}_2}{m_1+m_2}$ TKP.

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta_x \psi + U(r) = E\cdot\psi \qquad \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) \qquad \underline{R} = \begin{pmatrix} X \\ Y \\ Z \end{pmatrix}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2M}\Delta_X \varphi = E_{TKP}\varphi$$

TKP szerinti Δ $\left(\frac{\partial^2}{\partial X^2} + \frac{\partial^2}{\partial Y^2} + \frac{\partial^2}{\partial Z^2}\right)$

- rel. koord.:

$$U(r)\psi - \frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta\psi = E\psi \qquad \Delta = \frac{1}{r}\cdot\frac{\partial^2}{\partial r^2}(r\cdot\psi) - \frac{1}{r^2}\overbrace{\left(\frac{1}{\sin\vartheta}\frac{d}{d\vartheta}\left(\sin\vartheta\frac{\partial\psi}{\partial\vartheta}\right) + \frac{1}{\sin^2\vartheta}\frac{\partial^2\psi}{\partial\varphi^2}\right)}^{\frac{L^2}{\hbar^2}\cdot\psi}$$

ha $\psi = R(r)\cdot Y_{lm}(\vartheta,\varphi)$

$$\Rightarrow \Delta\psi = \frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}(r\cdot R(r))\cdot Y_{lm} - \frac{R}{r^2}\, l(l+1)\, Y_{lm} \qquad R(r) := \frac{u(r)}{r}$$

$$\Rightarrow E\psi = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{1}{r}\cdot u''(r)\, \cancel{Y_{lm}} - \frac{l(l+1)}{r^2}\frac{u}{\cancel{r}}\cancel{Y_{lm}}\right) + U(r)\cdot\frac{u(r)}{\cancel{r}}\cancel{Y_{lm}}$$

$$E\Psi = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(u'' - \frac{l(l+1)}{r^2}u\right) + U(r)\cdot u(r)$$

(Einstein - de Haas)

12) **A spin és a Pauli-egyenlet:** Stern-Gerlach-kís.:

(spin → valójában Dirac-egyenletből jön ki)

mesterségesen betehető a Schr.-egyenletbe

(forgásimp. ope. → ope. direkt szorzata)

↓

belső tul., 2 érték

$+\frac{\hbar}{2}$ $-\frac{\hbar}{2}$

$$\underline{M} = \frac{e}{2mc}\underline{L}$$

$$\underline{M}_S = \frac{e}{mc}\underline{S}$$

teljes imp. mom.: $\underline{J} = \underline{L} + \underline{S}$

$S^2 = S_x^2 + S_y^2 + S_z^2$, ... + L-hez has.-an

$\hat{S}_i = \frac{\hbar}{2}\sigma_i$ σ_i: Pauli-mátrix

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

H EM tér esetén (klassz.):

$$H = \frac{1}{2m}\left(\underline{p} + \frac{e}{c}\underline{A}\right)^2 - e\Phi(r)$$

kvantumos

$$\Rightarrow i\hbar\frac{d\Psi}{dt} = \left[\frac{1}{2m}\left(\hat{\sigma}\cdot\left(\hat{p} + \frac{e}{c}\hat{A}\right)\right)^2 - e\Phi\right]\Psi(t)$$ Pauli-egyenlet

13) Korrespondencia, Ehrenfest tétel:

↓

- A kvantummechanika határértékben visszaadja a klasszikus mechanikát ($E \to \infty$, $\hbar \to 0$), Niels Bohr.

  E: nagy kv. szám

Kváziklasszikus közelítés: $\Psi(r,t) = e^{\frac{i}{\hbar} S(r,t)}$ ahol S a hatás∫.

$e^{i\varphi(r,t)}$ optikában

Beírva a Schr.-egyenletbe:

adott energiára: $S = S_0(r) - E \cdot t$

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \underbrace{-\frac{\partial S}{\partial t}}_{\text{Hamilton}}\Psi = \cancel{\left(\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{\hbar^2}\left(\nabla S(r,t)\right)^2\right)} \quad \hat{H}\Psi = \frac{(\nabla S_0)^2}{2m}\Psi + U(r)\Psi - \underbrace{\frac{i\hbar \Delta S_0}{2m}}$$

ez jogos, ha

ezt elhagyva kapjuk a Ham.-Jacobi egyenletet

$$(\nabla S_0)^2 \gg \hbar |\Delta S_0|$$

$$\nabla S_0 = p \Rightarrow p^2 \gg \hbar |\mathrm{div}\, p|$$

$$1 \gg \hbar \frac{|\mathrm{div}\, p|}{p^2}$$

1D-ra:

$$p = \sqrt{2m(E-U(x))} \qquad \left|\frac{dp}{dx}\right| = \frac{m}{p}\left|\frac{dU}{dx}\right|$$

$$\Downarrow$$

$$p^3 \gg m\hbar \left|\frac{dU}{dx}\right|$$

nagy impulzus és lassan változó potenciál

- ~~Ehrenfest-tétel~~ $\hat{v}'' = \frac{d\hat{r}}{dt} = \cancel{\frac{\partial r}{\partial t}} + \frac{i}{\hbar}[\hat{H}, \hat{r}] = -\frac{i\hbar}{2m}(\Delta, \hat{r}) = -\frac{i\hbar}{\cancel{2}m}\cancel{2}\nabla\Psi = -\frac{i\hbar\nabla\Psi}{m} = \frac{\hat{p}}{m}\Psi$

$$\cancel{(\Delta(r\Psi)} - r\Delta\Psi = \nabla \cdot (\Psi + r\nabla\Psi) - r\Delta\Psi = \nabla\Psi + \nabla\Psi + \cancel{r\Delta\Psi} - \cancel{r\Delta\Psi} = 2\nabla\Psi$$

$$\hat{v} = \frac{\hat{p}}{m}$$

- Ehrenfest - tétel:

$$\left[\frac{p^2}{2m}, p\right] + (U, p) = -i\hbar(U, \nabla) = +i\hbar(\nabla U)\cdot\psi$$

$$U\cdot\nabla\psi - \nabla(U\psi) = U\nabla\psi - U\nabla\psi - (\nabla U)\psi$$

$$\hat{a} = \frac{d\hat{v}}{dt} = \frac{i}{\hbar}\left(\hat{H}, \hat{v}\right) = \frac{i}{\hbar}\left(H, \frac{p}{m}\right) = \frac{i}{\hbar m}\left(H, p\right) = -\frac{\nabla U(\underline{r})}{m}$$

$$m\hat{a} = -\nabla U(\underline{r})$$

$$m\frac{d^2}{dt^2}\langle\hat{\underline{r}}\rangle = -\langle \operatorname{grad} U(\underline{r})\rangle$$

Ha a részecske jól lokalizált, és a $|\psi|^2 \neq 0$ tartományban U lassan változik $\Rightarrow$ $\langle \operatorname{grad} U(\underline{r})\rangle = \int \psi^* \nabla U(\underline{r})\cdot\psi \, d\underline{r} = \nabla U\big|_{\underline{r}=\underline{r}_0} \cdot \underbrace{\int \psi^*\cdot\psi}_{1}$

$\underline{r}_0 = \langle\underline{r}\rangle$

$$m\frac{d^2}{dt^2}\langle\hat{r}\rangle = -\operatorname{grad} U(\langle\underline{r}\rangle)$$

14) EPR (Einstein - Podolsky - Rosen paradoxon)

1. gondolatkísérlet: kétállapotú rsz., 2 részecske (spin pl. foton pol.)

1.
2.

legyen a 2 rész. áll. között tökéletes antikorreláció,

azaz:

$$\Psi = \left[a\left(\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_1;\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_2\right) + b\left(\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_1;\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_2\right)\right] \qquad |a|^2+|b|^2=1$$

közös hfv.

$$\left(a := \frac{1}{\sqrt{2}},\ b = -\frac{1}{\sqrt{2}}\ \text{(singlett áll.)}\right)$$

2. EPR (1935): lokalitás: a szétszpülés után van 2 rendsz. kh. nélkül

(kv. mech.): nincs! $\Rightarrow$ az egyik mérés a másikat nem befoly.

3. Valóság: a 2. spinvetület az 1. mérése után (a rsz. megzav. nélkül) biztosan

meghatározott ⇒ ez egy „eleme a fiz. valóságnak", ami a kv. mechanikában

nincs benne)

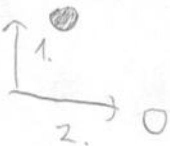
vagyis

(lokalitásnak ellentmond, mert a mérés ~~meghat.~~ meghat. a másik

állapotot is (befoly. a másik mérést) így, hogy (kezdetben nem tudtuk a r.sz. melyik állapotban van

↕

golyók (fekete, fehér)



← a kiépülő golyó már csak 1 színű lehet, a méréssel nem változtat

a kiépülő rész. spinje már nincs meghatározva, ezt „a mérés dönti el")

⇒ teljesség: a kv. mecha nem teljes, mert a fizikai valóság egy elemét nem tartalmazza

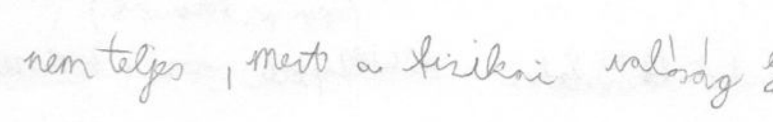
⇕

kv. mechanika: nincs lokalitás!, a kv. mech. r.sz. (~~nem~~ megzavarás nélkül) nem esik szét két független részrendszerre)

rejtett paraméter: tfh. ∃ egy rejtett (λ) paraméter, ami egyértelműen (EPR) meghatározza a mérés kezdetén, hogy melyik állapotot fogjuk mérni

kvantitatív jóslat adható

kísérlet: Stern-Gerlach analizátor (spin esetén $\frac{\hbar}{2}$ egységekben)



Szorozzuk össze a ~~kapott~~ detektorok eredményeit!

ha $\vec{a} \parallel \vec{b}$ $\Rightarrow$ -1-et kapunk a ~~tökéletes~~ antikorr. miatt

DE legyen $\vec{a} = \begin{pmatrix} \sin\vartheta_1 \cos\varphi_1 \\ \sin\vartheta_1 \sin\varphi_1 \\ \cos\vartheta_1 \end{pmatrix}$ $\quad \vec{b} = \begin{pmatrix} \sin\vartheta_2 \cos\varphi_2 \\ \sin\vartheta_2 \sin\varphi_2 \\ \cos\vartheta_2 \end{pmatrix}$

Átlagoljuk a szorzatokat:

$$\Rightarrow \text{kv. m.: } E^{\Psi}(\vec{a},\vec{b}) = \langle \Psi | \underbrace{(\vec{a}\,\vec{\sigma})_1}_{1.\text{ér.}} \cdot \underbrace{(\vec{b}\,\vec{\sigma})_2}_{2.\text{ér.}} | \Psi \rangle \qquad \text{ahol } \vec{\sigma} = \begin{pmatrix} \sigma_1 \\ \sigma_2 \\ \sigma_3 \end{pmatrix} \leftarrow \text{Pauli-mátrixok}$$

$$\vec{a}\,\vec{\sigma} = \begin{pmatrix} \cos\vartheta_1 & \sin\vartheta_1 e^{-i\varphi_1} \\ \sin\vartheta_1 e^{i\varphi_2} & -\cos\vartheta_1 \end{pmatrix} = \hat{1}$$

$\vec{b}\,\vec{\sigma}$ hasonlóan $= \hat{2}$
(ϑ_2, φ_2)

$\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} := |+\rangle$

$\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} := |-\rangle$

Mivel $\Psi = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|1,-1\rangle - |-1,1\rangle \right)$

$$E^{\Psi}(\vec{a},\vec{b}) = \frac{1}{2} \Big(\langle +|1|+\rangle \langle -|2|-\rangle + \langle -|1|-\rangle \langle +|2|+\rangle -$$
$$- \langle +|1|-\rangle \langle -|2|+\rangle - \langle -|1|+\rangle \langle +|2|-\rangle \Big) =$$
$$= \frac{1}{2} \Big(\cos\vartheta_1 (-\cos\vartheta_2) + (-\cos\vartheta_1) \cdot \cos\vartheta_2 - \sin\vartheta_1 \cdot e^{-i\varphi_1} \sin\vartheta_2 e^{i\varphi_2} -$$
$$- \sin\vartheta_1 e^{i\varphi_1} \cdot \sin\vartheta_2 e^{-i\varphi_2} \Big) = -\cos\vartheta_1 \cos\vartheta_2 - \underbrace{\cos(\varphi_1 - \varphi_2)}_{\cos\varphi_1 \cos\varphi_2 + \sin\varphi_1 \sin\varphi_2} \cdot \sin\vartheta_1 \sin\vartheta_2 =$$
$$= -\vec{a} \cdot \vec{b}$$

Bell-féle egyenlőtlenség helyett CHSH (Clauser-Horne-Shimony-Holt)-egyenlőtlenség

$\rightarrow$ a detektor torzító hatása kiesik

tek. az $\vec{a}, \vec{a}'$ (1-es analiz.) $\vec{b}, \vec{b}'$ (2-es analiz.) irányokat

Nézzük az $S = E(\vec{a},\vec{b}) - E(\vec{a}',\vec{b}') + E(\vec{a}',\vec{b}) + E(\vec{a}',\vec{b}')$

mennyiséget.

Kv. szerint tehát $S = |-\vec{a}\vec{b} + \vec{a}\vec{b}' - \vec{a}'\vec{b} - \vec{a}'\vec{b}'| \not\leq 2$

$\uparrow$ $\exists$ ilyen $\vec{a},\vec{a}'$, $\vec{b},\vec{b}'$ irány

- Rejtett paraméteres elm.: λ lok. paraméter

x_1 az 1. $\vec{a}'$, x_2 a 2. $\vec{b}$ analizátor eredménye

$S = \langle x_1 x_2 - x_1 x_2' + x_1' x_2 + x_1' x_2' \rangle = \sum_{\lambda=1,2} (x_1 x_2 - \dots)_\lambda$

λ-ra vett átlag

$\|$

$S = \langle x_1 (x_2 - x_2') \rangle + \langle x_1' (x_2 + x_2') \rangle$

ha $x_2 = 1$, $x_2' = 1$ $\Rightarrow$ $x_2 - x_2' = 0$, $x_2 + x_2' = 2$

$x_2' = -1$: $x_2 + x_2' = 0$, $x_2 - x_2' = 2$

$x_2 = -1$, $x_2' = 1$: $x_2 + x_2' = 0$, $x_2 - x_2' = -2$

$x_2' = -1$: $x_2 - x_2' = 0$, $x_2 + x_2' = -2$

x_1, x_2, x_1', x_2' határozott érték lehet (nincs lin. komb.!)

$x_1 = 1$ v. -1

$\Rightarrow |S| \leq 2$

~~DE ...~~

$\Rightarrow$ kísérlet: $S \geq 2$ ✓ $\Rightarrow$ kv. m. ✓

rejtett param. ✗