Kvantummechanika gyakorlat

Honlap: http://bodri.elte.hu/~tromlitas

Követelmények:

2 ZH → 1 rossz → javító
→ 2 rossz → gyak. UV

Beadandók: 50% kell a gyakjegyhez, de nem számít bele

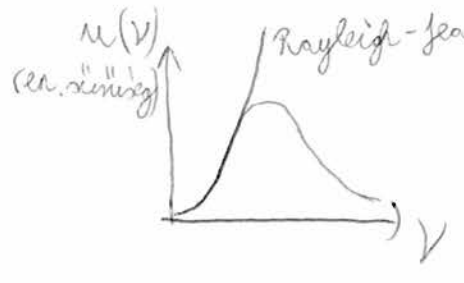
Elérhetőség: Márfy János, 1.111 szoba (elmfiz. tanszék)
marfy.j@gmail.com

Aj. irodalom
- Landau
- Elmfiz. példatár
- Maggyari - Constantinescu
- Griffiths példatár

1. óra

Bevezetés

1) Hőmérsékleti sugárzás:

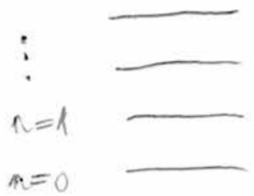


$u(\nu) = \frac{8\pi}{c^3}\overline{\mathcal{E}(\nu)}\cdot \nu^2 d\nu$ (ν és ν+dν között kisug. energiasűr.)

ha: $\overline{\mathcal{E}(\nu)} = kT$ (1D-s osci) $= \sim \nu^2$ → klasszikus statfiz. alapján (folyt. állapotok)

$u = \int_0^\infty u(\nu)d\nu = \infty$ lenne

- kvantumhipotézis: $\mathcal{E}(\omega) = n\cdot\hbar\omega$ (diszkrét állapotok)

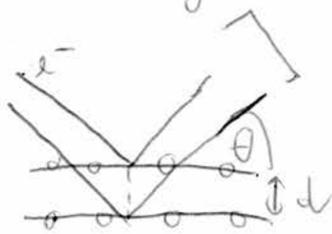


$$\boxed{u(\nu) = \frac{8\pi h}{c^3} \frac{\nu^3}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1}}$$ Planck-féle sug. tv.

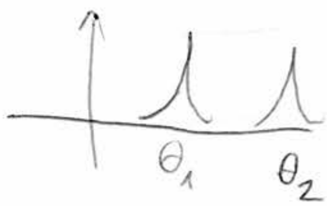
(korrespondencia elv: nagy kvantumszámokra kvantumfizika →

→ klassz. fiz)

2) Davisson-Germer-kís.:



(Bragg-diffrakció)



→ e^- hullámterm.

3) fotoeffektus, Compton-eff.

$\nu' < \nu$

(energia és imp. is megmarad)

$\underline{p} = \hbar \underline{k} = h\frac{\nu}{c}$

$E = h\nu = \hbar\omega \qquad \hbar = \frac{h}{2\pi}$

Frank-Hertz

⇒ foton korpuszkuláris természete

Atommodellek

a) Rutherford-modell

· folytonos pályák lehetnének

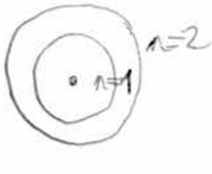
· e^- kering → sugároz

b) Bohr-modell:

1. stac. pályák, melyeken nem sugároz az e^-

$r\cdot p = \hbar \cdot n$ (imp. mom. kvantált)

2.



$$E_n - E_{n'} = \Delta E = \hbar\omega$$

elnyelt / kibocsájtott fény energiája

Bohr-Sommerfeld-kvantálási feltételek (kváziklasszikus közelítés)

($H = H(q, p) = T + V$ $\quad i = 1, \dots f$

koord. → hozzá kanonikusan konjugált imp.

$L = T - V \quad L = L(q, \dot q)$

$$\left.\begin{aligned} \dot p_i &= -\frac{\partial H}{\partial q_i} \\ \dot q_i &= \frac{\partial H}{\partial p_i} \end{aligned}\right\}$$

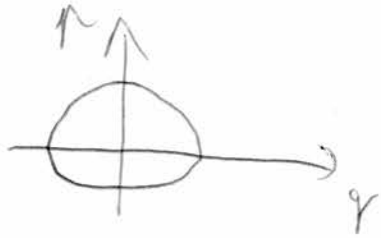
Euler-L.-egy.:

$$\frac{d}{dt}\Big(\underbrace{\frac{\partial L}{\partial \dot q_i}}_{=\,p_i}\Big) - \frac{\partial L}{\partial q_i} = 0$$

)

periodikus mozg.-ra

$$\boxed{\oint p_i \, dq_i = n_i h}$$



1 periódusra

(körpályára: $p = \text{áll} \Rightarrow p \cdot 2r\pi = nh$

$$p \cdot r = n\hbar$$

annyi szab. fok, ahány ~~koord.~~

centrális erőtérben

$$V = -\frac{Z \cdot e^2}{r}$$

$$L = \frac{m}{2}\left(r^2\dot{\theta}^2 + \dot{r}^2 + r^2 \sin^2\theta \cdot \dot{\varphi}^2\right) + \frac{Z e^2}{r}$$

$$p_r = m \cdot \dot{r} = 0$$

$$p_\varphi = m r^2 \sin^2\theta \cdot \dot{\varphi}$$

$$p_\theta = m r^2 \dot{\theta} = 0$$

$$\theta = \text{áll} = \frac{\pi}{2}$$

$$r = \text{áll} = a$$

$$\boxed{p_\varphi = m a^2 \omega}$$

φ ciklikus koord. (nem függ tőle a Lagr.)

$$\Downarrow$$

$$\frac{\partial L}{\partial \varphi} = 0 \Rightarrow \frac{d}{dt}\Big(\underbrace{\frac{\partial L}{\partial \dot{\varphi}}}_{p_\varphi}\Big) = 0$$

$$\Downarrow$$

$$p_\varphi = \text{áll}$$

HF-ben 1 teljes periódusra kell $\int$-ni!

$$m a^2 \omega \oint d\varphi = m a^2 \omega \int_0^{2\pi} d\varphi = 2\pi \cdot m a^2 \omega = n \cdot h$$

$$\omega = \frac{n \cdot \hbar}{m \cdot a^2}$$

e^- körfrekv.-ja $\neq$ kibocs. foton frekije

$$\frac{Ze^2}{a^2} = ma\omega^2$$

$$E = T + V = \frac{p^2}{2m} - \frac{Ze^2}{a} = \frac{m}{2}a^2\omega^2 - \frac{Ze^2}{a} =$$

$$E_n = -\frac{Z^2e^4m}{2\hbar^2}\cdot\frac{1}{n^2}$$

Oszcillátor:

$$H = \frac{m\dot{x}^2}{2} - \frac{m\omega^2x^2}{2} = \frac{p^2}{2m} - \frac{m\omega^2x^2}{2} = H(p,q)$$

$$\Rightarrow \ddot{q} + \omega^2 q = 0$$

$$\left.\begin{aligned} q &= A\cdot\sin(\omega t) \\ p &= mA\omega\cdot\cos(\omega t) \end{aligned}\right\}$$ ($t=0$ fázis ← KF) $\to \frac{p^2}{m^2A^2\omega^2} + \frac{q^2}{A^2} = 1$

$\oint p\,dq$ = ellipszis

területe $= m\cdot A\cdot\omega\cdot A\cdot\pi =$

$= mA^2\omega\pi = nh \to A^2 = \frac{2\hbar\cdot n}{m\omega}$

↓

$H(p,q) = \boxed{E_n = \frac{1}{2}m\omega^2A^2 = n\hbar\omega}$ ↪ egzakt: $\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega$

Elmélet hibái:

- spin
- finomfelhasadás
-

Kvantummechanika

1) $\mathcal{H}$ $\quad \alpha, \beta, \gamma \in \mathcal{H}$ lineáris tér + skal. szorzat:
(Hilbert-tér)

$$(\cdot,\cdot) : \mathcal{H} \times \mathcal{H} \to \mathbb{C}$$

① $(\alpha, \beta) = (\beta, \alpha)^*$

② $(\alpha + \beta, \gamma) = (\alpha, \gamma) + (\beta, \gamma)$

③ $(c \cdot \alpha, \beta) = c^* (\alpha, \beta)$

④ $(\alpha, c\beta) = c(\alpha, \beta)$

⑤ $(\alpha, \alpha) \geq 0$, $= 0$ ha $\alpha = 0$

norma: $\quad \|\alpha\| = (\alpha, \alpha)^{1/2}$

$$(\mathcal{H}, (\cdot,\cdot))$$

$(\alpha, \beta) = 0 \Rightarrow \alpha$ és β <u>ortogonálisak</u>

$$(\alpha_k)_{k=1,\dots}$$

$$(\alpha_k, \alpha_j) = \delta_{kj}$$

<u>Teljes:</u>
$\forall \alpha \in \mathcal{H} \qquad \alpha = \sum_k c_k e_k = \sum_k \underbrace{(e_k, \alpha)}_{= c_k} e_k$

Most:

$\mathcal{H} = L_2 \quad$ (ahol $\int |f|^2 dx < \infty$, $f \in L_2$)

$\boxed{(f, g) = \int f^*(x) g(x)\, dx} \qquad f, g, \dots \in L_2$ hullámfv.-ek : fizikai állapotok

2) Operátorok

$$\hat{A}: \mathcal{H}\times\mathcal{H} \to \mathcal{H}$$

$\alpha \in \mathcal{H}$ $\qquad$ α: „vektor", „fv.", „állapot"

$$\hat{A}(\alpha) = \hat{A}\cdot\alpha$$

$$\hat{A}(a\alpha + b\beta) = a\hat{A}\alpha + b\hat{A}\beta \qquad (\hat{A}+\hat{B})\alpha := \hat{A}\alpha + \hat{B}\alpha$$

$a, b \in \mathbb{C}$ $\qquad$ $\hat{A}\hat{B}\alpha := \cancel{\hat{A}\hat{B}\alpha}\ \hat{A}(\hat{B}\alpha)$

$\alpha, \beta \in \mathcal{H}$

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

$[\hat{A},\hat{B}] = 0 \to$ kommutáló operátorok

$$[\hat{A}\hat{B},\hat{C}] = \hat{A}\hat{B}\hat{C}\Psi - \hat{C}\hat{A}\hat{B}\Psi = \hat{A}\hat{B}\hat{C}\Psi - \hat{A}\hat{C}\hat{B}\Psi + \hat{A}\hat{C}\hat{B}\Psi - \hat{C}\hat{A}\hat{B}\Psi =$$

$$= \hat{A}(\hat{B}\hat{C}-\hat{C}\hat{B})\Psi + (\hat{A}\hat{C}-\hat{C}\hat{A})\hat{B}\Psi = \hat{A}[\hat{B},\hat{C}]\Psi + [\hat{A},\hat{C}]\hat{B}\Psi$$

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

A fizikai mennyiségek az operátorok sajátértékei lesznek!

DE — " — csak valós lehet.

adjungálás def.:

$(\hat{A}^+\phi, \Psi) = (\phi, \hat{A}\Psi)$, ha $\hat{A} = \hat{A}^+$: hermitikus (önadjungált)

$(\hat{A}\hat{B})^+ = \hat{B}^+\hat{A}^+$, Biz: $\hat{A}\hat{B}(\phi,\Psi)$ $(\phi, \hat{A}\hat{B}\Psi) = (A^+\phi, B\Psi) =$

$(B^+A^+\phi, \Psi) = (B^+A^+)^+(\phi,\Psi)$

unitér op.:

$$UU^+ = U^+ U = 1$$

normatartó:

$$\underline{(U\phi, U\psi)} = (\underbrace{U^+U}_{1}\ \phi, \psi) = \underline{\underline{(\phi, \psi)}}$$

„lárüstrafó"

a skalárszorzat nem vált.

~~A~~ $\hat{A}\alpha = a\alpha \quad a \in \mathbb{C}$

Spektrum: egy operátor összes lehetséges sajátértéke

~~Áll~~:
Hermitikus op. sajátértékei valósak és kül. sajátértékekhez tartozó sajátvektorok ortogonálisak.

$\hat{A}\beta = b \cdot \beta$ $\quad$ ~~tfh.~~ $a \neq b$ $\quad$ Áll: $(\alpha \cdot \beta) = 0$, ha $\hat{A} = \hat{A}^+$

$\hat{A}\alpha = a\alpha$

$$(\alpha, \hat{A}\beta) = (\alpha, b\beta) = b(\alpha, \beta)$$

$$\|$$

$$(\hat{A}^+\alpha, \beta) = (\hat{A}\alpha, \beta) = (a\alpha, \beta) = a^*(\alpha, \beta)$$

$$a^* = b \quad \text{DE} \quad a \neq b \quad \Downarrow$$

$\Rightarrow$ ez csak úgy lehet, ha $(\alpha, \beta) = 0$

és $(\overbrace{\hat{A}^+\alpha}^{a\alpha}, \alpha) = (\alpha, \overbrace{\hat{A}\alpha}^{a\alpha})$

$a^*(\alpha, \alpha) = a \cdot (\alpha, \alpha)$

$\Downarrow$

$a^* = a$

$\downarrow$

valósak a s.é.-ek

$\Rightarrow$ fizikai mennyiségek hermitikus op.-ok sajátértékei.

Áll.:

Kommutáló op.-nak van közös sajátfv. rendszerük

Biz.: Nem kell.

Áll.: (feladat)

$\hat A, \hat B$

$$e^{\hat B}\cdot \hat A \cdot e^{-\hat B} = \hat A + [\hat B, \hat A] + \frac{1}{2!}[\hat B, [\hat B, \hat A]] + \dots$$

mindig a $\hat B$-nek az előző taggal vett komm.-a

Biz.:

$$e^{\hat B} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\hat B^n}{n!} \quad \text{(Taylor-sor)}$$

$$\hat A(s) = e^{s\hat B}\cdot \hat A \cdot e^{-s\hat B}$$

$$[\hat A^2, \hat A] = 0$$

$$\hat A(0) = \hat A$$

$$\frac{d\hat A}{ds} = \hat B\, \underbrace{e^{s\hat B}\cdot \hat A\, e^{-s\hat B}}_{\hat A(s)} \cancel{(-\hat B)\cdot e^{-s\hat B}} + \overbrace{e^{s\hat B}\cdot \hat A\, (-\hat B)\, e^{-s\hat B}}^{\hat A(s)\cdot \hat B} = [\hat B, \hat A(s)]$$

ha hatványfv.-ként tekintünk rá, látható, hogy felcserélhető

$$\frac{d^2\hat A}{ds^2} = \left[\hat B, \frac{d\hat A}{ds}\right] = [\hat B, [\hat B, \hat A(s)]]$$

$\vdots$

$$\hat{A}(s) = \hat{A}(0) + \frac{d\hat{A}}{ds}\Big|_{s=0} \cdot s + \frac{1}{2!}\frac{d^2\hat{A}}{ds^2}\Big|_{s=0} \cdot s^2 + \ldots$$

$$\hat{A}(1) = e^{\hat{B}} \cdot \hat{A} \cdot e^{-\hat{B}} = \underbrace{\hat{A}}_{=\hat{A}(0)} + \ldots$$

$\Downarrow$

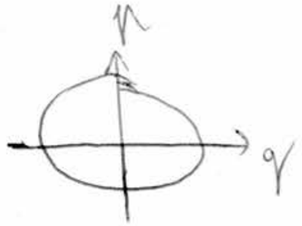
Ha $\hat{B}$ és $\hat{A}$ felcserélhető $[\hat{B}, \hat{A}] = 0$, akkor

$e^{\hat{B}} \cdot \hat{A} \cdot e^{-\hat{B}} = \hat{A}(s)$ ← Heisenberg képben az időfüggést viszik át az operátorra

2. óra

Minden feladatsornak 50%-a meg kell lennie!

1) $\oint p\, dq$



p, q egyszerre nem mérhető

$\Downarrow$

kvantummechanikában nincs ← trajektória!

nem alkalmazható a Bohr – Sommerfeld - kvant. felt.

2) Schrödinger - egyenlet:

kl. mech.	QM
$x, \dot{x}$	$\Psi(x,t)$
$m\ddot{x} = F$	$\Psi(x,0)$ meghatározza a többi későbbi állapotot
$x_0, \dot{x}(0)$	$\Rightarrow$ 1 kezdőfeltétel $\Rightarrow \boxed{i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H}\Psi}$ (ez nem azt jelenti, hogy $\hat{H} = \frac{\partial}{\partial x}$!)

időfüggő Schr. egy.

$\hat{H}$ milyen operátor lehet?

$$\int |\Psi(x,0)|^2 dx = 1$$

$$\int |\Psi(x,t)|^2 dx = 1$$ bármely időpillanatban le kell tudnom normálni

ha ez egy dinamikai egy.

$$\int \Psi^* \Psi \, dx = 1 \quad / \frac{d}{dt}$$

$$\int \left(\frac{\partial \Psi^*}{\partial t} \Psi + \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial t} \right) dx = 0$$ → ezt $\forall \Psi$-nek tudnia kell

Schr.-egy.*

$$\boxed{(\hat{H}\Psi)^* = \hat{H}^+ \cdot \Psi^*}$$

$$-i\hbar \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} = \hat{H}^+ \cdot \Psi^*$$

↓

$$\int \left(\frac{i}{\cancel{\hbar}} \hat{H}^+ \Psi^* \Psi - \frac{i}{\cancel{\hbar}} \Psi^* \hat{H} \Psi \right) dx = 0$$

$$\int \left(H^+ \Psi^* \Psi - \Psi^* \hat{H} \Psi \right) dx = 0$$

$$(\hat{H}^* \Psi, \Psi) - (\Psi, \hat{H}\Psi) = 0$$

$$(\Psi, H^+ \Psi) - (\Psi, H\Psi) = (\Psi, (H^+ - H)\Psi) = 0 \quad \forall \Psi\text{-re}$$

$$\Rightarrow H^+ - H = 0$$

$\underline{H^+ = H}$ → H önadjungált (így lesz csak normálható)

→ fizikai mennyiség rendelhető hozzá

Milyen?

↓

geom. optika $\xleftarrow[\text{köz.}]{\text{eikonál}}$ hullámoptika

$\downarrow$ (fény-út) $\qquad\qquad\qquad\qquad \downarrow$

kl. mech. $\longleftarrow$ QM

kvázikl. közelítés: $\boxed{\Psi = a \cdot e^{\frac{i}{\hbar} \cdot \underbrace{S(x,t)}_{\text{hatás}}}}$

$\downarrow$

Schr. egyenlet:

$$i\hbar \cdot \frac{i}{\hbar} \frac{\partial S}{\partial t} \cdot \Psi = \hat{H} \Psi$$

$$\hat{H} \cdot \Psi = -\frac{\partial S}{\partial t} \cdot \Psi \quad \rightarrow \quad \hat{H} = -\frac{\partial S}{\partial t}$$

$$\underset{\text{hatás}}{S} = -E \cdot t + \underbrace{S_0(q_i)}_{\text{rövidített hatás}} \quad \leftarrow \text{Hamilton-Jacobi-egyenletekből}$$

$$E = -\frac{\partial S}{\partial t} \qquad\qquad (S \text{ a Lagrange-fv. } \int\text{-ja})$$

$$p_i = \frac{\partial S_0}{\partial q_i} = \frac{\partial S}{\partial q_i}$$

$\Downarrow$

$\hat{H}$ a Hamiltont jelöli!

3) Operátorok idő szerinti deriváltja:

(QM-ban nem lehet két közeli időpillanatban mérni a rendszert, mert a mérés elrontja az állapotot)

$$\langle \dot{\hat{A}} \rangle = \frac{d}{dt} \langle \hat{A} \rangle \qquad \langle \hat{A} \rangle = (\Psi, \hat{A}\Psi) \ne \left(\sum_m c_m \Psi_m, \hat{A} \overset{\substack{\text{sorfejtés } \hat{A} \text{ bázisán} \\ \downarrow}}{\sum} c_n \Psi_n\right)$$

→ kitérés: várható érték:

$\Psi = \sum_k c_k \Psi_k$ → Várható érték nem időátlag!

$\hat{f} \Psi_k = f_k \cdot \Psi_k$

(pl. megmérjük többször ugyanazt a rendszert t időpillanatban → átlag)

$$\underline{\underline{\langle f \rangle}} = (\Psi, \hat{f} \Psi) =$$

$$= \left(\sum_m c_m \Psi_m \, \hat{f} \sum_n c_n \Psi_n \right) =$$

$$= \int \left(\sum_m c_m^* \Psi_m^* \cdot \sum_n c_n \cdot \Psi_n f_n \right) =$$

$$= \sum_{m,n} c_m^* c_n f_n \underbrace{\int \Psi_m^* \Psi_n \, dx}_{\delta_{mn}} = \underline{\underline{\sum_n |c_n|^2 \cdot f_n}}$$

annak a val.-e, hogy az n. sajátállapotban van a rendszer

← adott n. állapothoz tartozó f érték

↑ ez tényleg f várható értéke

$\rho(x) = |\Psi|^2 \cancel{dx}$ → valószínűségi eloszlás

$$\langle f^k \rangle = (\Psi, \hat{f}^k \Psi) \quad \leftarrow$$

Időbeli derivált (folyt.):

$$\frac{d}{dt} \langle f \rangle = \int \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} \hat{f} \Psi \, dx + \underbrace{\int \Psi^* \frac{\partial \hat{f}}{\partial t} \cdot \Psi \, dx}_{\langle \frac{\partial f}{\partial t} \rangle} + \int \Psi^* \hat{f} \frac{\partial \Psi}{\partial t} \, dx =$$

$$= \left\langle \frac{\partial \hat{f}}{\partial t} \right\rangle + \left\langle \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{f}] \right\rangle = \frac{d}{dt} \langle f \rangle$$

$$\boxed{\frac{d\hat{f}}{dt} = \frac{\partial \hat{f}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{f}]}$$

így definiálom az op. időderiváltját, hogy várható értéke ugyanazt adja, mint $\frac{d}{dt} \langle f \rangle$

Ha $\hat{f}$ nem függ explicite az időtől, és kommutál $\hat{H}$-val,

akkor ~~(időbeli átlaga)~~ időderiváltja 0 → <u>megmaradó mennyiség</u>

4) Impulzus

$x \to x+a \qquad a \ll 1$

(eltolás)

$$\Psi(x+a) = \Psi(x) + a\frac{\partial}{\partial x}\Psi \overset{\text{elhagyjuk, mert } a \text{ kicsi}}{+\ldots} = \underbrace{\left(1 + a\frac{\partial}{\partial x}\right)}_{\hat{T}_a}\Psi$$

$\hat{T}_a$: nem függ explicit az időtől

$\hat{T}_a$: a-val való eltolás operátora

$$\left[\hat{H}, \hat{T}_a\right]\Psi = \left[\hat{H}, a\frac{\partial}{\partial x}\right]\Psi = a\hat{H}\left(\frac{\partial}{\partial x}\Psi\right) - a\frac{\partial}{\partial x}\left(\hat{H}\Psi\right)$$

ha $\hat{H}$ nem függ x-től, akkor $\left[\hat{H}, \hat{T}_a\right] = 0$!

(hasonlóan klassz. mech.-ban ha Hamilton nem függ x-től (eltolásra invariáns), akkor p megmarad)

$\text{const} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \to$? megmaradás

$\Psi = a \cdot e^{\frac{i}{\hbar}S(x,t)} \qquad \text{const} = -i\hbar$

$$-i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial x} = -\cancel{i\hbar}\frac{\partial S}{\partial x} \cdot \frac{\cancel{i}}{\cancel{\hbar}} \cdot \Psi$$

$$-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\Psi = \frac{\partial S}{\partial x}\Psi$$

$$-i\hbar\frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial S}{\partial x} = p_x$$

$$\boxed{\hat{p} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}}$$ $\to$ az impulzus megmarad (ált. ban)

általánosan:

$$\hat{p}_k = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_k}$$

$$\boxed{\hat{\underline{p}} = -i\hbar \nabla}$$

5) További megmaradó menny.-ek:

$[\hat{H}, \hat{H}] = 0 \rightarrow$ energia (stacionárius állapotok esetén $\leftarrow \hat{H}$ nem függ explicite t-től)

$[\hat{H}, \hat{p}] = 0 \rightarrow$ impulzus

$[\hat{H}, \hat{L}_z] = 0 \rightarrow$ imp. momentum

$\hat{\underline{L}}^2$

(ált.ban ha valamelyik op. kommutál $\hat{H}$-val, akkor megmaradó menny., de ehhez az is kell, hogy az ne függjön explicite az időtől)

6) Stac. állapotok

ha $\frac{d\hat{H}}{dt} = 0$!, $\underline{\Psi}(x,t) = T(t) \cdot \Psi(x)$ (kis Ψ)

$\underline{\Psi}$: időfüggés is van

Ψ: – " – már nincs, csak x függő rész

$$i\hbar \frac{\partial \underline{\Psi}_n}{\partial t} = \hat{H}\underline{\Psi}_n = E_n \underline{\Psi}_n$$

$$\boxed{\underline{\Psi}_n = e^{-\frac{i}{\hbar}E_n \cdot t} \cdot \Psi_n(x)}$$ (ez már normált)

energiasajátállapotban így vált. a hullámfv.

ahol Ψ_n: $\boxed{\hat{H}\Psi_n = E_n \Psi_n}$ $\rightarrow$ ezt ilyenkor elég megoldani
időfüggetlen Schr. egyenlet

ilyenkor csak a helyfüggő rész számít

$$(\underline{\Psi}, \hat{A}\underline{\Psi}) = \int \underline{\Psi}^* \hat{A} \cdot \underline{\Psi} \cdot dx = \int \underbrace{e^{\frac{iE_n t}{\hbar}} e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}}_{1} \cdot \Psi_n^* \hat{A} \cdot \Psi_n \, dx = \int \Psi_n^* \hat{A} \cdot \Psi_n \, dx$$

↓

Ált. ban a fázis nem mérhető!

(kivéve He_2^4-nél a rendszer fázis szerint rendeződik ...)

7) Koord.:

$$\langle x\rangle = \int \underbrace{|\Psi|^2}_{\text{valósz. sűr.}} \cdot \underbrace{x}_{\text{mennyiség}}\, dx = \int \Psi^* \cdot x \cdot \Psi\, dx \rightarrow \hat{x} = x.$$

8) Hamilton:

$$\boxed{\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(x)} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)$$

← $V(x,p)$ nem lehetséges, mert x és p egyszerre nem mérhető

9) Schrödinger-egyenlet

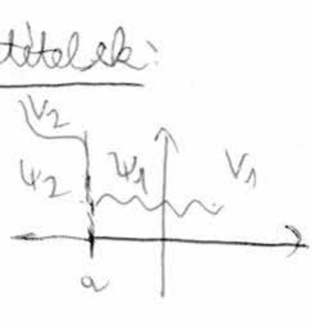
$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\Psi}{dx^2} + V(x)\Psi = E\Psi}$$

időfüggetlen Schr.-egyenlet (sajátérték-egyenlet) !

$\int |\Psi|^2 dx = 1$ kötött állapot (= normálható) ↔ szórási állapot (itt is normálható, de másképp)

diszkrét a spektrum

a) Határfeltételek:



$$\left.\begin{aligned} \Psi_2(a) &= \Psi_1(a) \\ \Psi_2'(a) &= \Psi_1'(a) \end{aligned}\right\} \text{a hullámfv. és a deriváltja is folytonos}$$

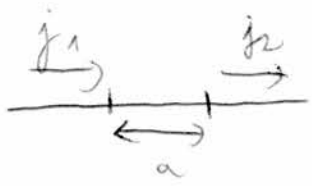
Miért folyt. a derivált?

$$\frac{d}{dt}\int \Psi^* \Psi \, dx = 0 \Rightarrow \rho = |\Psi|^2 = \Psi^* \Psi$$

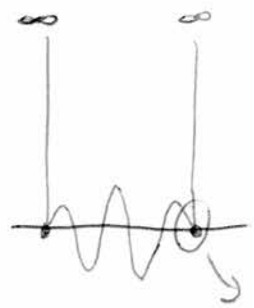
$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \mathrm{div}\, j = 0$$

ahol $j = \frac{2\hbar}{m}\left(\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \cdot \nabla \Psi^*\right)$ valószínűségi áramsűrűség

$\Psi^* \cdot \Psi'$



j-nek is folytonosnak kell lennie, mert egyébként valószínűség halmozódna fel



a derivált itt is folyt.

b) potenciálok

$\lim_{x \to \pm\infty} \Psi(x,t) = 0$ kötött állapot

~~(...)~~ spektrum diszkrét

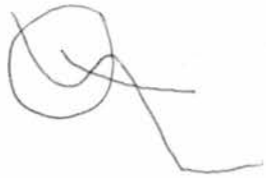
σ_x véges

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

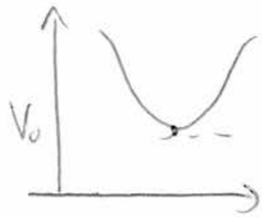
lehet még kötött állapot

ha $E < V_-, V_+$

de metastabil állapot



c) $\hat{p}\,\psi_n = \lambda_n \psi_n$



$E > V_0$

$$\langle E \rangle = \left\langle \frac{p^2}{2m} \right\rangle + \underbrace{\langle V(x) \rangle}_{V_0 \le}$$

$\psi = \sum_n c_n \psi_n$

$$\langle p^2 \rangle = \int \psi^* \hat{p}^2 \psi \, dx = \int \sum_m c_m^* \psi_m^* \sum_n c_n \lambda_n^2 \cdot \psi_n =$$

$$= \sum_{n,m} c_n \cdot c_m^* \cdot \underbrace{\int \psi_n \psi_m^*}_{\delta_{nm}} \cdot \lambda_n^2 = \sum_n |c_n|^2 \cdot \lambda_n^2 > 0$$

valamelyik állapotban van

$\Downarrow$

valamelyik $|c_n|^2 > 0$

$\Downarrow$

$\langle p^2 \rangle > 0$

(szig. poz. def.)

d) Nincsenek elfajult sajátállapotok kötött állapotban!

adott E-hez $\to \psi_1, \psi_2$ ahol $\psi_1 \neq \psi_2$

$$\frac{\psi_1''}{\psi_1} = \frac{2m(V-E)}{\hbar^2} = \frac{\psi_2''}{\psi_2} \Rightarrow \psi_1''\psi_2 - \psi_1\psi_2'' = 0$$

$$\Downarrow$$

$$\psi_1'\psi_2 - \psi_1\psi_2' = \text{konst}$$

$$\uparrow$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi'' + V\psi = E\cdot\psi$$

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

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

$\psi_1, \psi_2 \xrightarrow[\pm\infty]{x} 0$ (kötött áll.)

$$\frac{\psi_1'}{\psi_1} = \frac{\psi_2'}{\psi_2}$$

$$\ln\psi_1 = \ln\psi_2 + \ln C$$

$$\psi_1 = C\cdot\psi_2 \quad |C| = 1 \quad \text{(normálás miatt)}$$

$$\psi_1 = \psi_2 \quad \lightning \quad (\text{feltettük, hogy } \psi_1 \neq \psi_2)$$

e) 1D-ban a hullámfv. mindig választható valósnak!

Dobozba zárt részecske

$E > 0$

$$\psi'' = -\frac{2mE}{\hbar^2}\psi = -k^2\psi \qquad V(x) = \begin{cases} 0 & 0 < x < a \\ \infty & x < 0 \text{ v. } x > a \end{cases}$$

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

$$\psi(x) = A\sin kx + B\cos kx \qquad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

PF: $\psi(0) = \psi(a) = 0 \Rightarrow B = 0$

$$\Downarrow$$

$$\psi(x) = A\sin kx$$

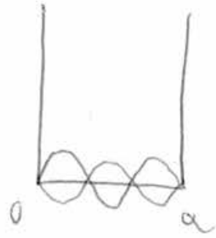
$$\psi(a) = A\sin(ka) = 0 \Rightarrow \sin ka = 0 \Rightarrow k\cdot a = n\pi \quad \nearrow \frac{2mE}{\hbar^2}\cdot a^2 = n^2\pi^2$$

$$k^2\cdot a^2 = n^2\pi \qquad \downarrow$$

$\hookrightarrow \boxed{E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} \cdot n^2}$

n mi lehet?

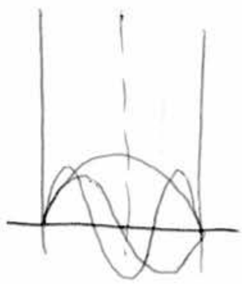
- $n=0 \rightarrow$ nincs részecske
- $\Psi_n = A \cdot \sin\left(\frac{n\pi}{a} x\right)$



ha n negatív, az ugyanazt adja lényegében, mint a $\oplus$ eset $\leftarrow$ úgyis csak $|\Psi|^2$-t tudunk mérni

$\Downarrow$

$n = 1, 2, 3, \ldots$



oszcillációs tétel:

n. sajátállapotban $n-1$ zérushelye van a hullámfv.-nek (a peremfeltételeket nem számítva)

$\Rightarrow$ 1. sajátáll.: 0 z.h. $\rightarrow$ páros fv.

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

$$A = \sqrt{\frac{2}{a}} \quad \Psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a} x\right)$$

HF-hoz segítség:

$$\sigma_x \sigma_p \geq \frac{\hbar}{2}$$

$$\sigma_x^2 = \langle x^2 \rangle_n - \langle x \rangle_n^2$$

$$\langle x^2 \rangle_n = \int_0^a \psi_n^* x^2 \psi_n \, dx = \int_0^a \frac{2}{a} \sin^2\left(\frac{n\pi}{a}x\right) \cdot x^2 \, dx \ \dots$$

$$\langle x \rangle = \dots = \frac{a}{2}$$

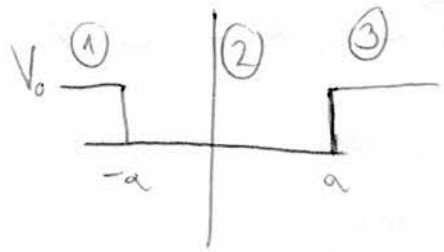
$$\hat{p} = -i\hbar \frac{d}{dx} \qquad \langle p \rangle = 0 \quad \leftarrow \text{oda-vissza pattog}$$

$$\langle \hat{p} \rangle = \int_0^a \psi^* \hat{p} \psi \, dx = -\frac{i\hbar n\pi}{a} \int_0^a \frac{2}{a} \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) \cdot \cos\left(\frac{n\pi}{a}x\right) dx = 0$$

$$\langle \hat{p}^2 \rangle = \dots$$

3. óra

1) Részecske véges potenciálgödörben



$\boxed{\text{kötött állapotok: } 0 < E < V_0}$

$$\psi'' + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V(x))\psi = 0$$

1 - 3 $\quad \psi_{1,3}'' + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V_0)\psi_{1,3} = 0$

2 $\quad \psi_2'' = -\frac{2mE}{\hbar^2}\psi_2 = -k^2 \cdot \psi_2$

$$k^2 := \frac{2mE}{\hbar^2}$$

$$\psi_2 = B \cdot \sin(kx) + A \cdot \cos(kx)$$

①-③

$$K^2 := \frac{2m(V_0-E)}{\hbar^2} \geq 0$$

$\Downarrow$

$$\psi''_{1,3} = K^2 \cdot \psi_{1,3}$$

$$\psi_1 = \underline{C_1} \cdot e^{Kx} + \cancel{D_1 \cdot e^{-Kx}}$$

$$\psi_3 = \underline{\underline{C_3}} \cdot e^{-Kx} + \cancel{D_2 \cdot e^{Kx}}$$

$\leftarrow$ ezeket nem lehetne normálni

$$\psi_1 = C_1 \cdot e^{Kx}$$

$$\psi_2 = A\cos kx + B\sin kx = A \cdot \sin(kx+\delta)$$

$$\psi_3 = C_3 \cdot e^{-Kx}$$

Határfelt.: ψ folyt., ψ' folyt. $\rightarrow \frac{\psi'}{\psi}$ is folyt.

$$\psi_1(-a) = \psi_2(-a)$$

$$\psi_1'(-a) = \psi_2'(-a) \Rightarrow \left.\frac{\psi_1'}{\psi_1}\right|_{-a} = \left.\frac{\psi_2'}{\psi_2}\right|_{-a} \rightarrow \text{(I)}\ K = k \cdot \mathrm{ctg}(-ka+\delta)$$

$$\left.\frac{\psi_2'}{\psi_2}\right|_{a} = \left.\frac{\psi_3'}{\psi_3}\right|_{a} \rightarrow \text{(II)}\ k\,\mathrm{ctg}(ka+\delta) = -K$$

(az energia k-ban és K-ban van)

$\downarrow$

ezek lesznek megkvantálva

$$-1 = \frac{\cos(-ka+\delta) \cdot \sin(ka+\delta)}{\sin(-ka+\delta) \cdot \cos(ka+\delta)}$$

msz.: száml.:

$$\cos(\alpha-\beta) \cdot \sin(\alpha+\beta) + \sin(\alpha-\beta) \cdot \cos(\alpha+\beta) - \sin(\alpha-\beta) \cdot \cos(\alpha+\beta) =$$

$$= \sin 2\alpha - \sin(\alpha-\beta)\cos(\alpha+\beta)$$

$$-\cancel{1} = \frac{\sin 2\delta - \sin(\delta-ka)\cos(\delta+ka)}{\sin(-ka+\delta)\cos(ka+\delta)} = \frac{\sin 2\delta}{(\dots)} - \cancel{1}$$

$$\frac{\sin(2\delta)}{(\dots)} = 0$$

$\sin 2\delta = 0$

$2\delta = n \cdot \pi \qquad n \in \mathbb{N}$ egyenlőre

$\delta = n\frac{\pi}{2}$

$\downarrow$

$$(\mathrm{I})^2 \rightarrow K^2 = k^2 \cdot \frac{1-\sin^2(-ka+\delta)}{\sin^2(-ka+\delta)}$$

$$\sin^2(\delta - ka) = \cancel{\frac{k^2}{\sqrt{k^2+K^2}}} \quad \frac{k^2}{k^2+K^2}$$

$$\sin(\delta - ka) = \frac{k}{\sqrt{k^2+K^2}} = \frac{k}{\sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2}}} = \frac{\hbar k}{\sqrt{2mV_0}}$$

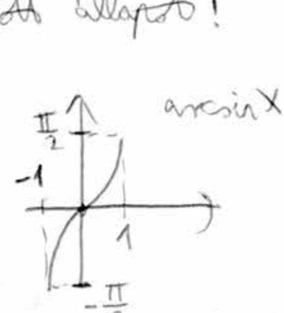
$$\boxed{\sin(\delta - ka) = \frac{\hbar k}{\sqrt{2mV_0}}}$$

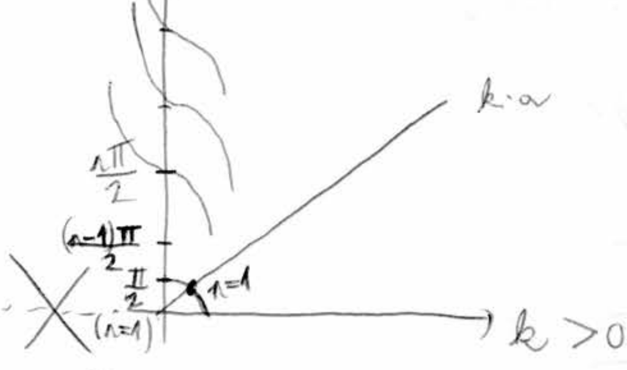
$$(\delta - ka) = \arcsin\left(\frac{\hbar k}{\sqrt{2mV_0}}\right)$$

$$\boxed{\frac{n\cdot\pi}{2} - ka = \arcsin\left(\frac{\hbar k}{\sqrt{2mV_0}}\right)} \rightarrow k = \dots(n) \rightarrow E = \dots(n) \quad (\text{kvantált})$$

Olyan is előfordulhat, hogy nincs kötött állapot!

$$ka = \frac{k\pi}{2} - \arcsin\left(\frac{\hbar k}{\sqrt{2mV_0}}\right)$$





mert $k > 0$

Minél nagy a potenciálgödör szélessége (a), annál több kötött állapot jelenik meg!

1 kötött állapot biztosan van ($n=1$)!

- Ha a potenciál páros, a sajátállapotok párosak vagy páratlanok.
- Alapállapot mindig páros ($n=1 \to 0$ zérushely)!

(oszcillációs tétel)

alapállapot

$$\Downarrow$$

$$C_1 = C_3$$

$$\delta = \frac{n\pi}{2}, \quad n=1$$

$$\delta = \frac{\pi}{2}$$

$$\psi_2 = A\sin\left(kx + \frac{\pi}{2}\right) = A\cos(kx)$$

2) $a \to 0$ szélességű pot. gödör

$$ka = \frac{n\pi}{2} - \arcsin\frac{\hbar k}{\sqrt{2mV_0}}$$

$$a \to 0, \quad n=1$$

$$\frac{\pi}{2} = \arcsin\frac{\hbar k}{\sqrt{2mV_0}} \quad /\sin$$

$$\psi = C \cdot e^{-\kappa|x|} = \sqrt{\kappa} \cdot e^{-\kappa \cdot |x|}$$

$$2C^2 \int_0^\infty e^{-2\kappa x}\,dx = \frac{C^2}{\kappa} = 1$$

$$\frac{\hbar k}{\sqrt{2mV_0}} = 1$$

$$C = \sqrt{\kappa}$$

$$k = \frac{\sqrt{2mV_0}}{\hbar}$$

a derivált ugrik!

$$\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} = \frac{\sqrt{2mV_0}}{\hbar}$$

ha $V_0 \to \infty$

$$ka = \frac{n\pi}{2}$$

$$E = \frac{\hbar^2 n^2 \pi^2}{8 \cdot m a^2}$$

3) Dirac - δ, Fourier-transzformáció

- $$\mathcal{F}(f(x)) = F(k) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(x) e^{-ikx} dx$$

$$\mathcal{F}^{-1}(F(k)) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} F(k) e^{ikx} dk$$

- $$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x) \cdot e^{-ikx} dx = 1 \qquad \tilde{\delta} = 1$$

$$\int f(x) \cdot \delta(x-a)\, dx = f(a) \qquad \delta(\alpha x) = \frac{1}{\alpha}\delta(x)$$

$$\int \delta(x)\, dx = 1$$

$$\boxed{\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} e^{ikx} dk = \delta(x)} \qquad (\text{definíció})$$

4) Az impulzus operátor sfv-ei

$$\hat{p}_x = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \to \text{sajátsfv-ek?}$$

$$-i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial x} = p\psi \qquad \boxed{\psi_p(x) = C \cdot e^{\frac{i}{\hbar} p x}}$$ → nem normálható szokásos értelemben!

(határozott p-re nincs hat. x → bárhol lehet)

$$k = \frac{p}{\hbar}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_{p'}^*(x)\cdot\psi_p(x)\,dx = |c|^2\cdot\int_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{i}{\hbar}(p-p')x}\,dx = |c|^2\cdot 2\pi\cdot\delta\left(\frac{p-p'}{\hbar}\right)$$

ilyen értelemben van normája

c-t nem hat. meg semmi $\Rightarrow |c|^2 := 1$

$$\boxed{(\psi_{p'},\psi_p) = 2\pi\hbar\,\delta(p-p')}$$

(több dim.-ban)

$$(\psi_{p'},\psi_p) = (2\pi\hbar)^d\cdot\delta(\underline{p}-\underline{p}')$$

ha $|c|^2=1$, akkor $|\psi_p|^2=1$

5) <u>Kontinuitási egyenlet</u>

$$\oplus\begin{cases} i\hbar\dfrac{\partial\psi}{\partial t} = \hat{H}\psi & /\cdot\psi^* \\ \quad\downarrow /^* & \\ -i\hbar\dfrac{\partial\psi^*}{\partial t} = \hat{H}\psi^* & /\cdot(-\psi)\end{cases}$$

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V$$

$$\psi\cdot\psi^* = |\psi|^2 = \rho$$

(valósz. sűr.)

$$i\cancel{\hbar}\frac{\partial(\psi\psi^*)}{\partial t} = -\frac{\hbar^{\cancel{2}}}{2m}\left(\psi^*\Delta\psi - \psi\Delta\psi^*\right)$$

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} = -\frac{i\hbar}{2m}\underbrace{\left(\psi\Delta\psi^* - \psi^*\Delta\psi\right)}_{\mathrm{div}\left(\underbrace{\psi(\nabla\psi^*) - \psi^*(\nabla\psi)}\right)}$$

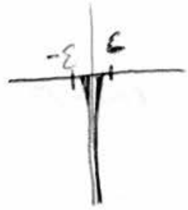
$$j = \frac{i\hbar}{2m}\left[\psi(\nabla\psi^*) - \psi^*(\nabla\psi)\right]$$

$$\boxed{\frac{\partial\rho}{\partial t} + \mathrm{div}\, j = 0}$$

kontinuitási egyenlet
(valószínűség megmaradása)

6) δ (Dirac-delta) potenciál:

$$V(x) = -V_0 \cdot \delta(x)$$



$$\psi'' + \frac{2m}{\hbar^2}\left(E - V(x)\right)\psi = 0 \quad \Big/ \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} dx$$

$$\varepsilon \to 0 \quad \psi'\Big|_{\varepsilon} - \psi'\Big|_{-\varepsilon} + \cancel{\underbrace{\frac{2m}{\hbar^2} E \cdot \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} \psi(x)\,dx}_{\varepsilon \to 0 \;\Rightarrow\; 0}} - \frac{2m}{\hbar^2}\int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon} V(x)\,\psi(x)\,dx = 0$$

mert $\boxed{\Psi \text{ folytonos!}}$

$$\underbrace{\Delta\psi'}_{\text{delta} \neq \text{Laplace}} = \frac{2m}{\hbar^2}(-V_0)\underbrace{\int_{-\varepsilon}^{\varepsilon}\delta(x)\,\psi(x)\,dx}_{\psi(0)} = -\frac{2mV_0}{\hbar^2}\psi(0)$$

$$\boxed{\text{A derivált } -\frac{2mV_0}{\hbar^2}\psi(0)\text{-at ugrik!}}$$

$$\psi'' = k^2\psi \quad \text{ahol } k^2 = -\frac{2mE}{\hbar^2}$$

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

$$\psi = C \cdot e^{\pm kx}$$

$$\psi_1 = A \cdot e^{kx} + \cancel{B e^{-kx}}$$

$$\psi_2 = C \cdot e^{-kx} + \cancel{D e^{kx}}$$

$$\psi_1(0) = \psi_2(0) \Rightarrow A = C \qquad \underline{\Psi \text{ folytonos}}$$

$$\Delta\psi' = -ck - ck = -2ck =$$

$$= -\frac{2mV_0}{\hbar^2} \cdot c \quad \leftarrow \text{derivált ugrásából}$$

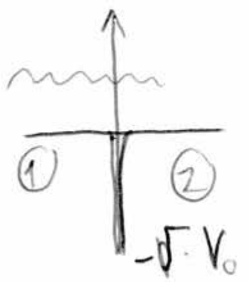
$\underline{\Psi' \text{ ugrik}}$

(ha van δ potenciál)

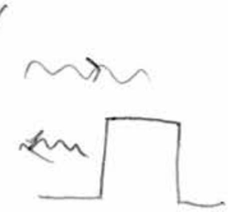
$k=\frac{m\cdot V_0}{\hbar^2}$ $\boxed{E=-\frac{mV_0^2}{2\hbar^2}}$ 1 kötött állapot van

$\sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}}=\frac{mV_0}{\hbar^2}$ (ugyanazt kaptuk, mint határesetben)

Szórás állapotok

1) 

$E>0$

( van visszaverődés is)

$$\Psi''+\frac{2m}{\hbar^2}\left(E-V_0\cdot\delta(x)\right)\cdot\Psi(x)=0$$

$$\Psi_1''+\frac{2m}{\hbar^2}E\Psi_1(x)=0 \qquad k^2=\frac{2mE}{\hbar^2}>0$$

$$\Psi_1''(x)=-k^2\Psi_1(x) \qquad \Psi_1=A\cdot e^{ikx}+B e^{-ikx}$$

$$\dots \qquad \Psi_2=C\cdot e^{ikx}+D\cdot e^{-ikx}$$

Ψ folytonos:

$A+B=C+D$

Ψ' ugrik:

$$ik\left(C-D-A+B\right)=-\frac{2mV_0}{\hbar^2}(A+B)$$

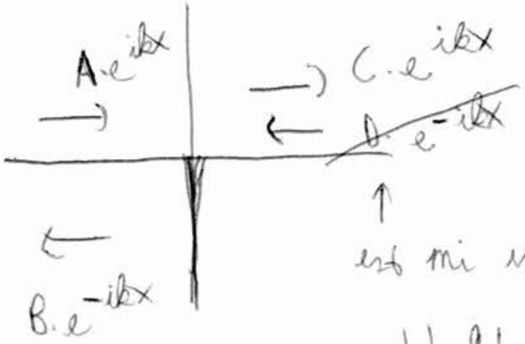
2 egyenlet, 4 ismeretlen

↓

a normálás miatt kevesebb feltételünk van

$j=\frac{i\hbar}{2m}\left(\Psi^*\Psi'-\Psi^{*\prime}\Psi\right)$ ← $A\cdot e^{ikx}$ ⊕ irányba halad

e^{-ikx} ⊖ —||—



ezt mi választjuk meg így:

szóráskísérletnél csak egyik irányból

jön hullám

(52) belátni $j \sim |A|^2$

$$\boxed{R = \left|\frac{B}{A}\right|^2 = \frac{j_{vissza}}{j_{be}}} \quad \boxed{T = \left|\frac{C}{A}\right|^2 = \frac{j_{át}}{j_{be}}} \qquad R+T=1$$

$$ik(C - A + B) = -\frac{2mV_0}{\hbar^2}(A+B)$$

$$2ikB = -\frac{2mV_0}{\hbar^2}(A+B)$$

$$B\left(2ik + \frac{2mV_0}{\hbar^2}\right) = -\frac{2mV_0}{\hbar^2}A$$

$$\frac{B}{A} = \frac{-\cancel{2}\frac{mV_0}{\hbar^2}}{\cancel{2}ik + \frac{\cancel{2}mV_0}{\hbar^2}} = \frac{-1}{\frac{ik\hbar^2}{mV_0} + 1}$$

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

$$\underline{\underline{R}} = \left|\frac{B}{A}\right|^2 = \frac{1}{1 + \left(\frac{\hbar^2 k}{mV_0}\right)^2} = \frac{1}{1 + \frac{\hbar^{\cancel{4}} \cdot \frac{2\cancel{m}E}{\cancel{\hbar^2}}}{m^{\cancel{2}}V_0^2}} = \underline{\underline{\frac{1}{1 + \frac{2\hbar^2 E}{mV_0^2}}}}$$

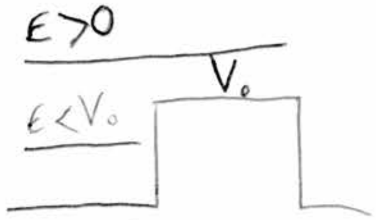
Véges magasságú V_0 esetén van visszaverődés!

4. óra

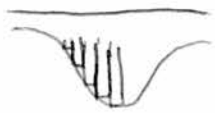
Köv. gyakorlatra 1. hf-t visszahozni!

okt. 24-25-26 lehetséges ZH időpontok.

1)



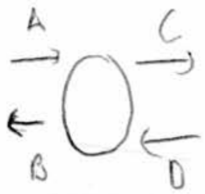
Bonyolultabb potenciálok lépcsőfv.-el közelíthetőek:



$2N+2$ paraméter $\left(A := 1,\ D=0\right)$

csak arány számít

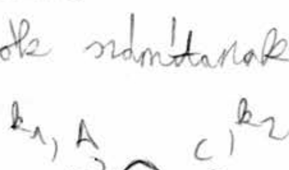
$2(N+1)$



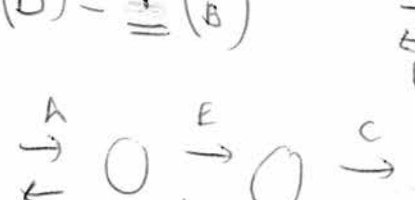
2) Transzfermátrix módszer

Csak az együtthatók számítanak:

a) $\begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} = \underline{\underline{T}} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix}$



milyen lin. összef. van az eh-k között



$$\begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} = T_2 \begin{pmatrix} E \\ F \end{pmatrix} = T_2 T_1 \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} \Rightarrow \underline{\underline{T = T_2 \cdot T_1}}$$

A módszer előnye:

elég a potenciálra 1-szer meghat. a transzfer m.-t →

esetén mátrixszorzással az eredmény megkapható

megalmas szórásra: $(k_1=k_2)$

b) $H\psi = E\psi$ $\qquad E=E(k)$

$H\psi^* = E\psi^*$

$\psi = A\cdot e^{ikx} + B\, e^{-ikx}$

$\psi^* = B^*\cdot e^{ikx} + A^*\cdot e^{-ikx}$

$$T = \begin{pmatrix} T_{11} & T_{12} \\ T_{21} & T_{22} \end{pmatrix}$$

$$C = T_{11}(k)\cdot A + T_{12}(k)\cdot B \qquad \text{I}$$

$$\begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} = T\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} D^* \\ C^* \end{pmatrix} = T(k^*)\cdot\begin{pmatrix} B^* \\ A^* \end{pmatrix}$$

→ nem rug. szórásra

$T(k_1, k_2)$, de egyébként minden változatlan

$$C^* = T_{21}(k^*)\cdot B^* + T_{22}(k^*)\cdot A^* \qquad \text{II}$$

$$\left.\begin{aligned} T_{11}^*(k) &= T_{22}(k^*) \\ T_{12}^*(k) &= T_{21}(k^*) \end{aligned}\right\}$$ feltételek, hogy $\underline{\underline{T}}$ transzfermátrix legyen

c) kontinuitási egy.:

$$\frac{\partial \varrho}{\partial t} + \operatorname{div} \underline{j} = 0$$

$$\underline{j} = \frac{i\hbar}{2m}\left(\psi^*\psi' - \psi\psi^{*\prime}\right)$$ → stac. állapotra $(\underline{j}=0)$ ezek valósak

$\psi = A\cdot e^{ikx} + B\, e^{-ikx}$ → nem stac. állapot! → ezek nem feltétlenül valósak

$$j_x = \frac{\cancel{\hbar} k_1}{2\cancel{m}}\left(|A|^2-|B|^2\right) =$$

$$= \frac{\cancel{\hbar} k_2}{2\cancel{m}}\left(|C|^2-|D|^2\right)$$

1D-ban: $\operatorname{div} \underline{j} = 0$

$\underline{j} = \text{konst.}$

$j_x = \text{konst.}$

(kötött állapotra $j_x = 0$)

(rugalmas szórás: $k_1 = k_2$)

most:

$$|C|^2-|D|^2 = C\cdot C^* - D\cdot D^* = \left[T_{11}(k_1^{\,k_2})\cdot A + T_{12}(k_1^{\,k_2})\cdot B\right]\cdot \overbrace{(c.c.)}^{\text{komplex konj.}} -$$

$$-\left(T_{21}(k_1^{\,k_2})\cdot A - T_{22}(k_1^{\,k_2})\cdot B\right)\cdot(c.c.)$$

— ha $\underline{k \text{ valós}}$ (szabad részecske): $k = k^*$

$$|C|^2-|D|^2 = \left(|A|^2-|B|^2\right)\underbrace{\left(T_{12}T_{21} - T_{11}T_{22}\right)}_{\det T}$$

$\Downarrow$ j_x-ből

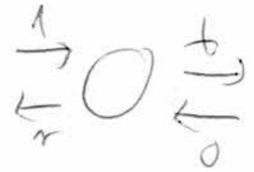
$$\boxed{\det T = \frac{k_1}{k_2}}$$

most $t = \frac{C}{A}$, $r = \frac{B}{A}$ szerint van definiálva!

$$\left(\frac{|t|^2}{\det T} + |r|^2 = 1\right)$$

— ha $A = 1$, $D = 0$

$$\begin{pmatrix} t \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} T_{11} & T_{12} \\ T_{21} & T_{22} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 \\ r \end{pmatrix}$$



(így pont a reflexiós és transzmissziós együtthatókat kapjuk)

$$\underline{\underline{r = -\frac{T_{21}}{T_{22}}}}$$

$$T_{21} + T_{22}\, r = 0$$

$$r = -\frac{T_{21}}{T_{22}}$$

$$\underline{\underline{t}} = T_{11} + T_{12}\, r =$$

$$= T_{11} + T_{12}\left(-\frac{T_{21}}{T_{22}}\right) = \frac{T_{11}T_{22} - T_{12}T_{21}}{T_{22}} = \underline{\underline{\frac{\det T}{T_{22}}}}$$

Áll.: $\boxed{|r|^2 + \frac{|t|^2}{\det T} = 1}$

j_x-ből:

Biz.: $k_1\left(|A|^2 - |B|^2\right) = k_2\left(|C|^2 - |D|^2\right)$

$\downarrow$ most

$$k_1\left(1 - |r|^2\right) = k_2\left(|t|^2\right)$$

$$|t|^2 \cdot \underbrace{\left(\frac{k_2}{k_1}\right)}_{1/\det T} + |r|^2 = 1$$

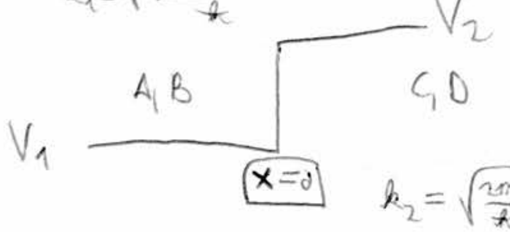
$\uparrow$

ha a korábban definiált 't'-t és 'r'-t használjuk $\left(t = \text{"}\frac{C}{A}\text{"}, r = \frac{B}{A}\right)$, akkor nem jön ki, hogy $|t|^2 + |r|^2 = 1$

3) Lépcsős pot.:

a)

$k_1 = \sqrt{\frac{2m(E-V_1)}{\hbar}}$



$k_2 = \sqrt{\frac{2m}{\hbar}(E - V_2)}$

$E > V_2$

$$A + B = C + D$$

$$ik_1(A - B) = ik_2(C - D)$$

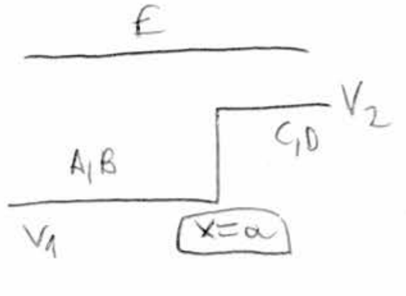
$$C = \frac{1}{2}\left[\left(1 + \frac{k_1}{k_2}\right)A + \left(1 - \frac{k_1}{k_2}\right)\cdot B\right]$$

$$D = \frac{1}{2}\left[\left(1 - \frac{k_1}{k_2}\right)A + \left(1 + \frac{k_1}{k_2}\right)B\right]$$

$$T = L(k_2, k_1) = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 + \frac{k_1}{k_2} & 1 - \frac{k_1}{k_2} \\ 1 - \frac{k_1}{k_2} & 1 + \frac{k_1}{k_2} \end{pmatrix}$$

$\rightarrow$ Megvan a mátrix. Nem kell megoldani az egy. rendsz.-t t és r-hez, a mátrixelemekből megkaphatóak!

b)



$$Ae^{ik_1a} + B\cdot e^{-ik_1a} = C\cdot e^{ik_2a} + D\cdot e^{-ik_2a}$$

$$ik_1\left(A\cdot e^{ik_1a} - Be^{-ik_1a}\right) = ik_2\left(Ce^{ik_2a} - De^{ik_2a}\right)$$

$$\tilde{A} := A e^{ik_1 a}, \quad \tilde{B} := B e^{-ik_1 a}, \quad \tilde{C} := C \cdot e^{ik_2 a}, \quad \tilde{D} := D \cdot e^{-ik_2 a}$$

$$\begin{pmatrix} \tilde{C} \\ \tilde{D} \end{pmatrix} = \underbrace{\begin{pmatrix} e^{ik_2 a} & 0 \\ 0 & e^{-ik_2 a} \end{pmatrix}}_{E_a(k_2)} \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix}$$

$E_a(k_2)$ → a-val való eltolás unitér transzformációja!

$$\begin{pmatrix} \tilde{A} \\ \tilde{B} \end{pmatrix} = E_a(k_1) \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix}$$

(unitér : $U \cdot U^+ = 1$

$U^+ = U^{-1}$

↓

koordinátatrafó unitér, mert normatartó)

Most

$$E_a(k)^{-1} = E_{-a}(k)$$

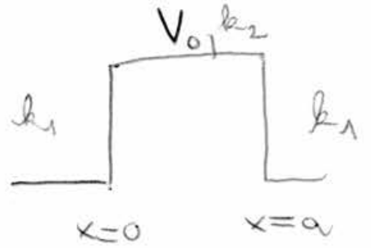
(ami logikus : $(-a)$-val való eltolás → (−fázis))

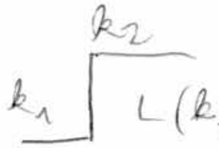
$$\begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} = E_{-a}(k_2) \begin{pmatrix} \tilde{C} \\ \tilde{D} \end{pmatrix} = E_{-a}(k_2) \, L(k_2, k_1) \begin{pmatrix} \tilde{A} \\ \tilde{B} \end{pmatrix}$$

$\begin{pmatrix} \tilde{C} \\ \tilde{D} \end{pmatrix}$ és $\begin{pmatrix} \tilde{A} \\ \tilde{B} \end{pmatrix}$ között ugyanaz az összef., mint előbb $\begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix}$ és $\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix}$ között.

$$\boxed{T = E_{-a}(k_2) \, L(k_2, k_1) \, E_a(k_1)}$$

c)





$L(k_2, k_1)$

$L(k_1, k_2)$

honnan hova ugrik

$$T = \underbrace{E_{-a}(k_1) \cdot L(k_1, k_2) E_a(k_2)}_{T_2} \underbrace{L(k_2, k_1)}_{T_1}$$

$$\boxed{\begin{gathered} L(k_2, k_1) = \frac{1}{2}\begin{bmatrix} 1+\frac{k_1}{k_2} & 1-\frac{k_1}{k_2} \\ 1-\frac{k_1}{k_2} & 1+\frac{k_1}{k_2} \end{bmatrix} \\ E_a(k_2) = \begin{pmatrix} e^{ik_2 a} & 0 \\ 0 & e^{-ik_2 a} \end{pmatrix} \end{gathered}}$$

$$t = \frac{\det T}{T_{22}}$$

$$T_{22} = e^{ik_1 a}\left[\cos(k_2 a) - \frac{k_1^2 + k_2^2}{2k_1 k_2} \cdot i \cdot \sin(k_2 a)\right]$$

– 

$E > V_0 \Rightarrow$ k_1, k_2 valós

$$|T_{22}|^2 = 1 + \frac{V_0^2}{4E(E-V_0)} \sin^2(k_2 a)$$

a teljes szórás rugalmas, mert k a két oldalon megegyezik $\rightarrow \det T = 1$ $\leftarrow$ ilyenkor nem $\frac{k_1}{k_2}$, hanem $\frac{k_1}{k_1}$ számít!

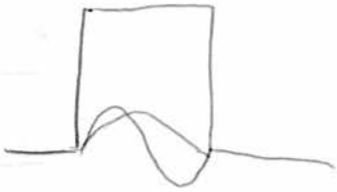
$$|t|^2 = \frac{1}{1 + \frac{V_0^2}{4E(E-V_0)} \sin^2(k_2 a)}$$

$\leftarrow$ ez is tartalmazza E-t!

$k_2 a = n\pi$

$\frac{2\pi}{\lambda}\cdot a = n\pi$

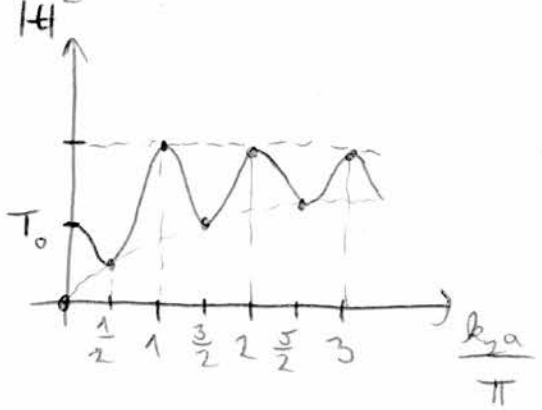
$$\boxed{a = n\cdot\frac{\lambda}{2}}$$



$|t| = 1$

Ha ✓ teljesül, $|t|^2 = 1$, az anyag átlátszó.

$k_2 = \sqrt{\frac{2m(E-V_0)}{\hbar}}$ ha $E \to V_0$, $|t|^2 \not\to 0$
$\not\to 1$

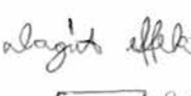


$$|t|^2 = \frac{1}{1+\frac{V_0^2}{4E(E-V_0)}\sin^2(k_2 a)} \xrightarrow{\text{L'Hospital}} \frac{1}{1+\frac{m_0 V_0 a^2}{4\hbar^2}} = T_0$$

ez is $\to 0$

(Hasonlít optikában a Fabry-Perot interferométerhez)

alagút effektus:

-  $0<E<V_1$ $\to k_2$ komplex (képzetes) lesz!

formailag továbbra is érvényes az előbbi levezetés ha $k_2 = iq_2$

k_1 $k_2 = iq_2$, q_2 valós

$$q_2 = \frac{\sqrt{2m(V_0-E)}}{\hbar}$$

$\sin(iq) = i\,\mathrm{sh}(q)$

$\sin^2(iq_2 a) = -\mathrm{sh}^2(q_2 a)$

$$|t|^2 = \frac{1}{1+\frac{V_0^2}{4E(V_0-E)}\mathrm{sh}^2(qa)}$$

klasszikus határeset:

$$|t|^2 = \frac{1}{1+\frac{V_0^2}{4E(V_0-E)}\cdot sh^2\left(\frac{a\sqrt{2m(V_0-E)}}{\hbar}\right)}$$

$$\lim_{\hbar\to 0}|t|^2 = 0$$ ✓ → ezt ált. ban érdemes leellenőrizni, mert $|t|^2=0$ határértéket kell kapnunk.

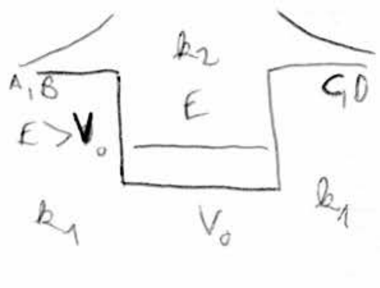
(alagút eff.: természetben pl. α-bomlás

időegység alatt $|t|^2\cdot N$ rész. jut ki

$\Downarrow$

$$\frac{dN}{dt} = -\lambda\cdot N$$)

4) Kötött állapot



∞-ben lecsengő megoldások

$\begin{pmatrix}A\\B\end{pmatrix}$ $\quad \cancel{A\cdot e^{ik_1x}} + B e^{-ik_1x}$

$\begin{pmatrix}C\\D\end{pmatrix}$ $\quad C\cdot e^{ik_1x} + \cancel{D\cdot e^{-ik_1x}}$

$k_1 = iq_1$

$q_1, k_2 \in \mathbb{R}$

$q_1 = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$

$\Downarrow$

$$\begin{pmatrix}0\\B\end{pmatrix} = T^{-1}\begin{pmatrix}C\\0\end{pmatrix} \qquad \begin{pmatrix}C\\0\end{pmatrix} = T\begin{pmatrix}0\\B\end{pmatrix}$$

$$0 = T_{22} B \quad \to B \text{ nem lehet } 0, \text{ mert az azonosan } 0 \text{ megoldás lenne}$$

$$C = T_{12} B$$

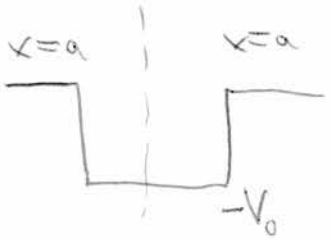
$$\Downarrow$$

$$T_{22} = 0$$

egyenlet a spektrumra $T_{22}(k_1, k_2) = 0$

a spektrumhoz nem kell a belső amplitúdókkal foglalkozni!

HF

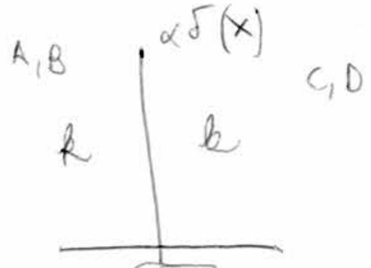


$\to$ leellenőrizni, hogy a fenti egyenlet ($T_{22} = 0$) ugyanazt adja-e

Kötött állapotnál $|t|^2$ és $|r|^2$ nem értelmes!

5) δ-potenciál:

a)



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

$$\Delta\psi' = \frac{2m\alpha}{\hbar^2}\psi(0)$$

$$A + B = -C + D$$

$$ik(C - D) - ik(A - B) = \frac{2m\alpha}{\hbar^2}(A + B)$$

$$\vdots$$

$$\boxed{T = D_\alpha(k) = \begin{pmatrix} 1-\varepsilon & -\varepsilon \\ \varepsilon & 1+\varepsilon \end{pmatrix}} \qquad \boxed{\varepsilon = \frac{2m\alpha}{\hbar^2}}$$

b) $V(x) = \alpha\delta(x-a) \to \boxed{T = E_{-a}(k) \cdot D_\alpha(k) E_a(k)}$ (a potenciált általánosan így kell eltolni)

5. óra
Harmonikus oszcillátor

$$\hat{H} = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}x^2$$

(Megoldás: mátrixmódszer! nem a Schr.-diff egyenletet oldjuk meg, hanem absztrakt kommutátorokkal és léptető-operátorokkal dolgozunk)

$$\hat{a} := \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\left(m\omega\hat{x} + i\hat{p}\right)$$

$$\hat{a}^+ := \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\left(m\omega\hat{x} - i\hat{p}\right)$$

$$\hat{p} = i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}\left(a^+ - a\right)$$

$$\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left(a + a^+\right)$$

$$[a, a^+] = aa^+ - a^+a = \frac{1}{2m\hbar\omega}\left(-2im\,\omega\hat{x}\hat{p} + 2m\omega i\hat{p}\hat{x}\right) =$$

$$= +\frac{i}{\hbar}\Big(\underbrace{[\hat{p}, \hat{x}]}_{=\frac{\hbar}{i}}\Big) = 1 \rightarrow a \text{ és } a^+ \text{ dimenziótlan}$$

($[a, a^+] = 1$: bozonok , $\underbrace{(a, a^+)}_{\text{antikommutátor}} = 1$: fermionok)

$$[H, a] = \left[\frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}x^2, \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\left(m\omega x + ip\right)\right] = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\omega}{2\hbar}}\cdot[p^2, x] +$$

$$+ \frac{im\omega^2}{2\sqrt{2m\hbar\omega}}\cdot[x^2, p]$$

$$[p^2, x] = 2\frac{\hbar}{i}p$$

$$\left([AB, C] = A[B,C] + [A,C]B\right)$$

$$[x^2, p] = -[p, x^2] = -2\frac{\hbar}{i}x \qquad \leftarrow [p, A(x)] = \frac{\hbar}{i}\frac{dA}{dx}$$

$$[\hat H, \hat a] = -\hbar\omega \hat a$$

$$[\hat H, \hat a^+] = \hbar\omega \hat a^+$$

$$a^+ a = \underbrace{\frac{p^2}{2m\hbar\omega} + \frac{m\omega^2}{2\hbar\omega}x^2}_{\hat H \cdot \frac{1}{\hbar\omega}} - \cancel{i}\frac{\cancel{m\omega}}{2\cancel{m}\hbar\cancel{\omega}}\underbrace{[\hat p, \hat x]}_{= \cancel{\frac{\hbar}{i}}}$$

$$\hat H = \hbar\omega\left(a^+ a + \frac{1}{2}\right)$$

Áll.: Ψ, E : $\hat H \Psi = E\Psi$

$a\Psi \to E - \hbar\omega$

$a^+\Psi \to E + \hbar\omega$ s.é.

Biz.: $[\hat H, \hat a]\Psi = H(a\Psi) - a(H\Psi) = H(a\Psi) - E\, a\Psi = \hbar\omega\, a\Psi$

$$H(a\Psi) = \underbrace{(E - \hbar\omega)}_{\text{s.érték}}\underbrace{(a\Psi)}_{\text{s.fv.}}$$

hasonlóan a^+-ra

(Kvantummechanikában cél a kommutáló operátorok megtalálása → → ezeket tudom együtt mérni)

⋮

$a^+\Psi, E+\hbar\omega$

Ψ, E

$a\Psi, E-\hbar\omega$

↓

lefelé van korlát! (nem csökkenthetem akármennyire az energiát)

⋮

$\overline{}\ \psi_0 \rightarrow a\psi_0 = 0$ kell legyen, hogy ne mehessünk lejjebb

a^+ : keltő operátor, abszorpciós

a : eltüntető -‖- , emissziós

(léptetőoperátorok)

potenciál páros

↓

alapállapot páros

(ψ_1 ptl.)

$a\psi_0 = 0$

$$\left(m\omega x + \hbar \frac{d}{dx}\right)\psi_0 = 0 \qquad \boxed{\psi_0 = A \cdot e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}}$$

$$\frac{d\psi_0}{\psi_0} = -\frac{m\omega}{\hbar} x\, dx \qquad A = \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{1/4} \leftarrow \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-x^2} = \sqrt{\pi}$$

$$\hat{H}\psi_0 = E_0\psi$$

$$A \cdot e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{m\omega}{-\hbar} + \cancel{\left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^2 x^2}\right) + \cancel{\frac{m\omega^2}{2}x^2}\right] = E_0 \cdot A \cdot e^{(\dots)}$$

$$\boxed{\frac{\hbar\omega}{2} = E_0}$$

$$E_1 = \frac{3}{2}\hbar\omega$$

⋮

<u>Kérdés</u>: megtaláltuk-e így az összes állapotot?

$\overline{}\ E_1$

$- - - E_0 < E < E_1 \quad \psi \neq \psi_0 \rightarrow$ ~~Tfh~~. létezik $\rightarrow a\psi = 0$ erre is igaz

$\overline{}\ E_0$

⇓ (nem mehetünk lejjebb, mint ψ_0)

$\psi = \psi_0$

↓

ellentmondás

⇓

nincs energiaszint E_0 és E_1 között

⇓

csak 1 "létra" van ⇒ 1féle sorozat

$$\text{———} \quad \Psi_n$$

$$\text{———} \quad a\Psi_n \sim \Psi_{n-1}$$

$$a^+\Psi_n \sim \Psi_{n+1}$$

új jelölés: $|n\rangle = \Psi_n$ $\qquad \langle n|n\rangle = 1$

$$\langle n|H|n\rangle = \underline{\hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)} \quad \text{(ezt már ~~tudjuk~~)}$$

$$E_n = \hbar\omega\left(\langle n|a^+a|n\rangle + \frac{1}{2}\right)$$

$E_n \uparrow \hat{H} = \hbar\omega\left(a^+a+\frac{1}{2}\right)$ (konst. szorzó); $\langle n|a^+a|n\rangle \,\|\, n$

$$a^+a\,|n\rangle = |n\rangle$$

$$\underbrace{a^+a}_{\hat{n}}\,\Psi_n = n\Psi_n$$

$\boxed{\hat{n}\text{: részecskeszám operátor}}$

$$a\,|n\rangle = A_n\,|n-1\rangle$$

$$a^+\,|n\rangle = A_n^+\,|n+1\rangle \qquad A_n, A_n^+ = ?$$

Normálásból:

- $$\int (\hat{a}\Psi_n)^*(\hat{a}_n\Psi_n)\,dx = |A_n|^2 = (\hat{a}\Psi_n, \hat{a}\Psi_n) = (\Psi_n, a^+a\Psi_n) = n(\Psi_n,\Psi_n) = n$$

$$A_n = \sqrt{n}$$

- $$|A_n^+|^2 = (a^+\Psi_n, a^+\Psi_n) = (\Psi_n, aa^+\Psi_n) = (\Psi_n, (1+a^+a)\Psi_n) = n+1$$

$$A_n^+ = \sqrt{n+1}$$

$$\boxed{\begin{aligned} a\,|n\rangle &= \sqrt{n}\cdot|n-1\rangle \\ a^+\,|n\rangle &= \sqrt{n+1}\,|n+1\rangle \end{aligned}}$$

Mátrixelemek:

($f_{ij} = \underline{e}_i f \cdot \underline{e}_j$ mátrixoknál)

$$f_{kn} = \langle k | \hat{f} | n \rangle = \int \psi_k^* \hat{f} \psi_n \, dq$$

mátrixelem

mátrixelem használata →

(Schrödinger-egyenlet mátrixos alakja:

Ψ s.fv.-t tetszőleges bázison kifejtve:

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

$E \sum_k c_k |\varphi_k\rangle = \hat{H} \cdot \sum_n c_n |\varphi_n\rangle \, / \cdot \langle \varphi_k |$

$E \cdot \underbrace{\sum_k c_k}_{\text{vektor}} = \underbrace{\sum_n c_n}_{\text{vektor}} \cdot \underbrace{\langle \varphi_k | \hat{H} | \varphi_n \rangle}_{H_{kn} \text{ (mátrix)}}$

→ mátrix s.ért. egyenlet! (nem diffop. s.ért. egyenlet))

a) várh.-ben:

$$\langle f \rangle = (\Psi, \hat{f} \Psi) = \left(\sum_k c_k \psi_k , \hat{f} \sum_n c_n \psi_n \right) = \sum_{k,n} c_k^* c_n \underbrace{(\psi_k, \hat{f} \psi_n)}_{f_{kn}} =$$

$$= \quad \overline{} \; \square \; |$$

várható értéket így mátrixszorzásra lehet visszavezetni!

- ha ψ_k és ψ_n f s.fv.-ei:

$$\langle f \rangle = \sum c_k^* c_n (\psi_k, \lambda_n \psi_n) = \sum_{k,n} c_k^* c_n \lambda_n \cdot \delta_{kn} = \sum_k c_k^* \cdot c_k \cdot \lambda_k = \sum_k \lambda_k |c_k|^2$$

→ ilyenkor a mátrix diagonális, a mátrixelemek a s.é.-ek!

(↳ egy operátort a sajátfv. rendszerében leírva a s.é.-ek lesznek a főátlóban)

b)

$\langle k|, |n\rangle$: energia sfv-ek

$$\langle k | a^+ | n \rangle = \langle k | n+1 \rangle \sqrt{n+1} = \sqrt{n+1} \cdot \delta_{k,n+1}$$

$$\langle k | a | n \rangle = \sqrt{n} \cdot \delta_{k,n-1}$$

$$\langle k | a^+ a | n \rangle = n \cdot \delta_{k,n}$$ ($a^+ a$ -nak közös s.fv. rendszere van $\hat{H}$-val)

$$a^+_{kn} = \begin{pmatrix} 0 & \cdots & & \\ \sqrt{1} & 0 & & 0 \\ & \sqrt{2} & 0 & \\ 0 & & \sqrt{3} & \ddots \end{pmatrix}$$

$$a_{kn} = \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & & & 0 \\ & 0 & \sqrt{2} & & \\ & & 0 & \sqrt{3} & \\ & 0 & & 0 & \\ & & & & \ddots \end{pmatrix}$$

$$a^+ a_{kn} = \begin{pmatrix} 1 & & & 0 \\ & 2 & & \\ & & 3 & \\ & 0 & & 4 \\ & & & & \ddots \end{pmatrix}$$

$$\hat{H}_{kn} = \begin{pmatrix} \hbar\omega(1+\frac{1}{2}) & & 0 \\ & \hbar\omega(2+\frac{1}{2}) & \\ 0 & & \ddots \end{pmatrix}$$

Általában igaz:

$$\boxed{\langle p \rangle = 0 \quad \text{stacionárius állapotban}}$$

(egyébként lenne egy átlagos "driftsebesség" $\to$ elvándorogna a részecske)

Biz.:

$$H^+\Psi = H\Psi = E\Psi$$

$$(\Psi, \hat{p}\Psi) = \left(\Psi, i\frac{m}{\hbar}[H, x]\Psi\right) = i\frac{m}{\hbar}\left[(\Psi, H x\cdot\Psi) - (\Psi, x\cdot(H\Psi))\right] =$$

$$[\hat{p}^2, \hat{x}] = 2\frac{\hbar}{i}\hat{p}$$

ha stacionárius állapot van (V nem függ t-től)!

$$[H, x] = \left[\frac{\hat{p}^2}{2m} + V(x), x\right] = \frac{1}{2m}[\hat{p}^2, \hat{x}]$$

$$= iE\frac{m}{\hbar}\left[(\Psi, x\cdot\Psi) - (\Psi, x\Psi)\right] = 0$$

$$\underset{\langle k|\hat{p}^2|n\rangle}{\overset{\|}{p^2_{kn}}} = -\frac{m\hbar\omega}{2}\langle k|(a^+ - a)\cdot(a^+ - a)|n\rangle = -\frac{m\hbar\omega}{2}\langle k|a^+a^+ + aa - \overset{(1+a^+a)}{\overset{\|}{aa^+}} - a^+a|n\rangle$$

$$= -\frac{m\hbar\omega}{2}\left[\sqrt{n+1}\sqrt{n+2}\,\delta_{k,n+2} + \sqrt{n}\sqrt{n-1}\cdot\delta_{k,n-2}\right]$$

$$+\frac{m\hbar\omega}{2}\langle k|1 + 2a^+a|n\rangle =$$

$$= -\frac{m\hbar\omega}{2}\left[\sqrt{n+1}\,\sqrt{n+2}\,\delta_{k,n+2} + \sqrt{n}\,\sqrt{n-1}\,\delta_{k,n-2} - (1+2n)\,\delta_{kn}\right]$$

$$\underline{\underline{\langle p^2\rangle = \frac{m\hbar\omega}{2}(1+2n)}}$$

← várható értékben most csak a főátló fog számítani

klasszikusan:

$$\langle H\rangle = \left\langle \frac{p^2}{2m}\right\rangle + \left\langle \frac{m\omega^2}{2}x^2\right\rangle = \frac{p^2}{m}$$

időátlagban ezekre ugyanakkora energia jut

kvantumosan:

$$\langle p^2\rangle = \frac{m\hbar\omega}{2}(1+2n) \qquad \begin{array}{l}\hbar\to 0\\ n\to\infty\\ \hbar n \to \text{véges}\end{array} \qquad m\hbar\omega\cdot n = m\cdot E$$

<u>Hermite-polinomok</u>

$$\Psi_n = \frac{1}{\sqrt{n}}\cdot a^+\cdot\Psi_{n-1} = \sqrt{\frac{m}{2\hbar\omega n}}\cdot\left(\left(-\frac{\hbar}{m}\frac{d}{dx} + \omega x\right)\Psi_{n-1}\right)$$

$$\xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\cdot x \qquad \frac{d}{dx} = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\frac{d}{d\xi} \qquad (\xi \text{ dimenziótlan})$$

$$\Psi_n(\xi) = \frac{1}{\sqrt{2n}}\left(-\frac{d}{d\xi} + \xi\right)\Psi_{n-1} = -\frac{1}{\sqrt{2n}}\cdot e^{\frac{\xi^2}{2}}\frac{d}{d\xi}\left(e^{-\xi^2/2}\cdot\Psi_{n-1}\right)$$

$$\Psi_n(\xi) = (-1)^2\cdot\frac{1}{\sqrt{2^2 n(n-1)}}\cdot e^{\xi^2/2}\cdot\frac{d}{d\xi}\left(\cancel{e^{-\frac{\xi^2}{2}}}\cdot\cancel{e^{\xi^2/2}}\cdot\frac{d}{d\xi}\left(e^{-\frac{\xi^2}{2}}\cdot\Psi_{n-2}\right)\right) =$$

$$\Psi_n(\xi) = (-1)^n\cdot\frac{1}{\sqrt{2^n\cdot n!}}\,e^{\frac{\xi^2}{2}}\cdot\frac{d^n}{d\xi^n}\left(e^{-\frac{\xi^2}{2}}\right)\frac{1}{\pi^{1/4}}$$

$$\boxed{H_n(\xi) \equiv (-1)^n\cdot e^{\xi^2}\frac{d^n}{d\xi^n}\left(e^{-\xi^2}\right)} \quad \text{Hermite-polinom}$$

$$\to \underline{\underline{\Psi_n(\xi) = \frac{1}{\pi^{1/4}\sqrt{2^n n!}}\,e^{-\xi^2/2}\cdot H_n(\xi)}}$$

ług: a Hermite-polinomokkal való számolás dimenziótlan,
⇓ de az eredeti hullámfv. nem ($\frac{1}{\sqrt{\text{hossz}}}$ mértékegységű)

$|\psi_n(\xi)|^2 d\xi = |\psi_n(x)|^2 dx$

$\psi_n(x) = \sqrt{\left|\frac{d\xi}{dx}\right|} \cdot \psi_n(\xi)$

6. óra

ZH: jövő szerdán 17–19 ^{00}

írott és nyomtatott jegyzetet lehet használni! (Bronstejnt is)
(javított HF-ok, ...)

Impulzusmomentum

kommutátorok:

1) $\underline{\hat{L}} = \underline{\hat{r}} \times \underline{\hat{p}}$ $\quad \underline{\hat{L}} = (L_x, L_y, L_z)$

$$\hat{L}_k = \varepsilon_{kij} x_i p_j \qquad p_j = -i\hbar \underset{\frac{\partial}{\partial x_j}}{\partial_j}$$

diff. operátor

$$\cdot \ [L_i, L_j] = \varepsilon_{ikl}\varepsilon_{jmn}\left(\hat{x}_k \hat{p}_l(\hat{x}_m \hat{p}_n) - \hat{x}_m \hat{p}_n(\hat{x}_k \hat{p}_l)\right) \overset{\downarrow}{=}$$

$$L_i = \varepsilon_{ikl}\, x_k p_l$$

$$L_j = \varepsilon_{jmn}\, x_m p_n$$

$$= (-i\hbar)^2 \cdot \varepsilon_{ikl} \cdot \varepsilon_{jmn} \left(x_k \delta_{lm} \partial_n + \cancel{x_k x_m \partial_l \partial_n} - x_m \delta_{nk} \partial_l - \right.$$

$$\left. - \cancel{x_m x_k \partial_n \partial_l} \right) = (-i\hbar)^2 \cdot \underbrace{\varepsilon_{ikm}\varepsilon_{jmn}}_{\varepsilon_{mik}\cdot\varepsilon_{mnj}} x_k \partial_n - \underbrace{\varepsilon_{inl}\varepsilon_{jmn}}_{\varepsilon_{nli}\cdot\varepsilon_{njm}} x_m \partial_l =$$

$$= \left(\delta_{in}\delta_{kj} - \delta_{ij}\delta_{kn}\right) x_k \partial_n - \left(\delta_{lj}\delta_{im} - \delta_{lm}\delta_{ij}\right) \cdot x_m \partial_l =$$

$$= x_j \partial_i - \cancel{\delta_{ij} \underbrace{x_n \partial_n}} - x_i \partial_j + \cancel{\delta_{ij} \underbrace{x_m \partial_m}} = (-i\hbar)^2 \cdot \left(x_j \partial_i - x_i \partial_j\right) =$$

$$= (-i\hbar) \underbrace{(-i\hbar)\left(x_j \partial_i - x_i \partial_j\right)}$$

$$[L_i, L_j] = i\hbar L_k \varepsilon_{ijk}$$

(Lee-csoportban forgatás operátorai)

$$[L_x, L_y] = i\hbar L_z$$

- $[L^2, L_i] = [\hat{L}\hat{L}, L_i] = (L_k L_k, L_i] = L_k [L_k, L_i] + [L_k, L_i] L_k =$

$$= L_k \cdot i\hbar \varepsilon_{kij} L_j + i\hbar \varepsilon_{kij} L_j L_k = i\hbar \underbrace{\varepsilon_{kij}}_{\text{antiszimm.}} \underbrace{(L_k L_j + L_j L_k)}_{\text{szimm.}} = 0$$

(Kazimir-operátor)

$[L^2, L_z] = 0$ → közös sfv. rendszerük van

DE akkor L_x, L_y már nem kommutálnak L_z-vel → ezeknek külön sfv. rendszerük van!

- $L_\pm := L_x \pm i L_y$

(Algebrai módszer lényege: a kommutátorokból meg lehet határozni a s. értékeket (és sfv.-eket is))

$$[L_z, L_\pm] = [L_z, L_x \pm i L_y] = \pm\hbar L_\pm$$

$$[L^2, L_\pm] = 0$$

- sajátértékek:

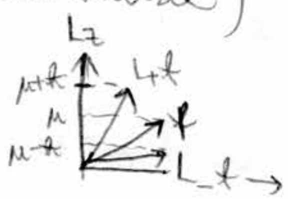
• $L^2 f = \lambda f$

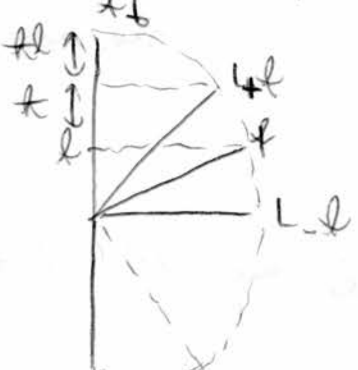
$L_z f = \mu f$

$$L^2 (L_\pm f) \overset{\text{kommutátor } 0}{=} L_\pm L^2 f = \lambda (L_\pm f)$$

$$L_z (L_\pm f) = L_\pm \underbrace{L_z f}_{\mu f} \pm \hbar L_\pm f = (\mu \pm \hbar)(L_\pm f)$$

$\Rightarrow$ ha f sajátállapota L^2, L_z-nek $\Rightarrow (L_\pm f)$ is sajátállapota L^2, L_z-nek (L^2-nek ugyanakkora (λ) sajátértékkel, L_z-nek $\mu \pm \hbar$-al $\rightarrow$ az imp. mom. vektort $\pm$ irányba forgatja úgy, hogy a vetület $\pm\hbar$-al változik)





Mostantól vizsgáljuk a sfv-eket adott L^2 sajátértékre!

$$L_\pm L_\mp = \underbrace{L_x^2 + L_y^2}_{L^2 - L_z^2} \mp i\left[L_x, L_y\right] = L^2 - L_z^2 \pm \hbar L_z$$

$$\boxed{L^2 = L_\pm L_\mp + L_z^2 \mp \hbar L_z}$$

- L_z spektruma korlátos (poz. definit) → $L_\pm$ nem léptethet akármeddig:

⇓

↳ $L_+ f_t \equiv 0$ $\quad L_z f_t \equiv \hbar l f_t$ (legyen f_t sfv. a maximális $\hbar \cdot l$ imp. mom. vetülettel)

$$L^2 f_t = \left(L_- L_+ + L_z^2 + \hbar L_z\right) f_t = \left(\hbar^2 l^2 + \hbar^2 l\right) f_t = \underline{\underline{\hbar^2 \cdot l(l+1)}}\, f_t$$

⇒ L^2 lehetséges sajátértékei $l(l+1) \cdot \hbar^2$ ⇒ $\lambda = \hbar^2 l(l+1)$

↳ $L_- f_b \equiv 0$ $\quad L_z f_b \equiv \hbar \bar{l} f_b$ (legyen f_b ugyanahhoz a „létrához" tartozó sfv.) (imp. mom. $\vec{l}$-hez)

$$L^2 f_b = \left(L_+ L_- + L_z^2 - \hbar L_z\right) f_b = \underline{\underline{\hbar^2 \cdot \bar{l}(\bar{l}-1)}}\, f_b$$

Mivel L^2 ugyanazt a sajátértéket veszi fel f_b, f_t-re:

$l(l+1) = \bar{l}(\bar{l}-1)$, ahol l a max. értéke L_z-nek, $\bar{l}$ a min.

$\cancel{\bar{l} = l+1}$ $\quad \bar{l} = -l$

mert $\bar{l} < l$

⇒ L_z lehetséges értékei $-l$ és l között változnak ($\hbar$ egységekben):

$-l, -l+1, -l+2, \ldots, l-1, l$

$\ell = -\ell + N \quad , \; N = 2\ell$

N egész szám !

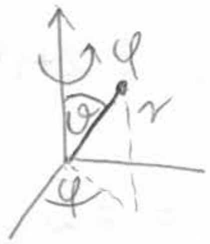
$\Downarrow$

$\ell = 0, \; 1/2, \; 1, \; 3/2, \dots$

↳ a pályaimpulzus momentum nem lehet féligész (l. később), csak a spin, mégis kijöttek ezek az értékek is, mert csak a kommutátorokat használtuk ki (forgatások) !

2) <u>Speciálisan pályaimpulzus mom.-ra:</u>

a)
$$x = r \sin\vartheta \cos\varphi$$
$$y = r \sin\vartheta \sin\varphi$$
$$z = r \cos\vartheta$$



$$- \quad L_z \overset{\text{def. szerint}}{=} -i\hbar \left(y \frac{\partial f}{\partial x} - x \frac{\partial f}{\partial y} \right) = -i\hbar$$

msz.:

$$\frac{\partial f}{\partial \varphi} = \frac{\partial f}{\partial x} \cdot \frac{\partial x}{\partial \varphi} + \frac{\partial f}{\partial y} \cdot \frac{\partial y}{\partial \varphi} = -y \frac{\partial f}{\partial x} + x \cdot \frac{\partial f}{\partial y} = \left(-y \frac{\partial}{\partial x} + x \frac{\partial}{\partial y} \right) f$$

$$L_z f = i\hbar \left(y \cdot \frac{\partial f}{\partial x} - x \frac{\partial f}{\partial y} \right) \overset{\downarrow}{=} +i\hbar \left(-\frac{\partial}{\partial \varphi} \right) f = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} f$$

$$L_k = \varepsilon_{kij} \, x_i \, p_j = (-i\hbar) \, \varepsilon_{kij} \, x_i \frac{\partial}{\partial x_j}$$

$$\boxed{L_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}}$$

$$\Rightarrow L_z\psi = -i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial\varphi} = \lambda\psi$$

$$\psi = A\cdot e^{i\frac{\lambda}{\hbar}\varphi}$$

- <u>Feltétel</u>: 2π szerint periodikus!

(Ez különbözteti meg az imp. mom.-ot a spintől, ami 4π szerint periodikus)

$$A\cdot e^{\frac{i}{\hbar}\lambda(\varphi+2\pi)} = A\cdot e^{\frac{i}{\hbar}\lambda\varphi}$$

$$e^{\frac{i}{\hbar}\lambda 2\pi} = 1$$

$$\frac{2\pi\lambda}{\hbar} = m\cdot 2\pi$$

$$\underline{\underline{\lambda = m\cdot\hbar}} \qquad m\in\mathbb{Z}$$

$\Rightarrow$ λ lehetséges értékei $\hbar$-ban egészek!

b) $L^2 Y_l^m = \hbar^2 l(l+1)$ $\qquad L_z|lm\rangle = \hbar m|lm\rangle$

$|lm\rangle$

(még nem tudjuk, hogy jómlfv.-ek)

(<u>Megj.</u>:

Normálás $\phi_m = e^{im\varphi}$-re:

$$\int \phi_m^*\phi_{m'}\cdot d\varphi = \delta_{mm'}$$

$$|A|^2\cdot\int_0^{2\pi} d\varphi\cdot e^{i\varphi(m'-m)} = |A|^2\left.\frac{e^{i\varphi(m'-m)}}{i(m'-m)}\right|_0^{2\pi} = \begin{cases} 0 & \text{ha } m\neq m' \\ \underbrace{|A|^2\cdot 2\pi}_{=1\ (\text{normálás})} & \text{ha } m=m' \Rightarrow A=\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \end{cases}$$

$$\Rightarrow \phi_m = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi} \Rightarrow \quad m=0 \quad (1.\ \text{gömbfv.}) \quad \phi_0 = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}$$

$$L_\pm |lm\rangle = A^{\pm}_{lm} \underbrace{|l\,(m\pm1)\rangle}_{Y_l^{m\pm1}}$$

$$\left(L_+ Y_l^m, L_+ Y_l^m\right) = |A^+_{lm}|^2 = \left(Y_l^m, L_- L_+ Y_l^m\right) = \left(Y_l^m, (L^2 - L_z^2 - \hbar L_z) Y_l^m\right) =$$

$$= \left(Y_l^m, \left[\hbar^2 l(l+1) - \hbar^2 m^2 - \hbar^2 m\right] Y_l^m\right) \Rightarrow |A^+_{lm}|^2 = \hbar^2 \cdot \left[l(l+1) - m(m+1)\right]$$

$$L_\pm |lm\rangle = \hbar \sqrt{l(l+1) - m(m\pm1)}\, |l\,(m\pm1)\rangle$$

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

$$\boxed{L_\pm = \hbar e^{\pm i\varphi}\left(\pm\frac{\partial}{\partial\vartheta} + i \operatorname{ctg}\vartheta \frac{\partial}{\partial\varphi}\right)}$$

- ϑ függő rész:
  - $L^2 Y_l^m = \hbar^2 l(l+1) Y_l^m \qquad Y_l^m = \phi_m(\varphi)\cdot\Theta_{lm}(\vartheta)$

$$-\hbar^2\left[\frac{1}{\sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial\vartheta}\left(\sin\vartheta\frac{\partial\Theta_{lm}}{\partial\vartheta}\right) - \frac{m^2}{\sin^2\vartheta}\Theta_{lm}\right] = \hbar^2 l(l+1)\Theta_{lm}$$

  - másik módszer:

$$L_+ Y_l^l = L_+ \Theta_{ll} = 0$$

$$\frac{d\Theta_{ll}}{d\vartheta} - l \operatorname{ctg}\vartheta\cdot\Theta_{ll} = 0 \to \Theta_{ll} = \text{const}\cdot\sin^l\vartheta$$

$$Y_l^m(\vartheta,\varphi) = \varepsilon \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}\cdot\frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}}\cdot e^{im\varphi}\cdot P_l^m(\cos\vartheta)$$

((l−m)-szer hattatjuk L_--t Θ_{ll}-re $\Rightarrow \Theta_{lm} \Rightarrow Y_l^m$)

ahol $\varepsilon = \begin{cases} (-1)^m & \text{ha } m>0 \\ 1 & \text{ha } m\leq 0 \end{cases}$

P_l^m (csatolt Legendre polinom): $P_l^m(x) = (1-x^2)^{\frac{|m|}{2}} \frac{d^{|m|}}{dx^{|m|}} P_l(x)$

$$P_l(x) = \frac{1}{2^l l!}\frac{d^l}{dx^l}\left[(x^2-1)^l\right]$$

– Normálás:

$$\int Y_l^{m*}(\vartheta,\varphi)\, Y_l^m(\vartheta,\varphi)\, \overbrace{d\Omega}^{\sin\vartheta\, d\vartheta\, d\varphi} = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} d\vartheta\; Y_l^{m*}(\vartheta,\varphi)\, Y_l^m(\vartheta,\varphi) \sin\vartheta$$

kell!

mj:

$d^3r = r^2 \sin\vartheta\, d\vartheta\, d\varphi$

3) Rotátor:

$$\hat H = \frac{\hat L_z^2}{2\Theta} = -\frac{\hbar^2}{2\Theta}\cdot\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}$$ ← Θ-t mérésekből határozzuk meg

($H = \frac{1}{2}\Theta\dot\varphi^2 = \frac{(\Theta\dot\varphi)^2}{2\Theta} = \frac{L_z^2}{2\Theta}$ klasszikusan)

$\hat H\Psi = E\Psi \rightarrow \Psi'' = -\underbrace{\frac{2E\Theta}{\hbar^2}}_{m^2}\Psi = -m^2\Psi$

nem meglepő, mert kommutálnak

$\Psi = A\cdot e^{im\varphi} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\cdot e^{im\varphi}$ (L_z^2 sfv.-e $= L_z$ sfv.-e)

$$E_{+,-} = \frac{\hbar^2 m^2}{2\Theta}$$

(2-szeresen elfajultak a sajátértékek, mert adott m-hez $e^{\pm im\varphi}$ is megoldás → + és − irányú forgatás is megengedett)

$L_z |lm\rangle = \hbar m |lm\rangle$

$$\langle L_x \rangle = \langle lm | L_x | lm \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle lm | [L_y, L_z] | lm \rangle =$$

$$= -\frac{i}{\hbar} \Big(\langle lm | L_y L_z | lm \rangle - \langle lm | L_z L_y | lm \rangle \Big) =$$

$$(Y_l^m, L_z L_y Y_l^m) = (L_z^+ Y_l^m, L_y Y_l^m) = L_z Y_l^m$$

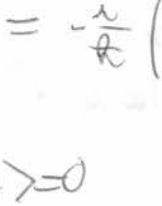
$$= -\frac{i}{\hbar} \Big(m\hbar \langle lm | L_y | lm \rangle - m\hbar \langle lm | L_y | lm \rangle \Big) = 0$$

$\langle L_y \rangle = 0$

$\langle L_z \rangle = m\hbar$

$\Downarrow$

A spin (imp. mom.) precesszálhat z körül → a z komponense állandó, x és y komponense <u>átlagban</u> viszont 0-t ad



4) $$\Delta = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2 \frac{\partial}{\partial r}\right) - \frac{1}{r^2 \hbar^2} L^2(\vartheta, \varphi)$$

s p d f
$l = 0, 1, 2, 3$

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(r) \quad \text{centrális erőtérben}$$

ha $l=0$ $\Delta = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2 \frac{\partial}{\partial r}\right)$ (másik rész nem játszik szerepet)

$\Psi(r,\vartheta,\varphi) = R(r) Y_l^m(\vartheta,\varphi)$ $\downarrow$ nincs φ, ϑ függés ha $l=0$

$\int_0^\infty dr\, r^2 |R|^2 = 1$ ← mert a gömbfv.-ek már normáltak $\left(\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} d\vartheta \sin\vartheta\, |Y_l^m(\varphi,\vartheta)|^2 = 1\right)$

7. óra

ZH javítás

4) $R(r)\frac{1}{r^2} z(x-y) = R(r) \sin\vartheta \cos\vartheta (\cos\varphi - \sin\varphi)$

$L_z = \frac{\partial}{\partial\varphi}$

$\langle L_z \rangle = \int \Psi^* L_z \cdot \Psi$ $L_z \cdot Y_2^1 = \hbar Y_2^1$ $\frac{e^{i\varphi} + e^{-i\varphi}}{2}$

Y_2^{-1}

$\frac{e^{i\varphi} - e^{-i\varphi}}{2i}$

1) $\binom{1}{0}$ nem sajátállapot!

$\Psi(t) = \sum_{k=1,2} \langle k \cdot |k\rangle \cdot e^{-\frac{i}{\hbar}E_k t}$

↑ 2 sajátáll. van

2) $\Psi'' = k^2 \Psi$ $\quad k$ valós

$$\Psi = Ae^{-kx} + Be^{kx} \qquad \cancel{Ae^{-ikx}}$$

5)

itt egzaktul $\quad k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar}}$

0

(1) $\Psi'' = -k^2 \Psi$

(2) $\Psi'' = -\kappa^2 \Psi \qquad \kappa = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar}}$

kötött állapot: $0 < E < V_0$!

Spinalgebra, spinösszeadás

1) Előző gyakorlaton levezettük (hasonlóan imp. mom.-hoz):

$$[S_i, S_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} S_k$$

$$[S^2, S_i] = 0$$

$|s\ m\rangle \leftarrow m$: aktuális spin vetülete

$\uparrow$

spin maximális

vetülete

(imp. mom.-nál

l volt)

$m = -s, -s+1, \ldots\ s$

$$S^2 |s\, m\rangle = \hbar^2 s(s+1)\, |s\, m\rangle$$

$$S_z |s\, m\rangle = \hbar m\, |s\, m\rangle$$

$$S_\pm = S_x \pm i S_y \qquad \boxed{S_\pm |s m\rangle = \hbar \sqrt{s(s+1) - m(m\pm 1)} \cdot |s\; m\pm 1\rangle}$$

2) pl. ha $\boxed{s = \frac{1}{2}}$ 2 s.á. lehet: $\chi_+ := |\tfrac{1}{2}\;\tfrac{1}{2}\rangle$

$m = \pm\frac{1}{2}$ $\chi_- := |\tfrac{1}{2}\; -\tfrac{1}{2}\rangle$

<u>SU(2) algebra</u>

Reprezentáció:

$$\left.\begin{array}{l} \chi_+ = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \\ \chi_- = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \end{array}\right\} \text{legyenek ezek a bázisvektorok}$$

$\Downarrow$

$\chi = a\chi_+ + b\chi_-$ ez fogja definiálni a mátrixot!

$$\left.\begin{array}{l} S_z \chi_+ = \frac{\hbar}{2}\chi_+ \\ S_z \chi_- = -\frac{\hbar}{2}\chi_- \end{array}\right\} \quad S_z = \frac{\hbar}{2}\underbrace{\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}}_{1\cdot\chi_+ + (-1)\cdot\chi_-} \rightarrow \text{Pauli-mátrix}$$

– S_x-et még szabadon megválaszthatom, DE az kikötés, hogy S_z sajátállapotaiban $\langle S_x\rangle = 0$

$$\Rightarrow S_x := \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$\Downarrow$

(S_x, S_y úgy is kiszámítható, hogy S_+-t és S_--t határozzuk meg (hatásuk a bázisvektorokra ismert) $\Rightarrow S_x, S_y$)!

S_x sajátvektorai: $\chi_+^{(x)} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix} \to \frac{\hbar}{2}$

$$\chi_-^{(x)} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\-1\end{pmatrix} \to -\frac{\hbar}{2}$$

- $\chi = a\chi_+ + b\underset{\substack{\uparrow \\ \text{áttérünk} \\ \text{másik bázisra}}}{\chi_-} = c\chi_+^{(x)} + d\chi_-^{(x)} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}c+d\\c-d\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}a\\b\end{pmatrix}$

$$c = \frac{a+b}{\sqrt{2}} \qquad d = \frac{a-b}{\sqrt{2}}$$

$$|c|^2 = \frac{|a+b|^2}{2} \qquad d^2 = \frac{|a-b|^2}{2}$$

S_z sajátállapotban $a=1,\ b=0$ vagy $a=0,\ b=1$

$\Rightarrow \frac{1}{2}$ valószínűséggel $\chi_-^{(x)}$ $\begin{pmatrix}1\\-1\end{pmatrix}$ állapotban vagyunk

$\frac{1}{2}$ — " — $\chi_+^{(x)}$ $\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix}$

$\Rightarrow \langle s_x \rangle = 0$ ✓

– S_y-t a kommutátorreláció már meghatározza:

$$[S_z, S_x] = i\hbar S_y$$

$$S_y = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0 & -i\\ i & 0\end{pmatrix}$$

$\lambda = 1$

$$\begin{pmatrix}-1 & -i\\ i & -1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}i\\-1\end{pmatrix} = \underline{0} \qquad \chi_+^{(y)} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}i\\-1\end{pmatrix}$$

$\lambda = -1$

$$\begin{pmatrix}1 & -i\\ i & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}i\\1\end{pmatrix} = \underline{0} \qquad \chi_-^{(y)} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}i\\1\end{pmatrix}$$

3) Spinösszeadás

a) $\mathcal{H}_1, \mathcal{H}_2$ Hilbert terek

$\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ direkt szorzat (tenzor szorzat):

Ha $\begin{matrix} \varphi_a, \varphi_b \in \mathcal{H}_1 \\ \varphi_c, \varphi_d \in \mathcal{H}_2 \end{matrix} \Rightarrow \begin{matrix} \varphi_a \otimes \varphi_c \in \mathcal{H} \\ \varphi_b \otimes \varphi_d \in \mathcal{H} \end{matrix}$ $(\varphi_a \cdot \varphi_b)$

Def: $\langle \varphi_a \otimes \varphi_c | \varphi_b \otimes \varphi_d \rangle_{\mathcal{H}} := \langle \varphi_a | \varphi_b \rangle_{\mathcal{H}_1} \cdot \langle \varphi_c | \varphi_d \rangle_{\mathcal{H}_2}$

b) Operátorok:

$\underline{S}_1 : \mathcal{H}_1 \to \mathcal{H}_1$

$\underline{S}_2 : \mathcal{H}_2 \to \mathcal{H}_2$

$\underline{S} = \underline{S}_1 + \underline{S}_2 = \underline{S}_1 \otimes 1 + 1 \otimes \underline{S}_2$

Hatás:

$$\underline{\underline{\overset{\text{teljes}}{S_z}\chi}} = S_z^t (\chi_1 \otimes \chi_2) = \left(S_z^{(1)} + S_z^{(2)}\right) \cdot (\chi_1 \otimes \chi_2) =$$

$$= \left(S_z^{(1)} \chi_1\right) \otimes \chi_2 + \chi_1 \otimes \left(S_z^{(2)} \chi_2\right) = (\hbar m_1 \chi_1) \otimes \chi_2 +$$

$$+ \chi_1 \otimes (\hbar m_2 \chi_2) = \underline{\underline{\hbar (m_1 + m_2) \cdot \chi_1 \otimes \chi_2}}$$

$\Rightarrow$ a spinvetületek összeadódnak

→ ez azt jelenti, hogy függetlenek a spinek!

(hasonlóan $H = H_1(q_1) + H_2(q_2)$)

4) Például:

$s_1 = \frac{1}{2}$

$s_2 = \frac{1}{2}$

m		
0	$\uparrow\downarrow$	$\downarrow\uparrow$
-1	$\downarrow\downarrow$	
1		$\uparrow\uparrow$

DE nem ezek lesznek a sajátállapotok!!!

$|\overset{s}{1}\ \overset{m}{1}\rangle = \uparrow\uparrow$

$\left.\begin{matrix} s_1\ m_1 \\ s_2\ m_2 \end{matrix}\right\}\ s\,m$

$|s_1 m_1\rangle|s_2 m_2\rangle \to |s\ m\rangle$

ahol $m = m_1 + m_2$

$|1\ -1\rangle = \downarrow\downarrow$

a maximális vetület mindkét esetben 1 kell legyen

$\left.\begin{matrix} \underline{|1\ 0\rangle} = \rightrightarrows \\ \underline{|0\ 0\rangle} = \uparrow\downarrow \end{matrix}\right\}$ $m=0$ -nál s már kétféle lehet: 1 és 0 (nagyobb nem lehetne, pl. 2, mert akkor több sajátállapotot kaptunk volna)

⇓

= áttértünk egy másik $\overset{\text{irreducibilis}}{\checkmark}$ ábrázolásra, új sajátállapotok: $|1\ 1\rangle$, $|1\ 0\rangle$, $|1\ -1\rangle$, $|0\ 0\rangle$

– $j\ m$

$|1\ 1\rangle = \uparrow\uparrow$ $\qquad S_- = S_-^{(1)} + S_-^{(2)}$

- régi repr.:

$$S_-|1\,1\rangle = \underbrace{\left(S_-^{(1)}\uparrow\right)}\uparrow + \uparrow\left(S_-^{(2)}\uparrow\right) = \hbar\downarrow\uparrow + \uparrow\hbar\downarrow =$$

$$\hbar\sqrt{\tfrac{1}{2}\left(\tfrac{1}{2}+1\right) - \tfrac{1}{2}\left(\tfrac{1}{2}-1\right)} = \hbar \qquad = \underline{\hbar\left(\downarrow\uparrow + \uparrow\downarrow\right)}$$

de ez még nem normált

- Másik reprezentációban (új)

$$\underline{S_-|1\,1\rangle = \hbar\sqrt{2}\,|1\,0\rangle}$$

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

az új S_--ra is igaz!

(mert: $S_\pm = S_\pm^{(1)} + S_\pm^{(2)} = S_x^{(1)} + S_x^{(2)} \pm i\left(S_y^{(1)} + S_y^{(2)}\right) = S_x \pm iS_y \Rightarrow \dots$)

$$\Rightarrow \boxed{|1\,0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\downarrow\uparrow + \uparrow\downarrow\right)}$$

($\downarrow\uparrow + \uparrow\downarrow \neq 2\uparrow\downarrow$ a nyilak nem felcserélhetők)

az új állapot a régi s. állapotok lineáriskombinációja!

– $S_-|1\,0\rangle = |1, -1\rangle \cdot \underset{\text{faktor}}{\dots}$

új:

- $S_-|1\,0\rangle = \hbar\sqrt{2}\,|1\,-1\rangle$

régi:

- $S_-|1\,0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\overbrace{\left(S_-^{(1)}\downarrow\right)\uparrow + \uparrow\left(S_-^{(2)}\downarrow\right)}^{0} + \left(S_-^{(1)}\uparrow\right)\downarrow + \downarrow\left(S_-^{(2)}\uparrow\right)\right) =$

$$= \hbar\frac{1}{\cancel{\sqrt{2}}}\,\overset{\sqrt{2}}{\cancel{2}}\cdot\downarrow\downarrow\cdot 1 = \sqrt{2}\hbar\downarrow\downarrow$$

$$\hbar\cdot\sqrt{2}\cdot\downarrow\downarrow = \hbar\sqrt{2}\,|1\,-1\rangle$$

$$\boxed{\downarrow\downarrow = |1\,-1\rangle}$$

régi $\qquad$ új

J_- -al több állapotot már nem kapok $\left(J_-|1 -1\rangle = 0 \right)$

$|0\,0\rangle$: ortogonális a többire!

$|0\,0\rangle = a \downarrow\uparrow + b \uparrow\downarrow$ (ezt tudom róla) , $a^2 + b^2 = 1$ és $a = -b$ $\Rightarrow a = \frac{1}{\sqrt{2}}$, $b = -\frac{1}{\sqrt{2}}$

$$\langle 1\,0|0\,0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\downarrow\uparrow + \uparrow\downarrow \right) \left(a \downarrow\uparrow + b \uparrow\downarrow \right) = \frac{1}{\sqrt{2}} (a+b) = 0$$

$$\Rightarrow a = \frac{1}{\sqrt{2}}, \quad b = -\frac{1}{\sqrt{2}}$$

(a többi állapotra is működik, de ha azokat írjuk fel, a és b-re nem jön ki semmi)

$$\boxed{|0\,0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\downarrow\uparrow - \uparrow\downarrow \right)}$$

Recept:

új reprezentációban: $j = j_1 + j_2, \ldots, |j_1 - j_2|$

$m = -j, -j+1, \ldots j$

1. Veszem a legmagasabb vetületű állapotot

$$|j\,j\rangle \xrightarrow{J_-} |j\,j-1\rangle \rightarrow \ldots \rightarrow |j\,-j\rangle$$

$\downarrow$ ortogonalitás $\longrightarrow$

$|j-1\,j-1\rangle \rightarrow \ldots$ (elvileg ez az összes olyan szorzatot tartalmazhatja, ahol az összvetület $j-1$)

$\downarrow$

$\vdots$

Clebsch-Gordon-együtthatók

$$|j\,m\rangle = \sum_{m = m_1 + m_2} C^{j_1, j_2, j}_{m_1, m_2, m} \cdot |j_1 m_1\rangle \cdot |j_2 m_2\rangle$$

(Csoportelmélet nyelvén:

csoportok direkt szorzata a csoportok direkt összegeinek lineárkombinációja)

$$|1\ 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(\uparrow\downarrow + \downarrow\uparrow)$$

$$C^{\frac12\ \frac12\ 1}_{\frac12\ -\frac12\ 0} = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

5) $s_1 = \frac{1}{2}$ $\quad s_2 = 1$

lehetséges állapotok

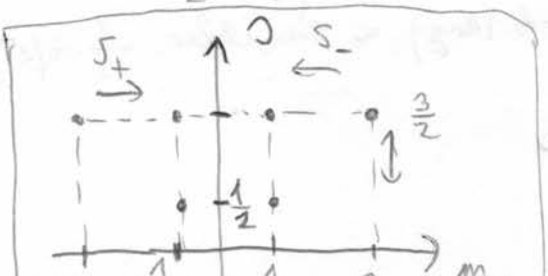
$|\frac32\ \frac32\rangle$ 1 db

$$|\tfrac32\ \tfrac12\rangle = \underbrace{C^{\frac12\ 1\ \frac32}_{-\frac12\ 1\ \frac12}}_{C_1} |\tfrac12\ -\tfrac12\rangle \cdot |1\ 1\rangle + C_2 |\tfrac12\ \tfrac12\rangle \cdot |1\ 0\rangle$$

c_1^2 és c_2^2 adja meg a valószínűséget, hogy ebben az állapotban melyik régi állapotokat mérjük

$|\frac32\ -\frac12\rangle$

$|\frac32\ -\frac32\rangle$



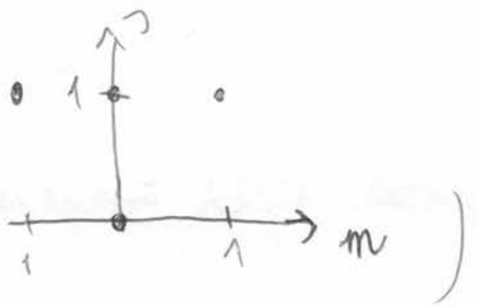
$|\frac12\ \frac12\rangle$

$|\frac12\ -\frac12\rangle$

súlydiagram (deutérium: mag 1 spinű, e^- $\frac12$ spinű)

↓

(ezt lehet sima részecskére is alk.: $|1\ 0\rangle$, $|0\ 0\rangle$ $|1\ -1\rangle$ $|1\ 1\rangle$



- $\left|\frac{3}{2}\ \frac{3}{2}\right\rangle = 1\ |1\,1\rangle\left|\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\right\rangle$

- $S_-\left|\frac{3}{2}\ \frac{3}{2}\right\rangle = \overbrace{\left(S_-^{(1)}|1\,1\rangle\right)\left|\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\right\rangle + |1\,1\rangle S_-^{(2)}\left|\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\right\rangle}^{\text{régi repr.}} =$

$$= \sqrt{2}\,\hbar\,|1\,0\rangle\left|\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\right\rangle + \hbar\,|1\,1\rangle\left|\frac{1}{2}\ -\frac{1}{2}\right\rangle$$

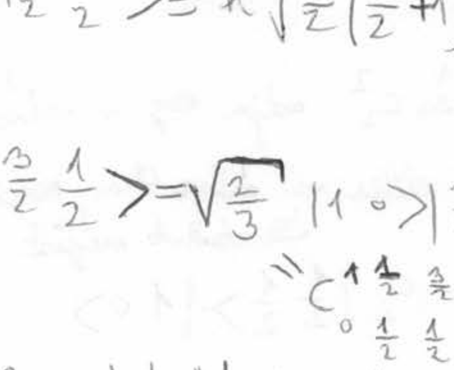
és:

$$S_-\left|\frac{3}{2}\ \frac{3}{2}\right\rangle = \hbar\sqrt{\frac{3}{2}\left(\frac{3}{2}+1\right)-\frac{3}{2}\,\frac{1}{2}}\ \left|\frac{3}{2}\ \frac{1}{2}\right\rangle = \hbar\sqrt{3}\ \left|\frac{3}{2}\ \frac{1}{2}\right\rangle$$

$$\left|\frac{3}{2}\ \frac{1}{2}\right\rangle = \underbrace{\sqrt{\frac{2}{3}}}_{=C^{1\ \frac{1}{2}\ \frac{3}{2}}_{0\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{2}}}\ |1\,0\rangle\left|\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\right\rangle + \sqrt{\frac{1}{3}}\ |1\,1\rangle\left|\frac{1}{2},\ -\frac{1}{2}\right\rangle$$

$\Rightarrow$ $\frac{2}{3}$ valószínűséggel mérek az egyikben 0-t (mag), a másikban $\frac{1}{2}$-t (e^-),
$\frac{1}{3}$ — " — 1-t (mag), a másikban $-\frac{1}{2}$-t (e^-)

ha a rendszerem a $\left|\frac{3}{2}\ \frac{1}{2}\right\rangle$ állapotban van



itt nem tudok ortogonalitást értelmezni

$$\left|\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\right\rangle = a\,|1\,0\rangle\left|\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\right\rangle + b\,|1\,1\rangle\left|\frac{1}{2}\ -\frac{1}{2}\right\rangle \xrightarrow{\text{skalárszorzom}} \left|\frac{3}{2}\ \frac{1}{2}\right\rangle\text{-el} \to 0$$

$$\Downarrow$$

$$a = \frac{1}{\sqrt{3}} \qquad b = -\sqrt{\frac{2}{3}}$$

8. óra

Perturbációszámítás

Tfh. a Hamilton-op. szeparálható kül. nagyságrendű tagokra (operátor nagyságát a norma ⇒ sajátértékek (most E) szabják meg)

$$H = H_0 + H' \qquad \langle \varphi | H' | \varphi \rangle \ll \langle \varphi | H_0 | \varphi \rangle$$

1) Nem degenerált eset: E_k, φ_k

0. rendű egyenlet sfv.-ei

a) λ^0: $H_0 \Psi_k^{(0)} = E_k^{(0)} \cdot \Psi_k^{(0)} \qquad \Psi_k^{(0)} = \varphi_k$ $\qquad \lambda^0$ hatvány szerint kiválogatva a tagokat

$$H = H_0 + \lambda H' \qquad \lambda \in (0,1) \qquad E_k^{(0)} = E_k$$

$$\Psi_k = \Psi_k^{(0)} + \lambda \Psi_k^{(1)} + \lambda^2 \Psi_k^{(2)}$$

$$E_k = E_k^{(0)} + \lambda E_k^{(1)} + \dots$$

→ λ hatványai képviselik a nagyságrendeket

$$\lambda^1: \quad H_0 \underline{\underline{\Psi_k^{(1)}}} + H' \Psi_k^{(0)} = E_k^{(0)} \underline{\underline{\Psi_k^{(1)}}} + \underline{\underline{E_k^{(1)}}} \Psi_k^{(0)}$$

$\underline{\underline{}}$ = ismeretlen

$\lambda^2: \; H_0 \Psi_k^{(2)} + H' \Psi_k^{(1)} = \ldots$ $\qquad$ $E_{0k} :=$ az eredeti H_0 sp. k. sajátértéke $\left(= E_k^{(0)}\right)$

$\vdots$

– Elsőrendű egyenlet megoldása:

• sorfejtés: $\Psi_k^{(1)} = \sum_l a_{kl} \varphi_l$ $\quad (\varphi_k, \varphi_l) = \delta_{kl}$

jelölés: $\uparrow$ 0. rendű egyenlet s.fv.-ei (elvileg bármilyen bázison kifejthetném a jmelléktv.-t, de így leegyszerűsödik az egyenlet)

$$\sum_l a_{kl} E_{0l} \varphi_l + H' \varphi_k = E_{0k} \sum_l a_{kl} \varphi_l + E_k^{(1)} \varphi_k \quad \Big/ \varphi_m^* \int dV$$

$$a_{km} E_{0m} + \langle \varphi_m | H' | \varphi_k \rangle = E_{0k} a_{km} + E_k^{(1)} \delta_{km}$$

$\uparrow$ nincs összegzés m-re!

• $m = k$ $\rightarrow$ energiakorrekció

$$\boxed{E_k^{(1)} = \langle \varphi_k | H' | \varphi_k \rangle} = H'_{kk}$$

(diagonális mátrixelemek a perturbálatlan bázison!)

• $m \neq k$ $\rightarrow$ sajátfv. korrekciója

$$a_{km} = \frac{H'_{mk}}{E_{0k} - E_{0m}}$$

elvileg ez a tag kéne, de $\downarrow$

$$\Rightarrow \quad \Psi_k^{(1)} = \sum_{m \neq k} \frac{H'_{mk}}{E_{0k} - E_{0m}} \cdot \varphi_m + \cancel{a_{kk} \cdot \varphi_k}$$

$\uparrow$

$\Psi_k^{(1)} + \alpha \varphi_k$ is kielégíti az elsőr. egyenletet

áll.: enélkül is kielégíti $\Psi_k^{(1)}$ az elsőrendű egyenletet

Miért van ez a szabadság:

$$\Psi_k = \varphi_k + \sum_{m \neq k} \frac{H'_{mk}}{E_{0k} - E_{0m}}$$

$\uparrow$

itt úgyis van φ_k, a fázist pedig szabadon

megválaszthatom (a végén úgyis le kell normálni a hullámf.-t)

- Másodrendű korrekció (energiában)

$$\boxed{E_k^{(2)} = \sum_{m \neq k} \frac{H'_{mk} H'_{km}}{E_{0k} - E_{0m}}}$$

b) Anharmonikus oszcillátor:

$$H = \underbrace{\frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} x^2}_{H_0} + \underbrace{\varepsilon_1 x^3 + \varepsilon_2 x^4}_{H'}$$

$$|n\rangle \quad E_{0n} = E_n^{(0)} = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2}\right)$$

$$E_n^{(1)} = \langle n | H' | n \rangle = \varepsilon_1 \underbrace{\langle n | x^3 | n \rangle}_{0} + \varepsilon_2 \langle n | x^4 | n \rangle$$

Mivel $x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \left(a + a^+\right)$ $\rightarrow$ az x^3-ben csak páratlan a, a^+ szerepel $\rightarrow$ nem tudok $(a^+ a)$-s tagokat behozni $\rightarrow$ $\langle n | x^3 | n \rangle = 0$

$$E_n^{(1)} = \varepsilon_2 \frac{3\hbar^2}{4m^2\omega^2} \left(2n^2 + 2n + 1\right)$$

$$E_n = E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \dots \qquad \lambda = 1$$

$$\frac{E_n^{(k+1)}}{E_n^{(k)}} \ll 1$$

$$n=0 \qquad \frac{E_n^{(1)}}{E_n^{(0)}} = \frac{3\hbar}{2m^2\omega^3}\cdot \varepsilon_2 \cdot \frac{2n^2+2n+1}{2n+1} \ll 1$$

$$\boxed{\varepsilon_2 \ll \frac{2m^2\omega^3}{3\hbar}}$$

Feltétele annak, hogy mikor használhatom a perturbáció-számítást (elsőrendű korrekcióból).

c)

$$H_0 = \begin{pmatrix} E_1 & 0 \\ 0 & E_2 \end{pmatrix} \qquad H' = \begin{pmatrix} 0 & V \\ V^* & 0 \end{pmatrix}$$

H'_{12}

H'_{21}

$E_1 : \varphi_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ mivel H' is önadjungált!

$E_2 : \varphi_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ ($\hat{H}$ része, és $\hat{H}_0$ is -||-)

$$E_1^{(1)} = \langle \varphi_1 | H' | \varphi_1 \rangle = H'_{11} = 0 \Rightarrow E_1^{\text{perturbált}} = E_1$$

$$H'_{22} = 0 = E_2^{(1)} \qquad E_2^{\text{pert.}} = E_2$$

(ezek pont az átlós tagok, mivel φ_1 és φ_2 bázison vagyunk)

normálás is kell

$$k=1: \quad \Psi_1 = \varphi_1 + \frac{H'_{21}}{E_1 - E_2}\varphi_2 = \begin{pmatrix} E_2 - E_1 \\ -V^* \end{pmatrix} \cdot \text{konst} \rightarrow \frac{1}{\sqrt{(E_2-E_1)^2 + |V|^2}} \cdot \begin{pmatrix} E_2 - E_1 \\ -V^* \end{pmatrix}$$

$$k=2:\ \Psi_2 = \varphi_2 + \frac{H_{22}'}{E_2-E_1}\cdot\varphi_1 = \begin{pmatrix} V \\ E_2-E_1 \end{pmatrix}$$

Időfejlődés:

$$\Psi = c_1\Psi_1 e^{-\frac{i}{\hbar}E_1 t} + c_2\Psi_2 e^{-\frac{i}{\hbar}E_2 t}$$

$$|c_1|^2+|c_2|^2=1 \quad + \text{ Kf (kezdőfelt.)}$$

2) Degenerált eset:

Ugyanaz az eljárás, DE:

a) Baj: $\Psi_k^{(1)} = \sum_{m\neq k} \frac{H'_{mk}}{E_{0k}-E_{0m}}$

$\uparrow$

különböző m, k-hoz is tartozhat (és tartozik is a degen. miatt) azonos $E_{0k}=E_{0m}$ $\to$ szingularitás

Nézzük azokat a k-kat, ahol degeneráció van (a perturbálatlan egyenletnél):

$$\Psi_k^{(1)} = \sum_l a_{kl}\varphi_l \qquad E_{0k}: \varphi_{k_1},\dots\varphi_{k_p}$$

(helyett)

$\to \Psi_{kl} = \sum_{r,s} a_{klrs}\varphi_{rs}$ $\to$ nem csak az energiaszintek szerint megy a Σ, hanem a degenerált -‖- különböző hullámfv-eit is végig felösszegezzük

Ha φ_l bázison vagyunk:

$$H'_{kl} = \langle \varphi_{ks} | H' | \varphi_{ls} \rangle : \ k\neq l \text{ -re } H'_{kl}=0 \text{ -t kapunk}$$

$\to$ ez általában nem igaz (offdiagonális elemek nem 0-k)

$\Rightarrow$ megoldás: váltsunk bázist!

$$\Psi_{kl}^{(0)} = \sum_r \alpha_{kr} \varphi_{rl}$$ α unitér (skalárszorzattartás miatt)

$\uparrow$ $\rightarrow$ H' diagonális ebben a bázisban

az új sajátfv-ek a

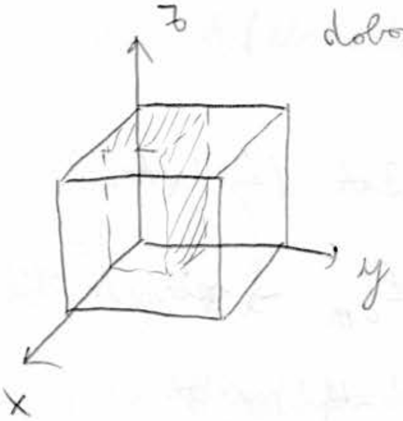
régiek lineárkombinációi lesznek úgy, hogy: $\leftarrow$ a hullámfv. 0. rendben is megváltozik !!!

(elfajult sfv.-ek)

$$E_{kl}^{(1)} = H'_{ll} = \langle \varphi_{kl} | H' | \varphi_{kl} \rangle$$

s.v. $\Psi_{kl}^{(0)}$ $\rightarrow$ kielégítik H' sajátértékegyenletét

s.é. $E_{kl}^{(1)}$

b.) 

dobozba zárt részecske:

$$E^{(0)}_{n_x, n_y, n_z} = (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2) \frac{\hbar^2}{2ma^2}$$

$$\Psi^{(0)}_{n_x, n_y, n_z} = \left(\frac{2}{a}\right)^{3/2} \sin\left(\frac{n_x \pi}{a} x\right) \sin\left(\frac{n_y \pi}{a} y\right) \sin\left(\frac{n_z \pi}{a} z\right)$$

perturb.: $H' = \begin{cases} V_0 & 0 < x < \frac{a}{2} \quad 0 < y < \frac{a}{2} \\ 0 & \text{egyébként} \end{cases}$

- Alapállapot:

$\Psi_{111}^{(0)}$ $E_{111}^{(0)} = \frac{3\hbar^2 \pi^2}{2ma^2}$ $\rightarrow$ nem degenerált!

$$\Rightarrow E_{111}^{(1)} = \langle \Psi_{111}^{(0)} | H' | \Psi_{111}^{(0)} \rangle = \left(\frac{2}{a}\right)^3 \underbrace{\int_0^{a/2} \sin^2\left(\frac{1 \cdot \pi}{a} x\right) dx}_{\frac{a}{4}} \underbrace{\int_0^{a/2} \sin^2\left(\frac{1 \cdot \pi}{a} y\right) dy}_{\frac{a}{4}} \cdot \underbrace{\int_0^{a} \sin^2\left(\frac{\pi}{a} z\right) dz}_{a/2} \cdot V_0$$

$$E_{111} = \frac{V_0}{4} + \frac{3\hbar^2\pi^2}{2ma^2}$$

- Második energiaszint:

$\varphi_a := \psi_{112}$ $\qquad E_{112} = \frac{3\hbar^2\pi^2}{ma^2} = E_{121} = E_1$

$\varphi_b := \psi_{121}$

$\varphi_c := \psi_{211}$ $\qquad H' = \begin{pmatrix} H'_{aa} & H'_{ab} & H'_{ac} \\ H'_{ab} & H'_{bb} & H'_{bc} \\ H'_{ac} & H'_{bc} & H'_{cc} \end{pmatrix}$

most valósak a sfv.-ek → konjugálás nem számít

$$H'_{aa} = \frac{V_0}{4} = H'_{bb} = H'_{cc}$$

$$\langle \psi_{112} | H' | \psi_{121} \rangle = H'_{ab} = \left(\frac{2}{a}\right)^3 \cdot V_0 \int_0^{a/2} \sin^2\left(\frac{\pi}{a}x\right) dx \int_0^{a/2} \sin\left(\frac{\pi}{a}y\right) \cdot \sin\left(\frac{2\pi}{a}y\right) dy \cdot \int_0^a \sin\left(\frac{\pi}{a}z\right) \sin\left(\frac{2\pi}{a}z\right) dz = 0$$

ortogonális fv.-ek ($[0,a]$-n értelmezett bázis)

msz.: $$\int_0^a 2\sin^2\left(\frac{\pi}{a}z\right) \cdot \cos\left(\frac{\pi}{a}z\right) dz = 2\left[\frac{\sin^3\left(\frac{\pi}{a}z\right)}{3\frac{\pi}{a}}\right]_0^a = 0$$

$\Rightarrow H'_{ab} = H'_{ac}$

$$H'_{bc} = \left(\frac{2}{a}\right)^3 V_0 \underbrace{\left(\int_0^{a/2} \sin\left(\frac{\pi}{a}x\right) \sin\left(\frac{2\pi}{a}x\right)\right)}_{=\frac{a}{3\pi}} \int_0^{a/2} \sin\left(\frac{\pi}{a}y\right) \sin\left(\frac{2\pi}{a}y\right) dy \underbrace{\int_0^a \sin^2\left(\frac{\pi}{a}z\right) dz}_{a/2}$$

$$\Rightarrow H'_{bc} = \left(\frac{2}{a}\right)^3 V_0 \cdot 4 \cdot \left(\frac{a}{3\pi}\right)^2 \cdot \frac{a}{2} = \frac{16 V_0}{9\pi^2} = \frac{V_0}{4} \cdot \frac{64}{9\pi^2} = \frac{V_0}{4} \cdot \left(\frac{8}{3\pi}\right)^2$$

$$H' = \frac{V_0}{4}\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & K \\ 0 & K & 1 \end{pmatrix} \qquad K = \left(\frac{8}{3\cdot\pi}\right)^2$$

$\downarrow$

diagonalizálás:

$$(1-\lambda)\left[(1-\lambda)^2 - K^2\right] = 0$$

$\lambda_1 = 1 \qquad \lambda_2 = 1+K \quad \lambda_3 = 1-K$

(az $\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$ alteréből látszik)

Mivel mindhárom sajátérték különböző, a degeneráció teljesen fel fog oldódni! (ha 2 egyenlő lenne, csak részben oldódna fel)

$$\left.\begin{aligned} \lambda_1 &= 1 & \varphi_a^{(0)} &= \varphi_a \\ \lambda_2 &= 1+K & \varphi_b^{(0)} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\varphi_b + \varphi_c) \\ \lambda_3 &= 1-K & \varphi_c^{(0)} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\varphi_b - \varphi_c) \end{aligned}\right\}$$

a 0. rendű korrekciók az ellfajult energiaszinthez tartozó sfv-ek lineárkombinációi lesznek!

9. óra

Időfüggetlen perturbációszámítás (példák)

1) Hidrogénatom finomszerkezete

- relativisztikus (de perturbatíven kezelhető) korrekciók:

→ spin-pálya k.h. ($\underline{S}\,\underline{L}$) (spin elvileg csak a Dirac-egyenletből jön ki)

→ relativisztikus korrekció ($p_\mu p^\mu = m^2$)

a) H-atom alapproblémája:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta - \frac{e_0^2}{r} \quad \text{ahol} \quad e_0^2 = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0} \quad (CGS)$$

- $E_n = -\frac{\varepsilon_0}{n^2}$, $\varepsilon_0 = \frac{m e_0^4}{2\hbar^2}$, $a_0 = \frac{\hbar^2}{m e_0^2}$

- $$\Psi_{nlm} = \underset{\substack{\uparrow \\ \text{norm. tény.}}}{N} \cdot Y_l^m(\vartheta,\varphi) \cdot L_{n-l-1}^{(2l+1)}\left(\frac{2r}{n a_0}\right) \cdot e^{-\frac{r}{n a_0}} \cdot \left(\frac{r}{n a_0}\right)^l$$

ahol L: Laguer-polinom, $L_n^{(\alpha)} = \frac{x^{-\alpha} \cdot e^x}{n!} \cdot \frac{d^n}{dx^n}\left(e^{-x} \cdot x^{n+\alpha}\right)$

= „durva szerkezet"

b) $E = \sqrt{p^2c^2 + m^2c^4} \Rightarrow T = E - \underset{\substack{\uparrow \\ \text{ez nem hoz} \\ \text{létre magától („nyugalmi energia")}}}{mc^2} = mc^2\left[\sqrt{1+\left(\frac{p}{mc}\right)^2} - 1\right] \overset{\frac{p}{mc} \ll 1}{=}$

$$= \frac{p^2}{2m} - \underbrace{\frac{p^4}{8m^3c^2}}_{H'}$$

$\uparrow \qquad \frac{p^2}{2m} \gg \frac{p^4}{8m^3c^2}$

$\sqrt{1+x^2} = 1 + \frac{1}{2}x^2 - \frac{1}{8}x^4$ $\qquad$ H' perturbatíve kezelhető, mert $\frac{1}{m^2c^2}$-es szorzót kap

$H = H_0 + H'$

- $$E_n^{(1)} = \langle \Psi_{nlm} | \underbrace{H'}_{\frac{p^4}{8m^3c^2}} | \Psi_{nlm} \rangle = \frac{-1}{8m^3c^2} \langle p^2 \Psi_{nlm} | p^2 \Psi_{nlm} \rangle$$

$$p^2 \Psi_{nlm} = 2m \cdot (E_n^{0} - V) \Psi_{nlm} \qquad \text{ahol } V = \frac{e_0^2}{r}$$

(ezt tudjuk az alapproblémából)

$$E_n^{(1)} = -\frac{1}{2mc^2} \langle \Psi_{nlm} | (E_n^{(0)} - V)^2 | \Psi_{nlm} \rangle = -\frac{1}{2mc^2} \Big[E_n^{(0)2} -$$

$$- 2E_n^{(0)} \cdot \langle \Psi_{nlm} | V | \Psi_{nlm} \rangle + e_0^4 \langle \Psi_{nlm} | \frac{1}{r^2} | \Psi_{nlm} \rangle \Big] =$$

$$= -\frac{1}{2mc^2} \Big[E_n^{(0)2} - 2E_n^{(0)} \cdot e_0^2 \langle \Psi_{nlm} | \frac{1}{r} | \Psi_{nlm} \rangle + e_0^4 \langle \Psi_{nlm} | \frac{1}{r^2} | \Psi_{nlm} \rangle \Big]$$

ezt általánosan kiszámítani nehéz, DE trükk:

- Feynmann - Hellman - tétel:

Áll.: $H(\lambda)$ $\qquad H(\lambda)\Psi(\lambda) = E(\lambda)\Psi(\lambda)$

$\uparrow$

Hamilton függ valami λ paramétertől

$$\frac{\partial E}{\partial \lambda} = \langle \Psi(\lambda) | \frac{\partial H}{\partial \lambda} | \Psi(\lambda) \rangle$$

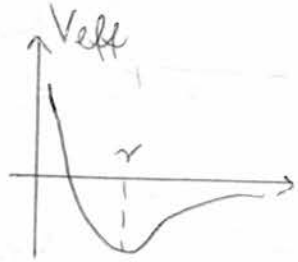
Biz.: $E = \langle \Psi | H | \Psi \rangle \rightarrow \frac{\partial E}{\partial \lambda} = \langle \Psi | \frac{\partial H}{\partial \lambda} | \Psi \rangle + \overbrace{\langle \frac{\partial \Psi}{\partial \lambda} | H | \Psi \rangle + \langle \Psi | H | \frac{\partial \Psi}{\partial \lambda} \rangle}^{*=0, \text{ mis}}$

$$* = E\left[\left(\frac{\partial\Psi}{\partial\lambda},\Psi\right)+\left(\Psi,\frac{\partial\Psi}{\partial\lambda}\right)\right] = E\,\underbrace{\frac{d}{d\lambda}\overbrace{(\Psi,\Psi)}^{\equiv 1 \text{ (nem függ } \lambda\text{-tól)}}}_{0 \text{ (normálás miatt)}}$$

$$\Rightarrow \quad \underline{\underline{\frac{\partial E}{\partial\lambda} = \left\langle \Psi \middle| \frac{\partial H}{\partial\lambda} \middle| \Psi \right\rangle}}$$

- alkalmazzuk a mi esetünkre:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dr^2} + \underbrace{\frac{\hbar^2}{2m}\frac{l(l+1)}{r^2}}_{} - \frac{e_0^2}{r}$$



„centrifugálgát" (nem zuhanhat be véges impulzusú részecske a középpontba)

- $\langle\frac{1}{r}\rangle$-re hajtunk:

$$\frac{\partial H}{\partial e_0} = -2e_0 \cdot \frac{1}{r}$$

$$\frac{\partial E_n^{(0)}}{\partial e_0} = -\frac{\cancel{2}me_0^{\cancel{3}\,2}}{\cancel{2}\hbar^2}\cdot\frac{1}{n^2} = -2\cancel{e_0}\left\langle \Psi_{nlm} \middle| \frac{1}{r} \middle| \Psi_{nlm}\right\rangle$$

$$\left\langle \Psi_{nlm} \middle| \frac{1}{r} \middle| \Psi_{nlm}\right\rangle = \frac{me_0^2}{2\hbar^2 n^2} = \frac{1}{n^2 a_0}\cdot\frac{1}{2}$$

- $\langle\frac{1}{r^2}\rangle = ?$

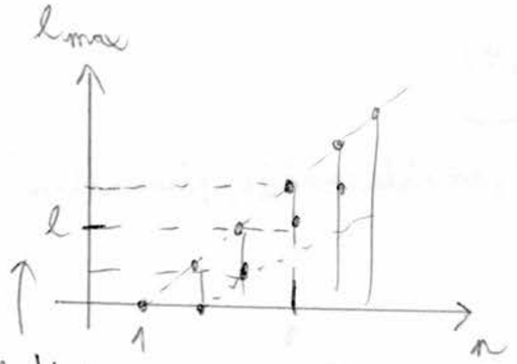
$E_n^{(0)}$ is függ l-től n-en keresztül!

$$= \underbrace{\left.\frac{\partial E_n^{(0)}}{\partial n}\right|}_{l}\cdot\frac{\partial n}{\partial l} \overset{!}{=} 1$$

$$\left\langle \Psi_{nlm} \middle| \frac{1}{r^2} \middle| \Psi_{nlm}\right\rangle = \frac{1}{2l+1}\cdot\frac{2m}{\hbar^2}\frac{\partial E_n^{(0)}}{\partial l} = \frac{2E_0}{n^3}$$

$$\Uparrow \qquad \frac{\partial E_n^{(0)}}{\partial l} = \left\langle \Psi_{nlm} \middle| \frac{\partial H}{\partial l} \middle| \Psi_{nlm}\right\rangle$$

$$\frac{\partial H}{\partial l} = \frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{2l+1}{r^2} \rightarrow \frac{1}{r^2} = \frac{2m}{\hbar^2}\frac{1}{2l+1}\frac{\partial H}{\partial l}$$



$l_{max} = n-1$

$n = l_{max}+1$

rögzített l-re n 1-el változik

$$E_n^{(0)} = -\frac{1}{n^2}E_0 \Rightarrow \frac{\partial E_n^{(0)}}{\partial n} = 2\frac{E_0}{n^3} = -E_n^{(0)}\cdot\frac{2}{n}$$

...

$$\Rightarrow \underline{\underline{E_n^{(1)} = -\frac{E_n^{(0)\,2}}{2mc^2}\left[\frac{4n}{l+\frac{1}{2}}-3\right]}}$$

l megjelent $\Rightarrow$ a degeneráció részlegesen feloldódik

<u>Kitérés:</u>

Miért használhattuk a 74. old tetején lévő formulát degenerált esetben?

$\downarrow$

Csak akkor használható ilyen esetben, ha H' diagonális! $\rightarrow$ ilyenkor a perturbálatlan sfv.-ek nem kombinálódnak (0. rendben), és $E^{(1)}_{nlm} = \langle\psi_{nlm}|H'|\psi_{nlm}\rangle$ lesz

<u>Biz.:</u> (H' diag. ψ_{nlm} bázison):

<u>Áll.:</u> Ha $[A, H'] = 0$, és $\underset{\mu}{\psi_a^{(0)}}, \underset{\nu}{\psi_b^{(0)}}$ $\mu \neq 0$ A sfv.-ei:

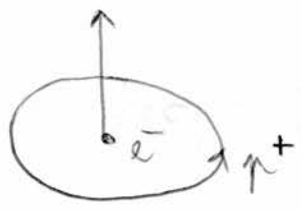
$$A\psi_a^{(0)} = \mu\psi_a^{(0)}$$
$$A\psi_b^{(0)} = \nu\psi_b^{(0)}$$

akkor $H'_{ab} = 0$ (Hf. belátni)

jó 0. rendű hullámfv.-ként (de csak most $\uparrow$ <u>mindkettővel</u> felcserél)

$\Rightarrow$ most $H' = \frac{p^4}{2m^3c^4}$ és $[H', L_z] = [L^2, H'] = 0 \Rightarrow \psi_{nlm}$ diagonalizálja H'-t

c) Spinpálya - kh.:



$\underline{B} \sim \underline{L}$

$\underline{\mu} \sim \underline{S}$

e^--hoz képest a p^+

$\underline{L}$-el „kering" → mágn. tér

$\Downarrow$

$H' = -\underline{\mu}\,\underline{B}$ ↗ „keringésből adódó köráram"

– $H' = \dfrac{e_0^2}{2m^2c^2r^3} \cdot \underbrace{\underline{S} \cdot \underline{L}}_{\underline{L}\cdot\underline{S}}$ (kommutálnak) $e_0^2 = \dfrac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}$

↗ nem inerciarendszer (precesszió)

$\mu_e = -\dfrac{e}{2m}\,\underline{S} \cdot g$

$g = 2,\ldots$ (giromágneses faktor) ↙ Lamb-shift (QED)

↑ Dirac-egyenletből jön csak ki

$\Downarrow$

$$E_n^{(1)} = \frac{e_0^2}{2m^2c^2} \cdot \left\langle \Psi_{nlm} \left| \frac{\underline{L}\cdot\underline{S}}{r^3} \right| \Psi_{nlm} \right\rangle$$

– $\underline{L}\cdot\underline{S}$ és $\frac{1}{r^3}$-öt külön kezelhetem ($\underline{L}\cdot\underline{S}$ → szögfüggő integrál, $\frac{1}{r^3}$ → radiális integrál)

- A spinpálya k.h. miatt nem lesz jó az L^2, L_z bázis

$\underline{L}, \underline{S} \rightarrow$

J^2, J_z, L^2, S^2 megmarad

L_z, S_z nem marad meg (k.h. miatt)

$\underline{J} = \underline{L} + \underline{S}$, $\underline{J}^2 = L^2 + S^2 + 2\,\underline{S}\,\underline{L}$ ↙ felcserélhetőek

$$\Rightarrow \underline{L}\cdot\underline{S} = \frac{1}{2}\left(J^2 - L^2 - S^2\right)$$

$$\langle \psi | \underline{L}\,\underline{S} | \psi \rangle = \frac{\hbar^2}{2}\left[j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)\right] \qquad \left(s = \frac{1}{2} \quad e^- \text{-ra}\right)$$

$$E_n^{(1)} = \frac{e^2}{8\pi\varepsilon_0\, m^2 c^2}\,\frac{\hbar^2}{2}\left(j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4}\right)\underbrace{\langle \psi | \frac{1}{r^3} | \psi \rangle}_{=\left\langle \frac{1}{r^3}\right\rangle}$$

- Kramer-összefüggés:

Áll.: $\langle r^s\rangle$, $\langle r^{s-1}\rangle$, $\langle r^{s-2}\rangle$ között létezik rekurzió:

$$\frac{s+1}{n^2}\langle r^s\rangle - (2s+1)\,a_0\langle r^{s-1}\rangle + \frac{s}{4}\left((2l+1)^2 - s^2\right)a_0^2\langle r^{s-2}\rangle = 0$$

Biz.: $$u'' = \left[\frac{l(l+1)}{r^2} - \overset{\text{potenciál}}{\frac{2}{a_0 r}} + \frac{1}{n^2 a_0^2}\right]\cdot u \qquad R(r) = \frac{u(r)}{r}$$

(radiális Schr.-egyenlet)

normálás: $\int_0^\infty u^2\,dr = 1$

$$\Uparrow$$

$$\int_0^\infty R^2(r)\,r^2\,dr = 1$$

$$\langle r^s\rangle = \int_0^\infty u\cdot r^s\cdot u\,dr$$

$\langle u | r^s | u\rangle$ (csak a radiális rész számít most)

$$\downarrow$$

$$\int_0^\infty u\,r^s\,u'' = \int_0^\infty u\,\frac{l(l+1)}{r^2}\,r^s\cdot u\,dr - \frac{2}{a_0}\int_0^\infty u\,r^{s-1}\,u\,dr + \int_0^\infty \frac{r^s}{n^2 a_0^2}\,u\,u\,dr =$$

$$= l(l+1)\langle r^{s-2}\rangle - \frac{2}{a_0}\langle r^{s-1}\rangle + \frac{1}{n^2 a_0^2}\langle r^s\rangle \qquad \text{és} \quad \int_0^\infty dr\,u^2 = 1$$

$$\downarrow$$

bal oldalt parc. int. -al továbbalakítva kijön a rekurzív összefüggés

$\Downarrow$

$$\left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle = \frac{1}{l(l+1/2)(l+1)\, n^3 a_0^3} \qquad \left(\left\langle \frac{1}{r^2} \right\rangle \text{ és } \left\langle \frac{1}{r} \right\rangle \text{-ből} \right)$$

(megj. ezekből már r összes momentuma kiadható!)

$\Downarrow$

$$E^{(1)}_{SL} = \frac{e_0^2}{2m^2c^2} \frac{\hbar^2}{2} \frac{j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4}}{l(l+1/2)(l+1)\, n^3 a_0^3} = \frac{{E^{(0)}_n}^2}{mc^2} \left[\frac{n(j+1)j - l(l+1) - \frac{3}{4}}{l(l+1)(l+\frac{1}{2})} \right]$$

(SO: spin-orbit)

$$E^{(1)}_{rel} = -\frac{{E_n^{(0)}}^2}{2mc^2} \left[\frac{4n}{l+1/2} - 3 \right]$$

$\Rightarrow$ a relativisztikus és SL korrekciók azonos nagyságrendűek:

$$\left. \begin{array}{l} E_1^{(0)} = 13{,}6 \text{ eV} \\ mc^2 \approx 512 \text{ keV} \end{array} \right\} \Rightarrow \mathcal{O}\left(\frac{{E_n^{(0)}}^2}{mc^2} \right) \approx 10^{-4}$$

teljes energia a Dirac-egyenletből sorfejtéssel:

$$\Rightarrow \boxed{E_{n,j} = -\frac{E_0}{n^2} \left[1 + \frac{\alpha^2}{n^2} \left(\frac{n}{j+\frac{1}{2}} - \frac{3}{4} \right) \right]}$$

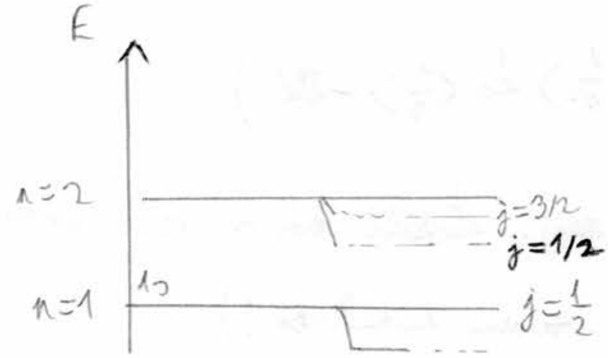
ahol $\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} \approx \frac{1}{137}$ finomszerkezeti állandó

$\left(E_0 = \frac{m e_0^4}{2\hbar^2} \right)$

$j = l+\frac{1}{2}, l-\frac{1}{2}$ (két spin összeadásából:

ha $l=0$:

$j=\frac{1}{2} \to j_z = \pm\frac{1}{2}$ $\Leftarrow$ $s_1+s_2,\ s_1+s_2-1, \dots |s_1-s_2|$)



$j_z = \pm\frac{1}{2}$

$n=2 \quad l=0,1 \Rightarrow j=\frac{3}{2}, \frac{1}{2}$

$n=3 \quad l=0,1,2 \Rightarrow j= \dots$

10. óra

Variációszámítás

(Ha a perturbációszámítás első közelítése ($\varepsilon \ll 1$) nem teljesül, magasabb rendekig el kéne menni. Ehelyett:)

a) Tétel:

Tetszőleges állapotban az energia várható értéke $\geq$ az alapállapoti energia:

$$E=\langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle \geq E_g \qquad \langle \psi | \psi \rangle = 0$$

E_g: alapállapoti energia

$E_n \geq E_g$

Biz.: $\psi = \sum c_n \psi_n$

$$\langle \psi | \psi \rangle = \sum_n |c_n|^2 = 1$$

$$\langle \psi | H\psi \rangle = \sum_n E_n |c_n|^2 \geq E_g \sum_n |c_n|^2 = E_g$$

Baj: azt nem tudjuk, milyen messze vagyunk az alapállapottól

1) 1D oszcillátor:

- Válasszunk olyan hullámfv.-t, ami közel van (felt. szerint) az alapállapothoz, pl. most:

$$\Psi(x) = \frac{A}{x^2+b^2}$$ (érdemes olyat venni, aminek nincs zérushelye)

msz.:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^2(x)\,dx = A^2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{(x^2+b^2)^2} = \qquad I_n = \int \frac{dx}{(x^2+b^2)^n}$$

$$= A^2 \cdot \frac{\pi}{2b^3} = 1 \rightarrow A = \sqrt{\frac{2b^3}{\pi}} \qquad I_{n+1} = \frac{1}{2nb^2}\,\frac{x}{(x^2+b^2)^n} + \frac{2n-1}{2nb^2}\cdot I_n$$

(rekurzió)

1D oszcillátorra:

- $$E(b) = \langle \Psi | H | \Psi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(x) \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{m\omega^2}{2}x^2\right)\Psi(x)\,dx \overset{\text{minimalizáló } b\text{-vel}}{=} \frac{1}{\sqrt{2}}\hbar\omega \geq \frac{1}{2}\hbar\omega$$

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{m\omega^2}{2}x^2$$

<u>b paraméter szerint először minimalizáljuk az energiát</u> $\frac{\partial E}{\partial b} = 0 \rightarrow b = \ldots$

ezt az minimalizáló b-t tesszük be a közelítő E-be

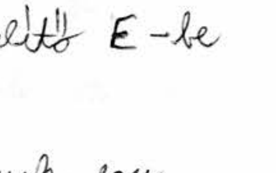
↓

így kapunk egy E_g-hez közeli energiát, és b-t Ψ-be visszaírva hullámfv.-t is

$$E(b) = \frac{\hbar^2}{4b^2m} + \frac{m\omega^2}{2}b^2$$

2) He alapállapota:

$$\hat{H} = \underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_1 - \frac{\hbar^2}{2m}\Delta_2 - \frac{Ze_0^2}{r_1} - \frac{Ze_0^2}{r_2}}_{\text{idáig 2 független H atom probléma}} + \underbrace{\frac{e_0^2}{|\underline{r}_1 - \underline{r}_2|}}_{\text{k.h.-i tag!}}$$



$(Z=2)$

Perturbációszámításban a perturbálatlan hullámfv. a 2 független H alapállapot szorzata lenne (ez nem mindig igaz a Slater-determináns miatt, de most kimondhatjuk, hogy a spin rész lesz antiszimmetrikus)

→ ez közel lesz a valódi (perturbált) hullámfv.-hez

$$\Psi = \Psi_{100}(r_1)\cdot\Psi_{100}(r_2) \qquad \Psi_{100} \sim e^{-\frac{r}{a_0}}\cdot\frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}}$$

a_0: Bohr-sugár

$Z=1$ -re

↓

ez legyen a közelítő fv.!

$$\Psi_{100} = \sqrt{\frac{Z^3}{\pi a_0^3}}\cdot e^{-\frac{Zr}{a_0}}$$

ált. Z-re

(Érdekesség: ezzel a módszerrel, ilyen kiinduló fv. mellett nagyon jó közelítést kapunk → ok: a kölcsönhatás az e^--k között kisebb, mint a mag és az e^- között)

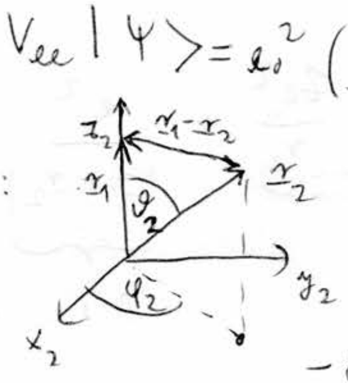
$$\Rightarrow \Psi = \frac{8}{\pi a_0^3}\cdot e^{-\frac{2}{a_0}(r_1+r_2)} \qquad V_{ee} := \frac{e_0^2}{|\underline{r}_1-\underline{r}_2|}$$

töltés miatt (H-atom esetén Z^2-től függ)

$$H\cdot\Psi = \left(8E_1 + V_{ee}\right)\Psi \qquad E_1 = -\frac{e_0^2}{a_0}\cdot\frac{1}{n^2}$$

$$\langle V_{ee}\rangle = \langle\Psi|V_{ee}|\Psi\rangle = e_0^2\left(\frac{8}{\pi a_0}\right)^2\int\frac{e^{-\frac{4(r_1+r_2)}{a_0}}}{|\underline{r}_1-\underline{r}_2|}\,d^3\underline{r}_1\,d^3\underline{r}_2$$

Áttérés polárra:



$$2\pi \int \frac{e^{-4(r_1+r_2)/a_0}}{\sqrt{r_1^2+r_2^2-2r_1r_2\cos\vartheta_2}}\, r_2^2 \sin\vartheta_2 \cdot dr_2\, d\vartheta_2 \cdot e_0^2 \left(\frac{8}{\pi a_0}\right)^2 =$$

$\uparrow$

ϑ_2 szerinti $\int$

$$= 2\pi \int dr_2 \cdot e^{-4\left(\frac{r_1+r_2}{a_0}\right)} \cdot r_2^2 \cdot \left[\frac{\sqrt{r_1^2+r_2^2-2r_1r_2\cos\vartheta_2}}{r_1 r_2}\right]_0^{\pi} e_0^2 \cdot \left(\frac{8}{\pi a_0}\right)^2 =$$

$$= 2\pi \int_0^{\infty} dr_2 \cdot r_2^2 \frac{1}{r_1 r_2}\left[(r_1+r_2) - |r_1 - r_2|\right] e^{-\frac{4(r_1+r_2)}{a_0}} \cdot e_0^2 \left(\frac{8}{\pi a_0}\right)^2 =$$

$$= 2\pi \left[\int_0^{r_1} \frac{2}{r_1} e^{-\frac{4(r_1+r_2)}{a_0}} \cdot r_2^2\, dr_2 + \int_{r_1}^{\infty} \frac{2}{r_2} e^{-(\ldots)} \cdot r_2^2\, dr_2\right] \cdot e_0^2 \left(\frac{8}{\pi a_0}\right)^2 =$$

$$= \frac{\pi a_0^3}{8 r_1}\left[1 - \left(1 + \frac{2r_1}{a_0}\right) \cdot e^{-4r_1/a_0}\right]$$

$$V_{ee} = \int_0^{\infty}\int_0^{2\pi}\int_0^{\pi} \frac{\pi a_0^3}{8 r_1}[\ldots] \cdot e^{-\frac{4r_1}{a_0}} r_1^2 \cdot \sin\vartheta_1\, d\vartheta_1\, d\varphi_1\, dr_1 = \frac{5e_0^2}{4a_0} \approx 34 \text{ eV}$$

$$E = 8E_1 + V_{ee} = -8 \cdot 13{,}6 \text{ eV} + 34 \text{ eV} = -75 \text{ eV} > E_g = -79 \text{ eV}$$

(mérések)

Eddig még nem variáltunk!

Milyen paramétert vezessünk be? Ha együtt van a 2 elektron, az árnyékolás miatt nem ugyanazt a magtöltést látják!

$\Rightarrow$ Vezessünk be egy paramétert (Z) a töltés helyére, ami elvileg

(az árnyékolás miatt) 1 és 2 közé fog esni.

$\Psi = C \cdot e^{-\frac{Z}{a_0}(r_1+r_2)}$

(a Hamilton-op. nem változik, csak szétszedjük így szét, hogy a $\langle\ \rangle$-eket könnyebben kiszámíthassuk)

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\Delta_1 + \Delta_2\right) - e_0^2 \cdot Z \cdot \left(\frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2}\right) + e_0^2\left(\frac{Z-2}{r_1} + \frac{Z-2}{r_2} + \frac{1}{|\underline{r}_1 - \underline{r}_2|}\right)$$

$$\langle H \rangle = 2Z^2 \cdot E_1 + \underbrace{2(Z-2)\, e_0^2 \langle \tfrac{1}{r_1} \rangle}_{-e_0^2 \langle \Psi | \frac{2}{r_1} | \Psi \rangle + e_0^2 \cdot Z \langle \Psi | \frac{1}{r_1} | \Psi \rangle} + V_{ee}$$

$$\langle \tfrac{1}{r_1} \rangle = Z/a_0$$

V_{ee}: hasonló integrál, mint az előbb, csak Z függő

$$\min_Z \langle H \rangle \rightarrow Z = 1{,}69$$

$$\underline{\underline{\langle H \rangle}} = \frac{5}{8} \frac{Z e_0^2}{a_0} \approx \underline{\underline{-77{,}6\ eV}}$$

LCAO: linear combination of atomic orbitals

H-szerű állapotok hullámfv-eiből indulnak ki, és variáció- vagy perturbációszámítással közelítenek

Megjegyzés: Lehet gerjesztett állapotok energiáit is becsülni ezzel a módszerrel, ha tudjuk az alacsonyabb energiájú sfv-eket, vagy legalábbis ismerünk rájuk merőleges fv. osztályt. Pl. első gerjesztett állapot:

$\Psi = \sum_{n=2} c_n \cdot \Psi_n$ tetszőleges, a Ψ_1 alapállapotra ortogonális fv.

$$E(\lambda) = \langle \Psi(\lambda) | H | \Psi(\lambda) \rangle = \sum_{n=2} E_n \cdot |c_n|^2 \geq E_2 \overbrace{\sum_{n=2} |c_n|^2}^{1\ (\Psi \text{ is normált})} = E_2 \Rightarrow E(\lambda) \geq E_2$$

Időfüggő perturbációszámítás

1) $H = H_0 + K(t)$ → időfüggő Hamilton → nincs stacionárius állapot!

$$\Psi = \sum_k c_k(t)\Psi_k(q)\cdot e^{-\frac{i}{\hbar}E_k t} \qquad \text{ahol } H_0\Psi_k = E_k\Psi_k$$

Tetszőleges állapotot sorbafejthetek $\sum_k |c_k|^2 = 1$

H_0 stacionárius állapotai szerint ∀ időpillanatban!

pontosabban az időben fejlődött hullámfv.-ek szerint

$$i\hbar\cdot\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \hat{H}\Psi$$

(koncepció: ⟶ t

kezdeti állapot $c_k(0)$ $\xrightarrow{\text{időbeli fejl.}}$ perturbáció → új eloszl. $c_k(t_1)$ $\xrightarrow{\text{időbeli fejl.}}$ perturb. → új eloszl. → ... $c_k(t_2)$)

c_k-k időben változnak → változik az állapotban való tartózkodás valószínűsége!

⇒ átmeneti valószínűség:

ha $\boxed{c_k(0) := \delta_{km}}$ (kezdetben m állapotban vagyunk 1 vsz.-el)

$$\Rightarrow w_{m\to n} = |c_n|^2$$

mivel most m-ben voltunk, ez csak m-nél számít $c_{k(m)}^{(0)}$ (kezdeti valósz. abban az állapotban)

– c_k-ra egy diffegyenletet kapunk, melyből: $c_k = c_{km} = \delta_{km} + c_{km}^{(1)} + c_{km}^{(2)} + \dots$

m állapotból indulva

· elsőrendű közelítés:

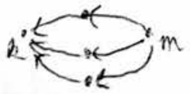
$$c_{km}^{(1)} = -\frac{i}{\hbar}\int_0^t \underbrace{\langle \Psi_k | K(t) | \Psi_m \rangle}_{K_{km}\ \text{(kölcsönhatási mátrixelem)}} \cdot e^{i\omega_{km}t'}\,dt' \qquad \text{ahol } \omega_{km} = \frac{E_k - E_m}{\hbar}$$

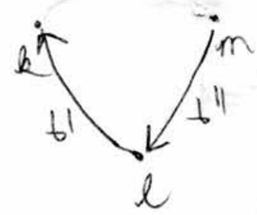
kezdetben m állapotban volt

elsőrendű közelítés értelmezése:

(0. rend: marad helyben)

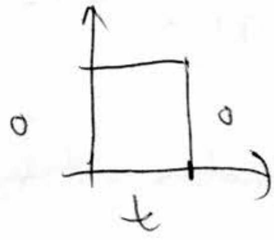
másodrendű közelítés:





$t'+t''=t$

$\Downarrow$



(t ideig tart a kölcsönhatás)

ehhez az kell, hogy $\frac{1}{\omega_{km}} \gg t$: nagyon rövid ideig tart a kölcsönhatás

(összegzés l-re)

$$c_{km}^{(2)} = -\frac{1}{\hbar^2}\int_0^t dt' \int_0^{t'} dt''\, K_{kl}(t')\, K_{lm}(t'')\, e^{i\omega_{lm}t''}\, e^{i\omega_{kl}t'}$$

($t''=t-t'$ -ként tekinthető)

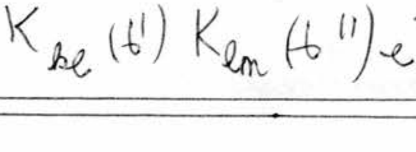
időrendezett szorzat:

$$T\left[e^{-\frac{i}{\hbar}H(t)}\right] \quad \text{időrendező operátor}$$

- Olyan esetre is ki lehet terjeszteni, amikor sokáig tart a k.h. (kis időlépésekben ugrálunk)

2) Töltött oszcillátor homogén elektromos térben:

$$\hat{H} = H_0 - \underset{\substack{\uparrow \\ \text{el. tér}}}{E(t)} \cdot e$$



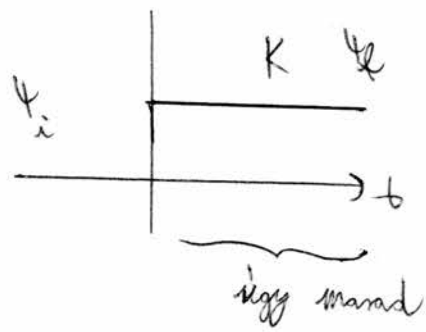
$$\left.\begin{aligned} c_k(0) &= \delta_{k0} \\ \psi_k &= N \cdot e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} \end{aligned}\right\} \text{alapállapotból indulunk}$$

$$c_2^{(1)} = N^2 E e \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{m\omega}{\hbar}x^2} \cdot \underbrace{\exp\left(-\left(\frac{t}{\tau}\right)^2\right)}_{\text{Gauss}} \cdot \underbrace{\lambda x}_{\psi_2\text{-vel}} \cdot \underbrace{\exp\left(i\,\frac{E_2-E_1}{\hbar}t\right)}_{\text{Fourier-trafó}} \, dt$$

van $\lambda \cdot x$ szorzó is

$$\to w_{1\to 2} \simeq \frac{e^2 E^2}{2m\hbar\omega}\, e^{-\left(\frac{\omega^2\tau^2}{2}\right)}$$

Mikor nem jó az időfüggő perturbációszámítás?



$\Rightarrow$ ilyenkor egyszerűen perturbációszámítás kell!

$t<0$-ban perturbálatlan hullámfv.

$t>0$-ban perturbált —||—

$$w_{i\to f} = \left|\langle \psi_f | K | \psi_i \rangle\right|^2$$

$\leftarrow$ átmeneti val. a sorfejtési együtthatókból adódik

(a perturbált hullámfv.-ben mekkora együtthatóval szerepel az átmenet végpontjaként vizsgált hullámfv.)

(Feynman - Hellman - tétel:

$$\frac{\partial E}{\partial \lambda} = \langle \psi_\lambda | \frac{\partial H_\lambda}{\partial \lambda} | \psi_\lambda \rangle$$

$\hbar$ és ω szerint deriválva a viriál tétel adódik!

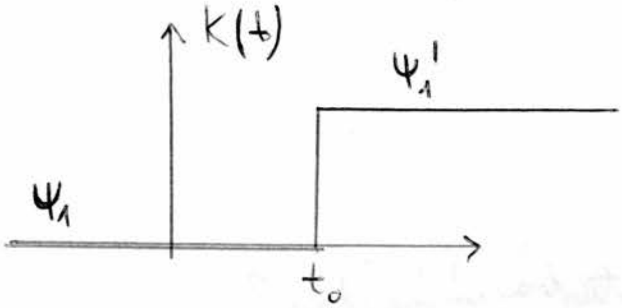
(a kinetikus és potenciális energiára átlagosan ugyanakkora energia jut))

11. óra

ZH: jövő kedd (2012. 12. 11.) $12^{00} - 14^{00}$ 6.85 teremben

(gyakorlat helyén és idejében)

1) Perturbációszámítás (folyt.):



elvileg ez is időfüggő perturbációszámítás, de időtől független módszerrel megoldható.

$$\Psi_f' = \sum_n c_n \Psi_n \qquad \Psi_f'(0) = \delta_{in}\Psi_i$$ (kezdetben i. állapotban vagyunk)

$$w_{fi} = |c_i|^2 = \left| \int \Psi_f^* \Psi_i \, dV \right|^2$$ (itt $f = f'$)

(a sorfejtési együtthatók adják az átmeneti valószínűséget)

2) Példa: $\beta^{\pm}$-bomlás:

$Z \to Z \pm 1$

$$\alpha_0 := \frac{Z}{a_0} \qquad \alpha_1 := \frac{Z\pm1}{2a_0}$$

$w_{1s \to 2s}$

$$\Psi_{100} = \sqrt{\frac{Z^3}{\pi a_0^3}} \cdot e^{-\frac{Zr}{a_0}}$$

közben Z megváltozik!

az e^- közben átugorhat másik pályára (mert megváltozik a pályák energiája)

$$\Psi_{200} = \frac{1}{4}\sqrt{\frac{(Z\pm1)^3}{2\pi a_0^3}} \left(2 - \underbrace{\frac{(Z\pm1)r}{a_0}}_{-2\alpha_1}\right) e^{-\frac{(Z\pm1)r}{2a_0}}$$

↑ most egzaktul tudjuk Ψ_f'-t

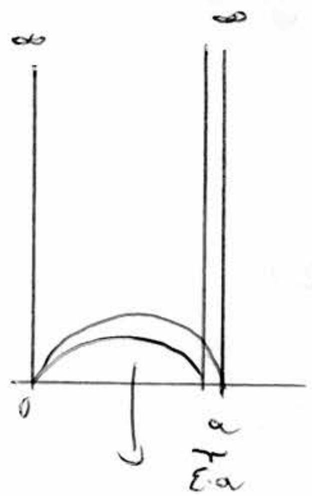
$$\sqrt{w_{12}} = \frac{1}{16\sqrt{2}} \frac{\sqrt{Z^3(Z\pm1)^3}}{a_0^3 \pi} \int_0^\infty e^{-(\alpha_0+\alpha_1) r} \cdot (1-\alpha_1 r)\, r^2\, dr =$$

msz.:

$$\boxed{\int_0^\infty e^{-\alpha x} x^n\, dx = \frac{n!}{\alpha^{n+1}}}$$

$$= \frac{1}{2\sqrt{2}} \frac{\sqrt{Z^3(Z\pm1)^3}}{a_0^3 \cdot \pi} \cdot \left[\frac{2}{(\alpha_0+\alpha_1)^3} - \frac{6\alpha_1}{(\alpha_0+\alpha_1)^4} \right] = \frac{2^{11} \cdot Z^3 (Z\pm1)^3}{(3Z\pm1)^8} \sim \frac{1}{Z^2}$$

3) (ZH példa lehet) potenciálgödör összenyomása:



deformálom a potenciálgödröt (összenyomom) → változik az alapállapot → az új alapállapotot a régi állapotokban sorba kell fejteni

$w_{1\to1}$ (ε rendig) = ?

⋮

Szórásszámítás

A Schrödinger-egyenlet:

$$(\Delta+k^2)\cdot\Psi(r)=\frac{2m}{\hbar^2}U(r)\Psi(r)=Q(\Psi,r)$$

($U=0 \to$ Helmholtz-egy. eldin.-ben
$U\neq 0 \to$ Poisson-egyenlet)

$$k=\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \quad \boxed{\text{rugalmas szórás} \to k=\text{áll}}$$

$(\Delta+k^2)\Psi(r)=\delta^{(3)}(\underline{r}) \to$ megoldása a Green-fv. $\Psi(\underline{r})=G(\underline{r})$

$$\Rightarrow \Psi(\underline{r})=\int G(\underline{r}-\underline{r}')\cdot Q(\underline{r}')\,d^3\underline{r}'$$

itt már hallgatólagosan feltételeztük, hogy a rendszer eltolásinvariáns

$$(\Delta+k^2)\Psi(\underline{r})=\int\underbrace{(\Delta+k^2)\,G(\underline{r}-\underline{r}')}_{\delta^{(3)}(\underline{r}-\underline{r}')}\Psi(\underline{r}')\,d^3\underline{r}'=\Psi(\underline{r})$$

$\to$ megkeressük a Green-fv.-t $\to$ kész is lennénk, ha a gerjesztés nem lenne Ψ függő! (l. később)

$$G(\underline{r})=\frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\int e^{i\underline{s}\underline{r}}\,g(\underline{s})\,d^3s \qquad \text{Fourier-transzformáció}$$

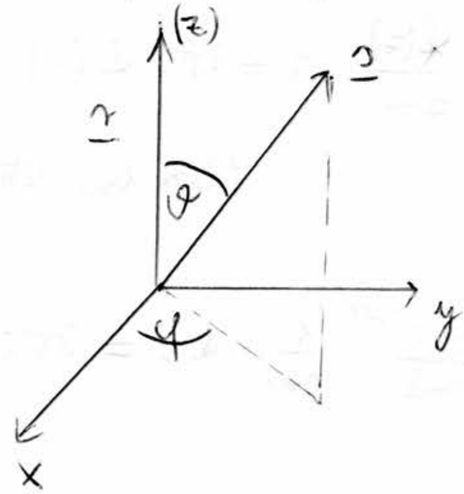
$$\frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\int(-s^2+k^2)\,e^{i\underline{s}\underline{r}}\,g(\underline{s})\,d^3s=\frac{1}{(2\pi)^3}\int e^{i\underline{s}\underline{r}}\,d^3s$$

Δ Fourier-tr.-ja

$\downarrow$ ez $\forall s$-re teljesül

$$g(\underline{q}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \frac{1}{k^2 - q^2}$$

általános polárka : $\underline{r}$ fix



$$G(\underline{r}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int \frac{e^{i\underline{q}\underline{r}}}{k^2 - q^2} \, d^3 q$$

$$\underline{r}\,\underline{q} = r q \cdot \cos\vartheta$$

$$d^3 q = \sin\vartheta \, q^2 \, d\vartheta \, d\varphi \, dq$$

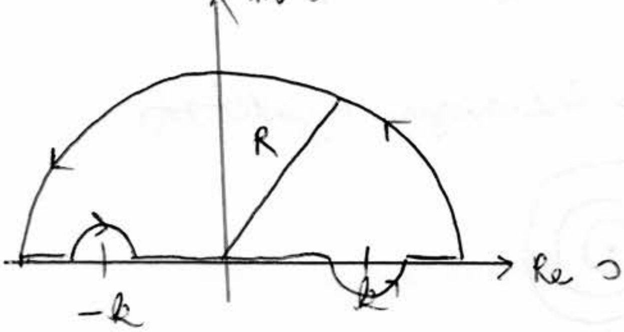
$$G(\underline{r}) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^\infty q^2 dq \int_0^\pi d\vartheta \sin\vartheta \, \frac{e^{irq\cos\vartheta}}{k^2 - q^2} = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^\infty \frac{q^2 \, dq}{k^2 - q^2} \underbrace{\int_0^\pi d\vartheta \sin\vartheta \, e^{irq\cos\vartheta}} =$$

$$\frac{2 \cancel{i} \sin(rq)}{\cancel{i} rq} = \frac{-e^{-irq} + e^{irq}}{irq} = \left[- \frac{e^{irq\cos\vartheta}}{irq} \right]_0^\pi$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^2} \frac{2}{r} \int_0^\infty \frac{q \sin(qr)}{k^2 - q^2} \, dq =$$

$$G(\underline{r}) = \frac{i}{8\pi^2 r} \left\{ \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} \frac{q \cdot e^{iqr}}{(q-k)(q+k)} \, dq}_{I_1} - \underbrace{\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{q \, e^{-iqr}}{(q-k)(q+k)} \, dq}_{I_2} \right\}$$

I_1:



felül zárjuk le, mert ilyenkor

$$e^{iqr} = e^{i \operatorname{Re} q \cdot r} \cdot e^{-\operatorname{Im} q \, r}$$

és $\operatorname{Im} q > 0 \Rightarrow$ lecseng

a kontúron eltűnik $\Leftarrow$ a ∞-ben

→ itt (stac. esetben) mindegy, hogyan kerülgetjük a pólusokat

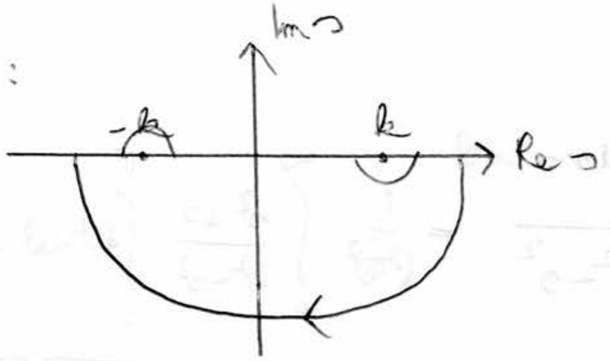
Msz:

$$\oint \frac{f(z)}{z-a}\, dz = 2\pi i\, f(a)$$

$$\left(\text{ált.ban: } 2\pi i \sum_i \operatorname{Res} f(z_i)\right)$$

$$I_1 = \oint \frac{s \cdot e^{isr}}{s-k} \cdot \frac{1}{s+k}\, ds = 2\pi i \cdot \left.\frac{s e^{isr}}{s+k}\right|_{s=k} = i\pi \cdot e^{ikr}$$

I_2 :



$$I_2 = 2\pi i \left.\frac{s e^{-isr}}{s-k}\right|_{s=-k} = -i\pi\, e^{ikr}$$

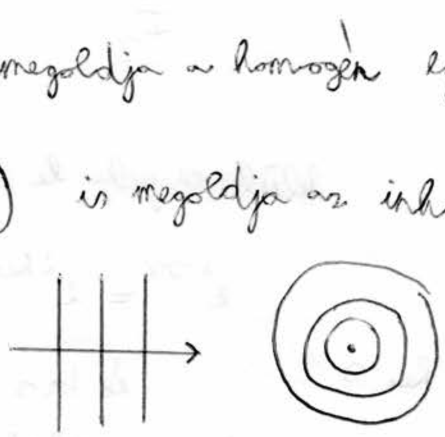
$$\Rightarrow \boxed{G(\underline{r}) = -\frac{e^{ikr}}{4\pi r}}$$

$$(\Delta + k^2)\, G(\underline{r}) = \delta^{(3)}(\underline{r})$$

kezdeti feltétel

DE ha $G_0(\underline{r})$ megoldja a homogén egyenletet, akkor

$G(\underline{r}) + G_0(\underline{r})$ is megoldja az inhomogén egyenletet



$$\boxed{\Psi(\underline{r})} = \int G(\underline{r}-\underline{r}')\underbrace{\frac{2m}{\hbar^2}u(\underline{r}')\Psi(\underline{r}')}_{Q(\underline{r}')}d^3\underline{r}' = \underset{\substack{\uparrow \\ G_0(\underline{r})\text{-ből}}}{\Psi_0(\underline{r})} - \frac{\cancel{2}m}{\hbar^2}\cdot\frac{1}{\cancel{4}_{2}\pi}\int\frac{e^{ik|\underline{r}-\underline{r}'|}}{|\underline{r}-\underline{r}'|}\cdot$$

$$\cdot u(\underline{r}')\Psi(\underline{r}')d^3\underline{r}' = \boxed{\Psi_0(\underline{r}) - \frac{m}{2\pi\hbar^2}\int\frac{e^{ik|\underline{r}-\underline{r}'|}}{|\underline{r}-\underline{r}'|}\cdot u(\underline{r}')\Psi(\underline{r}')d^3\underline{r}'}$$

„önkonzisztens" egyenlet Ψ-re

Nincsen kezdeti feltétel (stac. állapot) és peremfeltétel sem (szórásállapot), de asszimptotika van.

$\chi = \chi(b, v_0)$

b: impakt paraméter

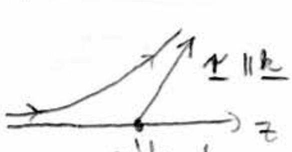
$$d\sigma = \frac{j_{out}(\chi)}{j_{in}}\underset{dF}{\sim}$$

felületelem $= r^2 d\Omega$

asszimptotika:

a szórócentrumról egy gömbhullám verődik vissza!

$$r\to\infty: \quad \Psi = A\left[e^{ikz} + f(\vartheta)\cdot\frac{e^{ikr}}{r}\right]$$



ebből lesz szórásprobléma!

bejövő hullám → a homogén egyenlet megoldása

ha ez teljesül, akkor:

$$j_{in} = \frac{i\hbar}{2m}\left(\Psi\cdot\frac{\partial\Psi^*}{\partial z} - \Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial z}\right) = \frac{\hbar k}{m} = \frac{p}{m}$$ (bejövő rész. fluxus)

$$j_{out} = \frac{i\hbar}{2m}\left(\Psi\frac{\partial\Psi^*}{\partial r} - \Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial r}\right) = \underbrace{\frac{\hbar k}{m}}_{p/m}\frac{1}{r^2}|f(\vartheta)|^2$$

$$d\sigma = \frac{d\sigma}{d\Omega}d\Omega = \frac{j_{out}\cdot dF^{=r^2 d\Omega}}{j_{in}} = |f(\vartheta)|^2 d\Omega$$

$f(\vartheta)$: szórási amplitúdó (hengerszimm.)

$f(\vartheta,\varphi)$: ált. ban függhet φ-től

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\vartheta)|^2$$

$$\sigma_{\text{totális}} = \int \frac{d\sigma}{d\Omega}\, d\Omega$$

$$\Psi(\underline{r}) = \Psi_0(\underline{r}) - \frac{m}{2\pi\hbar^2} \int \frac{e^{ik|\underline{r}-\underline{r}'|}}{|\underline{r}-\underline{r}'|} u(\underline{r}')\,\Psi(\underline{r}')\, d^3\underline{r}'$$

<u>(Első) Born-közelítés</u>

1) $V(\underline{r}')$ az origó „kis" körny.-ben különbözik 0-tól

$$|\underline{r}-\underline{r}'|^2 = |\underline{r}-\underline{r}_0|^2 = r^2 + r_0^2 - 2rr_0\cos\vartheta_0 \qquad \boxed{\underline{r}_0 \equiv \underline{r}'} \qquad |\underline{r}| = r \gg r_0$$

$$= r^2\left(1 + \left(\frac{r_0}{r}\right)^2 - \frac{2r_0}{r}\cos\vartheta_0\right) \qquad \frac{r_0}{r} \ll 1$$

$$|\underline{r}-\underline{r}_0| \approx r - \frac{\underline{r}\,\underline{r}_0}{r}$$

$$\frac{e^{ik|\underline{r}-\underline{r}_0|}}{|\underline{r}-\underline{r}_0|} \approx \frac{e^{ikr}\cdot e^{-i\underline{k}\,\underline{r}_0}}{|\underline{r}-\underline{r}_0| \approx r} \qquad \underline{k} = k\frac{\underline{r}}{r}$$

$$\Psi(\underline{r}) = \underbrace{\Psi_0(\underline{r})}_{A\cdot e^{ikz}} - \frac{m}{2\pi\hbar^2}\,\frac{e^{ikr}}{r} \int e^{-i\underline{k}\,\underline{r}_0}\, u(\underline{r}_0)\,\Psi(\underline{r}_0)\, d^3\underline{r}_0$$

→ így tényleg előáll egy bejövő síkhullám és egy kimenő gömbhullám összegeként a hullámfv.

$$f(\vartheta) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2 A}\int \ldots$$

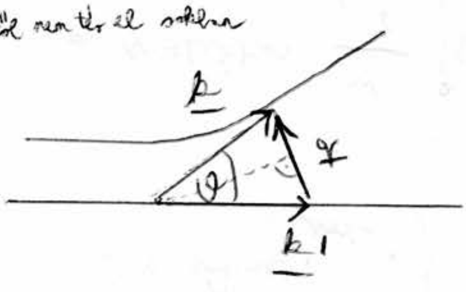
2) A pot. energia perturbációnak tekinthető a kin. energia mellett

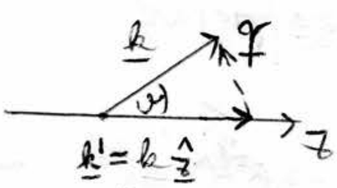
(vagyis a bejövő síkhullám csak kis szögben térül el

(egyszeri impulzusátadásként közelíthető a szórás, és csak radiális irányban adódik át imp.))

$$\Rightarrow \quad \Psi(\underline{r}_0) \underset{\uparrow}{=} \Psi_0(\underline{r}_0) = A e^{ikz_0} = A e^{i\underline{k}'\underline{r}_0}$$

az integrálon belül a kezdeti síkhullámmal számunk (első közelítés), mert kis különb. esetén a szórt hullámfv. ettől nem tér el sokban





$\underline{k}' = k\hat{\underline{z}}$

$\Downarrow$

$\underline{k}'\cdot\underline{r}_0 = k\cdot\underline{r}_0\cdot\frac{\hat{\underline{z}}}{z_0}$

$\underline{k}' = k\,\hat{\underline{z}}$ ← z irányú egységvektor

csak az irány változik, a nagyság nem!

$$\hbar(\underline{k} - \underline{k}') = \hbar\underline{q}$$

$$\boxed{q = 2k\sin\frac{\theta}{2}} = |\underline{k} - \underline{k}'|$$

$$\boxed{f(\theta) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int \underbrace{e^{i(\underline{k}'-\underline{k})\underline{r}_0}}_{e^{-i\underline{q}\underline{r}_0}} V(\underline{r}_0)\, d^3\underline{r}_0}$$

- Gömbszimmetrikus esetben: $V(\underline{r}_0) = V(r_0)$

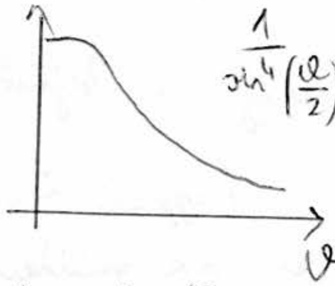
és $\underline{q}\underline{r}_0 = q r_0 \cos\theta_0$ $\qquad \theta_0 \neq \theta$ → vizsgált szórási szög

θ_0 ↓ integrálási változó

$$d^3\underline{r}_0 = r_0^2 \sin\theta_0\, d\theta_0\, d\varphi\, dr_0$$

$$\Rightarrow \boxed{f(\vartheta) = -\frac{2m}{\hbar^2 q}\int_0^\infty r\, V(r)\sin(qr)\,dr}$$

(Rutherford-szórás



)

Coulomb-potenciállal ez divergál!

Yukawa-potenciál:

$$V(r) = \beta \cdot \frac{e^{-\mu r}}{r}$$ → közelre eltér a Coulomb-pot.-tól (magerők közelítése)

$$f(\vartheta) = -\frac{2m}{\hbar^2 q}\,\beta\int_0^\infty \cancel{r}\,\frac{e^{-\mu r}}{\cancel{r}}\sin(qr)\,dr$$

$$\underbrace{\int_0^\infty e^{-\mu r}\sin(qr)\,dr}_{I} = \cancel{\frac{e^{-\mu r}}{-\mu}\sin(qr)\Big|_0^\infty} + q\int_0^\infty \frac{e^{-\mu r}}{\mu}\cos(qr)\,dr =$$

$$= \frac{q}{\mu}\,\underbrace{\frac{e^{-\mu r}}{-\mu}\cdot\cos(qr)\Big|_{r=0}^{\infty}}_{\frac{1}{\mu}} - \frac{q^2}{\mu^2}\int e^{-\mu r}\cdot\sin(qr)\,dr$$

$$\Rightarrow \left(1+\frac{q^2}{\mu^2}\right) I = \frac{q}{\mu^2}$$

$$I = \frac{\frac{q}{\mu^2}}{1+\frac{q^2}{\mu^2}} = \frac{q}{\mu^2+q^2}$$

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left(\frac{2m\beta}{\hbar^2}\right)^2 \frac{1}{(q^2+\mu^2)^2}$$

$$q = 2k\cdot\sin\frac{\vartheta}{2}$$

$k\to\infty$-re: $\frac{d\sigma}{d\Omega} \sim \frac{1}{\sin^4\frac{\vartheta}{2}}$ távolra
(μ elhagyható) visszaadja a Ruth.-szórást

Példa:

$$V(\underline{r}) = \begin{cases} V_0 & r < a \\ 0 & r \geq a \end{cases} \qquad aq \ll 1 \quad (\text{kis energiás szórás})$$

⋮

kérdés, hogy ilyenkor is használható-e a Born-közelítés

$$f(\vartheta) = -\frac{2mV_0}{\hbar^2 q} \cdot \frac{\sin aq - a q \cdot \cos(aq)}{q^2}$$

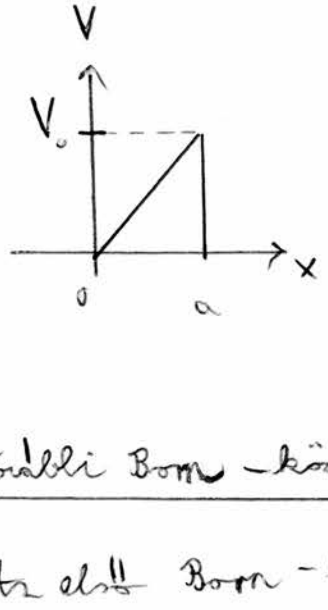
$$\left(\sigma_{tot} = \pi \cdot A^2 \quad aq \ll 1\text{-re} \right)$$

1D-s Born közelítés

$U(x)$

$$R = \left(\frac{m}{\hbar^2 k}\right)^2 \left| \int_{-\infty}^{\infty} e^{2ikx} V(x)\, dx \right|^2$$

1D-ben reflexiós együttható $(\vartheta = \pi)$
$\Downarrow$
$q = 2k$



→ ilyen példát is meg lehet oldani 1D-s Born-közelítéssel

(ZH-n lehet!)

További Born-közelítések

Az első Born-közelítésből adódó ψ-t visszatesszük az integrálba → iterációs eljárás