Kvantummechanika

Előadó: Csikor Ferenc

Gyak. vezetők: Márfy János, Trombitás Norbert

Honlap: theorphys.elte.hu/~csikor

Ajánlott irodalom:
- Landau – Lifschitz: Kvantummechanika
- Marx György: – II –
- Nagy Károly: – II –
- Gombás: Bevezetés a kvantummechanikába és alkalmazásaiba
- Geszti Tamás: Kvantummechanika

Vizsga: szóbeli

1. óra

Bevezetés

1. Történeti áttekintés:

→ Klasszikus fizika: mechanika, el. din., termodin., stat. fizika (részben), spec. rel. elm.

→ Kvantumfizika előzményei:

- Hőmérsékleti sugárzás spektráleloszlásának kérdése

$\Downarrow$

Max. Planck (1900): az elektromagn. tér energiája $h\nu$ kvantumokból áll

→ Fotoeffektus: Einstein: fotonok a kvantumok

→ Compton-effektus: foton impulzus $\frac{h\nu}{c}$

(foton szóródása „szabad" e^--on

ha a foton energiája nagy, a kötési energia elhanyagolható)

→ Egyéb részecskéknek van hullámtulajdonságuk is, pl. interferencia lehetséges (1927: Davisson - Germer - kísérlet: e^- szóródása fémlemezen)
hullámszámvektor: $\vec{k} = \frac{\vec{p}}{\hbar}$

→ Klassz. fizika nem elegendő az atomok és molekulák tulajdonságainak magyarázatára ← vonalas színkép, Franck - Hertz - kís.

Stern - Gerlach - kísérlet: imp. mom. kvantáltsága (spin)

Niels Bohr: használható, de nem konzisztens modellt alkotott a H-atom színképének magyarázatára

az e^- körpályán kering → → gyorsul → miért stabil? ↘ sugároz

---

1925: W. Heisenberg: mátrixmech.,
1926: E. Schrödinger: hullámmech.

Max Born, Paul Dirac, P. Jordan, Wolfgang Pauli

2) <u>Fizikai adatok (nagyságrendek)</u>

- $m_e = 0,9 \cdot 10^{-30}$ kg
- lineáris méret: $10^{-8} - 10^{-15}$ m
- ~~fontos~~ fontos!: mindig kell makroszkopikus mérőeszköz, amire a klassz. fizika érvényes

A mérés lényegesen befolyásolja a mérendő rendszer állapotát!

Hőmérsékleti sugárzás

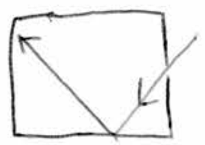
Adott hőm.-en (T) minden test sugároz és el is nyel sugárzást.

Az el.mágn. tér intenzitása és frekvenciaeloszlása függ az anyagi minőségtől és T-től.

Megvalósítható az abszolút fekete test (anyagi min.-től való függés kicselezhető).
minden beeső EM sugárzást elnyel

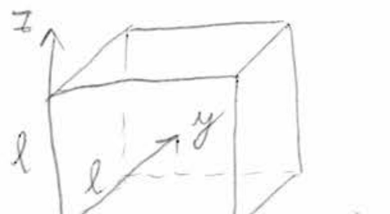
Kirchhoff-törv.: a fényelnyelő és kibocsájtó képesség arányos.

⇒ az abszolút fekete test sugárzása is univerzális.



zárt doboz jól közelíti az abszolút fekete testet

A kisugárzott fény ugyanolyan, mint ami az üregben van. Zárt üregen belüli sugárzást számoljuk.



vákuum:

$$\text{rot}\, H - \frac{1}{c}\frac{\partial E}{\partial t} = 0 \qquad \text{div}\, \underline{E} = 0$$

$$\text{rot}\, E + \frac{1}{c}\frac{\partial \underline{H}}{\partial t} = 0 \qquad \text{div}\, \underline{H} = 0$$

határfelt.:

ideális vezető: $E_t = 0$

$H_n = 0$

$$\Delta E - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2 E}{\partial t^2} = 0$$

$$\Delta H - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2 H}{\partial t^2} = 0$$

$E_x = 0$ $\quad y = 0,\ l$-ben $\qquad H_x = 0$, ha $x = 0$ v. l.

$z = 0,\ l$-ben

$E_y = 0 \quad \begin{cases} x = 0, l \\ z = 0, l \end{cases}$ $\qquad H_y = 0$ ha $y = 0$ v. l

$E_z = 0 \quad \begin{cases} x = 0, l \\ y = 0, l \end{cases}$ $\qquad H_z = 0$ ha $z = 0, l$

A hat. felt.-ből $\underbrace{q(\underline{n})_x}$

$$E_x = \sum_n q_{nx}(t) \cdot \cos\left(n_x \frac{\pi}{l} x\right) \cdot \sin\left(n_y \cdot \frac{\pi}{l} y\right) \cdot \sin\left(n_z \cdot \frac{\pi}{l} \cdot z\right)$$

$$E_y = \sum_n q_{ny}(t) \cdot \sin\left(n_x \frac{\pi}{l} \cdot x\right) \cdot \cos\left(n_y \frac{\pi}{l} y\right) \cdot \sin\left(n_z \cdot \frac{\pi}{l} z\right)$$

$$E_z = \sum_n q_{nz}(t) \cdot \sin\left(n_x \frac{\pi}{l} x\right) \cdot \sin\left(n_y \cdot \frac{\pi}{l} y\right) \cdot \cos\left(n_z \frac{\pi}{l} z\right)$$

$\underline{n} = \sqrt{n_x^2 + n_y^2 + n_z^2}$

$\uparrow$

terj. irány

$$\operatorname{div} E = 0 \Rightarrow \sum_n \left(n_x \cdot q_{nx} + n_y \cdot q_{ny} + n_z \cdot q_{nz}\right) \sin\left(n_x \cdot \frac{\pi}{l} x\right) \cdot \sin\left(n_y \frac{\pi}{l} y\right) \cdot \sin\left(n_z \cdot \frac{\pi}{l} z\right)$$

$\swarrow$

így lesz $\forall x, y, z$-re igaz, ha:

$$\underline{n} \cdot \underbrace{q_n(t)}_{\text{átírd: } q(\underline{n})} = 0$$

$$q_n = q_n^{(1)}(t) \cdot \underline{e}_n^{(1)} + q_n^{(2)}(t) \cdot \underline{e}_n^{(2)}$$ ($\underline{e}_n^{(r)}$ polarizációs vektorok) $\perp$-ek $\underline{n}$-re

A hull. egyenletből $\Rightarrow$ $r = 1, 2$-re:

olyan, mint egy lin. oszcill. $\leftarrow$ $\ddot{q}_n^{(r)} + q_n^{(r)} \cdot 4\pi^2 \nu_n^2 = 0$,

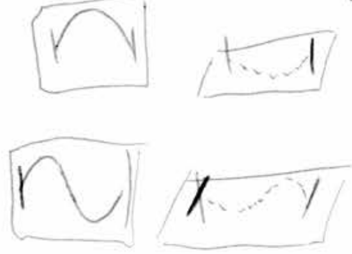
ahol $\underline{\underline{\nu_n = \frac{c}{2l}\sqrt{\underline{n}^2}}}$

$$\underline{\underline{q_n^{(r)} = A_n^{(r)} \cdot \cos\left(2\pi\nu_n t + \delta_n\right)}}$$

$A_n^{(r)}$, δ_n nem **fontos**, $|A_n^{(r)}|$-ről termodin. egyensúly ad információt

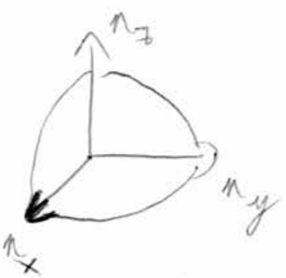
Módus jellemzői: $\underline{n}$, ν (adott hullámszámra 2 féle pol. létezik, és egyébként diszkrét sok $\underline{k}$ (módus))

$\underline{E} \Rightarrow \underline{H}$ meghatározható, ami jó!



- ν-nél kisebb fr.-jú módusok száma?

Igaz $\frac{c}{2l}\sqrt{n_x^2+n_y^2+n_z^2} \leq \nu$



$n_x, n_y, n_z \geq 0$

$\Downarrow$

nyolcadgömbben a rácspontok száma = keresett módusok száma

A rácspontok száma a nyolcadgömb térfogata

$$\frac{1}{8}\cdot\frac{4\pi}{3}\left(\frac{2l\nu}{c}\right)^3$$

$\uparrow$

$|\underline{n}| = \frac{2\nu\cdot l}{c}$

A módusok száma $\times 2$ ← polar. miatt

$$N(\nu) = \frac{8\pi}{3} V\cdot\frac{\nu^3}{c^3}$$

$\uparrow$

$= l^3$

$(\nu, \nu+d\nu)$ közti módusok száma

$$dN(\nu) = \frac{8\pi}{\cancel{3}}\cdot V\cdot\frac{\nu^2\, d\nu}{c^3}$$

Az energia-sűrűség:

$$u(\nu) = \frac{8\pi}{3} \frac{\nu^3}{c^3} \overline{\mathcal{E}(\nu)}$$ ← módus átlagos energiája

<u>2. óra</u>

1 módust jellemez $\underline{n}, r\ (=1,2)$:

$$u(\nu)\,d\nu = \frac{8\pi}{c^3} \overline{\mathcal{E}(\nu)} \cdot \nu^2 d\nu$$

↑

1 módus átlagenergiája (T-től függ)

$$U = \frac{1}{8\pi} \int \left(\underline{E}^2 + \underline{H}^2 \right) dV \qquad \text{(CGS-ben)}$$

$$\int \sin\left(n_x \frac{\pi}{l} x\right) \cdot \sin\left(n_x' \cdot \frac{\pi}{l} x\right) dx \propto \delta_{n_x n_x'}$$

$$U = \sum_{\underline{n}} \sum_{r} \frac{1}{8\pi} \underbrace{\left(\dot{q}_{\underline{n}}^{(r)^2} + 4\pi^2 \nu_n \, q_{\underline{n}}^{(r)^2} \right)}_{\text{lin. oszcillátor energiája}} \frac{1}{4\pi^2 \nu_n^2} \cdot \frac{V}{8}$$

⇓

$$\overline{\mathcal{E}(\nu)} = kT$$ ← ekvipartíció tétel (klassz. stat.)

↑

Boltzmann

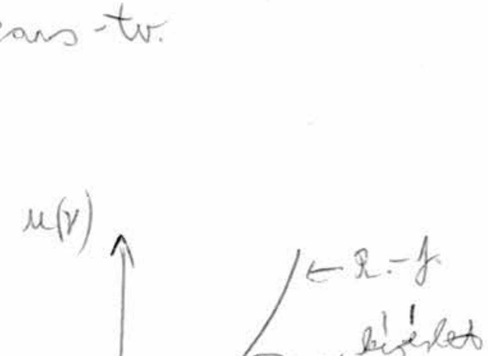
$$\boxed{u(\nu) = \frac{8\pi}{c^3} kT \cdot \nu^2}$$ Rayleigh-Jeans-tv.

A levezetés jó!

Az eredmény nem!

1.) Nem egyezik a kísérlettel

csak kis ν-kre



2.) $\int_0^\infty u(\nu)\,d\nu = \infty$

hőkapacitás:

3.) $\frac{du(\nu)}{dT} = \frac{8\pi}{c^3} k\nu^2 \to$ nem függ T-től

$\to$ Ellentmond a III. főtételnek

Max Planck:

Legyen az energia diszkrét $\varepsilon_k(\nu) = k\cdot\varepsilon_0(\nu)$ $k=0,1,2,\ldots$

$\varepsilon_0(\nu) = h\nu = 2\pi\hbar\nu = \hbar\omega$

$$\overline{\varepsilon(\nu)} = \sum_{k=0}^{\infty} \varepsilon_k \cdot \frac{e^{-\frac{\varepsilon}{k_B T}}}{\sum_{k'=0}^{\infty} e^{-\frac{\varepsilon_{k'}}{k_B T}}} =$$

Boltzmann-faktor

$\varepsilon_k = \varepsilon_0 \cdot k$

$\xi = -\frac{1}{k_B T}$

$$= \frac{\sum_{k'} \frac{d}{d\xi} e^{\xi\varepsilon_{k'}}}{\sum_{k'} e^{\xi\varepsilon_{k'}}} = \frac{\frac{\varepsilon_0\cdot e^{\xi\cdot\varepsilon_0}}{(1-e^{\xi\varepsilon_0})^{\cancel{2}}}}{\frac{1}{\cancel{1-e^{\xi\varepsilon_0}}}} = \varepsilon_0\cdot\frac{e^{\xi\cdot\varepsilon_0}}{1-e^{\xi\cdot\varepsilon_0}} = \frac{\varepsilon_0}{e^{\frac{\varepsilon_0}{k_B T}}-1}$$

$$\boxed{u(\nu) = \frac{8\pi\cdot h\nu}{c^3}\cdot\frac{\nu^2}{e^{\frac{h\nu}{k_B T}}-1}}$$

1.) jó!

$\sigma = 7{,}56\cdot 10^{-16}\,\frac{J}{K^4\cdot m^3}$

2.) $\int_0^\infty u(\nu)\,d\nu = \frac{8\pi^5\cdot k_B^4}{15 h^3\cdot c^3}\cdot T^4$ Stefan-Boltzmann-tv.

$\frac{h\nu}{k\cdot T}$-re integrálunk

3.) Jó $\left(C \overset{T}{\underset{O}{+}} O\right)$

4) ~~[illegible]~~ Wien-féle eltolódási -tv.

$$\nu_{max} \propto k_B T$$

Határozatlansági elv

Davisson-Germer-kís. szerint az elektronnak hullámtul.-a is van.

1,) Ha mindkét rés nyitva van ⇒ interferenciakép

2,) Ha egyiket zárjuk a klassz. mechanikának megfelelő helyen esik be.

Kis intenzitásra is igaz (1 elektronra!)

Klassz. mechanikától 1, a 2, képek összege → nem jó.

Nem értelmes az e^- pályájáról beszélni.

- Heisenberg-féle hat.lansági elv:

A kvantummech. a klasszikus mechanikától elvileg különbözik (pl: pálya fogalma nem létezik).

↳ Fontos a feltehető kérdések jellegének tisztázása szempontjából.

- Mi a kapcsolat a klasszikus és kvantummech. között?

Határesetben kv. mech → klassz. mech.

(De a fogalmak is mások: pl. nincs pálya → nincs sebesség)

($\underline{r}(t)$ nincs ⇒ $\dot{\underline{r}}(t)$ nincs)

Ha ilyen részecskék lennének, nem lehetne elméletet felállítani, mert méréskor a mérőeszköz makroszkópikus, tehát a klasszikus fizika érvényes rá.

pl. nagy tömegű test (kis pontossággal az elektron is jó lehet)

- Kérdésfeltevés:

a) Egy fizikai rendszeren ismételten elvégzett mérés eredményének jóslása, ha ~~ismert a~~ fiz. rendszeren korábban elvégzett mérések eredménye (~ kezdeti feltételek klassz. fizikában)

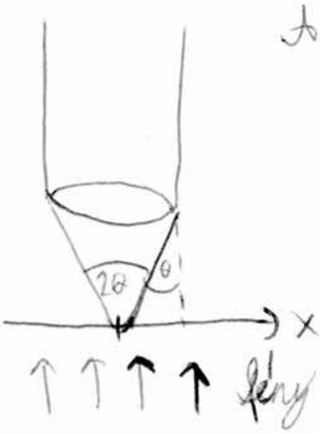
pl. nincs pálya (→ más a kezdeti feltétel, kevesebb információt ad meg) ⇒ a jóslat is, valószínűségi jóslatok lesznek ~~vannak~~.

b) Bizonyos fizikai mennyiségek értékei csak diszkrét számok lehetnek. Mik ezek?

- Mérés sajátságai: a mérés folyamán a rendszert a mérőeszköz megzavarja, elvileg sem küszöbölhető ki (a hiba elvileg sem lehet 0).

A mérés folyamán a mikrorendszer állapota ugrásszerűen megváltozik, ezt a kvantummech. nem írja le.

- pl. Heisenberg-féle mikroszkóp kís.:



A felbontóképesség $\Delta x \geq \frac{\lambda}{\sin\theta}$

Δx csökkenthető, de az e^- impulzusa bizonytalanabb lesz.

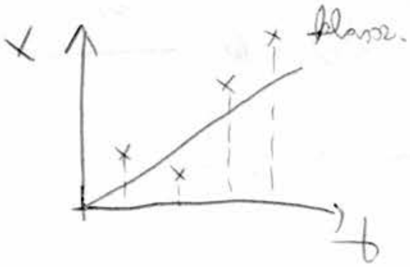
A szórt fotonról csak azt ~~tudj~~ tudjuk, hogy bejutott a mikroszkópba.

$|p_\gamma| = \frac{h}{\lambda}$ $\quad$ $|p_{\gamma_x}| \le \frac{h}{\lambda} \cdot \sin\theta$ ⇒ ugyanekkora az e^- imp. $|_x$ komp.-e (p_x)

$$\Delta p_x = \frac{h}{\lambda} \sin\theta \, ;$$

$$\underbrace{\Delta x \ge \frac{\lambda}{\sin\theta}}_{\text{felbontás}} \Rightarrow \underline{\underline{\Delta x \, \Delta p_x \ge h}}$$

• Koordináta mérés:



Rögzített Δt időközökben mérjük x-et. Nem kapunk sima görbét. Minél pontosabban mérünk, annál nagyobb az ugrálás. Sima görbe kis pontosságnál jön ki.

~~Adott~~ pontosságnál Δt-t csökkentjük, a pontok közelebb kerülnek, de $\Delta t \to 0$ nem ad sima görbét. Nem lehet így $\underline{v}$-t definiálni.

Impulzus mérhető, így ebből $\underline{v}$ is van.

⇒ Kvantummech.-ban a koord. és imp. egyidejűleg nem jól meghatározott, az állapot leírása nem olyan részletes, mint a klasszikus fizikában.

Egyszerre csak az egyiket jó az állapot jellemzésére használni.
Megmondható pl., hogy adott x érték mérésének mi a valószínűsége.

— Bonyolultabb rendszernél hogyan lehet megadni az állapotot?
Meg kell keresni azokat a fizikai mennyiségeket, amik egyszerre (egyidejűleg) pontosan mérhetők, ezek ~~(rögzítése)~~ megadása rögzíti az állapotot.

pl. elektronnál x, y, z
vagy p_x, p_y, p_z
vagy E, L^2, L_z (L: impulzusmomentum)

Adott impulzusú részecske hullámfv-e (szabad részecske)

Az állapotot a hullámfv. írja le 1 részecskére. Ez egy komplex értékű fv., egyértékű folytonos, diff-ható fv-e, $\underline{r}$-nek és t-től is függ.
→ t függést leíró egyenlet: időfüggő Sch. egy. (l. később)
Szabad részecskét jellemez: $p, m, E = \frac{p^2}{2m}$ (a hely nem!)
A Davisson-Germer-kísérlet miatt: $\lambda = \frac{2\pi}{k} = \frac{2\pi\hbar}{p}$
Foton analógiával: $\Psi(\underline{r}, t) = A \cdot e^{i(\underline{k}\underline{r} - \omega t)}$ $\omega = \frac{E}{\hbar} = \frac{p^2}{2m\hbar}$

A hullám fázisseb.: $v_f = \frac{\omega}{k} = \frac{E}{p} = \frac{p}{2m} \neq$ a klassz. seb.

Szuperpozíció elve, hullámcsomag

1, Ha Ψ_1 és Ψ_2 lehetséges hullámfv. $\Rightarrow \Psi = a_1 \Psi_1 + a_2 \Psi_2$ is lehetséges

2.) Ψ és $(a \cdot \Psi)$ ugyanazt az állapotot jelenti

Ha $\Psi_1 = e^{i(k_1 x - \omega_1 t)}$

$\Psi_2 = e^{i(k_2 x - \omega_2 t)}$

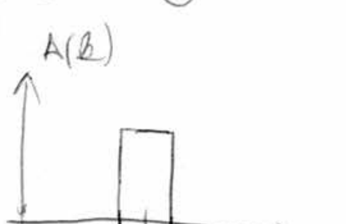
$\Psi = a_1 \Psi_1 + a_2 \Psi_2$ $\qquad \frac{|a_1|^2}{|a_1|^2 + |a_2|^2}$ a val.-e, hogy p_1-et mérünk!

3. óra

- z irányú síkhullámok folytonos szuperpozíciója:

$$\Psi(z,t) = \int_{k_0 - \Delta k}^{k_0 + \Delta k} A(k)\, e^{i(kz - \omega t)}\, dk = (*)$$

$k = \frac{p}{\hbar}$, $\omega = \frac{p^2}{2m\hbar}$, legyen:



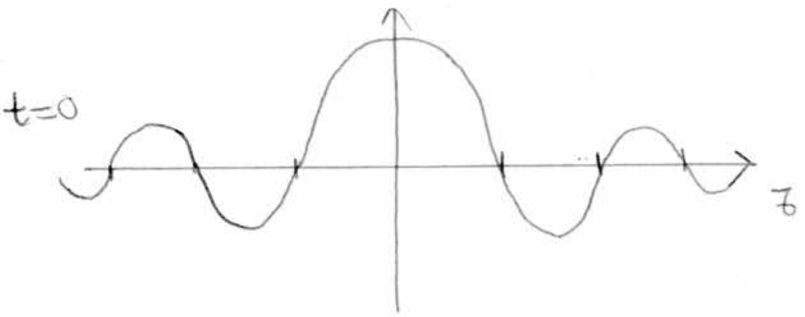
$$\omega(k) = \underset{\omega(k_0)}{\omega_0} + \left.\frac{d\omega}{dk}\right|_{k_0} \cdot (k - k_0) + \ldots$$

$$(*) = A(k_0) \cdot e^{i(k_0 z - \omega_0 t)} \cdot \int e^{i\left(z - \left.\frac{d\omega}{dk}\right|_{\omega_0} t\right)\cdot(k - k_0)}\, dk =$$

$$= A(k_0) \cdot e^{i(k_0 z - \omega_0 t)} \frac{e^{i\left(z - \left.\frac{d\omega}{dk}\right|_{k_0} t\right)\Delta k} - e^{-i\left(z - \left.\frac{d\omega}{dk}\right|_{k_0} t\right)\cdot \Delta k}}{z - \left.\frac{d\omega}{dk}\right|_{k_0} t} =$$

$$= 2 \cdot A(k_0) \cdot \underbrace{\frac{\sin\left[\left(z - \frac{d\omega}{dk}\Big|_{\omega_0} t\right)\cdot \Delta k\right]}{z - \frac{d\omega}{dk}\Big|_{\omega_0} \cdot t}}_{z\text{-ben lassan változó amplitúdó}} \cdot \underbrace{e^{i(k_0 z - \omega_0 t)}}_{\text{maga a hullám}}$$

$$z_n = \frac{\pi}{\Delta k} \cdot n$$



- A hullám kiterjedése:

$$\Delta z = 2 z_1$$

$$\boxed{\Delta z \cdot \Delta p = 2\pi\hbar}$$

- $v_{cs} = \frac{d\omega}{dk}\Big|_{k_0} = \frac{\hbar k}{m} = \frac{p}{m}$

- időfüggés: általában a térben szétfolyik a hullámcsomag

– Lokalizált részecske (ahol $\Delta x_i \Delta p_i = \frac{\hbar}{2}$):

$$t=0 \qquad \Psi(\underline{r}) = \frac{1}{\left(a\cdot\sqrt{\pi}\right)^{3/2}}\, e^{-\frac{r^2}{2a^2}}$$

a kvantummechanika szerint ez:

$$\Psi(\underline{r}, t) = \frac{1}{\left[\sqrt{\pi}\cdot\left(a + i t \frac{\hbar}{m a}\right)\right]^{3/2}} \cdot e^{-\frac{r^2}{2\left(a^2 + i \frac{\hbar}{m} t\right)}}$$

A hullámfv. valószínűségi értelmezése

(elektrodinamikában térerősség valós és bármilyen értéket felvehet

$\updownarrow$

kvantummechanikában hullámfv. komplex és ált. ban diszkrét értékeket vehet fel)

- A Davisson–Germer-kísérlet interferenciáját a szuperpozíció elve alapján úgy magyarázhatjuk, hogy a Ψ hullámfv. abszolútérték négyzete adja meg az eloszlást.

De mindig csak egész (sosem fél v. 1/4 stb.) elektront detektálunk. Hogy érthető ez?

(A mérést magát a kv. mechanika nem írja le → ha detektáljuk az e^--t, azt jelenti, éppen akkor ott volt, de nem tudjuk, előtte és utána milyen pályát jár be)

- A megoldás (Max Born → koppenhágai értelmezés)

• $|\Psi(x,y,z,t)|^2 dV \sim$ az e^- megtalálási valószínűségével az $\underline{r}$ helyen t időben. ($|\Psi(\underline{r},t)|^2$ megtalálási val. sűrűség)

• több rész. esetén:

$$|\Psi(\underbrace{x_1, y_1, z_1, x_2, y_2, z_2, \ldots z_n}_{q}, t)|^2 dx_1 dy_1 dz_1 \ldots dz_n \sim \text{a megtalálási val.-gel}$$

$$\equiv |\Psi(q,t)|^2 dq$$

A szuperpozíció elve miatt kiköthető: $\boxed{\int |\Psi(q,t)|^2 dq = 1}$ normálási feltétel

(ha nem teljesül, a hullámfv.-t leoszthatjuk az integrál gyökével)

Ha $\int |\Psi(q,t)|^2 \, dq = \infty$ nem normálható

$$\frac{|\Psi(q_1,t)|^2}{|\Psi(q_2,t)|^2}$$ adja a megtal. valószínűségek arányát.

Normálási feltétel síkhullámra:

$$\Psi = A \cdot e^{\frac{i}{\hbar}(\underline{p}\underline{r} - Et)}$$

nem normálható, mivel $|\Psi|^2 = |A|^2$

Dobozba zárt elektron

(Formális trükk a nem normálható állapotok kezelésére.)

- Vegyünk egy L oldalú kockát $L \gg 10^{-8}$ m ($\frac{h}{mc}$: Compton-hullámhossz), a belsejében a határ nem sokat számít.
- Periodikus határfeltételt veszünk (periodikus fv-t veszünk)

$$\Psi(x,y,z) = \Psi(x+L,y,z) = \Psi(x,y+L,z) = \Psi(x,y,z+L)$$

$t=0$, síkhullámok:

$$\Psi_{\underline{k}}(\underline{r}) = V^{-\frac{1}{2}} \cdot e^{i\underline{k}\underline{r}}, \quad k_i = \frac{2\pi}{L} n_i$$ n_i egész (határfelt. miatt)

$$\int_V \Psi^*_{\underline{k}'}(\underline{r}) \cdot \Psi_{\underline{k}}(\underline{r}) \, d\underline{r} = \delta_{\underline{k}'\underline{k}}$$ (könnyen belátható)

$\Psi_{\underline{k}}(\underline{r})$ fv.-ek teljes rendszert alkotnak, azaz:

$$\Psi(\underline{r}) = \sum_{\underline{k}} a_{\underline{k}} \cdot \Psi_{\underline{k}}(\underline{r})$$
per. fv.

ahol $a_{\underline{k}} = \int \Psi(\underline{r})\, \Psi_{\underline{k}}^{*}(\underline{r})\, dV$

Ha Ψ normált:

$$1 = \int_V \Psi^*(\underline{r})\cdot\Psi(\underline{r})\cdot dV = \int \sum_{\underline{k},\underline{k}'} a_{\underline{k}} \cdot a_{\underline{k}'}^{*} \cdot \underbrace{\Psi_{\underline{k}}(\underline{r})\cdot \Psi_{\underline{k}'}^{*}(\underline{r})\, dV}_{\delta_{\underline{k},\underline{k}'}} = \sum_{\underline{k}} |a_{\underline{k}}|^2$$

$|a_{\underline{k}}|^2$ határozza meg annak a valószínűségét, hogy $\Psi(\underline{r})$-ben a $\underline{p} = \hbar \underline{k}$ impulzus szerepeljen (mert $\Psi_{\underline{k}}$-k normáltak).

– dobozba zárt el. hullámfv.-ei: ...

→ <u>Hilbert-tér</u>:

- Kv. mech.-ban négyzetesen integrálható fv.-ek L^2 terét használjuk a hullámfv.-eknek.
- skalárszorzat $\int \Psi^*(q)\, \Phi(q)\, dq = \langle \Psi | \Phi \rangle$ ←

A fizikai mennyiségek átlagértékének kiszámítása a hullámfv. ismeretében

<u>Koordináta és impulzus középértékek számolása</u>

Legyen $\Psi(\underline{r})$ normált hullámfv.

$\rho = \Psi^*(\underline{r})\cdot\Psi(\underline{r})$ a megtalálási valósz. sűrűség

- A közép (átlag) (várható) érték:

• $\langle \underline{r} \rangle = \int \underline{r} \cdot \rho(\underline{r})\, dV = \int \Psi^*(\underline{r}) \cdot \underline{r} \cdot \Psi(\underline{r})\, dV$

• $\langle f(\underline{r}) \rangle = \int \Psi^*(\underline{r}) \cdot f(\underline{r}) \cdot \Psi(\underline{r})\, dV$ → $\underline{r}$-r lesz a koordináta operátora!

- A $\underline{p} = \hbar \underline{k}$ impulzus megtalálási val.-e $|a_{\underline{k}}|^2$ (dobozba zárt e^-)

• $\langle \underline{p} \rangle = \sum a_{\underline{k}}^* a_{\underline{k}} \hbar \underline{k} \underset{\uparrow}{=} i\hbar \sum_{\underline{k}} \underbrace{\int \Psi^*(\underline{r}') \cdot \Psi_{\underline{k}}(\underline{r}')\, d\underline{r}'}_{a_{\underline{k}}^*} \cdot \underbrace{\int \Psi(\underline{r})\, \nabla \Psi_{\underline{k}}^*(\underline{r})\, d\underline{r}}_{-\int \nabla\Psi(\underline{r}) \Psi_{\underline{k}}^*(\underline{r})\, d\underline{r}} =$

igaz $\underline{k} \cdot \Psi_{\underline{k}}(\underline{r}) = -i \nabla \Psi_{\underline{k}}(\underline{r})$

(a végtelenben eltűnik $\Psi_{\underline{k}}$)

$= -i\hbar \int \Psi^*(\underline{r}') \cdot \underbrace{\left\{ \sum_{\underline{k}} \Psi_{\underline{k}}(\underline{r}') \cdot \Psi_{\underline{k}}^*(\underline{r}) \right\}}_{\delta(\underline{r}-\underline{r}') \text{: Dirac-féle delta} \leftarrow \text{teljességből}} \cdot \nabla \Psi(\underline{r})\, d\underline{r}\, d\underline{r}' =$

$= -i\hbar \int \Psi^*(\underline{r})\, \nabla \Psi(\underline{r})\, d\underline{r} = \int \Psi^*(\underline{r})\, \underbrace{-i\hbar \nabla}\, \Psi(\underline{r})\, d\underline{r}$

ez lesz az impulzus operátora!

• $F(\underline{p})$ átlagértéke:

$\langle F(\underline{p}) \rangle = \int \Psi^*(\underline{r})\, F(-i\hbar \nabla)\, \Psi(\underline{r})\, d\underline{r}$

pl. kinetikus energia

$\left\langle \frac{p^2}{2m} \right\rangle = \int \Psi^*(\underline{r}) \left(-\frac{\hbar^2 \Delta}{2m} \right) \cdot \Psi(\underline{r})\, d\underline{r}$

Fizikai mennyiségek operátorai

- $F = F_1(\underline{r}) + F_2(\underline{p})$

$$\langle F \rangle = \int \Psi^* \cdot \hat{F} \cdot \Psi \, dV$$

ahol $\hat{F} = \hat{F}_1(\underline{r}) + \hat{F}_2(\underline{p})$

- A középérték valós, ha:

$\langle F \rangle = \langle F \rangle^*$, mivel $\hat{F}$ adjungáltja

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

igaz, ha $\hat{F} = \hat{F}^+ \ldots$

= Lineáris, önadjungált operátorok felelnek meg a fiz. mennyiségeknek

- $F(\underline{r}, \underline{p})$

$\hat{F}(\hat{\underline{r}}, \hat{\underline{p}})$ nem egyértelmű

pl. $\underline{r} \cdot \underline{p} \to \hat{\underline{r}} \hat{\underline{p}}$ v. $\hat{\underline{p}} \hat{\underline{r}}$ nem ugyanaz!

- Ha $\hat{A}, \hat{B}$ önadjungált operátor, akkor $\hat{A}\hat{B}$ általában nem önadjungált op.,

kivéve, ha: $\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = \underbrace{[\hat{A}, \hat{B}]}_{\text{kommutátor}} = 0$

- Ha $\hat{A}, \hat{B}$ nem kommutál, akkor önadjungált operátor:

$\frac{1}{2}(\hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A})$, $\frac{i}{2}(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})$.

- A fiz. mennyiségeknek önadjungált (= hermitikus) operátorok felelnek meg.

$\underline{r} \to \hat{\underline{r}} = \underline{r}$:

$\underline{p} \to \hat{\underline{p}} = \frac{\hbar}{i} \nabla$

$F(\underline{r}, \underline{p}) \to \hat{F} = F(\hat{\underline{r}}, \hat{\underline{p}}) = F(\mathbf{r}, -i\hbar\underline{\nabla})$ nem egyértelmű (koordináta és imp. operátorok nem felcserélhetőek)

- Ha $\hat{A}, \hat{B}$ önadjungált, akkor mi $(\hat{A}\hat{B})^+$?

$$\int \psi^* (\hat{A}\hat{B})^+ \varphi \, dV = \int (\hat{A}\hat{B}\psi)^* \varphi \, dV = \int (\hat{B}\psi)^* \hat{A}^+ \varphi \, dV =$$

$$= \int \psi^* B^+ A^+ \varphi \, dV$$

$$(\hat{A}\hat{B})^+ = \hat{B}^+ A^+ \qquad (\hat{A}\hat{B})^+ = \hat{B}^+ \hat{A}^+ \overset{\hat{A},\hat{B} \text{ önadj.}}{=} \hat{B}\hat{A}$$

$\hat{A}\hat{B}$ önadjungált, ha $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$

- Ha $\hat{A}, \hat{B}$ önadjungált, de $[\hat{A}, \hat{B}] \neq 0$

$\Rightarrow \frac{1}{2}(\hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A})$ ill. $\frac{i}{2}(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})$ önadj.

- További mennyiségek:

$\to \underline{L} = \underline{r} \times \underline{p} \to \hat{\underline{L}} = -i\hbar (\underline{r} \times \nabla)$

$\hat{L}_x = -i\hbar \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right)$ nincs baj a sorrenddel

$\ldots = \hat{L}_y, \; \hat{L}_z = \ldots$

$\to E = \frac{p^2}{2m} + V(\underline{r}) \to \hat{E} = -\frac{\hbar^2 \Delta}{2m} + V(\underline{r})$

- A kommutátorok:

$[\hat{r}_i, \hat{r}_k] = 0$

$[\hat{p}_i, \hat{p}_k] = 0$

$[\hat{r}_i, \hat{p}_k] = i\hbar\, \delta_{ik} \quad \leftarrow \left(x\frac{\partial}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x}x\right)\psi = -\psi$

$[\hat{L}_i, \hat{L}_k] = i\hbar\, \varepsilon_{ikl} \hat{L}_l \quad \leftarrow [\hat{A}\hat{B}, \hat{C}] = \hat{A}[\hat{B}, \hat{C}] + [\hat{A}, \hat{C}]\hat{B}$

$\hat{\underline{L}} \times \hat{\underline{L}} = i\hbar \hat{\underline{L}}$

$$\boxed{\hat{\underline{L}}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2}$$

$[\hat{\underline{L}}^2, \hat{L}_i] = 0$

- $\hat{p}$ önadj.:

ez az adjungált, ami ugyanaz, mint az eredeti

$$\int \psi^*(\underline{r}) \cdot \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\right) \cdot \psi(\underline{r})\, d\underline{r} \stackrel{?}{=} \int \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\psi(\underline{r})\right)^* \psi(\underline{r})\, d\underline{r}$$

„átvisszük a deriválást" (parc. der.)

$$= -i\hbar \int dy\, dz\, \psi^* \cdot (-\psi)\Big|_{x=-\infty}^{x=+\infty} - i\hbar \int d\underline{r} \left(\frac{\partial}{\partial x}\psi^*\right)\psi$$

$\downarrow$

eltűnik

dobozba zárt ell.-nál párosság miatt

egyébként L_2 fv.-nél is eltűnik

Operátorok sajátfüggvényei és sajátértékei

1) • F átlagértéke Ψ állapotban

$$\langle F\rangle=\int \Psi^* \hat{F}\Psi\, dV$$

• F szórás^2-e Ψ áll.-ban

$$\langle (\Delta F)^2\rangle=\int \Psi^* (\Delta\hat{F})^2 \Psi\, dV=\int (\Delta\hat{F}\cdot\Psi)^2\, dV$$

$$\Delta\hat{F}=\hat{F}-\langle F\rangle$$

— Olyan áll.-ra, amiben F-nek határozott értéke van

• $\langle(\Delta F)^2\rangle=0$ v. $\int |\Delta\hat{F}\Psi|^2\, dV=0$ (norma)

$$\Downarrow$$

$$\Delta\hat{F}\Psi=0$$

• $\hat{F}\Psi=\langle F\rangle\cdot\Psi$

Ez a sajátérték egyenlet, ahol Ψ ismeretlen és $\langle F\rangle\equiv F$ is ismeretlen

$\hat{F}\Psi=F\Psi$ — Ψ s.fv., F s. ért.

↑

Ha Ψ s.fv. méréskor mindig u.azt az F értéket kapjuk

• A s.értékek összessége alkotja a <u>spektrumot</u>.

→ Van <u>diszkrét</u> spektrum

→ Van <u>folytonos</u> — II —

Jelöljük a sfv. Ψ_n-nel, a s.é.-t f_n-nel.

- Adott f_n-hez tartozhat 1 db s. fv. Ψ_n

  v. több db s. fv. Ψ_{nm}

- önadjungált operátor sajátértéke valós

– Jelölések:

  - hullámfv.: Ψ, $\Psi(\underline{r})$, $\Psi(q)$, $|\Psi\rangle$ ket vektor (skalárszorzati zárójel (bracket))
  - konjugált hullámfv.: Ψ^*, $\Psi^*(\underline{r})$, $\Psi^*(q)$, $\langle\Psi|$ bra vektor
  - skalárszorzat: (Ψ_1, Ψ_2), $\int \Psi_1^*(\underline{r})\Psi_2(\underline{r})\, d\underline{r}$, $\int \Psi_1^*(q)\Psi_2(q)\, dq$, $\langle\Psi_1, \Psi_2\rangle$

– Legyen $\hat{F}$ önadjungált op. $(\hat{F} = \hat{F}^+)$, s. fv. Ψ_n

$$\langle\Psi_n|\hat{F}|\Psi_m\rangle = \langle\hat{F}\Psi_n|\Psi_m\rangle$$

ezt írhatjuk így: $\langle\Psi_n|\hat{F}|\Psi_m\rangle = F_{nm}$ az $\hat{F}$ operátor mátrixeleme

(ha a rendszerünk sajátállapotban van, mindig ugyanazt az eredményt (az ahhoz tartozó sajátértéket) kapjuk a fiz. mennyiséget reprezentáló op.-ra)

2) Példák:

1.) $\hat{p}_x$, s. ért. egy: $-i\hbar \frac{\partial\Psi}{\partial x} = p\Psi$

$$\Psi_p = A e^{\frac{i}{\hbar}px}$$

Ψ_p nem normálható, tulajdonképpen nincs benne a Hilbert-térben, limeszként értelmezhető

2.) $\hat{L}_z = -i\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right) \overset{\text{gömbi polárkoor.-ban}}{=} \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\varphi}$

s. érték egy: $-i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} \Psi = m\Psi$

$$\Psi_m = e^{i\frac{m}{\hbar}\varphi}$$

→ Kikötjük, hogy egyértékű fv. legyen a stv.

$$\Psi_m(\varphi) = \Psi_m(\varphi + 2\pi)$$

$$\Rightarrow m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

$$\int_0^{2\pi} \Psi_m^* \Psi_m \cdot d\varphi = 1$$

$$\Psi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi}$$

a térfogatelemben csak ez a φ-től függő rész

$$d\underline{r} = r^2 \sin\theta \, d\theta \, d\varphi$$

(Ha $\Psi(\varphi) = \Psi(\varphi + 4\pi)$ $\Rightarrow m = \pm\frac{1}{2}, \pm\frac{3}{2}, \dots$ is jó!)

3) Diszkrét spektrumú operátorok sajátfv-einek tulajdonságai

$$\hat{F}\Psi_n = F_n \Psi_n$$

$$\langle \Psi_m | \hat{F} | \Psi_n \rangle = F_n \cdot \langle \Psi_m | \Psi_n \rangle$$

ha $\hat{F} = \hat{F}^+$ ||

$$\langle \hat{F}\Psi_m | \Psi_n \rangle = F_m \langle \Psi_m | \Psi_n \rangle$$

$$\Rightarrow 0 = (F_n - F_m) \langle \Psi_m | \Psi_n \rangle$$

$\Rightarrow$ Ha $F_n \neq F_m \Rightarrow \langle \Psi_m | \Psi_n \rangle = 0$ különb. sajátért.-ekhez tartozó sajátfv.-ek ortogonálisak

• Ha a sfv.-eket normáljuk:

$$\langle \Psi_m | \Psi_n \rangle = \delta_{mn}$$

• Az összes s. fv. teljes rendszert alkot, azaz:

$$|\Psi\rangle = \sum_n a_n |\Psi_n\rangle. \quad \text{(Hilbert-tér miatt)}$$

$$\underline{\underline{\langle \Psi_m | \Psi \rangle}} = \sum_n a_n \langle \Psi_m | \Psi_n \rangle = \sum_n a_n \delta_{mn} = \underline{\underline{a_m}}$$

A teljesség azt jelenti, hogy:

$$\underline{\underline{\sum_n \Psi_n^*(q') \Psi_n(q) = \delta(q' - q)}}$$

vagy $\sum_n |\Psi_n\rangle\langle\Psi_n| = 1$

• Elfajult eset, adott F_n-hez több lin.-an független s. fv. tartozik Ψ_{nl}.

l indexeli a kül. elfajult, de adott n s. é.-hez tartozó sfv.-eket

Ekkor $\langle \Psi_{nl} | \Psi_{nl'} \rangle = \delta_{ll'}$ nem igaz automatikusan, de $\sum_l c_l |\Psi_{nl}\rangle$ lin. kombinációkat alkalmasan megválasztva teljesíthető.

$$\langle F \rangle = \sum_{n,n'} \langle a_{n'} \Psi_{n'} | F | \underbrace{a_n \Psi_n}_{|\Psi\rangle} \rangle = \sum_n |a_n|^2 \cdot F_n \qquad \text{(ha } \Psi_n \text{ F sfv.-e)}$$

$$\langle \Psi | \Psi \rangle = \sum_n |a_n^2|$$

$|a_n|^2$ annak a val.-e, hogy $|\Psi\rangle$ állapotban f_n értéket mérjük.

4) Folytonos spektrumú op.-ok sfv.-einek tulajdonságai

- $\hat{f}|\Psi_f\rangle = f|\Psi_f\rangle$

Nem normálható: $\int |\Psi_f|^2 dq = \infty$

- Normált $\Psi(q)$ állapot kifejthető a Ψ_f-ekkel

$|\Psi\rangle = \int a_f |\Psi_f\rangle df$ (teljességi reláció)

- $|a_f|^2$ annak a valósz.-e, hogy $(f, f+df)$-be eső értéket kapjuk méréskor.

$\int |a_f|^2 df = 1 = \int \Psi^* \Psi \, dq = \langle \Psi | \Psi \rangle$, $\langle \Psi| = \int df \, a_f^* \langle \Psi_f|$

$\Rightarrow \int a_f^* \left\{ \langle \Psi_f | \Psi \rangle - a_f \right\} df = 0$

$\Rightarrow a_f = \langle \Psi_f | \Psi \rangle$ (a diszkrét képlet folytonosra is kiterjeszthető!)

$a_f = \int \langle \Psi_f | \Psi_{f'} \rangle a_{f'} df'$

$\Rightarrow \underline{\underline{\langle \Psi_f | \Psi_{f'} \rangle = \delta(f-f')}}$ adja a s.fv.-ek korrekt normálását

pl. p_x esetén: $\Psi_p = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{\frac{i}{\hbar} p x}$

$\langle \Psi_p | \Psi_{p'} \rangle = \int dx \frac{1}{2\pi} e^{-\frac{i}{\hbar}(p-p')x} = \delta(p-p')$

5. óra

folyt.:

$$|\Psi\rangle = \int a_F |\Psi_F\rangle dF = \int |\Psi_F\rangle\langle\Psi_F|\Psi\rangle dF$$

azaz $\int |\Psi_F\rangle\langle\Psi_F| dF = 1$

vagy $\int \Psi_F(q') \Psi_F^*(q) dF = \delta(q-q')$

pl.: a $\hat{p}$: impulzus sajátállapotok

$$\Psi_{\underline{p}}(\underline{r}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \cdot e^{\frac{i}{\hbar}\cdot\underline{p}\cdot\underline{r}}$$

- Hely s. állapotok:

$$\hat{\underline{r}} \cdot \Psi_{\underline{r}_0}(\underline{r}) = \underline{r}_0 \cdot \Psi_{\underline{r}_0}(\underline{r})$$

$$\Psi_{\underline{r}_0}(\underline{r}) = \delta(\underline{r}-\underline{r}_0)$$

$$|\Psi\rangle = \int a_{\underline{r}_0} \Psi_{\underline{r}_0}(\underline{r})\, d\underline{r}_0$$

$$a_{\underline{r}_0} = \int \Psi(\underline{r}) \cdot \delta(\underline{r}-\underline{r}_0)\, d\underline{r} = \Psi(\underline{r}_0)$$

$|a_{\underline{r}_0}|^2 d\underline{r}_0 = |\Psi(\underline{r}_0)|^2 d\underline{r}_0$ a kifejtési eh. $||^2$-e adja meg a megtalálási valószínűségsűrűséget

Absztrakt Hilbert-tér, reprezentációk

1) $\hat{F}$ önadj. op., $|\Psi_F\rangle$ s.fv.

- $|\Psi\rangle = \sum a_F |\Psi_F\rangle$

  $\uparrow$ meghatározzák $|\Psi\rangle$-t, ez az F reprezentáció

  $=a_F$ (folyt.-ban így is írhatom)

- $|\underbrace{a(F)}|^2 dF$ ~ mérés valószínűsége
- Eredetileg a $\Psi(q)$ adja meg, ehelyett használjuk az a_F-et ($a(F)$-et). $\Psi(q)$ jellemzőt semmi nem tünteti ki, hívhatjuk koordináta reprezentációnak.

= Ezért beszélhetünk absztrakt Hilbert-térről, amit a különböző reprezentációk konkrétan megvalósítanak.

2) pl.

állapot	koord. repr.	imp. repr.
adott imp-ú:	$\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{\frac{i\underline{p}_0 \cdot \underline{r}}{\hbar}}$	$\delta(\underline{p}-\underline{p}_0)$
adott helyű:	$\delta(\underline{r}-\underline{r}_0)$	$\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{-\frac{i\underline{p}\underline{r}}{\hbar}}$
tetszőleges áll.:	$\Psi(\underline{r})$	Ψ Fourier-transzf.-ja

Kommutáló operátorok sf.-einek tulajdonságai

Ha $|\Psi\rangle$ s.fv.-e $\hat{F}$-nek, F-et mérve a megfelelő s.é.-et kapjuk.

— Lehet $|\Psi\rangle$ egyszerre több op.-nak is s.fv.-e.

Pl. ($\hat{F}$ és $\hat{M}$ op.)
$$\left.\begin{aligned} \hat{F}|\Psi_n\rangle &= F_n|\Psi_n\rangle \\ \hat{M}|\Psi_n\rangle &= M_n|\Psi_n\rangle \end{aligned}\right\} \Rightarrow$$
ilyenkor $\hat{F}$ és $\hat{M}$ értéke is határozott egyszerre!

$\hat{F}$ és $\hat{M}$ egyszerre pontosan mérhető

Ekkor:
$$\underbrace{\left(\hat{M}\hat{F}-\hat{F}\hat{M}\right)}_{[\hat{M},\hat{F}]}|\Psi_n\rangle = 0$$

- Tetszőleges $|\Psi\rangle$-re is $[\hat{M},\hat{F}]|\Psi\rangle = 0$ mivel $|\Psi\rangle = \sum a_n|\Psi_n\rangle$
- Előfordulhat, hogy csak adott $|\Psi\rangle$ áll.-ban mérhető $\hat{F}$ és $\hat{M}$ egyszerre. Ilyenkor $[\hat{M},\hat{F}]|\Psi\rangle = 0$

— Fordítva, ha $[\hat{F},\hat{M}] = 0 \Rightarrow$ közös s.fv. rendszerük.

- Mivel ha nincs elfajult s.érték:

$\hat{M}|\Psi_n\rangle = M_n|\Psi_n\rangle$, $|\Psi_n\rangle$-ek teljes rendszert alkotnak

$$\underline{\hat{M}\cdot\hat{F}|\Psi_n\rangle} = \hat{F}\hat{M}|\Psi_n\rangle = M_n\underline{\hat{F}|\Psi_n\rangle}$$
(mindkét oldal $\hat{M}$ s.fv.-e)

$\Rightarrow \hat{F}|\Psi_n\rangle$ is $\hat{M}$ s.fv.-e, M_n s.értékkel $\Rightarrow \hat{F}|\Psi_n\rangle = \text{const.}\cdot|\Psi_n\rangle = F_n\cdot|\Psi_n\rangle$

- Ha elfajult s.ért. is van:

$\hat{M}|\Psi_{nk}\rangle = M_n|\Psi_{nk}\rangle$ (több lehetséges értéke van k-nak)

$$\hat{M}\underline{\hat{F}|\Psi_{nk}\rangle} = M_n\underline{\hat{F}|\Psi_{nk}\rangle}$$

$$\hat{F}|\psi_{nk}\rangle = \sum_m a_{km}|\psi_{nm}\rangle$$

megfelelően választott

Megfelelő lineárkombinációval elérhető, hogy $\phi_{nl} = \sum_k b_{lk}|\psi_{nk}\rangle$

$$\hat{F}|\phi_{nl}\rangle = F_{nl}|\phi_{nl}\rangle.$$

Egy rendszer állapotának megadása

- Ismerjük a fiz. mennyiségek operátorait, és ezek közül meg kell keresni az összes egyszerre pontosan mérhető mennyiség operátorát, ami kommutáló operátorokat jelent, ezek közös s.fv-ei jellemzik az állapotot egyértelműen.

pl. tömegpont esetén: $\hat{\underline{p}}$

$\hat{\underline{r}}$

$\hat{E}, \hat{\underline{L}}^2, \hat{L}_z$

- Egy rendszer nem mindig jellemezhető hullámfv.-nyel.

pl.

$$|\psi\rangle = a_1|\psi_1\rangle + a_2|\psi_2\rangle$$

előfordul, hogy csak $|a_1|^2, |a_2|^2$ ismert (a_1 és a_2 fázisa nem).

- Tiszta állapot: ha van hullámfv.
- Kevert állapot: ha nincs —"—

Ilyenkor a „sűrűségmátrixot" kell használni

- Ha a rendszer 2 fgtlen részrendszerből áll, a teljes rendszer hull. fv.-e szorzat alakú:

$$\Psi(q_1, q_2) = \Psi_1(q_1) \cdot \Psi_2(q_2)$$

(fgtlen rendszer: pl. az 1. nem függ a 2.-től, ha az 1. fizikai mennyiségét megmérve, az nem függ a 2. rsz. hullámfv.-étől.)

Ui. legyen $\hat{F}$ az 1. részrendszerhez ~~tartozó~~ op.

Az átlag:

$$\int \Psi^*(q_1, q_2)\, \hat{F}\, \Psi(q_1, q_2)\, dq_1 dq_2 = \underbrace{\int \Psi_1^*(q_1) \cdot \hat{F} \Psi(q_1)\, dq_1}_{\text{nem függ } \Psi_2\text{-től}} \cdot \underbrace{\int \Psi_2^*(q_2) \cdot \Psi_2(q_2)\, dq_2}_{1}$$

$\Rightarrow$ $\Psi(q_1, q_2) = \Psi_1(q_1) \cdot \Psi_2(q_2) = \left(\sum a_n \Psi_n(q_1) \right) \cdot \Psi_2(q_2)$

(az elhók nem függnek a 2. részrendszertől) $\leftarrow |a_n|^2 = \left| \int \Psi_n^*(q_1) \cdot \Psi(q_1)\, dq_1 \right|^2$

Határozatlansági relációk

- $\hat{A}, \hat{B}$ önadj. op.-ok,

$[\hat{A}, \hat{B}] = i \underset{\substack{\uparrow \\ \text{önadjungált op.}}}{\hat{C}}$

$\langle A \rangle = \langle \Psi | \hat{A} | \Psi \rangle$

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

$\langle |\Delta\hat{A}|^2 \rangle = \Delta A^2 =$ szórásnégyzet

(ha Ψ s. állapota $\hat{A}$-nak $\to \Delta\hat{A}^2 = 0$, $\Delta A = 0$)

- Levezethető $\Delta A \cdot \Delta B$-re alsó korlát:

u.i. Legyen α valós szám

$$\langle (\alpha \Delta\hat{A} + i\Delta\hat{B})\Psi | (\alpha\Delta\hat{A} + i\Delta\hat{B})\Psi \rangle \geq 0$$ (mert a Hilbert-tér eleme)

$$\langle \Psi | (\alpha\Delta\hat{A} - i\Delta\hat{B})(\alpha\Delta\hat{A} + i\Delta\hat{B}) | \Psi \rangle \geq 0$$

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

$\leftarrow$ mert $[\Delta\hat{A}, \Delta\hat{B}] = [\hat{A}, \hat{B}]$!

$$0 \leq \langle \Psi | \left(\alpha^2 \Delta\hat{A}^2 + \Delta\hat{B}^2 - \alpha\hat{C} \right) | \Psi \rangle$$

Mi a minimum α fv.-ében?

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

Ezt beírva:

$$\langle (\Delta\hat{B})^2 \rangle \geq \frac{1}{4} \frac{\langle \hat{C} \rangle^2}{\langle (\Delta\hat{A})^2 \rangle}$$

$$\Delta A^2 \cdot \Delta B^2 \geq \frac{1}{4} \langle \hat{C} \rangle^2$$

$$\underline{\underline{\Delta A \cdot \Delta B \geq \frac{1}{2} |\langle C \rangle|}}$$ Heisenberg-féle határozatlansági összefüggés

pl. $\hat{A} = \hat{x}$ $\hat{B} = \hat{p}_x$

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}$$

pl. $\hat{A} = \hat{\varphi}$ $\hat{B} = \hat{L}_z \Rightarrow [\hat{A}, \hat{B}] = i\hbar$

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

$$\Delta \varphi \cdot \Delta L_z \geq \frac{\hbar}{2}$$

– Mikor teljesül $\Delta A \cdot \Delta B = \frac{1}{2}\langle C \rangle$?

Legyen $\alpha_{min} = \dfrac{\langle C \rangle}{2\langle \Delta \hat{A}^2 \rangle} = 0$

Mi $|\Psi\rangle$ ahhoz, hogy $\|(\alpha_{min} \cdot \Delta\hat{A} + i\Delta\hat{B})\Psi\| = 0$ legyen?

$$\left(\frac{\langle C \rangle}{2\langle \Delta\hat{A}^2 \rangle}\Delta\hat{A} + i\Delta\hat{B}\right)|\Psi\rangle = 0$$

pl. $\langle x \rangle = 0$ $\langle p_x \rangle = 0$

$$\hat{C} = \hbar \qquad \Delta\hat{x} = x \qquad \Delta\hat{p}_x = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}$$

$$\left(\frac{\hbar}{2\langle x^2 \rangle} \cdot x + \hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\Psi(x) = 0$$

Ez itt egy diff. egy. $\rightarrow \Psi(x) = A \cdot e^{-\frac{x^2}{\langle x^2 \rangle}} = \dfrac{1}{\frac{\pi \langle x^2 \rangle}{2}} \cdot e^{\frac{-x^2}{4 \cdot \langle x^2 \rangle}}$

↳ lokalizált állapot hullámfv.-e $(a^2 = 2\langle x^2 \rangle$

Erre $\Delta x \cdot \Delta p_x = \dfrac{\hbar}{2}$

$$\Delta x = \sqrt{\langle x^2 \rangle} \qquad \Delta p_x = \frac{\hbar}{2\sqrt{\langle x^2 \rangle}}$$

6. óra

Időfüggés a kvantummechanikában

Klasszikus határeset

Analóg a hullámoptika és a geometriai optika kapcsolatával.

- Hullámoptikából: $f = a\, e^{ikL} = a \cdot e^{i\varphi}$

  $k \to \infty$ határeset (f: elektromos vagy mágneses

  Nagy fázisú határeset térerősség vmely komponense)

- Kvantummech.: $\Psi = a \cdot e^{i\varphi}$

  ‚a' lassan változó, φ nagy

Klasszikus mechanikában a pályát S_0 minimuma határozza meg (Maupertuis-elv)
(S_0 : rövidített hatás).

Optikában Fermat-elv: $\delta \int_A^B n\, ds = 0$, ez adja a pályát, azaz a fénysugár mentén $\int_A^B n\, \underline{k}\, d\underline{s}$ minimum.

Az eikonál kifejezve: $\text{grad}\, L = \frac{\underline{k}}{k} n \Rightarrow \int_A^B k\, \text{grad}\, L\, d\underline{s} = \text{minimum}$

Mivel $\varphi = k \cdot L \Rightarrow \varphi(B) - \varphi(A) = \text{minimum}$.

A fázis megfelelője a hatásintegrál.

- Kvantummechanikában a fázis arányos S_0-lal, beírva az időfüggést: $\underbrace{E \cdot t}_{\text{energia}\cdot\text{idő}} \ldots$

Mi az arányossági tényező?

Ilyen dimenziójú univerzális állandó: $\hbar$, így

$\Psi = a \cdot e^{\frac{i}{\hbar} S}$ a kvázi-klasszikus esetben.

Időfüggő Schrödinger-egyenlet

- A hullámfv. a rendszer állapotát teljesen meghatározza (az időbeli fejlődést is). Így $\frac{\partial \Psi}{\partial t}$-t Ψ-ből kell megkapni. Fontos a szuperpozíció elve.

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \underset{\substack{\uparrow \\ \text{lin. operátor}}}{\hat{H}} \Psi$$

- Mi a $\hat{H}$?

$\int \Psi^* \cdot \Psi \, dq = 1$ minden időpillanatban.

$$\frac{d}{dt}\int \Psi^* \cdot \Psi \, dq = 0 = \int \left(\Psi^* \cdot \frac{\partial \Psi}{\partial t} + \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} \Psi \right) dq = \int \left[\Psi^* \cdot \left(\frac{-i}{\hbar}\right) \cdot \hat{H}\Psi + \frac{i}{\hbar} (\hat{H}\Psi)^* \cdot \Psi \right] dq =$$

$$= -\frac{i}{\hbar} \int \left(\Psi^* \cdot \hat{H}\Psi - \Psi^* \cdot \hat{H}^+ \cdot \Psi \right) dq = 0 \Rightarrow \underline{\underline{\hat{H} = \hat{H}^+}}$$

Az egyenletbe beírva a kvázikalsszikus hullámfv.-t:

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t} a \cdot e^{\frac{i}{\hbar} S} = \frac{i}{\hbar} \frac{\partial S}{\partial t} \cdot \Psi$$

$\Rightarrow \hat{H} = -\frac{\partial S}{\partial t}$, ami a Hamilton-fv. Tehát $\hat{H}$ a Hamilton-operátor

és $\boxed{i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H} \Psi}$

Operátorok idő szerinti deriválása

$\hat{F}$ fizikai mennyiség operátora.

$\dot{\hat{F}}$ def.-ja: $\frac{d}{dt} \langle \hat{F} \rangle = \langle \dot{\hat{F}} \rangle$ (maga az operátor valójában nem feltétlenül függ az időtől (pl. impulzus), de az operátorral vett várható érték már igen)

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{F} \rangle = \frac{d}{dt} \int \Psi^* \hat{F} \Psi \, dq =$$

$$= \int \psi^* \frac{\partial \hat{F}}{\partial t} \psi \, dq - \int \underbrace{\frac{\partial \psi^*}{\partial t}}_{\psi^* \cdot \frac{i}{\hbar} \hat{H} \cdot \hat{F} \psi} \hat{F} \psi \, dq + \int \psi^* \hat{F} \underbrace{\frac{\partial \psi}{\partial t}}_{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} \psi} dq = \left\langle \left(\frac{\partial \hat{F}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{F}] \right) \right\rangle$$

$$\boxed{\dot{\hat{F}} = \frac{\partial \hat{F}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} \left[\hat{H}, \hat{F} \right]}$$

- Ha $\frac{\partial \hat{F}}{\partial t} = 0$ és $[\hat{H}, \hat{F}] = 0 \Rightarrow \langle F \rangle$ időben állandó, F megmaradó mennyiség.
- Ha még ψ $\hat{F}$ sfv.-e $t = 0$-ban, később is az marad.

Stacionárius állapot

Zárt rendszernél a $\hat{H}$ op. nem függ az időtől és $[\hat{H}, \hat{H}] = 0 \Rightarrow$

$\Rightarrow \hat{H}$ megmaradó mennyiség, energia.

Adott energiájú állapot $\equiv$ stacionárius állapot

$\hat{H} \psi_n = E_n \psi_n$, a stacionárius állapot:

$$\boxed{\Psi_n = e^{-\frac{i}{\hbar} E_n \cdot t} \cdot \psi_n(q)}$$

(Tetszőleges állapot: $\psi = \sum_n a_n \cdot e^{-\frac{i}{\hbar} E_n \cdot t} \cdot \psi_n(q)$, $|a_n|^2$ adja E_n mérésének a valószínűségét.)

Stacionárius állapotban a megtalálási vsz.:

$$|\Psi_n|^2 dq = |\psi_n|^2 dq \text{ időfüggetlen} \Rightarrow \langle F \rangle \text{ is időfüggetlen.}$$

- Ha $\hat{F}$ megmaradó mennyiség, stac. állapotban felvehet határozott értéket.
- Az energiasajátértékek lehetnek elfajultak.
- Ha $\hat{F}$ és $\hat{G}$ megmaradó mennyiség $\underline{\underline{\text{és}}}$ $[\hat{F},\hat{G}] \neq 0 \Rightarrow$ elfajult s.értékek vannak (l. H-atom kvantumállapotai $\Rightarrow$ adott a főkvantumszámhoz több sajátfv. (n,l,m) tartozik).

Biz. legyen Ψ $\hat{H}$ és $\hat{F}$ sfv.-e és $[\hat{F},\hat{G}]\Psi \neq 0$ (de $[\hat{H},\hat{G}]=[\hat{H},\hat{F}]=0$, mert megmaradó mennyiségek)

$$\hat{H}(\hat{G}\Psi) = \hat{G}(\hat{H}\Psi) = E(\hat{G}\Psi)$$ tehát $\hat{G}\Psi$ lin. független s.fv. az E s.értékhez.

- Az energiaspektrum lehet diszkrét vagy folytonos:
  - diszkrét energiához tartozó sfv. olyan mozgáshoz tartozik, amikor a rendszert alkotó részecskék nem távolodnak el egymástól ∞ távolságra, azaz kötött állapot van
  - folytonos eset, nem kötött állapot

diszkrét eset $\rightarrow$ normált hullámfv.
folytonos eset $\rightarrow$ nem normálható a hullámfv.

Kvantummechanikai Poisson zárójelek

- Klassz. mech. Hamiltoni rendszer

$$\frac{dF}{dt} = \frac{\partial F}{\partial t} + \{\mathcal{H}, F\}_{kl}, \text{ ahol}$$

$$\{G,F\}_{kl} = \sum_k \left(\frac{\partial F}{\partial q_k}\cdot\frac{\partial G}{\partial p_k} - \frac{\partial G}{\partial q_k}\cdot\frac{\partial F}{\partial p_k} \right)$$

↑
klasszikus

- Kvantummechanika:

$$\dot{\hat{F}} = \frac{\partial \hat{F}}{\partial t} + \underbrace{\frac{i}{\hbar}\left[\hat{H}, \hat{F}\right]}_{\left\{\hat{H}, \hat{F}\right\}_{k}}$$

k: kvantumm.

- A Poisson-zárójelek tul.-ai:

  - $\{f, g\} = -\{g, f\}$
  - $\{f, c\} = 0$
  - $\{f_1 + f_2, g\} = \{f_1, g\} + \{f_2, g\}$
  - $\{f_1 \cdot f_2, g\} = f_1\{f_2 g\} + f_2\{f_1 g\}$

- Klasszikus P.-zárójel   Kvantum P.-zárójel

$\{q_i, q_k\}_{kl} = 0$	$\{\hat{q}_i, \hat{q}_k\}_{kv.} = 0$
$\{p_i, p_k\}_{kl} = 0$	$\{\hat{p}_i, \hat{p}_k\}_{kv.} = 0$
$\{q_i, p_k\}_{kl} = \delta_{ik}$	$\{\hat{q}_i, \hat{p}_k\}_{kv.} = \delta_{ik}$

$\Rightarrow$ Általánosítva a megfeleltetést:

Minden olyan rendszernél, amelynek van klasszikus megfelelője, a kvantummechanikai Poisson-zárójel értékét a klasszikus mech. Poisson-zárójel adja meg.

= kanonikus kvantálás

7. óra

Szimmetriák és megmaradó mennyiségek

1) Általános leírás:

– Klasszikus mechanika: a tér homogenitása és izotrópiája ⇒ teljes impulzus és teljes impulzusmomentum megmaradása

– Kvantummechanika: ?

- Eltolásra: $\Psi(\underline{r}_1, \dots, r_n) \to \Psi(\underline{r}_1 + \underline{a}, \dots, \underline{r}_n + \underline{a})$
- Forgatásra: —"— $\to \Psi(\underline{r}_1', \dots, \underline{r}_n')$ $\quad \underline{r}_i' = \underline{\underline{R}} \cdot \underline{r}_i$
- ált. ban: $\Psi \to \hat{O}\Psi$

→ nyilván $\hat{O}$ lin. operátor

→ Ha a transzformált rendszer az eredetivel ekvivalens, azaz szimmetria van, a mérés folyamán a fiz. mennyiség adott értékének mérési valószínűsége nem változik.

$\hat{F}$ fiz. menny Ψ_n s. fv. f_n s. ért.

$|\langle \Psi_n | \Psi \rangle|^2$ a valószínűség (hogy f_n-et mérünk)

Transzformáció után $\hat{O}\Psi_n$ a s. fv. és $\hat{O}\Psi$ az állapot, így a

valósz. $= |\langle \hat{O}\Psi_n | \hat{O}\Psi \rangle|^2$

$\Rightarrow |\langle \hat{O}\Psi_n | \hat{O}\Psi \rangle|^2 = |\langle \Psi_n | \Psi \rangle|^2$ ehelyett Wigner szerint

megkövetelhető: $\langle \hat{O}\Psi_n | \hat{O}\Psi \rangle = \pm \langle \Psi_n | \Psi \rangle$ (– időtükrözésnél)
(sugárábrázolás van)

$$\Rightarrow \langle \Psi_n | \hat{O}^+ \hat{O} \Psi \rangle = \langle \Psi_n | \Psi \rangle$$

$\hat{O}^+ \hat{O} = 1$, azaz $\underline{\underline{\hat{O}^+ = \hat{O}^{-1}}}$, azaz $\hat{O}$ unitér op.

A szimmetria transzformációt unitér (antiunitér) operátor írja le.

→ Szimm. tr. esetén az energia értéke nem változik, azaz:

$$\langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle = \langle \hat{O} \Psi | \hat{H} | \hat{O} \Psi \rangle = \langle \Psi | \hat{O}^+ \hat{H} \hat{O} \Psi \rangle$$

$$\Rightarrow \quad \hat{O}^+ \hat{H} \hat{O} = \hat{H}$$

$$\underline{\underline{[\hat{O}, \hat{H}] = 0}}$$

2) Eltolás, impulzus:

eltolásra $\Psi(\underline{r}_1, \dots, \underline{r}_n) \to \Psi(\underline{r}_1 + \underline{a}, \dots, \underline{r}_n + \underline{a}) \overset{\downarrow}{=}$ infinitezimális eltolás $\underline{a} = \delta \underline{r}$

$$= \Psi(\underline{r}_1, \dots, \underline{r}_n) + \delta \underline{r} \cdot \sum_{i=1}^{n} \mathrm{grad}_i \, \Psi(\underline{r}_1, \dots \underline{r}_n) =$$

$$= \left(1 + \delta \underline{r} \cdot \sum_i \nabla_i\right) \cdot \Psi(\underline{r}_1, \dots, \underline{r}_n)$$

$$\Rightarrow \hat{O} = 1 + \delta \underline{r} \cdot \sum_a \nabla_a$$

– Mivel: $[\hat{O}, \hat{H}] = 0$
$$\Downarrow$$
$$[\underbrace{-i\hbar \sum_a \nabla_a}_{}, \hat{H}] = 0$$

megmarad, hermitikus → Mi lehet ez? ↓

– Hattatva a kvázikalsszikus hullámfv.-re ($a \cdot e^{\frac{i}{\hbar} S}$):

$$-i\hbar\nabla\left(a e^{\frac{i}{\hbar}S}\right) = -i\hbar a\cdot e^{\frac{i}{\hbar}\cdot S}\left(\frac{i}{\hbar}\nabla S\right) = \underbrace{\nabla S}_{\text{impulzus}}\left(a\cdot e^{\frac{i}{\hbar}\cdot S}\right)$$

$\Rightarrow$ A rendszer <u>teljes</u> impulzusa:

$\boxed{-i\hbar\sum_a \nabla_a}$, ami megmaradó mennyiség, ha a transzláció szimmetriatranszformáció.

3) Elforgatás, impulzusmomentum

$$\Psi' = \Psi(\underline{r}_1+\delta\underline{r}_1,\dots,\underline{r}_n+\delta\underline{r}_n) \underset{\uparrow}{=} \Psi(\underline{r}_1,\dots) + \underbrace{\sum_a \delta\underline{\varphi}\times\underline{r}_a\cdot\nabla_a\Psi(\underline{r}_1,\dots)}_{\sum_a \delta\underline{\varphi}\cdot(\underline{r}_a\times\nabla_a)\Psi(\underline{r}_1,\dots)}$$

$$\delta\underline{r}_a = \delta\underline{\varphi}\times\underline{r}_a$$

$$\hat{O} = 1+\delta\underline{\varphi}\cdot\sum(\underline{r}_a\times\nabla_a)$$

- $[\hat{O},\hat{H}]=0$

$$\Downarrow$$

$\boxed{-i\hbar\sum_a(\underline{r}_a\times\nabla_a)}$ a teljes imp. momentum szimmetrikus, kommutál $\hat{H}$-val, tehát megmaradó mennyiség, ha a forgatás szimm. transf..

<u>Impulzus momentum s. érték probléma</u>

1) Pontrendszerre is igaz:

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

$[\hat{\underline{L}}^2,\hat{L}_i]=0 \quad\Rightarrow \hat{\underline{L}}^2$-nek és $\hat{L}_i$-nek közös s.fv. rendszere lehet

$$\hat{L}_\pm := \hat{L}_1 \pm i\hat{L}_2 \quad\Rightarrow [\hat{L}_+,\hat{L}_-] = 2\hbar\hat{L}_3$$

$[\hat{L}_\pm, \hat{L}_3] = \mp \hbar \hat{L}_\pm$; $\hat{L}_1, \hat{L}_2, \hat{L}_3$ páronként nem kommutál

2) 1 részecskére gömbi koordinátarendszerben:

$$\hat{L}_3 = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}, \quad \hat{L}_\pm = \hbar \cdot e^{\pm i\varphi}\left(\pm \frac{\partial}{\partial \vartheta} + i \operatorname{ctg}\vartheta \cdot \frac{\partial}{\partial \varphi}\right)$$

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

- $\hat{L}_3$ s.értékei $\hbar \cdot m$, sfv.-ei $\Psi_m = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \cdot e^{im\varphi}$ $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$

$$\int_0^{2\pi} \Psi_m^* \cdot \Psi_{m'} \cdot d\varphi = \delta_{mm'}$$

(Megjegyzés: $\hat{L}_1, \hat{L}_2$ s.érték-ek „ugyanazok", és a s.fv.-ek is felírhatók)

- $\hat{L}_1, \hat{L}_2, \hat{L}_3$ páronként nem kommutál

$$\Rightarrow \Delta L_1 \cdot \Delta L_2 \geq \frac{\hbar}{2} \cdot \langle \hat{L}_3 \rangle$$

- Több részecskére $\hat{L}_i$ könnyen felírható,
  normálás az $\hat{L}_3$ sfv.-ekre — " —

3) $\underline{\hat{L}}^2$ és $\hat{L}_3$ közös s.érték. problémája

Konkrét operátorok helyett csak a kommutátorokat használjuk.

„$\hbar = 1$ egységrendszert" használjuk (beledefiniáljuk $\hbar$-t $\hat{L}_3, \hat{\underline{L}}^2$-be).

$$\hat{L}_3 \Psi_m = m \cdot \Psi_m$$

$$[\hat{L}_3, \hat{L}_\pm] = \pm \hat{L}_\pm$$

$$\hat{L}_3 \hat{L}_\pm \Psi_m = (\hat{L}_\pm \underbrace{\hat{L}_3}_{\to m} \pm \hat{L}_\pm)\Psi_m = (m \pm 1) \cdot \hat{L}_\pm \Psi_m$$

$\hat{L}_\pm$ léptetőoperátor: ψ_m-ből olyan fv.-t csinálnak, ami szintén sfv.-e $\hat{L}_3$-nak, de $m\pm1$ s.ért.-el (konstans $\cdot\,\psi_{m\pm1}$).

- Van $(\hat{L}_+)^k \cdot \psi_m = \text{const.}\, \psi_{m+k}$, $m+k$ s.ért.-el

$$m+k := L$$

$\hat{L}_+ \cdot \text{const.} \cdot \psi_L = 0 \Rightarrow$ **L** a legnagyobb $\hat{L}_3$ s.ért., sfv.-e legyen w_L (nem mehetünk el a ∞-be L_3 s.ért.-eivel $\hat{L}^2$ miatt).

- $\hat{L}_- w_L \equiv w_{L-1}$

$$\hat{L} w_{L-1} = w_{L-2}$$

$$\dots$$

$$\hat{L}_+ w_m = \underset{\substack{\uparrow \\ \text{szám}}}{r_{m+1}} \cdot w_{m+1} \quad \rightarrow \quad r_{L+1} = 0, \text{ mert } \hat{L}_+ \cdot w_L = 0$$

kommutátorból

$$\downarrow$$

$$\hat{L}_+ w_{m-1} = \hat{L}_+ \cdot \hat{L}_- w_m = \left(\hat{L}_- \hat{L}_+ + 2\hat{L}_3\right) w_m = \left(r_{m+1} + 2m\right) w_m =$$

$$= r_m \cdot w_m$$

$$r_m = r_{m+1} + 2m$$

$$r_{m+1} = \underbrace{\left(r_{m+1} - r_{m+2}\right)}_{2(m+1)} + \underbrace{\left(r_{m+2} - r_{m+3}\right)}_{2(m+2)} + \left(r_{m+3} - \dots\right. + \underbrace{\left(r_L - \overset{\overset{0}{\shortparallel}}{r_{L+1}}\right)}_{2L} =$$

$$= L(L+1) - m(m+1)$$

- Legyen $\hat{L}_- \cdot w_M = 0 = w_{M-1}$

$$\hat{L}_+ \underset{\substack{\uparrow \\ =0}}{w_{M-1}} = r_M \cdot w_M$$ M: minimális indexet jelöli

$$r_M = 0$$

$$r_M = 0 = L(L+1) - (M-1)M$$

$$m+1 = M \quad \Rightarrow M = -L$$

$\Rightarrow$ adott $\hat{L}^2$ s. érték esetén $m = -L, -L+1, \dots, +L$

$\Rightarrow$ $L = 0, +\frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \dots$ L egész vagy feles számok

- $\hat{\underline{L}}^2 = \frac{1}{2}\left(\hat{L}_+ \hat{L}_- + \hat{L}_- \hat{L}_+\right) + \hat{L}_3^2$

$$\hat{\underline{L}}^2 w_m = \frac{1}{2}\left(L_+ w_{m-1} + L_- r_{m+1} \cdot w_{m+1}\right) + m^2 \cdot w_m = \frac{1}{2}\left(r_m w_m + r_{m+1} w_m\right) +$$

$$+ m^2 \cdot w_m = \left(\frac{1}{2}\left(r_m + r_{m+1}\right) + m^2\right) \cdot w_m = L(L+1) \cdot w_m$$

$\Rightarrow$ w_m tényleg $\hat{\underline{L}}^2$ sajátfv.-e (ahogy azt előzőleg feltételeztük), $L(L+1)$ sajátértékkel

- Normálás szükséges: $\hat{L}_- := \hat{L}_+^+$

$$\langle \hat{L}_+ w_m \mid \hat{L}_+ w_m \rangle = \langle w_m \mid \hat{L}_- \hat{L}_+ w_m \rangle = \langle w_m \mid w_m \rangle \cdot \left(L(L+1) - m(m+1)\right)$$

$$\Psi_{L,m} = \left\{ \frac{(L+m)!}{(L-m)!} \right\}^{1/2} \cdot w_m$$

$$\langle \hat{L}_+ w_m | \hat{L}_+ w_m \rangle = \left(L(L+1) - m(m+1) \right)^{2} \cdot \langle w_{m+1} | w_{m+1} \rangle$$

- $$\hat{L}_\pm \Psi_{L,m} = \sqrt{L(L+1) - m(m\pm1)}\ \Psi_{L,m\pm1}$$

$$\Downarrow$$

$$\langle \Psi_{L,m\pm1} | \hat{L}_\pm | \Psi_{L,m} \rangle = \sqrt{L(L+1) - m(m+1)} \quad \text{(mátrixelem)}$$

Emlékeztető:

ha a forgatás szimmetria $\Rightarrow$ $\hat{L}^2$ és $\hat{L}_3$ megmaradó mennyiségek

8. óra

4) Impulzusmomentum sfv.-ek koord. reprezentációban

1 részecske esetén $Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$, ahol

$$\int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} Y^*_{l',m'}(\vartheta,\varphi)\, Y_{l,m}(\vartheta,\varphi) \cdot \sin\vartheta\, d\vartheta\, d\varphi = \delta_{ll'} \cdot \delta_{mm'}$$ a normálás

ugyanis $\int |\Psi(\underline{r})|^2 d\underline{r} = 1$

$$\Psi(\underline{r}) = f(r)\, Y_{lm}(\vartheta,\varphi)$$

$$d\underline{r} = r^2 \sin\vartheta\, dr\, d\vartheta\, d\varphi$$ $\rightarrow$ emiatt kell a $\sin\vartheta$ szorzó a normálásban

- Maga a s.érték egyenlet: $-m^2$ szorzó (l. 45. old.)

$$\frac{1}{\sin\vartheta} \frac{d}{d\vartheta}\left(\sin\vartheta \frac{\partial\Psi}{\partial\vartheta}\right) + \frac{1}{\sin^2\vartheta} \frac{\partial^2\Psi}{\partial\varphi^2} + l(l+1)\Psi = 0$$

$$Y_{lm} = \Phi_m(\varphi)\,\Theta_{lm}(\vartheta)$$

$\hat{L}_z$ s.fv. $\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \cdot e^{im\varphi}$

Behelyettesítve és osztva $\Phi_m(\varphi)$-vel:

$$\frac{1}{\sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial\vartheta}\left(\sin\vartheta\frac{\partial\Theta_{lm}}{\partial\vartheta}\right) - \frac{m^2}{\sin^2\vartheta}\Theta_{lm} + l(l+1)\Theta_{lm} = 0$$

Ennek polinom megoldásai vannak $l \geq |m|$: $P_l^m(\cos\vartheta)$

hozzárendelt (asszociált)

Legendre-polinomok

P_l^0 = közönséges Legendre-polinomok

$$P_l^m(\vartheta) = \frac{(-1)^{l+m}}{2^l l!} \cdot \sqrt{\frac{(2l+1)(l-m)!}{2(l+m)!}} \cdot (\sin\vartheta)^m \cdot \frac{d^{l+m}\overbrace{(\sin\vartheta)^{2l}}^{(1-\cos^2\vartheta)^l}}{(d\cos\vartheta)^{l+m}}$$

$$Y_{lm}(\vartheta,\varphi) = P_l^m \cdot \frac{e^{im\varphi}}{\sqrt{2\pi}} \quad ; \quad Y_{l,-m}(\vartheta,\varphi) = (-1)^m \cdot Y_{l,m}^*(\vartheta,\varphi)$$

- A diffegyenlet megoldása:

$u := \cos\vartheta$ változóra térünk át $\quad u \in [-1, 1]$

$$\Theta'' - \frac{2u}{1-u^2}\Theta' + \left(l(l+1) - \frac{m^2}{1-u^2}\right)\frac{\Theta}{1-u^2} = 0$$

- $u = \pm 1$ szinguláris pontok, ezeknél kell először az asszimptotikus mo.

Asszimptotikus egy.:

$$\Theta'' - \frac{2u}{1-u^2}\Theta' - \frac{m^2}{(1-u^2)^2}\Theta = 0$$

M.o.: $\Theta := (1-u^2)^2$

ekkor: $\Theta' = a(1-u^2)^{a-1} \cdot (-2u)$

$$\Theta'' = a(a-1)(1-u^2)^{a-2}(-2u)^2 - 2a(1-u^2)^{a-1}$$

Behelyettesítve:

$$(1-u^2)^{a-2}\left\{4\cdot(u^2-1+1)\,a(a-1) - 2a(1-u^2) + 4a(u^2-1+1) - m^2\right\} =$$

$$\{\ \} \to 4a(a-1) + 4a - m^2 = 4a^2 - m^2 = 0 \Rightarrow a = \frac{|m|}{2}$$

(a legszingulárisabb tag együttjának el kell tűnnie)

→ A pontos egy. megoldása $(1-u^2)^{\frac{|m|}{2}}$ polinom ⇒ l egész

- néhány gömbfv.:

$$Y_{00} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$$

$$Y_{1,0} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\vartheta, \quad Y_{1,\pm1} = \mp\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\vartheta \cdot e^{\pm i\varphi}$$

$$Y_{2,0} = \sqrt{\frac{5}{16\pi}}(3\cos^2\vartheta - 1), \quad Y_{2,\pm1} = \mp\sqrt{\frac{15}{8\pi}}\cos\vartheta\sin\vartheta\, e^{\pm i\varphi},$$

$$Y_{2,\pm2} = \sqrt{\frac{15}{32\pi}}\sin^2\vartheta \cdot e^{\pm 2i\varphi}$$

Ortogonalitásból:

$$\int Y_{lm}(\vartheta,\varphi)\sin\vartheta\, d\vartheta\, d\varphi = 0, \quad l \neq 0$$

5) Az imp. momentum s.fv.-ek transzformációja forgatásra

- Kis forgatásra:

$$\hat{O} = 1 + \frac{i}{\hbar}\delta\underline{\varphi}\cdot\hat{\underline{L}} = 1 + \frac{i}{\hbar}\left(\delta\varphi_3\cdot\hat{L}_3 + \frac{\delta\varphi_1 - i\delta\varphi_2}{2}\cdot\hat{L}_+ + \frac{\delta\varphi_1 + i\delta\varphi_2}{2}\hat{L}_-\right)$$

$$\hat{O}\Psi_{L,M} = \Psi_{L,M} + \frac{i}{\hbar}\left(\delta\varphi_3\cdot M\Psi_{L,M} + \frac{\delta\varphi_1 - i\delta\varphi_2}{2}\sqrt{L(L+1) - M(M+1)}\,\Psi_{L,M+1} + \right.$$

(most M nem a legkisebb index, hanem simán az index)

$$+ \frac{\delta\varphi_1 + i\delta\varphi_2}{2} \sqrt{L(L+1) - M(M-1)}\, \Psi_{L,M-1} \Big)$$

$\Rightarrow \hat{O} \cdot \Psi_{L,M} = \sum_{M'} a_{LM'} \Psi_{LM'}$ = adott L-ű imp. mom. sfv.-ek lineárkombinációja

$\Rightarrow$ $\hat{O}\Psi_{L,M}$ is L imp.-ú, mivel $[\hat{\underline{L}}^2, \hat{O}] = 0$

- $a_{L,M}$ meghatározható, mivel:

$$\hat{O} Y_{l,m}(\vartheta,\varphi) = Y_{lm}(\vartheta',\varphi') = \sum_{m'} a_{lm'} Y_{lm'}(\vartheta,\varphi)$$

$$a_{lm'} = \int_0^{2\pi}\int_0^{\pi} Y^*_{lm'}(\vartheta,\varphi)\, Y_{lm}(\vartheta',\varphi') \sin\vartheta \, d\vartheta \, d\varphi$$

– Egyszerű eset: $Y_{00} \to Y_{00}$

Y_{1m}-re

$$A_x = \frac{-Y_{11} + Y_{1,-1}}{\sqrt{2}} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \sin\vartheta \cos\varphi$$

$$A_y = i\,\frac{Y_{11} + Y_{1,-1}}{\sqrt{2}} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \sin\vartheta \sin\varphi$$

$$A_z = Y_{10} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos\vartheta$$

(derékszögű komponensek)

= Összefoglalva:

$\hat{\underline{L}}^2$ és $\hat{L}_z$ megadása meghatározza a hullámfv. transzformációját forgatás esetén.

Tekinthető ez az imp. mom. szemléletes definíciójának.

(6) Megjegyzés:

imp. mom. klasszikusan folytonos, de kvantumosan kvantált →

→ hogyan adja vissza ez határesetben a klassz. esetet?

Ha $\hat{L}^2$ nagyon nagy; a s. értékek közötti $\hbar$ ugrás elhanyagolhatóan kicsi ⇒ '$\hbar \to 0$' közelítés)

7) Impulzusmomentumok összeadása

2 (gyengén csatolt) független részből álló rendszert vizsgálunk.

- klasszikus eset:

$$\underline{L} = \underline{L}_1 + \underline{L}_2 \qquad \underline{L} \text{ megmaradó mennyiség}$$

- kvantumos eset: pl. He atom 2 elektronja

$$L_1, M_1 \; ; \; L_2, M_2 \qquad \Psi = \Psi_1 \cdot \Psi_2 \sim Y_{L_1 M_1}(\vartheta_1, \varphi_1) \cdot Y_{L_2 M_2}(\vartheta_2, \varphi_2)$$

$\hat{\underline{L}} = \hat{\underline{L}}_1 + \hat{\underline{L}}_2$

- $$\hat{L}_z Y_{L_1 M_1} Y_{L_2 M_2} = \left((\hat{L}_1)_z Y_{L_1 M_1}\right) \cdot Y_{L_2 M_2} + Y_{L_1 M_1}\left((\hat{L}_2)_z \cdot Y_{L_2 M_2}\right) = (M_1 + M_2) Y_{L_1 M_1} \cdot Y_{L_2 M_2}$$

- $\hat{\underline{L}}^2 = (\hat{\underline{L}}_1 + \hat{\underline{L}}_2)^2 = \hat{\underline{L}}_1^2 + \hat{\underline{L}}_2^2 + 2 \cdot \hat{\underline{L}}_1 \hat{\underline{L}}_2$ a szorzatfv. nem sajátfv.!

↳ Adott L_1 és L_2-jű szorzatállapotból hogyan kaphatunk $\hat{\underline{L}}^2$ sajátállapotot?

A szorzatállapotok száma: $(2L_1+1)(2L_2+1)$

Legyen a szorzatállapot: Ψ_{L, M, L_1, L_2}

Forgatáskor az adott Ψ_{L, M, L_1, L_2} állapotok keverednek.

Pl. $L_1 = L_2 = 1$

(↑ imp. mom. azért lehet, mert $\Psi_1 \cdot \Psi_2$ nem sajátállapot!)

M_1	M_2	M	L
1 ($Y_{11}(\vartheta_1,\varphi_1)$)	1 ($Y_{11}(\vartheta_2,\varphi_2)$)	2	$2 \to \underset{L,M}{\Psi_{22}}(\vartheta_1,\varphi_1,\vartheta_2,\varphi_2)$ ↑↑
1	0	1	$\underbrace{\hat{L}_- \Psi_{22}}_{\Psi_{21}\ \nearrow\nearrow}$, erre ortogonális: Ψ_{11} $\uparrow\rightarrow$ $\cdot 1\ \cdot 0$ (ortogonális lásást keresünk → a másik sfv.-nek ort.-nak kell lennie az elsőre)
0	1	1	
0	0	0	$\underbrace{(\hat{L}_-)^2 \Psi_{22}}_{\Psi_{20}\ \rightrightarrows}$, $\underbrace{\hat{L}_- \Psi_{11}}_{\Psi_{10}}$ $\nearrow\searrow$ $\cdot\frac{1}{\sqrt{2}}\ \cdot\frac{1}{\sqrt{2}}$ de, erre ortogonális Ψ_{00} $\rightleftarrows$
1	−1	0	
−1	1	0	
0	−1	−1	$\underbrace{(\hat{L}_-)^3 \Psi_{22}}_{\Psi_{2,-1}}$ $\swarrow\swarrow$, $\underbrace{\hat{L}_-^2 \Psi_{11}}_{\Psi_{1,-1}}$ $\cdot 1\ \cdot 0$ $\downarrow\rightarrow$, $\underbrace{\hat{L}_- \Psi_{00}}_{\Psi_{0,-1}} \equiv 0$
−1	0	−1	
−1	−1	−2	$\underbrace{(\hat{L}_-)^4 \Psi_{22}}_{\Psi_{2,-2}\ \downarrow\downarrow}$, $\hat{L}_-^3 \Psi_{11} \equiv 0$

L lehet $2, 1, 0$ (általában $(L_1+L_2), (L_1+L_2)-1, \dots (L_1-L_2)$)

$(2\cdot 2+1) + (2\cdot 1+1) + (2\cdot 0+1) = 9$ lin. független fv.

Szorzatok $(2L_1+1)(2L_2+1) = 3\cdot 3 = 9$

9. óra

Ált. ban Ψ_{L,M,L_1,L_2} sajátállapotok

M_1	M_2	$M = M_1 + M_2$	L	s. fv.
L_1	L_2	$L_1 + L_2$	$L_1 + L_2$	$\Psi_{L_1+L_2, L_1+L_2, L_1, L_2}$
$L_1 - 1$	L_2	$L_1 + L_2 - 1$	$\hat{L}_- \Psi_{L_1+L_2, L_1+L_2, L_1, L_2}$, erre ort. fv.: $\Psi_{L_1+L_2-1, L_1+L_2-1, L_1, L_2}$	
L_1	$L_2 - 1$			

$$\left.\begin{array}{ll} L_1-2 & L_2 \\ L_1-1 & L_2-1 \\ L_1 & L_2-2 \end{array}\right\} L_1+L_2-2 \qquad \left(\hat{L}_-\right)^2 \psi_{L_1+L_2,\dots}$$

, erre ort.: $\psi_{L_1+L_2-2,\, L_1+L_2-2,\, L_1,\, L_2}$

$\vdots$

(Tfh. $L_1 > L_2$)

$$\left.\begin{array}{ll} L_1 & L_2-M \\ L_1-1 & L_2-M+1 \\ & \vdots \end{array}\right\} L_1+L_2-M \Rightarrow \text{az új } L \text{ érték } L_1+L_2-M$$

Ha $M = 2L_2$, az még éppen jó,

és $(L_1+L_2) - \overbrace{2L_2}^{M} = L_1 - L_2$ még éppen jó

Tehát L minimális értéke $L_1 - L_2 = |L_1 - L_2|$

(Tovább nem lehet menni ezzel a módszerrel, mert túl sok sajátállapotunk lenne. Szemléletes magyarázat: a két imp. momentum (spin) hosszának minimális értékét akkor kaphatjuk, ha ellentétes irányba állnak be ennél kisebbet nem.)

Lehetséges értékei: $L_1+L_2,\, L_1+L_2-1, \dots, |L_1-L_2|$

Ellenőrzés:

$$\left[2(L_1+L_2)+1\right] + \overbrace{\left[2(L_1+L_2-1)+1\right]}^{\text{adott } L \text{ mellett } M\ (2L+1) \text{ féle lehet}} + \dots \left[2(L_1-L_2)+1\right] =$$

$= (2L_1+1)(2L_2+1)$ a szorzatállapotok száma ✓

A ψ_{L,M,L_1,L_2} állapotra: $\hat{L}_1 \cdot \hat{L}_2$, $\hat{L} \cdot \hat{L}_1$, $\hat{L} \cdot \hat{L}_2$ s.ért.-e

mivel pl.: $\hat{L}_1 \hat{L}_2 = \frac{1}{2}\left(\hat{L}^2 - \hat{L}_1^2 - \hat{L}_2\right)$

$$\Psi_{L,M,L_1,L_2} = \sum_{M_1,M_2} \underset{\uparrow}{C^{LM}_{L_1M_1L_2M_2}} \Psi_{L_1M_1}\Psi_{L_2M_2}$$

Clebsch-Gordon-együtthatók

(ilyen lineárkombinációját kell venni a szorzatállapotoknak az új állapothoz)

8) Kiválasztási szabályok

$$\langle \Psi_{L_1M_1} | \hat{A}_{L_2M_2} | \Psi_{L_3M_3} \rangle$$

mikor zérus a mátrixelem? (ilyenkor nem jön létre átmenet)

a) $\hat{A}_{L_2M_2} | \Psi_{L_3M_3} \rangle$ imp. mom. tartalma $L_2+L_3, L_2+L_3-1, \dots |L_2-L_3|$

Ha ebben nincs benne L_1, a mátrixelem 0.

b) $M_1 \neq M_2+M_3$ esetén is a mátrixelem 0.

Paritás

1) Zárt rendszernél v. gömbszimm. potenciálnál a ~~tér~~tükrözés is szimmetria

$$\underline{r} \to -\underline{r}$$

- Klassz. mech.-ban ehhez nincs megmaradó mennyiség, kvantummechanikában van!

- A tükrözés v. paritás operátor: $\hat{P}$

$$\hat{P}\,\psi(\underline{r}) = \psi(-\underline{r})$$

• Sajátértékek, sfv.-ek:

$$\hat{P}\,\psi(\underline{r}) = p\,\psi(\underline{r})$$

$$\hat{P}^2\,\psi(\underline{r}) = p^2\,\psi(\underline{r}) = \psi(\underline{r})$$

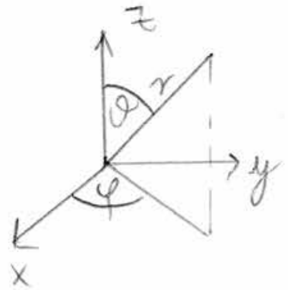
$$p^2 = 1$$

$p = \pm 1 \rightarrow$ sfv.: páros ($p=+1$) vagy páratlan ($p=-1$) fv.

• Igaz $[\hat{P}, \hat{H}] = 0$ szimmetria esetén $\Rightarrow$ $t=0$-kor páros / páratlan hullámfv. $t>0$-n is páros / páratlan

• Igaz $[\hat{\underline{L}}^2, \hat{P}] = 0$ $\Rightarrow$ közös sfv.-ek

pl. 1 részecskére



$\hat{P}$-re $\quad r \to r$

$$\vartheta \to \pi - \vartheta$$

$$\varphi \to \varphi + \pi$$

$$\hat{P}\, Y_{lm}(\vartheta, \varphi) = Y_{lm}(\pi - \vartheta, \varphi + \pi)$$

$$\cos\vartheta \to \cos(\pi - \vartheta) = -\cos\vartheta$$

$$e^{im\varphi} \to e^{im(\varphi+\pi)} = (-1)^m \cdot e^{im\varphi}$$

mivel:

$$P_l^m(-\cos\vartheta) = (-1)^{l-m} \cdot P_l^m(\cos\vartheta)$$

$$\Rightarrow Y_{lm}(\pi - \vartheta, \varphi + \pi) = (-1)^l \cdot Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$$

$\underline{\underline{p = (-1)^l}}$ a $\hat{P}$ s.ért.-e Y_{lm}-hez

- 2 független részrendszer esetén, $\hat{P} = \hat{P}_1 \cdot \hat{P}_2$

$$\hat{P}\psi = \hat{P}(\psi_1 \psi_2) = \underbrace{(\hat{P}_1 \psi_1)}_{p_1 \psi_1} \cdot \underbrace{(\hat{P}_2 \psi_2)}_{p_2 \psi_2} = (p_1 \cdot p_2) \cdot \psi$$

pl. ψ_1 l_1 imp. momentumú
ψ_2 l_2 —"— $\Rightarrow \psi$ $(-1)^{l_1 + l_2}$ paritású

(hasznos pl. részecskék bomlásakor)

Schrödinger-egyenlet megoldásai

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

Nem. relativ. kvantummechanikában:

$$\hat H = -\frac{\hbar^2}{2}\sum_a \frac{\Delta_a}{m_a} + U(\underline{r}_1, \underline{r}_2, \dots)$$

I.) Stacionárius eset:

$$\Psi = \psi(\underline{r}_1,\dots)\cdot e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$$

$\hat H\psi = E\psi$ időtől független Schr.-egyenlet (energia sajátért. egyenlet)

1.) 1db szabad részecskére:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi = E\psi$$

- $E>0$ -ra van mo., pl. adott impulzusú m.o.:

$$\psi = e^{\frac{i}{\hbar}\underline{p}\cdot \underline{r}}, \quad E = \frac{p^2}{2m}$$

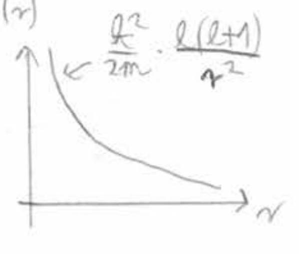
$$\Psi = e^{\frac{i}{\hbar}(\underline{p}\underline{r} - Et)}$$ nem normálható

- Másik mo. $\psi = \frac{1}{r} f(r)\cdot Y_{lm}(\vartheta,\varphi)$ adott imp.mom.-ú mo.

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2}\left(\cancel{r}\,\frac{f(r)}{\cancel{r}}\right)Y_{lm} - \underbrace{\frac{1}{r^2\hbar^2}\cdot\hat L^2\left(\frac{f(r)}{r}Y_{lm}\right)}_{-\frac{1}{r^2}\, l(l+1)\,\frac{f}{r}Y_{lm}}\right) = E\,\frac{f}{r}\,Y_{lm} \quad \Big/\cdot\frac{r}{Y_{lm}}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{d^2f}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2}f\right) = E\cdot f$$ (effektív 1D-s egyenlet)

effektív potenciál:



$k^2 := \frac{2mE}{\hbar^2}$ (fontos: $r \in [0, +\infty)$, negatív nem lehet!)

$\Downarrow$

$$\frac{d^2 f}{dr^2} + \left(k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2}\right) f = 0$$

$f := \sqrt{kr} \cdot J(kr)$ $kr := z$ dimenziótlan változó

$$\frac{d^2 J}{dz^2} + \frac{1}{z}\frac{dJ}{dz} + \left(1 - \frac{\left(l+\frac{1}{2}\right)^2}{z^2}\right) J = 0$$

Bessel-fv. a megoldás: $J_{l+\frac{1}{2}}(z)$, $\cancel{N_{l+\frac{1}{2}}(z)}$ → most nem jó, mert $r=0$ ($z=0$)-ban

"gömbi" Bessel-fv. (feleges indexű) Neumann-fv. szinguláris!

pl. $J_{\frac{1}{2}}(z) = \sqrt{\frac{2}{\pi \cdot z}} \cdot \sin z$

$N_{\frac{1}{2}}(z) = \sqrt{\frac{2}{\pi \cdot z}} \cdot \cos z$ nem jó m.o. $z=0$

} $z \to \infty$-ben jók

Tehát:

$$\Psi = \overbrace{\sqrt{\frac{k}{r}} \cdot J_{l+\frac{1}{2}}(kr)}^{\text{radiális hullámfv.}} Y_{lm}(\vartheta, \varphi) \quad \text{energia sfv.}$$

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

$r \to \infty$ $\Psi \to \text{const.} \frac{1}{r} \cdot \sin\left(kr - \frac{l\pi}{2}\right)$

- Kapcsolat az adott imp.-ú és adott imp. mom.-ú sajátfv.-ek között:

$$e^{ikz} = e^{ikr\cos\vartheta} = \sqrt{4\pi} \cdot \sum_{l=0}^{\infty} \sqrt{2l+1} \cdot e^{i\pi \cdot \frac{l}{2}} \cdot \sqrt{\frac{\pi}{2kr}} \cdot J_{l+\frac{1}{2}}(kr) \cdot Y_{l0}(\vartheta, \varphi)$$

2) Áramsűrűség, sebesség, gyorsulás

a) Klasszikus mechanika: $\underline{p} = m\dot{\underline{r}}$ értelmes, kvantumm.-ban nem

Operátor időderiváltját használva (ami az átlag érték időderiváltja)

$$\hat{\underline{v}} \equiv \hat{\dot{\underline{r}}} = \frac{i}{\hbar}\left[\hat{H}, \hat{\underline{r}}\right] = -\frac{i\hbar}{2m}\left[\Delta, \hat{\underline{r}}\right] = -\frac{i\hbar}{2m} \cdot 2 \cdot \nabla\psi$$

$$\Delta(\underline{r}\cdot\psi) - \underline{r}(\Delta\psi) = 2 \cdot \nabla\psi$$

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

b) Gyorsulás:

$U(\underline{r})$ a potenciál

$$\hat{\underline{a}} \equiv \hat{\dot{\underline{v}}} = \frac{i}{\hbar}\left[\hat{H}, \hat{\underline{v}}\right] = \frac{i}{\hbar m}\left[\hat{H}, \hat{\underline{p}}\right] = \frac{1}{m}\left(U\cdot\nabla - \nabla\cdot U\right) = -\frac{1}{m}(\nabla U)$$

$$m\hat{\underline{a}} = -(\nabla U) \qquad \text{„Newton-egyenlet"}$$

$$m\frac{d^2}{dt^2}\langle\underline{r}\rangle = -\langle \text{grad}\, U\rangle$$ (valójában időátlagokra vonatkozik az egyenlet)

Mikor azonos a klassz. mech. egyenlettel?

Ha a részecske jól lokalizált, és az a $|\psi|^2 \neq 0$ tartományban U lassan változik:

$$\langle \text{grad}\, U\rangle = \int_{\Delta V} \psi^* \,\text{grad}\, U\, \psi\, dV = \text{grad}\, U\Big|_{\underline{r}_0} \cdot \int \psi^* \psi\, dV = \text{grad}\, U\Big|_{\underline{r}_0}$$

$$\boxed{m\frac{d^2}{dt^2}\langle\underline{r}\rangle = -\nabla U\left(\langle\underline{r}\rangle\right)}$$ Ehrenfest-tétel

c) valószínűségi áramsűrűség

$\int |\Psi|^2 \, dV = 1$ időfüggetlen $\rightarrow$ kont. egyenlet

$$\frac{\partial}{\partial t}(\Psi^* \cdot \Psi) = \Big(\Psi \underbrace{\frac{\partial \Psi^*}{\partial t}}_{\frac{i}{\hbar}\cdot \hat{H}\Psi^*} + \Psi^* \cdot \underbrace{\frac{\partial \Psi}{\partial t}}_{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}\Psi}\Big) = \frac{i}{\hbar}\Big[\Psi \cdot (\hat{H}\Psi^*) - \Psi^* \cdot (\hat{H}\Psi)\Big] = -\frac{i\hbar}{2m}\left(\Psi \Delta \Psi^* - \Psi^* \Delta \Psi\right) =$$

a potenciál energiatag kiesik

$$= -\frac{i\hbar}{2m} \operatorname{div}\left(\Psi \nabla \Psi^* - \Psi^* \nabla \Psi\right) := \operatorname{div} \underline{j}$$

$$\underline{j} = +\frac{i\hbar}{2m}\left(\Psi \nabla \Psi^* - \Psi^* \nabla \Psi\right), \quad \rho = \Psi^* \cdot \Psi$$

$$\boxed{\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} \underline{j} = 0}$$ kontinuitási egyenlet

- Írjuk: $\Psi(\underline{r}, t) = R(\underline{r}, t)\, e^{i\phi(\underline{r}, t)}$

$$\Rightarrow \rho = R^2$$

$$\underline{j} = \frac{\hbar}{m} R^2 \operatorname{grad} \phi = \rho \cdot \operatorname{grad}\left(\frac{\hbar \phi}{m}\right)$$

$\Rightarrow$ Ha $\phi = 0$ vagy állandó $\Rightarrow \underline{j} = 0$

3) A Schrödinger egyenlet mo.-ainak általános tulajdonságai

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U(x,y,z)\right)\Psi = E\Psi$$

- $U(\underline{r}) \underset{r\to\infty}{\longrightarrow} 0$

- Ψ egyértékű, differenciálható, folyt. deriváltakkal

a) $U_{min} = \min U(\underline{r}) \Rightarrow E_n > U_{min}$

ui.: $\langle E \rangle = \langle T \rangle + \langle U \rangle \geq \langle T \rangle + U_{min} > U_{min}$

mivel $\langle T \rangle \geq 0$

b) • $E_n < 0$ s. értékek diszkrétek:

ui. ha folytonos lenne, nem lenne normálható

a részecske tetszőlegesen távol is előfordul,

de $U(\infty) \to 0$, a s. ért. egyenletet $\underline{r} \to \infty$-re nézve $(T\Psi = E\Psi)$

$E_n > 0$ lenne, mert $T \geq 0$.

• $E_n > 0$ folytonos spektrum

c) klasszikus mechanikában adott E-re a részecske ott lehet csak,

ahol $E \geq U$, mivel $T \geq 0$

kvantummechanikában mindenhol $|\Psi_n|^2 \neq 0$

Nincs ellentmondás, mert $[\hat{H}, \hat{\underline{r}}] \neq 0$

ha $E < U$ tartományba esik méréskor $(\underline{r})$, közvetlenül utána

már nem Ψ_n a hullámfv.

d) 1 dim. mozgásra:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}\left(E - U(\underline{r})\right)\psi = 0$$

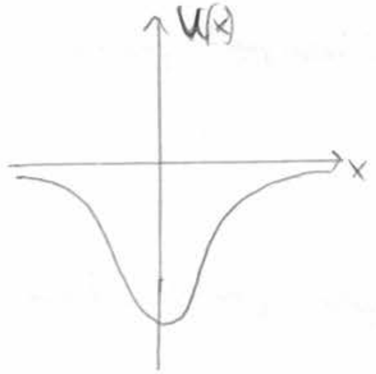
$$:= k^2 = \frac{p^2}{\hbar^2}$$

- $E>0$: asszimptotikusan $\dfrac{d^2\psi_{asz}}{dx^2} + \dfrac{2mE}{\hbar^2}\psi_{asz} = 0$

$$\psi_{asz} = a_1 e^{i\frac{p}{\hbar}x} + a_2 \cdot e^{-i\frac{p}{\hbar}x} \quad \text{nem normálható}$$

- $E<0$ $\quad \psi_{asz} = \begin{cases} e^{-Kx} & x\to\infty \\ e^{Kx} & x\to -\infty \end{cases}, \quad K = \sqrt{\dfrac{2m|E|}{\hbar^2}}$

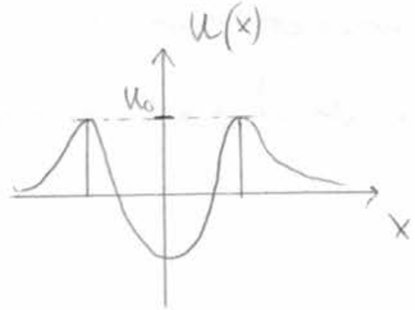
→ Véges x:



$E>0$ megoldás klasszikusan és kvantumosan is

$E>0$: ∞-ig megy a részecske

$E<0$: nem ∞-ig megy a részecske



Klassz.: $U_0 > E > 0$ a részecske fogva marad belül

Kvantum: $E>0$ nincs kötött állapot még

$E < U_0$ – nem ← Alagúteffektus

4) Variációs elv

a) A Schr. egyenlet megkapható, ha keressük

$$\int \psi^* (\hat{H} - E) \cdot \psi \, dq \quad \text{extrémumát}$$

azaz $\delta \int \psi^* (\hat{H} - E)\psi \, dq = 0$ (ψ és ψ^* is variálandó)

- Variáljuk csak ψ^*-ot:

$$\int \delta\psi^*(\hat{H}-E)\psi\, dq = 0 \quad (\text{tetsz. } \psi\text{-re igaz})$$

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

- Kikötjük, hogy $(\psi,\psi)=1$ legyen $\Rightarrow$

$$\delta\int \psi^*(\hat{H}-E)\psi\, dq = 0$$

$$\int \psi^*\psi\, dq = 1 \text{ mellékfeltétellel}$$

- Keressük a minimumot, ez ψ_0 lesz (alapállapot, legkisebb E-jű áll.)
  $\to$ meghatározódik ψ_0, E_0 is.
- Ha erre ortogonális fv-ekre keressük a minimumot, akkor meghatározható ψ_1, E_1 is.

b) Tétel: ψ_0-nak véges $\underline{r}$-re nincs zérushelye (∞-ben lehet)

c) 1 dim. eset: legyenek $E_0, E_1, \ldots$ a sorba rakott diszkrét s.ért.-ek
$\psi_0, \psi_1, \ldots$ a sfv.-ek, ψ_n-nek n db véges x-ű zérushelye van

$\Rightarrow$ E_0 nem elfajult,
ui. ha elfajult lenne: ψ_0, ψ_0' s.fv.
$c\cdot\psi_0 + c'\psi_0'$ is sfv. $\to$ adott véges x-re c, c' megválasztásával eltüntethető ($\to$ lenne olyan alapállapoti sfv., aminek van zérushelye $\leftrightarrow$ előző tétel)

II.) Időtükrözés

- Klassz. mech.-ban szimmetria, azaz $t \to -t$ helyettesítésre a mozg. egyenlet nem változik

- Kvantummech.-ban az szokott lenni, hogy a szimm. transzf.-t $\hat{O}$ unitér operátor valósítja meg, melyre $[\hat{O}, \hat{H}] = 0$. De időtükrözésre ez nem így van!

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(t)}{\partial t} = \hat{H} \Psi(t)$$

$t \to (-t)$

$$-i\hbar \frac{\partial \Psi(-t)}{\partial t} = \hat{H} \Psi(-t)$$

ez egy másik egyenlet.

Az eredeti egyenlet m.o.-a $\Psi^*(-t)$, ezt komplex konjugálva:

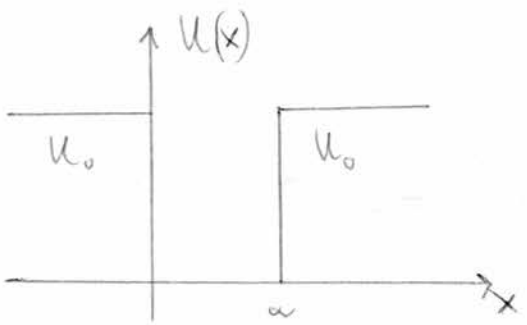
$$i\hbar \frac{\partial \Psi^*(-t)}{\partial t} = \hat{H} \Psi^*(-t)$$ az eredeti egyenlet

$\Rightarrow$ az időtükrözési transzf. $\Psi(t) \to \Psi^*(-t)$ csinál, ezt egy antiunitér operátor valósítja meg.

pl. $e^{\frac{i}{\hbar}(p r - E t)} \xrightarrow[\text{időtükr.}]{} e^{\frac{i}{\hbar}(-p r - E t)}$ (ellentétes irányba haladó síkhullám)

III.) Speciális megoldások

1) Potenciálgödör:



$E < U_0$ eset

Ha. $x > a$ $\quad \psi = \text{const.}\, e^{-K\cdot x}$ $\qquad K = \sqrt{\dfrac{2m(U_0 - E)}{\hbar^2}}$

$x < 0$ $\quad \psi = \text{const.}\, e^{Kx}$

$0 < x < a$ $\quad \psi = c \cdot \sin(kx + \delta)$ $\qquad k = \sqrt{\dfrac{2mE}{\hbar^2}}$

Illeszteni kell $x = 0$, ill. a-ban ψ-t és $\dfrac{d\psi}{dx}$-t !

Ha.  folytonos potenciálokkal közelítjük:

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

$\displaystyle\int_{a-\Delta a}^{a+\Delta a}$ -ra integrálva: $\displaystyle \psi'(a+\Delta a) - \psi'(a-\Delta a) + \frac{2m}{\hbar^2}\int_{a-\Delta a}^{a+\Delta a}(U-E)\psi\, dx = 0$

$\Delta a \to 0$ -ra: $\underline{\psi' \text{ folytonos}}$ $\Leftarrow 0$ (U folytonos,

$\underline{a\text{-ban}}$ $\qquad$ ψ folytonos)

Praktikusan $\dfrac{\psi'}{\psi}$-t illesztjük:

- $x = a + 0$ $\quad \dfrac{\psi'}{\psi} = -K$, $\quad x = a - 0$ $\quad \dfrac{\psi'}{\psi} = k \cdot \operatorname{ctg}(ka \;\; \delta)$
- $x = 0 - 0$ $\quad \dfrac{\psi'}{\psi} = K$, $\quad x = 0 + 0$ $\quad \dfrac{\psi'}{\psi} = k \cdot \operatorname{ctg}\delta$

Illesztésből: $k \operatorname{ctg}\delta = K$ és

$-K = k \operatorname{ctg}(ka + \delta)$

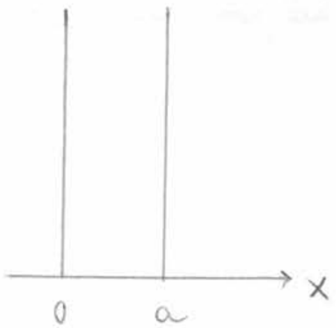
$$\Rightarrow \delta = \arcsin \frac{k\hbar}{\sqrt{2mU_0}} \qquad 0 < \delta < \frac{\pi}{2}$$

$$ka = (2n+1)\cdot\pi - 2\arcsin\frac{k\hbar}{\sqrt{2mU_0}}\,, \quad n = 0, 1, 2, \ldots$$

$\Rightarrow$ k diszkrét értékeket vehet fel $\Rightarrow E = \dfrac{k^2\hbar^2}{2m}$ is diszkrét lehet csak

(Ehhez felhasználtuk azt is, hogy Ψ a $(\pm\infty)$-ben eltűnik!)

2) Végtelen magas falú potenciálgödör:



$x < 0$, $x > a$: $\Psi = 0$ (új feltétel)

Mo.: $E_n = \dfrac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}\cdot n^2$

$$\Psi_n = \sqrt{\frac{2}{a}}\cdot\sin\left(\frac{\pi n x}{a}\right), \quad n = 1, 2, \ldots$$

$E_{min} = E_1 = \dfrac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2} \neq 0$, noha klassz. fiz.-ből 0-t várnánk!

$$E_1 = \langle\Psi_1|\hat{H}|\Psi_1\rangle = \langle T\rangle + \langle U\rangle = \langle T\rangle = \frac{1}{2m}\langle\hat{p}^2\rangle$$

$\langle\Psi_1|\hat{p}|\Psi_1\rangle = 0$; $\left(\Delta p = \dfrac{\pi\hbar}{?a}\right.$ (számolásból)$\Big)$

$\Delta x \cdot \Delta p \geq \dfrac{\hbar}{2}$ határozatlansági reláció

és $\Delta x \leq a$

$$\Rightarrow \Delta p \geq \frac{\hbar}{2\Delta x} \geq \frac{\hbar}{2a}$$

$$\langle\hat{p}^2\rangle = (\Delta p)^2 \geq \frac{\hbar^2}{4a^2} \Rightarrow \langle T\rangle \geq \frac{\hbar^2}{8ma^2}$$

$\Rightarrow E_1$ nem lehet 0 a hat. reláció miatt

11. óra

3) Lineáris oszcillátor

Kis rezgéseket végző tömegpont (majdnem) mindig ilyen

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

$$T + U$$

$U \to \infty$ ha $|x| \to \infty$: sejthető, hogy csak kötött állapot van (de $E > 0$)

a) Def.: $\hat{a} \equiv i\frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}}\hat{p} + \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{x}$

$$a^+ \equiv \ldots$$

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

$\hat{N}$: részecskeszám - operátor

$[\hat{a}, \hat{a}^+] = 1 \Rightarrow \hat{a}, \hat{a}^+$ léptető operátorok

Alapállapot: $\hat{a}|\varphi_0\rangle = 0$

$$|\varphi_n\rangle = \frac{\hat{a}^{+n}}{\sqrt{n!}} \cdot |\varphi_0\rangle$$

Koordináta reprezentációban $\equiv$ hullámfv. ($|\varphi_n\rangle$ eddig csak „absztrakt vektor" volt)

$$\hat{a}|\varphi_0\rangle \sim \left(\hat{x} + \frac{i}{m\omega}\hat{p}\right)|\varphi_0\rangle = 0$$

$$\varphi_0(x)' = -\frac{m\omega}{\hbar}\cdot x\cdot \varphi_0(x)$$

$$\varphi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}\cdot e^{-\frac{m\omega^2}{2\hbar}x^2}$$

b) Schrödinger-egyenletből (másik levezetés):

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}\left(E - \frac{m\omega^2 x^2}{2}\right)\Psi = 0$$

(ezen látszik, hogy az energia nívókra hasad a normálás miatt)

ξ = dimenziótlan változó $= \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\, x = \sqrt{\frac{m\omega^2 x^2}{\hbar\omega}}$

$$\frac{d^2\Psi}{d\xi^2} + \left(\frac{2E}{\hbar\omega} - \xi^2\right)\Psi = 0$$

- megoldás asszimptotikusan: $(\xi \to \infty)$

$$\frac{d^2\Psi_{asz}}{d\xi^2} - \xi^2\cdot\Psi_{asz} = 0$$

$$\Psi_{asz} = e^{-\frac{\xi^2}{2}} \quad \left(e^{+\xi^2/2}\text{-t eldobjuk}\right)$$

- pontos megoldás: $\Psi = e^{-\xi^2/2}\cdot \chi(\xi)$ (asszimptotikus mo. × polinom)

$\chi(\xi)$ polinom (Sommerfeld-féle polinom módszer)

$\Rightarrow$ igaz: $\chi'' - 2\xi\cdot\chi' + 2n\chi = 0$,

ahol: $2n = \frac{2E}{\hbar\omega} - 1$

$\chi = \sum_{l=0}^{\infty} a_l\cdot \xi^l$ (polinom alak), ekkor:

$$\xi\cdot\chi' = \sum_{l=0}^{\infty} a_l\cdot l\cdot \xi^{l-1+1}$$

$l=-1,-2$-re 0-t kapunk

$$\chi'' = \sum_{l'=0}^{\infty} a_{l'}\, l'(l'-1)\cdot\xi^{l'-2} \overset{l'-2=l}{=} \sum_{l=-2}^{\infty} a_{l+2}\,(l+2)\cdot(l+1)\cdot\xi^l = \sum_{l=0}^{\infty} a_{l+2}(l+2)(l+1)\cdot\xi^l$$

$$\sum_{l=0}^{\infty} \xi^l \Big(\underbrace{a_{l+2}\cdot(l+2)(l+1) + a_l\,(-2l+2n)}_{=0}\Big) = 0$$

$$a_{l+2} = a_l \cdot \frac{2(l-n)}{(l+2)(l+1)}$$

rekurzív formula a polinom együtthatóira ($a_0 \neq 0 \rightarrow$ páros, $a_1 \neq 0 \rightarrow$ páratlan)

- de akkor kapunk csak polinomot, ha

<u>n egész szám</u> $\rightarrow$ kvantálás a polinom módszerben

$$E = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right) \qquad n \text{ egész}$$

Hermite-polinomok: $H_n(\xi)$

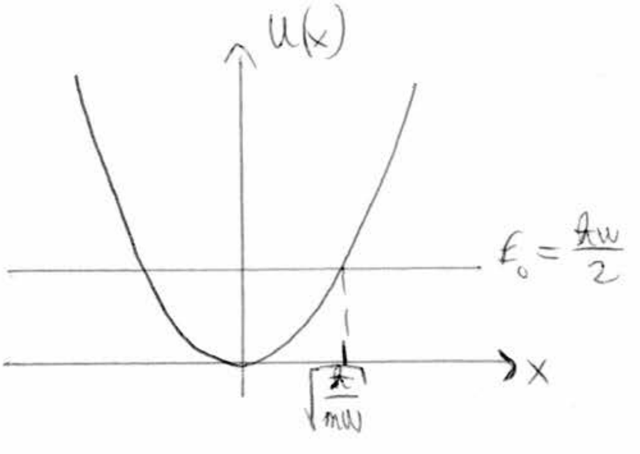
$\Psi_n = \text{const.} \cdot e^{-\xi^2/2} \cdot H_n(\xi)$

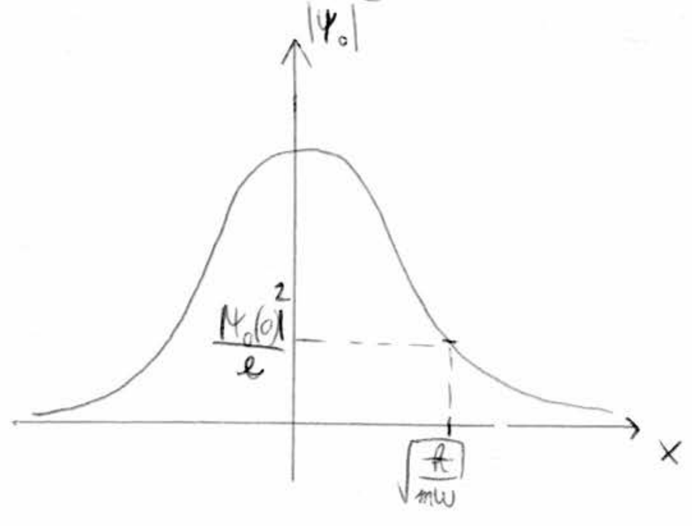
$\Psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \cdot e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}$

$\Psi_1(x) = \text{const} \cdot x \cdot e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}$

$\Psi_2(x) = \text{const} \cdot \left(4\,\frac{x^2 \cdot m\omega}{\hbar} - 2\right) \cdot e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}$

$\vdots$





- Klassz. mechanika szerint lejebb nincs a részecske
- $E=0$ a kvantummechanikában nem lehetséges:

$$\langle p \rangle = 0 \qquad \langle x \rangle = 0 \qquad \Psi_0\text{-ban}$$

$$\langle p^2 \rangle = (\Delta p)^2 \qquad \langle x^2 \rangle = (\Delta x)^2 \text{, továbbá} \qquad \Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$$

$$\Rightarrow E_0 = \langle \Psi_0 | \hat{H} | \Psi_0 \rangle = \frac{\langle p^2 \rangle}{2m} + \frac{m\omega^2 \langle x^2 \rangle}{2} \geq \frac{\hbar \omega}{2}$$

c) Mátrixelem: $\langle \Psi_n | \hat{a} | \Psi_m \rangle = (\hat{a})_{nm} = (\hat{a}^+)_{mn} = \sqrt{m} \cdot \delta_{n,m-1} = \sqrt{n+1} \cdot \delta_{n+1,m}$

$$\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & & & \\ \sqrt{1} & 0 & \sqrt{2} & & \\ & \sqrt{2} & 0 & \sqrt{3} & \\ & & \sqrt{3} & \ddots & \end{pmatrix} \qquad \hat{p} = i \sqrt{\frac{\hbar m \omega}{2}} \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & & & \\ -\sqrt{1} & 0 & \sqrt{2} & & \\ & -\sqrt{2} & 0 & \sqrt{3} & \\ & & -\sqrt{3} & 0 & \ddots \end{pmatrix}$$

(ezek $\infty \cdot \infty$ méretű mátrixok)

(Heisenberg, 1925 $\rightarrow$ mátrixmechanika megalkotása) $\quad |\Psi_n\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix}$

4) Térbeli oszcillátor

$$E_{n,m,l} = \hbar \omega \left(n + m + l + \frac{1}{2}\right)$$

(alapállapoti energia $= \frac{7}{2} \hbar \omega$, ha minden irányban ugyanakkora a kitérés amplitudója, és $n, m, l \neq 0$)

$$\Psi_{n,m,l} = \Psi_n \cdot \Psi_m \cdot \Psi_l$$

(1D-s oszcillátorok szorzata)

$\uparrow$

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}\left(x^2 + y^2 + z^2\right)$$

5) Mozgás centrális erőtér esetén

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_1}\Delta_1 - \frac{\hbar^2}{2m_2}\Delta_2 + U(r) \qquad (\underline{2\text{ részecske}})$$

$$r = |\underline{r}_1 - \underline{r}_2| \quad , \quad \underline{r} = \underline{r}_2 - \underline{r}_1 \quad , \quad \underline{R} = \frac{m_1\underline{r}_1 + m_2\underline{r}_2}{m_1+m_2} \quad (\text{TKP koordinátája})$$

$$\frac{\partial\Psi}{\partial x_1} = \frac{\partial\Psi}{\partial x}\cdot\frac{\partial x}{\partial x_1} + \frac{\partial\Psi}{\partial X}\cdot\frac{\partial X}{\partial x_1} = -\frac{\partial\Psi}{\partial x} + \frac{\partial\Psi}{\partial X}\cdot\frac{m_1}{m_1+m_2}$$

$$\frac{\partial^2\Psi}{\partial x_1^2} = \frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} - 2\frac{\partial^2\Psi}{\partial x\,\partial X}\cdot\frac{m_1}{m_1+m_2} + \frac{\partial^2\Psi}{\partial X^2}\left(\frac{m_1}{m_1+m_2}\right)^2$$

$$\frac{\partial^2\Psi}{\partial x_2^2} = \frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + 2\frac{\partial^2\Psi}{\partial x\,\partial X}\cdot\frac{m_2}{m_1+m_2} + \frac{\partial^2\Psi}{\partial X^2}\cdot\left(\frac{m_2}{m_1+m_2}\right)^2 \qquad (\text{hasonlóan } y, z\text{-re})$$

$$-\frac{\hbar^2}{2}\left(\frac{\Delta_1}{m_1} + \frac{\Delta_2}{m_2}\right)\Psi = -\frac{\hbar^2}{2}\left(\left(\frac{1}{m_1}+\frac{1}{m_2}\right)\cdot\underbrace{\left(\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\Psi}{\partial z^2}\right)}_{\Delta_x\Psi} + \frac{1}{m_1+m_2}\Delta_X\Psi\right)$$

⇒ lehet szorzat alakban keresni az eredményt (változók szétválasztása)

$$m = \frac{m_1 m_2}{m_1+m_2} \qquad (\text{redukált tömeg})$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_x - \frac{\hbar^2}{2(m_1+m_2)}\Delta_X + U(r)\right]\Psi = E_t\Psi$$

$$\Psi := \varphi(\underline{R})\cdot\psi(\underline{r})$$

$$\underbrace{U(r) - \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\Delta_x\psi(\underline{r})}{\psi(\underline{r})}}_{E:\ \underline{r}\text{-től függ}} \underbrace{-\frac{\hbar^2}{2(m_1+m_2)}\frac{\Delta_X\varphi(\underline{R})}{\varphi(\underline{R})}}_{E_0:\ \underline{R}\text{-től függ}} = E_t$$

$\Rightarrow$ E_0 és E állandók

$$E + E_0 = E_t$$

- $$-\frac{\hbar^2}{2(m_1+m_2)} \Delta_X \varphi(\underline{R}) = E_0 \varphi(\underline{R})$$

→ Szabad részecske Schr. egyenlete, (m_1+m_2) a tömeg
→ a TKP mozgását írja le
→ a megfelelő hullámcsomag szétfolyik (időfüggés miatt)

- $$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_x \Psi(\underline{x}) + U(r)\Psi(\underline{x}) = E\,\Psi(\underline{x})$$

→ a relatív mozgás Schrödinger-egyenlete

$$\Delta = \frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}(r \ldots) - \frac{1}{r^2\hbar^2}\hat{\underline{L}}^2$$ (a szögfüggő részt már ismerjük)

$$\Psi = \frac{1}{r}\chi(r)\cdot Y_{lm}(\vartheta,\varphi)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{1}{\cancel{r}}\chi'' + \frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{1}{r^2}\,l(l+1)\frac{\chi}{\cancel{r}} + \frac{U}{\cancel{r}}\chi = \frac{E}{\cancel{r}}\chi$$

$$\chi'' + \left[\frac{2m}{\hbar}(E-U) - \frac{l(l+1)}{r^2}\right]\chi = 0$$

1 dimenziós Schr.-egyenlet $\quad U(r) + \underbrace{\frac{\hbar^2}{2m}\frac{l(l+1)}{r^2}}_{\text{centrifugál gát}}$ effektív potenciálban

normálási feltétel kötött állapotra

$$\int |\Psi|^2 \underbrace{d\underline{r}}_{= r^2 \sin\vartheta\, d\vartheta\, d\varphi} = 1$$

$\Downarrow$

$$\int_0^\infty |\chi|^2 dr = 1$$

$$\chi(r=0) = \text{véges} = 0$$

- $r=0$ körüli asszimptotikus egyenlet, amennyiben $U(r)$ $\frac{1}{r^2}$-nél kevésbé divergál $r=0$ körül

$$\chi''_a - \frac{l(l+1)}{r^2}\chi_a = 0$$

Mo. $\chi_a = \text{const.}\cdot r^s$ $\quad (l = 0,1,2,\dots)$

$$s(s-1) - l(l+1) = 0 \quad \begin{cases} s = -l & \leftarrow \text{nem jó!, mert } \chi \neq \text{véges } r=0 \text{ ban} \\ s = l+1 & \Rightarrow \chi = \text{const.}\cdot r^{l+1} \end{cases}$$

- $r \to \infty$ esetén $E<0$ kötött állapot
  $E>0$ szórási állapot

Feltesszük, hogy $U(\infty) = 0$

$\rightarrow E>0$ $\quad \chi''_a - \frac{2m}{\hbar^2}E\cdot\chi_a$

$$\chi_a = c\cdot\sin\left(kr - \frac{\pi l}{2} + \delta_l\right)$$

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$ szabad részecskére $\delta_l = 0$,

(ezért nem olvasztjuk $\frac{\pi l}{2}$-t δ_l-be)

nem normálható ezt

$\rightarrow E \leq 0$ $\quad \chi_a = \text{const.}\cdot e^{-Kr}$ $\quad K = \sqrt{\frac{-2mE}{\hbar^2}}$

exponenciálisan lecseng

(konkrétabb megoldást csak akkor tudunk adni, amikor $U(r)$ alakja ismert, pl. Coulomb-potenciál)

12. óra

Mozgás Coulomb-térben: H-atom

1) $U = -\frac{e^2}{r} \cdot Z$

$Z = 1$ (H atom)

$$m = \frac{m_{p^+} \cdot m_{e^-}}{m_{p^+} + m_{e^-}} \approx m_{e^-}$$

$$\chi'' - \left[\frac{2m}{\hbar^2} \left(E + \frac{e^2}{r} \right) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] \chi = 0$$

a) $\underline{E < 0}$, kötött állapotokat keresünk, diszkrét spektrumot várunk el.

– Új, dimenziótlan változó: $\xi = \frac{2r}{r_0}$ $\qquad r_0 = \frac{\hbar}{\sqrt{2m|E|}}$

$$\frac{d^2\chi}{d\xi^2} - \left(\frac{1}{4} - \frac{\varepsilon}{\xi} + \frac{l(l+1)}{\xi^2} \right) \chi = 0 \quad ; \quad \varepsilon = \frac{m\, e^2\, r_0}{\hbar^2}$$

- $\xi \to \infty$: $\quad \frac{d^2\chi_{\text{asszimptot}_1}}{d\xi^2} - \frac{1}{4}\chi_{\text{assz}_1} = 0 \qquad \chi_{\text{assz}_1} = e^{-\frac{1}{2}\xi}$

- $\xi \to 0$: $\quad \chi_{\text{assz}_2} = \xi^{l+1}$

- $\chi = \xi^{l+1} \cdot e^{-\frac{\xi}{2}} \cdot w(\xi)$, $\quad w(\xi)$ hatványsor, amiből polinom lesz

$$w'' \cdot \xi^2 + w' \left(-\xi^2 + 2(l+1)\xi \right) + w \left(\varepsilon \cdot \xi - (l+1)\xi \right) = 0$$

$$\xi \cdot w'' + (2l+2-\xi)\, w' + (\varepsilon - l - 1)\, w = 0$$

$$w = \sum_{\nu=0} a_\nu \cdot \xi^\nu$$

$$\sum_{\nu'} \left[a_{\nu'} \cdot \nu'(\nu'-1) + a_{\nu'}(2l+2)\nu' \right] \xi^{\nu'-1} + \sum_{\nu} \left[-a_\nu \cdot \nu + a_\nu(\varepsilon - l - 1) \right] \cdot \xi^\nu = 0$$

$\uparrow$

$$\nu' := \nu + 1 \qquad \nu' - 1 = \nu$$

határ: ha $\nu' = 0 \to 0$ a tag $\Rightarrow$ $\nu' = 1$-től indul a Σ $\Rightarrow$ $\nu = 0$

$$\sum_\nu \Big[\underbrace{a_{\nu+1}\big(\nu(\nu+1) + (2l+2)(\nu+1)\big) + a_\nu(\varepsilon - l - 1 - \nu)}_{=0} \Big] \cdot \xi^\nu = 0$$

$$a_{\nu+1} = -a_\nu \cdot \frac{\varepsilon - l - 1 - \nu}{(\nu+1)(\nu+2l+2)}$$ rekurzív formula az eh.-kra

- Ha $\nu \gg 1$: $a_{\nu+1} = \frac{1}{\nu} \cdot a_\nu \Rightarrow a_\nu = \frac{1}{\nu!}$

  $\sum \frac{\xi^\nu}{\nu!} = e^\xi$ nem normálható $\Rightarrow$ véges sok tag kell

- Polinom, ha $\varepsilon = l + 1 + \nu = n$, $n = 1, 2, \ldots$

  $\varepsilon(E) \Rightarrow \boxed{E = -|E| = -\frac{me^4}{2\hbar^2 n^2}}$ $\qquad E \sim \frac{1}{n^2}$

— n neve főkvantumszám: $n = 1, 2, \ldots$, megszabja E-t.

l neve mellékkvantumszám: $l = 0, 1, \ldots n-1$ — " — az imp. mom.^{2}-t

m neve mágneses — " — : $m = -l, \ldots l$ — " — az imp. mom. z komp.-ját

- E nem függ l-től (és m-től), ez a Coulomb-pot.-ra jellemző speciálisan $\longleftarrow$ sokszoros degeneráció!

- Adott E-re (n-re)

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

- pl. $n=1$, $l=0$

$$\psi = 2\cdot\frac{1}{\rho^{3/2}}\cdot e^{-\frac{r}{\rho}}\cdot\frac{1}{\sqrt{4\pi}}, \quad \rho=\frac{\hbar^2}{me^2}$$ (a hullámfv. lecsengését adja meg r-ben)

$n=2$, $l=0$:

$$\frac{1}{\rho^{3/2}}\cdot\frac{1}{\sqrt{2}}\left(1-\frac{r}{2\rho}\right)e^{-\frac{r}{2\rho}}\cdot Y_{00}$$

$$l=1 \quad : \frac{1}{2\sqrt{6}}\,\frac{1}{\rho^{3/2}}\cdot\frac{r}{\rho}\cdot e^{-\frac{r}{2\rho}}\cdot Y_{1m}$$

$n=3$,

$$l=0 \quad \frac{1}{\rho^{3/2}}\,\frac{2}{3\sqrt{3}}\left(1-\frac{2}{3}\,\frac{r}{\rho}+\frac{2}{27}\,\frac{r^2}{\rho^2}\right)e^{-\frac{r}{3\rho}}\,Y_{00}$$

$$l=1 \quad \frac{1}{\rho^{3/2}}\cdot\frac{8}{\sqrt{6}\cdot 27}\cdot\left(1-\frac{1}{6}\,\frac{r}{\rho}\right)e^{-\frac{r}{3\rho}}\cdot Y_{1m}$$

$$l=2 \quad \frac{1}{\rho^{3/2}}\cdot\frac{4}{81\sqrt{30}}\left(\frac{r}{\rho}\right)^2\cdot e^{-\frac{r}{3\rho}}\cdot Y_{2m}$$

(minél nagyobb n, annál jobban lecseng a hullámfv.)

- Átlag: $$\langle r\rangle = \frac{\rho}{2Z}\left[3n^2 - l(l+1)\right]$$

$$\langle r^2\rangle = \frac{\rho^2 n^2}{2Z^2}\left[5n^2+1-3l(l+1)\right]$$

$$\left\langle \frac{1}{r} \right\rangle = \frac{1}{\varrho} \frac{Z}{n^2} \Rightarrow \langle U \rangle = 2E \quad \text{vagy}$$

$$-\langle U \rangle = 2\langle T \rangle$$

viriál tétel

$$\frac{1}{r} \chi = f_{nl}(r) = N_{nl} \left(\frac{2Zr}{\varrho \cdot n} \right)^{l} \cdot F\left(-n+l+1, 2l+2, \frac{2Zr}{n\varrho} \right)$$

F: elfajult hipergeometrikus hipergeometrikus fv.

$$N_{nl} = \frac{1}{(2l+1)!} \left[\frac{(n+l)!}{2n(n-l-1)!} \right]^{1/2} \cdot \left(\frac{2Z}{n} \right)^{3/2}$$

b) <u>$E > 0$ eset</u> : folytonos a spektrum

$$\chi'' + \left[\frac{2m}{\hbar^2} \left(E + \frac{e^2}{r} \right) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] \chi = 0$$

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

- $r \to \infty$: $\chi_{asz_1} \sim A \cdot e^{ikr} + B e^{-ikr}$
- $r \to 0$: $\chi_{asz_2} \sim r^{l+1}$
- $\chi(r) = e^{\pm ikr} \cdot r^{l+1} \cdot \underbrace{\sum_{n=0}^{\infty} \beta_n \cdot r^n}_{\text{polinom}}$

$\vdots$

$$\chi_{k,l}(r) = e^{\pm ikr} \left(\frac{r}{\varrho} \right)^{l+1} \cdot F\left(l+1 \pm \frac{Z}{ik\varrho}, 2l+2, \mp 2ikr \right)$$

2) Coulomb-taszítás

Csak $E>0$, a spektrum folytonos

$$\chi_{k,l}(r)=e^{\pm ikr}\left(\frac{r}{\rho}\right)^{l+1}\cdot F\left(l+1\mp\frac{Z}{ik\rho},\,2l+2,\,\mp 2ikr\right)$$

A klasszikus mechanikával való kapcsolat, kváziklasszikus közelítés (Wentzel - Kramers - Brillouin-köz.)

$\underbrace{\text{Wentzel - Kramers - Brillouin-köz.}}_{\text{WKB - közelítés}}$

1) Bevezetés:

- A kváziklasszikus hullámfv.: $a\cdot e^{\frac{i}{\hbar}\phi}$

$$\Psi(\underline{r},t)=e^{\frac{i}{\hbar}S(\underline{r},t)},$$ ahol S a hatásintegrál

Világos, hogy $\forall$ hullámfv. felírható így, ha komplex S-et megengedünk

$\Rightarrow$ Beírva a Schr.-egyenletbe:

$$-\frac{\partial S}{\partial t}=\frac{(\nabla S)^2}{2m}+U(\underline{r})-\frac{i\hbar}{2m}\Delta S$$

($\hbar\to 0$ esetén ez a Hamilton-Jacobi-egyenlet és S a klasszikus hatásintegrál)

– adott energia esetén:

$$\Psi(\underline{r},t) = \Psi(\underline{r}) \cdot e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$$

$$S(\underline{r},t) = S_0(\underline{r}) - Et \qquad (S_0(\underline{r}): \text{rövidített hatás})$$

$$\Psi(\underline{r}) = e^{\frac{i}{\hbar}S_0(\underline{r})}$$

$$\Rightarrow \frac{(\nabla S_0)^2}{2m} + U(\underline{r}) - E - \frac{i\hbar \Delta S_0}{2m} = 0$$

$$\downarrow$$

ezt elhagyva a rövidített hatásra felírt Ham.–Jacobi-egyenletet kapjuk

• az elhanyagolás jogos, ha $(\nabla S_0)^2 \gg \hbar |\Delta S_0|$

$$\nabla S_0 = p \text{, így}$$

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

1 dim. mozgásra $\quad 1 \gg \dfrac{\hbar \left|\frac{dp}{dx}\right|}{p^2}$

$p = \sqrt{2m(E-U)}$, így $\left|\dfrac{dp}{dx}\right| = \dfrac{m}{p}\left|\dfrac{dU}{dx}\right|$

végül $\boxed{p^3 \gg m\hbar \left|\dfrac{dU}{dx}\right|}$ a feltétel

Nagy impulzus kell és lassan változó potenciál

2) WKB - módszer:

- A stacionárius hullámfv.:

$$\psi(\underline{r}) = e^{\frac{i}{\hbar}\sigma(\underline{r})}$$ -t alakban keressük

$$\sigma = \sigma_0 + \frac{\hbar}{i}\sigma_1 + \left(\frac{\hbar}{i}\right)^2 \sigma_2 + \dots$$ ($\hbar$-ban sorfejtés)

Ha $p^2 \gg \hbar|\operatorname{div} \underline{p}|$ esetén σ_0 dominál, a további tagok a korrekciók.

- Schr.-egy.:

$$\frac{(\nabla\sigma)^2}{2m} + U(\underline{r}) - E - \frac{i\hbar\,\Delta\sigma}{2m} = 0$$

- Beírva a sorfejtést:

$$(\nabla\sigma_0)^2 + 2m(U-E) = 0$$

$$\nabla\sigma_1 \cdot \nabla\sigma_0 + \frac{1}{2}\Delta\sigma_0 = 0$$

$$(\nabla\sigma_1)^2 + 2\nabla\sigma_0\nabla\sigma_2 + \Delta\sigma_1 = 0$$

$$\dots$$

megoldható

- 1 dim. eset:

$$\sigma_0'^2 = p^2(x), \quad p^2 = 2m(E - U(x))$$

$$2\sigma_1' = -\frac{\sigma_0''}{\sigma_0'} = -\frac{d}{dx}\ln\sigma_0'$$

$$2\sigma_2' = -\frac{\sigma_1'' + (\sigma_1')^2}{\sigma_0'}$$

$$\dots$$

Mo.: $\sigma_0' = \pm p(x) \Rightarrow \sigma_0 = \pm \int_a^x p(x')\,dx'$

$$\sigma_1 = -\ln\sqrt{|p|} + \ln C$$

$$\Psi(x) = \frac{C}{\sqrt{|p|}} e^{\frac{i}{\hbar}\int_a^x p(x')\,dx'} + \frac{C_1}{\sqrt{|p|}} e^{-\frac{i}{\hbar}\int_a^x p(x')\,dx'}$$

- Klasszikusan megengedett tart.: $E - U(x) > 0$, $p(x)$ valós

$$\Psi(x) = \frac{A}{\sqrt{p}} \sin\left(\frac{1}{\hbar}\int_a^x p(x')\,dx' + \alpha\right)$$

$|\Psi(x)|^2 \sim \frac{1}{p}$ fizikailag érthető

- Ha $p=0$ $(E = U(x_0))$ baj van, mivel $p^3 \gg m\hbar\left|\frac{dU}{dx}\right|$ nem teljesül
- x_0-tól milyen messze jó a közelítés?

$$p^2 = 2m(E - U(x)) \simeq 2m\left|\frac{dU}{dx}\right|_{x_0}\cdot(x - x_0) + \dots$$

$$\Rightarrow |x - x_0| \gg \frac{1}{2}\left(\frac{\hbar^2}{m\left|\frac{dU}{dx}\right|}\right)^{1/3} = \frac{\hbar}{2p(x_0)} = \frac{\lambda(x_0)}{4\pi}$$

(hullámhossznál nagyobb távolságban már jó a közelítés)

$\Downarrow$

(x_0 körül $(p=0)$ nem jó a közelítés)

13. óra

2) WKB-közelítés (folyt.)

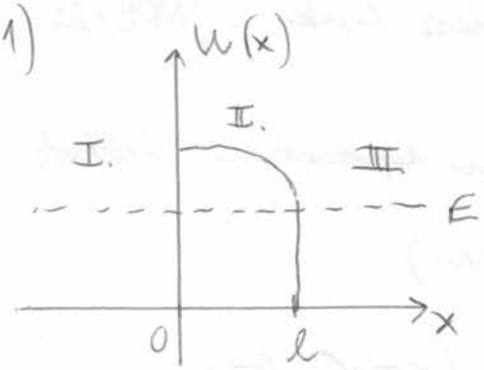
- $E < U$ tartományban $p = i\hbar\kappa$

$$\psi(x) = \frac{c}{\sqrt{|p|}} \cdot e^{-\int_0^x \kappa(x')\,dx'} + \frac{c_1}{\sqrt{|p|}} \cdot e^{+\int_0^x \kappa(x')\,dx'}$$

A 2 tartományt egy $p=0$ pont (x_0) választja el, így nehéz illeszteni

Áthaladás potenciál hegyen (alagúteffektus)

1)



$|p| \neq 0 \Rightarrow$ WKB alkalmazható

+ illeszteni kell ψ, ψ'-t $x=0$, illetve l-nél

$$\psi_I = A \cdot e^{i\frac{p_0}{\hbar}x} + B e^{-i\frac{p_0}{\hbar}x}$$

$$\psi_{III} = C \cdot e^{i\frac{p_0}{\hbar}x}$$

$\leftarrow$ mi választjuk meg $D=0$-t (így képzeljük el, hogy a $-\infty$-ből küldünk egy részecske-hullámot a pot. gátra, ami részben visszaverődik, részben átmegy)

- Visszaverődési együttható:

$$R = \frac{\text{visszavert áram}}{\text{beeső áram}} \qquad j = \frac{i\hbar}{2m}\left(\psi \cdot \psi^{*\prime} - \psi^{*} \cdot \psi'\right) \quad \text{1D-ben}$$

$$\left.\begin{aligned} j_{vissza} &= -\frac{p_0}{m}|B|^2 \\ j_{beeső} &= \frac{p_0}{m}|A|^2 \end{aligned}\right\} \Rightarrow R = \frac{|B|^2}{|A|^2}$$

- áthaladási együttható:

$$D = \frac{\text{áthaladó áram}}{\text{beeső áram}} = \frac{|C|^2}{|A|^2}$$

- határfeltételek:

$\Psi_\pm$ -ben szerepel $\varkappa(x) = \sqrt{\frac{2m(U-E)}{\hbar^2}}$

legyen ez lassan változó fv. (akkor lesz csak a WKB-köz. jó közelítés) $\Rightarrow$ a deriválásnál csak az exponenciális faktort deriváljuk ($U \approx$ konstans)

$x=0$ $\quad A+B = (\alpha+\beta)\frac{1}{\sqrt{a}}$ $\quad a = \varkappa(0)$, ($\alpha = -C$, $\beta = -C_1$ a WKB levezetésben (78. old))

$$i\frac{p_0}{\hbar}(A-B) = \sqrt{a}\,(\alpha-\beta)$$

$x = l$ $\quad \alpha\cdot e^{\gamma} + \beta\cdot e^{-\gamma} = C\cdot\sqrt{b}\cdot e^{i\frac{p_0 l}{\hbar}}$

ahol $\quad b = \sqrt{\frac{2m(U(l)-E)}{\hbar^2}}$, $\gamma = \frac{1}{\hbar}\int_0^l \sqrt{2m(U(x)-E)}\,dx$

$$\sqrt{b}\cdot\left[\alpha\cdot e^{\gamma} - \beta\cdot e^{-\gamma}\right] = i\frac{p_0}{\hbar}\cdot C\cdot e^{i\frac{p_0}{\hbar}l}$$

5 ismeretlen

4-ből meghatározható $\alpha, \beta, \frac{B}{A}, \frac{C}{A}$

3,4 - ből: $\alpha = \frac{1}{2}\left(\sqrt{b} + \frac{ip_0}{\hbar\sqrt{b}}\right) \cdot C \cdot e^{\frac{ip_0 l}{\hbar} - \gamma}$

$$\beta = \frac{1}{2}\left(\sqrt{b} - \frac{ip_0}{\hbar\sqrt{b}}\right) \cdot C \cdot e^{i\frac{p_0}{\hbar} l + \gamma}$$

Világos: $\gamma = \overline{\kappa} \cdot l \gg 1$ $\qquad (\overline{\lambda} \gg l)$

$\Rightarrow \alpha \ll \beta \quad \alpha = 0$-t vesszük

$$R = \frac{C}{A} = \frac{4 \cdot e^{\frac{ip_0 l}{\hbar} - \gamma}}{\left(\frac{1}{\sqrt{a}} - \frac{\sqrt{a}\,\hbar}{ip_0}\right)\left(\sqrt{b} - \frac{ip_0}{\hbar\sqrt{b}}\right)}$$

$$D = \frac{B}{A} = \frac{16\, e^{-2\gamma}}{\left(\frac{b}{a} + \frac{ab\hbar^2}{p_0^2} + \frac{p_0^2}{ab\hbar^2} + \frac{a}{b}\right)} \approx e^{-\frac{2}{\hbar}\int_0^l \sqrt{2m(U(x) - E)}\, dx}$$

$R = 1 - D$ (árammegmaradásból)

D erősen függ m-től pl. proton és elektron esetén

$$e^{\sqrt{2000}} \approx 10^{18} \text{ faktor}$$

$\Rightarrow$ Ha l nő D exponenciálisan csökken !

2) Ha $E > U_{max}$

$$\Psi_{II} = \frac{\alpha\sqrt{\hbar}}{\sqrt{p(x)}} \cdot \sin\left(\frac{1}{\hbar}\int_0^x p(x')\,dx' + \beta\right)$$

• Visszaverődési együttható:

$$R = \left|\frac{B}{A}\right|^2 \neq 0$$

A képlet egyszerűbb, ha $U(0)=U(l)$

$$a = b = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(E-U(0))}$$

ált. ban:

$$\frac{B}{A} = \frac{i\,\frac{p_0(b-a)}{\hbar} + \left(\frac{p_0^2}{\hbar^2} - ab\right)\operatorname{tg}\varphi}{i\,\frac{p_0(b+a)}{\hbar} + \left(\frac{p_0^2}{\hbar^2} + ab\right)\operatorname{tg}\varphi}$$

ahol $\varphi = \frac{1}{\hbar}\int_0^l \sqrt{2m(E-U(x))}\,dx$

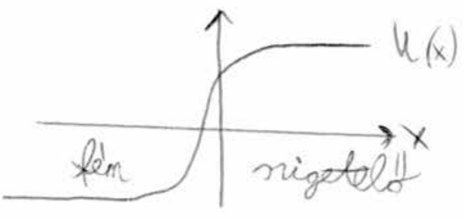
→ spec. eset: $U(0)=U(l)$:

lehet $R=0$ és $\varphi = n\pi$ $\quad n = 1, 2, \dots$

azaz teljesen átlátszó a pot. hegy.

Másképp $\frac{\bar{p}\,l}{\hbar} = n\pi$ vagy $l = n\frac{\lambda}{2}$

• Pl. hidegemisszió



külső el. térrel: $U_{el} = -\mathcal{E}\cdot e\cdot x$

át tud alagutazni az oxidrétegen az elektron!

Elemi reprezentáció elmélet

1) Ha $\hat{F} = \hat{F}^+$, s. fv.: Ψ_n, Ψ_F

$\uparrow$ diszkrét $\uparrow$ folytonos

a) $$|\Psi\rangle = \sum_n a_n |\Psi_n\rangle + \int a_F \cdot |\Psi_F\rangle \overset{\text{új jelölés}}{=} \sum_n a_n |F_n\rangle + \int a_F |F\rangle$$

$$a_n = \langle \Psi_n | \Psi \rangle \quad a_F = \langle \Psi_F | \Psi \rangle$$

- $\langle F | \Psi \rangle$-k jellemzik az állapotot

- $|\langle F|\Psi\rangle|^2 dF$ az adott érték mérésének valószínűsége

b) $\langle \Psi | \Psi \rangle = 1$ és $\langle F_n | F_{n'} \rangle = \delta_{nn'}$ ortogonalitás

$$\langle F | F' \rangle = \delta(F - F')$$

(Ha $\hat{F}$ a koord. operátor:

$$\Psi(q) = \langle q | \Psi \rangle$$

$|\Psi(q)|^2 dq = |\langle q|\Psi\rangle|^2 dq$ az adott helyen való megtalálás valószínűsége)

c) A kifejtésből: $|\Psi\rangle = \sum_n |F_n\rangle\langle F_n|\Psi\rangle + \int dF\, |F\rangle\langle F|\Psi\rangle$

$$\Rightarrow \quad \sum_n |F_n\rangle\langle F_n| + \int dF\, |F\rangle\langle F| = I \quad \text{teljesség}$$

- A bázisvektorok: $|F_n\rangle, |F\rangle$
- A koordináták: $\langle F_n|\Psi\rangle$, $\langle F|\Psi\rangle$

$=$ F reprezentáció: $|\Psi\rangle \to \begin{pmatrix} \langle F_1|\Psi\rangle \\ \langle F_2|\Psi\rangle \\ \vdots \end{pmatrix}$

d) Skalárszorzat F repr.-ban

$$\langle\Psi|\phi\rangle = \sum_F \underbrace{\langle\Psi|F\rangle\langle F|}_{\substack{\text{beszúrjuk} \\ \text{az egységmátrixot}}}\phi\rangle = \sum_F \langle F|\phi\rangle\langle F|\Psi\rangle^*$$

$$\begin{pmatrix} F|\Psi\rangle \end{pmatrix}^* \begin{pmatrix} F|\phi\rangle \end{pmatrix}$$

2) Hogyan lehet F repr.-ból M repr.-ba áttérni? (vektorok esetén)

$$\begin{array}{cc} \downarrow & \downarrow \\ \langle F|\Psi\rangle & \langle M|\Psi\rangle \end{array}$$

a) $\langle M|\Psi\rangle = \sum_F \langle M|F\rangle\langle F|\Psi\rangle$

$\langle M|F\rangle$-et kell tudni, ami négyzetes mátrixba írható

$$\langle M|\Psi\rangle = \underbrace{\begin{pmatrix} \langle M|F\rangle \end{pmatrix}}_{\text{mátrix}} \underbrace{\begin{pmatrix} \langle F|\Psi\rangle \end{pmatrix}}_{\text{vektor}}$$

Fordítva:

$$\langle F|\Psi\rangle = \sum_M \langle F|M\rangle\langle M|\Psi\rangle$$

$$\langle F|M\rangle = \langle M|F\rangle^*$$

3) Operátorok:

koord. repr.-ban: $\hat{A}\,\psi(q) = \varphi(q)$

$$\hat{A}\ \langle q|\psi\rangle = \langle q|\varphi\rangle$$

$$\langle q|\psi\rangle = \sum_{F'} \langle q|F'\rangle\langle F'|\psi\rangle$$

$$\langle q|\varphi\rangle = \sum_{F'} \langle q|F'\rangle\langle F'|\varphi\rangle$$

$$\sum_{F'} \underbrace{\int dq\, \langle F|q\rangle\, \hat{A} \langle q|F'\rangle}\langle F'|\psi\rangle = \int dq\, \langle F|q\rangle\langle q|\varphi\rangle =$$

$$= \sum_{F'} \int dq\, \underbrace{\langle F|q\rangle\langle q|F'\rangle}_{\langle F|F'\rangle = \delta_{FF'}}\langle F'|\varphi\rangle =$$

$$\underbrace{\int dq\, |q\rangle\langle q|}_{1} \cdot \underbrace{\langle F|\hat{A}|F'\rangle}_{\text{mátrixelem}}$$

$$= \langle F|\varphi\rangle$$

$$\sum_{F'} \langle F|\hat{A}|F'\rangle\ \langle F'|\psi\rangle = \langle F|\varphi\rangle$$

$\Downarrow$

$\hat{A}$ operátornak megfelel $\langle F|\hat{A}|F'\rangle$ mátrix.

- Ha $\hat{A}$ hermitikus: $\langle F|\hat{A}|F'\rangle = \langle \hat{A}F|F'\rangle = \langle F'|\hat{A}|F\rangle^*$

4) Milyen $\hat{A}$ mátrixa M repr.-ban az F repr. mátrixával felírva?

$$\langle M|\hat{A}|M'\rangle = \sum_{F'}\sum_{F''} \underbrace{\langle M|F'\rangle}_{\substack{\text{transzf.-s}\\ \text{mátrix}\\ F\to M}} \underbrace{\langle F'|\hat{A}|F''\rangle}_{\substack{\text{op. mátrixa}\\ F \text{ repr.-ban}}} \underbrace{\langle F''|M'\rangle}_{\substack{\text{transzf.-s mátrix}\\ M\to F}}$$

14. óra

3) Ism. operátorok reprezentációja:

- $$\hat{A}\Psi(q) = \varphi(q)$$

$$\langle q|\hat{A}\Psi\rangle = \langle q|\varphi\rangle$$

$$\parallel$$

$$\langle \hat{A}q|\Psi\rangle = \hat{A}\langle q|\Psi\rangle$$

· Betesszük a $\sum_{F'} |F'\rangle\langle F'|$ egységop.-t:

$$\sum_{F'} \hat{A}\langle q|F'\rangle\langle F'|\Psi\rangle = \sum_{F'}\langle q|F'\rangle\langle F'|\varphi\rangle$$

$$\sum_{F'}\int dq\, \langle F|q\rangle\hat{A}\langle q|F'\rangle\langle F'|\Psi\rangle = \underbrace{\sum_{F'}\int dq\, \langle F|\underbrace{q\rangle\langle q|}_{I}F'\rangle\langle F'|\varphi\rangle}$$

b.o.: $= \sum_{F'}\int dq\,\langle F|q\rangle\langle \hat{A}_q|F'\rangle\langle F'|\Psi\rangle =$

$= \sum_{F'}\int dq\,\langle F\underbrace{|q\rangle\langle q|}_{I}\hat{A}F'\rangle\langle F'|\Psi\rangle =$

$= \sum_{F'}\underbrace{\langle F|\hat{A}|F'\rangle}_{\hat{A}\text{ op. elemei}}\langle F'|\Psi\rangle$

j.o.: $= \sum_{F'}\underbrace{\langle F|F'\rangle}_{\delta_{FF'}}\langle F'|\varphi\rangle =$

$= \langle F|\varphi\rangle$

$$\Rightarrow \Big(\quad A \quad\Big)_{FF'}\begin{pmatrix}\Psi\end{pmatrix}_{F'} = \begin{pmatrix}\varphi\end{pmatrix}_F$$

- Mivel $\hat{A}$ hermitikus $\Rightarrow$ $\langle F|\hat{A}|F'\rangle$ mátrix is az
- Ha $\hat{A} = \hat{F}$:

$$\langle F|\hat{F}|F'\rangle = F\,\delta_{FF'}\text{, azaz a mátrix diagonál}$$

- Mi $\hat{A}$ mátrixa M repr.-ban?

$$\langle M|\underset{\underset{I}{\uparrow}}{}\hat{A}\underset{\underset{I}{\uparrow}}{|}M'\rangle = \sum_{F'}\sum_{F''}\langle M|F'\rangle\langle F'|\hat{A}|F''\rangle\langle F''|M'\rangle$$

$$\Big(\quad M \quad\Big)_{F'}\begin{pmatrix} & & \\ & A & \\ & & \end{pmatrix}_{F'F''}\begin{pmatrix} \\ M \\ \\ \end{pmatrix}_{F''}$$

$$\langle M|F\rangle = \langle F|M\rangle^*$$

- pl. $\hat{p}$ op. impulzus repr.-ban

$$\langle p'|\hat{p}|p\rangle = p\langle p'|p\rangle = p\,\delta(p-p') \overset{\text{másképp}}{=} \int dx\,\langle p'|x\rangle\,\hat{p}\,\langle x|p\rangle =$$

$$= \int dx\,\underset{\substack{\uparrow \\ \text{impulzus sajátáll.}}}{\psi^*_{p'}(x)}\,\hat{p}\cdot\psi_p(x) = p\int dx\,\psi^*_{p'}(x)\cdot\psi_p(x) = p\,\delta(p'-p)$$

$$\langle p'|\hat{x}|p\rangle = \int dx\,\langle p'|x\rangle\,x\,\langle x|p\rangle = \int dx\,\psi^*_{p'}(x)\cdot x\cdot\psi_p(x) =$$

msz.: $x\cdot\psi_p(x) = x\cdot C\cdot e^{i\frac{p}{\hbar}x} = -i\hbar\,C\cdot\frac{d}{dp}\,e^{i\frac{p}{\hbar}x}$

$$= -i\hbar\frac{d}{dp}\int dx\,\psi^*_{p'}(x)\cdot\psi_p(x) = -i\hbar\frac{\partial}{\partial p}\,\delta(p'-p)$$

- Mi $\hat{A}\cdot\hat{B}$ op. mátrixa F repr.-ban?

$\langle F|\hat{A}\underset{\underset{I}{\uparrow}}{\cdot}\hat{B}|F'\rangle = \sum_{F''}\langle F|\hat{A}|F''\rangle\langle F''|\hat{B}|F'\rangle$ a mátrixok szorzata

- Átlagérték:

$$\langle\Psi\underset{\uparrow \atop I}{|}\hat{A}\underset{\uparrow \atop I}{|}\Psi\rangle = \sum_{F,F'} \langle\Psi|F\rangle\langle F|\hat{A}|F'\rangle\langle F'|\Psi\rangle$$

$$\left(\quad\quad\right)^{*}\left(\ \hat{A}\ \right)\left(\ \right)$$

4) <u>Sajátérték számítás</u>

$$\hat{A}\Psi_A(q) = A\Psi_A(q)$$

- F repr.:

$$\sum_{F'} \langle F|\hat{A}|F'\rangle\langle F'|\Psi\rangle = A\langle F\underset{\uparrow \atop I}{|}\Psi\rangle = A\sum_{F'}\delta_{FF'}\langle F'|\Psi\rangle$$

$$\sum_{F'}\left(\langle F|\hat{A}|F'\rangle - A\delta_{FF'}\right)\langle F'|\Psi\rangle = 0$$

$\Rightarrow$ $\langle F'|\Psi\rangle$-re homogén, lineáris egy. rendszer

- Megoldás akkor van, ha:

$$\mathrm{Det}\left(\langle F|\hat{A}|F'\rangle - A\,\delta_{FF'}\right) = 0$$

$\rightarrow$ Innen meghatározhatók A sajátértékei

- Adott s. értékre $\langle F'|\Psi\rangle$ is megh.-ható

\+ ki kell kötni a normálási feltételt

$\Rightarrow$ Meghatározhatók a s.fv.-ek is

- Ha F repr. helyett A repr.-t veszünk:

$$\langle A|\hat{A}|A'\rangle = A\,\delta_{AA'} \text{ diagonális}$$

A mátrix diagonalizálása a s. ért. feladat

- Igaz M repr.-ban:

$$\langle M|\hat{A}|M'\rangle = \sum_{FF'} \langle M|F\rangle\langle F|\hat{A}|F'\rangle\langle F'|M'\rangle$$

$$\begin{pmatrix} & A & \end{pmatrix}_{MM'} = \underbrace{\begin{pmatrix} & & \end{pmatrix}_{MF}}_{S(F\to M)}\begin{pmatrix} & A & \end{pmatrix}_{FF'}\underbrace{\begin{pmatrix} & & \end{pmatrix}_{F'M'}}_{S(M\to F)}$$

- Világos, hogy:

$$S(F\to M)\,S(M\to F) = \underline{\underline{1}}$$

$$\left.\begin{array}{l} \Rightarrow S(M\to F) = S^{-1}(F\to M) \\ \text{másrészt } S(M\to F) = S(F\to M)^{+} \end{array}\right\} \Rightarrow S \text{ uniter mátrix}$$

$\Rightarrow$ Adott $\hat{A}$ op. diagonalizálása a megfelelő uniter mátrix-szal történik

5) A reprezentációk <u>ekvivalensek</u>, a fizika ugyanaz.
Operátorok nyelvén is elmondható az egyik repr.-ból a másikba való áttérés. Uniter transzformációt kell csinálni:

$$\hat{A} \to \hat{A}' = \hat{S}\hat{A}\hat{S}^{-1} \qquad \psi \to \psi' = S\psi$$

$$\hat{S}\hat{S}^{+} = \underline{\underline{1}}$$

- Mi nem változik?

a) $\hat{A}'$ is lineáris, hermitikus op.

b) Ha $[\hat{A}, \hat{B}] = i\hat{C} \Rightarrow [\hat{A}', \hat{B}'] = i\hat{C}'$

c) A s. ért.-ek nem változnak

d) Az op.-k közti algebrai összefüggések nem változnak

e) Az op.-ok mátrixelemei és a skalárszorzatok nem változnak

- A cserelációk a lényegesek!

<u>Neumann:</u> A $[\hat{p}_i, \hat{x}_k] = \frac{\hbar}{i}\delta_{ik}$ kommutátor minden Hilbert térbeli reprezentációja (ábrázolása) unitér ekvivalens

<u>Feltétele:</u> véges szabadsági fokszám esetén

Az állapot időbeli változásának leírása

A) Schrödinger-kép:

$$\Psi(q,t) = S(t)\cdot \underbrace{\Psi(q,0)}_{\Psi(q)}$$

- $S(0) = \underline{1}$ op.

- $S(t)$ uniter op.:

$$\langle \Psi' | \Psi \rangle_{t=0} = \langle S\Psi' | S\Psi \rangle_t \Rightarrow S S^+ = 1 \text{ azaz } S \text{ uniter}$$

– Schrödinger-egyenletbe beírva:

$$\left[i\hbar \frac{\partial S(t)}{\partial t} - \hat{H} S(t) \right] \Psi(q,0) = 0$$

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

formális mo.: $S(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}$

$\underline{\underline{\Psi(q,t) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\cdot \Psi(q,0)}}$, az operátorok nem függnek az időtől

B) Heisenberg-kép:

Időfüggő uniter tr.-val kapjuk: operátorok időfüggőek, az állapot fv. nem függ t-től.

- Legyen $\Psi_S(q,t)$ a Schr.-képbeli állapotfv.:

$$\boxed{\begin{aligned} \Psi_H(q) &\equiv S^{-1}(t)\,\Psi_S(q,t) \\ \hat{F}_H(t) &\equiv S^{-1}(t)\cdot\hat{F}_S\cdot S(t) \end{aligned}}$$

- $$\frac{d\hat{F}_H(t)}{dt} = \left(\frac{d}{dt}S^{-1}\right)\cdot F_S\cdot S + S^{-1}\cdot F_S\cdot\left(\frac{d}{dt}S\right)$$

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

$\hat{S}$ és $\hat{H}$ kommutálnak ($\hat{S}$ $\hat{H}$ fv.-e)

$$= \frac{i}{\hbar}\hat{H}S^{-1}F_S S + S^{-1}F_S\left(-\frac{i}{\hbar}\cdot\hat{H}\right)\cdot S = -\frac{i}{\hbar}\left[F_H, \hat{H}\right]$$

- $$\hat{F}(t+\tau) = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}\tau}\,\hat{F}_H(t)\,e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}\tau}$$

- Ha $\left[\hat{F}_H, \hat{H}\right] = 0 \Rightarrow \hat{F}_H$ időben állandó

Nyilván $\hat{H}$ ilyen

$\rightarrow$ mivel $\hat{S}(t=0) = \underline{\underline{1}} \Rightarrow \hat{F}_H(t=0) = \hat{F}_S = \hat{F}_H(t) = \text{áll.}$

$$\hat{H}_S = \hat{H}_H$$

(a Hamilton- és Schr.-képben a Hamilton megegyezik!)

C) Kölcsönhatási (Dirac-) kép:

$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V} \leftarrow$ kölcsönhatás

$S_K^{-1}(t) = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t}$ -vel csinálunk unitér tr.-t

$$\Psi_K(q,t) = S_K^{-1}(t)\, \Psi_S(q,t)$$

$$\hat{F}_K(t) = S_K^{-1}(t) \cdot \hat{F}_S \cdot S_K(t)$$

Schr.-egyenletbe beírjuk: $\Psi_S(q,t) = S_K(t) \cdot \Psi_K(q,t)$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\left(e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t} \cdot \Psi_K(q,t)\right) = \hat{H}\left(e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t} \cdot \Psi_K\right.$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\Psi_K(q,t) = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t} \cdot V \cdot e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t} \cdot \Psi_K(q,t)$$

$$\underline{\underline{i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\Psi_K(q,t) = \hat{V}_K(t) \cdot \Psi_K(q,t)}}$$

→ ebben a képben a Hamilton általában időfüggő!! (de $t=0$-ban megegyezik a Schr.-képbeli $\hat{H}$-al)

$$\underline{\underline{\frac{d\hat{F}_K(t)}{dt} = -\frac{i}{\hbar}\left[\hat{F}_K(t), \hat{H}_0\right]}}$$

(ríadselméletben használják ezt a leírásmódot)

15. óra

„E, t határozatlansági reláció"

1) Valamiféle $\Delta E \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}$ összefüggés léte sejthető,
ahol ΔE az energia szórása. $\Delta t = ?$ $\left(\Delta p \Delta x \geq \frac{\hbar}{2} \Rightarrow \Delta E \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}\right)$
(Miből sejthető? Síkhullám alakja: $e^{i\left(\frac{p}{\hbar}x - \frac{E}{\hbar}t\right)}$

t = idő paraméter, nem mérhető jellemzője az állapotnak, nem fizikai mennyiség (kvantummechanikai értelemben).

2) Levezetés:

$$\frac{d}{dt}\langle \hat{A} \rangle \underset{\uparrow}{=} \langle \Psi_H | \frac{d}{dt}\hat{A}_H | \Psi_H \rangle = \langle \Psi_H | \frac{-i}{\hbar}[\hat{A}_H, \underset{\uparrow}{\hat{H}}] | \Psi_H \rangle$$

Heisenberg-kép

a Hamilton Heisenberg-, Schrödinger-, ... képekben uaz.

A Heisenberg-féle hat. lansági reláció:

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

Def.: $\tau_A = \dfrac{\Delta A}{\frac{d\langle A \rangle}{dt}}$ (a szóráshoz képest mekkora az átlagérték időegységre eső megváltozása).

Tehát $\Delta E \cdot \tau_A \geq \frac{\hbar}{2}$

Legyen adott állapotra τ_A minimuma τ (többféle A mennyiséget veszünk, és megnézzük, melyikre a legkisebb τ_A)

$$\Rightarrow \quad \boxed{\Delta E \cdot \tau \geq \frac{\hbar}{2}}$$

↓

τ már univerzális mennyiség

3) Pl. Stacionárius állapot: $\Delta E = 0$ konzisztens $\tau = \infty$-el.

$$\boxed{\tau = \text{állapot élettartama}}$$

4) Pl. bomló állapot:

$$\Psi(t) = \Psi(0) \cdot e^{-\frac{i}{\hbar} E_0 t - \frac{\Gamma}{2\hbar} \cdot t}$$

$$|\Psi|^2 = |\Psi(0)|^2 \cdot e^{-\frac{\Gamma}{\hbar} t}$$

$$\tau = \frac{\hbar}{\Gamma}$$

ahol Γ értelmezése:

$$\Delta E \cdot \tau \approx \hbar$$

$$E_{komplex} = E - i\frac{\Gamma}{2}$$

$$\int \Psi(t) \cdot e^{\frac{i}{\hbar} E t} \, dt \propto \frac{\hbar}{i} \frac{1}{E - E_0 + \frac{i\Gamma}{2}}$$ rezonanciagörbe

$$\Delta E \cdot \tau = \frac{\Gamma}{2} \cdot \frac{\hbar}{\Gamma} = \frac{\hbar}{2}$$

Perturbációszámítás

Időfüggetlen perturbációszámítás

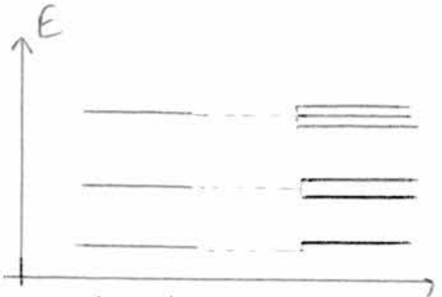
1) Diszkrét energiasajátértékeket és a megfelelő s. fv.-eket akarjuk közelíteni.

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$$

kicsi

ismert; $\psi_n^{(0)}, E_n^{(0)}$ ismertek

Mit értünk $\hat{V}$ kicsisége alatt?



$\hat{H}_0$ s.értékei $\hat{H}$ s.értékei : kicsi az eltérés

2) A) Nemelfajult eset:

($\hat{H}_0$ s.értékei nem elfajultak)

$$\hat{H}\psi = \left(\hat{H}_0 + \lambda\hat{V}\right)\psi = E\psi$$

a végén 1 lesz

$$\psi = \sum_m c_m \psi_m^{(0)}$$

$$\sum_m c_m \left(E_m^{(0)} + \lambda\hat{V}\right)\psi_m^{(0)} = \sum_m c_m E\cdot\psi_m^{(0)}$$ / Beszorzunk balról $\psi_k^{(0)}$-al

$$\sum_m c_m \left(E_m^{(0)}\cdot\delta_{km} + \lambda \underbrace{\langle \psi_k^{(0)} | \hat{V} | \psi_m^{(0)} \rangle}_{\text{jelölés: } \langle k|\hat{V}|m\rangle}\right) = E\sum_m c_m \delta_{km}$$

$$\boxed{\left(E-E_k^{(0)}\right)c_k=\lambda\sum_m \langle k|\hat{V}|m\rangle}$$ → c_k együtthatók

- $E_{\bar{n}}^{(0)}$, $\Psi_{\bar{n}}^{(0)}$-hoz közeli s.ért.-t és sfv.-t keresünk

(pl. a harmadik sajátállapothoz közeli állapotokat → $\bar{n}=3$)

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

$$E=E_{\bar{n}}^{(0)}+\lambda E_{\bar{n}}^{(1)}+\lambda^2\cdot E_{\bar{n}}^{(2)}+\dots$$

$$E_{\bar{n}}^{(0)}=\bar{E}_{\bar{n}}^{(0)}$$

$$c_m^{(0)}=\delta_{m\bar{n}}$$

$$\left[E_{\bar{n}}^{(0)}-E_k^{(0)}+\lambda E_{\bar{n}}^{(1)}+\lambda^2 E_{\bar{n}}^{(2)}+\dots\right]\left[\delta_{k\bar{n}}+\lambda c_k^{(1)}+\lambda^2 c_k^{(2)}+\dots\right]=$$

$$=\lambda\sum_m \langle k|\hat{V}|m\rangle\left[\delta_{m\bar{n}}+\lambda c_m^{(1)}+\lambda^2 c_m^{(2)}+\dots\right]$$

- λ különböző hatványainak együtthatói egyenlők:

- ha $k=\bar{n}$:

λ^1: $E_{\bar{n}}^{(1)}=\langle\bar{n}|\hat{V}|\bar{n}\rangle$

λ^2: $E_{\bar{n}}^{(2)}+E_{\bar{n}}^{(1)}c_{\bar{n}}^{(1)}=\sum_m \bar{n}|\hat{V}|m\rangle\, c_m^{(1)}$

...

- $k\neq\bar{n}$:

λ^1: $c_k^{(1)}\left(E_{\bar{n}}^{(0)}-E_k^{(0)}\right)=\langle k|\hat{V}|n\rangle$

λ^2: $E_{\bar{n}}^{(1)}c_k^{(1)}+\left(E_{\bar{n}}^{(0)}-E_k^{(0)}\right)c_k^{(2)}=\sum_m\langle k|\hat{V}|m\rangle c_m^{(1)}$

...

- 1. közelítésben:

$$E=E_{\bar{n}}^{(0)}+\langle\bar{n}|\hat{V}|\bar{n}\rangle$$

$$\Psi = \Psi_{\bar{n}}^{(0)} + \sum_{k \neq \bar{n}} \frac{\langle k|\hat{V}|\bar{n}\rangle}{E_{\bar{n}}^{(0)} - E_{k}^{(0)}} \Psi_k^{(0)} + c_{\bar{n}}^{(1)} \Psi_{\bar{n}}$$

$c_{\bar{n}}^{(1)}$-et a normálási feltételből kapjuk:

$$\langle \Psi|\Psi\rangle = 1 = \langle \Psi_{\bar{n}}^{(0)}|\Psi_{\bar{n}}^{(0)}\rangle + 2\mathrm{Re}\sum_{k \neq \bar{n}} \frac{\langle k|\hat{V}|\bar{n}\rangle}{E_{\bar{n}}^{(0)} - E_{k}^{(0)}} \underbrace{\langle \Psi_{\bar{n}}^{(0)}|\Psi_k^{(0)}\rangle}_{=0,\ \text{mert } \bar{n} \neq k} + 2\mathrm{Re}\, c_{\bar{n}}^{(1)} \cdot \langle \Psi_{\bar{n}}^{(0)}|\Psi_{\bar{n}}^{(0)}\rangle$$

$+ \ldots$ (magasabb közelítés)

$\Rightarrow \mathrm{Re}\, c_{\bar{n}}^{(1)} = 0$

Választható $c_{\bar{n}}^{(1)} = 0$

$$\Rightarrow \boxed{\begin{aligned} E &= E_{\bar{n}}^{(0)} + \langle \bar{n}|\hat{V}|\bar{n}\rangle \\ \Psi &= \Psi_{\bar{n}}^{(0)} + \sum_{k \neq \bar{n}} \frac{\langle k|\hat{V}|\bar{n}\rangle}{E_{\bar{n}}^{(0)} - E_{k}^{(0)}} \Psi_k^{(0)} \end{aligned}}$$

- 2. közelítés:

$$E_{\bar{n}}^{(2)} = \sum_{k \neq \bar{n}} \frac{\langle \bar{n}|\hat{V}|k\rangle\langle k|\hat{V}|\bar{n}\rangle}{E_{\bar{n}}^{(0)} - E_{k}^{(0)}}$$ az alapállapotra mindig negatív

- Konvergens-e a perturbációs sor? → Válasz: nem tudjuk ált.-ban.

B) Elfajult eset:

(Baj: több k-ra is lehet $k = \bar{n}$)

$E_{\bar{n}}^{(0)}$ s.fv.-ei $\Psi_{\bar{n}s}^{(0)}$ $s = 1, \ldots, f$ ortonormált fv.-ek

$$\Psi = \sum_{s=1}^{f} a_s \Psi_{\bar{n}s}^{(0)} + \sum_{m \neq \bar{n}s} c_m \Psi_m^{(0)}$$ → most az $\bar{n}$., elfajult perturbált energiát és sajátfv.-eit keressük

$(\hat{H}_0 + \lambda\hat{V})\Psi = E\Psi$ - be beírva, $\Psi^{(0)}_{\bar{n}r}$ -val balról skalárisan

beszorozva:

$$\sum_s a_s \left(\bar{E}^{(0)}_{\bar{n}} - E\right)\delta_{rs} + \sum_s \langle \bar{n}r | \lambda\hat{V} | \bar{n}s\rangle a_s + \sum_{m\neq\bar{n}} c_m \langle \bar{n}r | \lambda\hat{V} | \Psi^{(0)}_m\rangle = 0$$

$$E = E^{(0)}_{\bar{n}} + \lambda E^{(1)}_{\bar{n}} + \ldots \qquad E^{(0)}_{\bar{n}} = \bar{E}^{(0)}_{\bar{n}}$$

$$c_m = \lambda c^{(1)}_m + \lambda^2 c^{(2)}_m + \ldots \quad m \neq \bar{n}$$

(λ^0 rendből)

$$a_s = a^{(0)}_s + \lambda a^{(1)}_s + \ldots$$

a többi hullámfv. csak λ rendű korrekciót ad (hasonlóan nem degenerált esethez) l. Ψ a → 98. old-on

- λ rendig:

$$\sum_s \left(\left(\cancel{\bar{E}^{(0)}_{\bar{n}}} - \cancel{E^{(0)}_{\bar{n}}} - \lambda E^{(1)}_{\bar{n}}\right) a^{(0)}_s \cdot \delta_{rs} + \lambda \langle \bar{n}r | \hat{V} | \bar{n}s\rangle a^{(0)}_s \right) = 0$$

azaz:

$$\sum_s \left(-E^{(1)}_{\bar{n}}\delta_{rs} + \langle \bar{n}r | \hat{V} | \bar{n}s\rangle \right) a^{(0)}_s = 0$$

$a^{(0)}_s$-ra homogén lin. egyenletrendszer ⇒ mátrixreprezentáció (Heisenberg): a_s vektor (együtthatók vektora) a $\langle \bar{n}r|\hat{V}|\bar{n}s\rangle$ mátrix sajátvektora!

⇓

= Az egyenletrendszer az $\langle \bar{n}r | \hat{V} | \bar{n}s\rangle$ mátrix $r, s = 1, \ldots f$

s. ért. egyenlete, $E^{(1)}_{\bar{n}}$ s. értékekkel.

fv. repr.: (Schr.) $\sum_s a_s \Psi_{\bar{n}s}$ kielégíti a $\hat{V}$ operátor sajátértékegyenletét!

- Mo. van, ha

$$\mathrm{Det}\left(-E^{(1)}_{\bar{n}} \cdot \delta_{rs} + \langle \bar{n}r | \hat{V} | \bar{n}s\rangle \right) = 0$$

$\hat{V}$-hoz ami megadja $E^{(1)}_{\bar{n}}$-et (f db, értékek)

↓

A s. vektorok: a fenti egyenletrendszer sajátvektorai a degenerált energiaszinthez ($\bar{n}$) tartozó hullámfv.-ek lineárkombinációi lesznek

$$\Psi^{(0)}_{\bar{n}p} = \sum_s a^{p(0)}_s \Psi^{(0)}_{\bar{n}s} \qquad p = 1, \ldots f$$

Tehát a pert. számítást indító fv.:

$$\Psi = \sum_{\nu} \Psi^{(0)}_{\bar{n}\nu}\, b_\nu + \sum_{m \neq \bar{n}} c_m \Psi^{(0)}_m \quad \text{, ahol:}$$

$$b_\nu = \delta_{r\nu} + \lambda b_\nu^{(1)} + \lambda^2 b_\nu^{(2)} + \dots$$ ← a magasabb rendű korrekciókat most nem számoltuk ki, de a legáltalánosabb közelítésben szerepelnek

Mivel $\langle \Psi^{(0)}_{\bar{n}\nu} | \hat{V} | \Psi^{(0)}_{\bar{n}r} \rangle = \delta_{r\nu} \cdot E^{(1)}_r$ $\hat{V}$ diagonális

<u>A végeredmény:</u>

~~együttható~~ a nem elfajult esetből

$$\Psi_r = \Psi^{(0)}_{\bar{n}r} + \sum_{m \neq \bar{n}} \frac{\langle m | \hat{V} | \bar{n} \rangle}{E^{(0)}_{\bar{n}} - E^{(0)}_m} \Psi^{(0)}_m + \dots \qquad r = 1, 2, \dots f$$

elfajult esetben a hullámfv. <u>0. rendben</u> is megváltozik !!!

$$E_r = E^{(0)}_{\bar{n}} + \langle \Psi_{\bar{n}r} | \hat{V} | \Psi_{\bar{n}r} \rangle + \dots$$

(a 0. rendű korrekció a perturbálatlan eset elfajult sajátértékéhez tartozó sfv-ek <u>lineárkombinációja</u> lesz!)

ahol $\hat{V} \Psi^{(0)}_{\bar{n}r} = E^{(1)}_r \Psi^{(0)}_{\bar{n}r}$ ($\Psi^{(0)}_{\bar{n}r}$ sfv-e $\hat{V}$-nek)

<u>16. óra</u>

3) Példa elfajult perturbációszámításra: Stark-effektus:

H atom $\underline{E} = (0, 0, \mathcal{E})$ áll. homogén elektromos térben

$$\hat{H} = \underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta - \frac{e^2}{r}}_{\hat{H}_0} \underbrace{- e \cdot \mathcal{E} \cdot z}_{\hat{V}}$$

$\hat{H}_0$ sfv.-ei: $\psi_{nlm} = \frac{1}{r} \chi_{nl}(r) \cdot Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$

$$E_n^{(0)} = -\frac{me^4}{2\hbar^2}\cdot\frac{1}{n^2} \qquad n=1,2,\dots$$

- $n=1 \quad (=\bar{n})$ nem degenerált

$$E_1^{(1)} = \langle \psi_{100} | -e\cdot\mathcal{E}\cdot z | \psi_{100} \rangle$$

$$\psi_{100} \sim e^{-\frac{r}{\rho_0}} \qquad \rho_0 = \frac{\hbar^2}{me^2}$$

$$\int e^{-\frac{2r}{\rho_0}} \cdot z \cdot dx\, dy\, dz = 0$$

$E_1^{(1)} = 0 \rightarrow$ nincs korrekció első rendben

- $n=2 \quad \left.\begin{array}{ll} l=1 & m=1,0,-1 \\ l=0 & m=0 \end{array}\right\}$ elfajult eset

$\hat{V}$ mátrixelemeit kell számolni:

$$\varphi_1 = \psi_{200},\ \varphi_2 = \psi_{210},\ \varphi_3 = \psi_{211},\ \varphi_4 = \psi_{21-1},\ V_{ij} = \langle \varphi_i | \hat{V} | \varphi_j \rangle$$

- $$\begin{pmatrix} V_{11} & V_{12} & 0 & 0 \\ V_{21} & V_{22} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & V_3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & V_{44} \end{pmatrix}$$

azimut-szöge (φ) való integrálás miatt 0, ugyanis $\hat{V}$ nem függ φ-től

$\Delta m = 0$ a kiválasztási szabály

- φ_1, φ_2 valós $\Rightarrow V_{21} = V_{12}$

- $\Delta l = 1$ kiválasztási szabály, mert $\hat{V}$ vektor op. $\left(\propto z \propto Y_{10} \right)$

$(z \sim \cos\vartheta \sim Y_{10})$

$\langle \varphi' | \hat{V} | \varphi \rangle$ $\quad l' = l+1$ vagy l vagy $l-1$ lehet

$l' \quad 1 \quad l$ $\quad$ (imp. mom. megmaradás)

$\cos\vartheta \sim e^{i\vartheta \cdot 1}$ $\quad l+1, l, l-1$

(imp. mom. összeadás)

$\Delta l = 0$ paritás $\hat{V}$ miatt 0. (megmaradás)

$$\Rightarrow V_{11} = V_{22} = V_{33} = V_{44} = 0$$

$$V_{12} = V_{21} = \int d\underline{r}\, \varphi_1 \cdot (-e\,\mathcal{E}\cdot z)\, \varphi_2 = \int r^2 dr\, d\cos\vartheta\, d\varphi\, \frac{1}{\sqrt{2}}\left(1 - \frac{r}{2\rho_0}\right) \cdot e^{-\frac{r}{2\rho_0}} \cdot \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$$

$$(-e\,\mathcal{E}\,\underset{\uparrow\, r\cdot\cos\vartheta}{z})\, \frac{1}{2\sqrt{6}} \cdot \frac{r}{\rho_0} \cdot e^{-\frac{r}{2\rho_0}} \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cdot \cos\vartheta = 3e\,\mathcal{E}\,\rho_0$$

$$\begin{pmatrix} 0 & 3e\mathcal{E}\rho_0 & 0 & 0 \\ 3e\mathcal{E}\rho_0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$\uparrow$

a perturbáló potenciál degenerált perturbálatlan sajátfv.-ek alterén vett mátrixa

$\Downarrow$

$$\det \begin{vmatrix} (0-E^{(1)}) & 3e\mathcal{E}\rho_0 & 0 & 0 \\ 3e\mathcal{E}\rho_0 & (0-E^{(1)}) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & (0-E^{(1)}) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & (0-E^{(1)}) \end{vmatrix} = 0$$

$\Rightarrow$ $E^{(1)}$ $\quad 3e\mathcal{E}\rho_0 \quad -3e\mathcal{E}\rho_0 \quad 0 \quad 0$

s. vektor $\begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$ $\begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$ $\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ $\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$

s. fv.

$\frac{1}{\sqrt{2}}(\varphi_1+\varphi_2)$ $\quad \frac{1}{\sqrt{2}}(\varphi_1-\varphi_2)$ $\quad \varphi_3 \quad \varphi_4$

= A degeneráció részben feloldódik a perturbáció hatására!

$\Delta E \; (=E^{(1)}) \propto \mathcal{E}$ lineáris Stark-effektus $\to$ csak a H atomnál van
(arányos)

- Közegre: $\Delta E_{teljes} = -(\underline{p}\cdot\underline{\mathcal{E}})$ így néz ki, mintha a H-nak

állandó dipólmom.-a lenne

- A többi atomnál E_{nl} ($\hat{H}$ s. értéke) l-től is függ, így csak 'm' szerint

van degeneráció $\Rightarrow$ a perto. szám.:

- 1. közelítésében: $\Delta E^{(1)} = 0$
- 2. köz. kell, nyilván $\Delta E^{(2)} = E^{(2)} \propto \mathcal{E}^2$ $\uparrow$ Számolható az atom polarizálhatósága

$p_z \propto \mathcal{E}$: ez a szokásos dipólmomentumnak felel meg

Időfüggő perturbációszámítás

Külső tér hatására a rendszer egy stac. állapotából átmegy egy másikba. Ennek a valószínűségét számoljuk.

Érvényes az időfüggő Schr.-egyenlet:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \left(\hat{H}_0 + \hat{V}(t)\right)\Psi \qquad \text{ahol} \quad \hat{V}(t) = \begin{cases} \hat{W}(t) & 0 \le t \le \tau \\ 0 & t<0,\ t>\tau \end{cases}$$

- $\hat{H}_0$ s. fv.-e: $\psi_n^{(0)}$, s. érték-e: $E_n^{(0)}$

$$\Psi(t) = \sum_k a_k(t) \cdot \psi_k^{(0)} \cdot e^{-\frac{i}{\hbar}E_k^{(0)} \cdot t}$$

$t \le 0 \qquad a_k(t) = \delta_{ki}$ ← i a kezdeti állapotra utal (Ψ_i a kezdeti hullámfv (sajátáll.-ból indulunk))

$t \ge \tau \qquad a_{ki}(t) = \text{const.}$

Tehát: $\Psi_i = \psi_i^{(0)} \cdot e^{-\frac{i}{\hbar}E_i^{(0)} \cdot t}$

nem függ az időtől

$$\Psi_f(t>\tau) = \sum_k a_{ki}(\infty) \cdot \psi_k^{(0)} e^{-\frac{i}{\hbar}E_k^{(0)} \cdot t}$$

↑ végáll.

Az átmenet val.-e: $w_{ki} = \left| a_{ki}(\infty) \right|^2$

- Beírjuk a sorfejtést:

$$\sum_l \left[i\hbar \frac{d}{dt} a_l(t) + \cancel{E_l^{(0)} a_l(t)} \right] \psi_l^{(0)} \cdot e^{-\frac{i}{\hbar}E_l^{(0)} t} = \sum_l \left(\cancel{E_k^{(0)}} + \hat{V}(t)\right) a_l(t) \, \psi_l^{(0)} \cdot e^{-\frac{i}{\hbar}E_l^{(0)} t}$$

$\psi_k^{(0)} e^{-\frac{i}{\hbar}E_k^{(0)}\cdot t}$ -vel balról skalárisan szorozva

$$i\hbar \frac{d\, a_k(t)}{dt} = \sum_l \langle k | \hat{V}(t) | l \rangle \, a_l(t)\, e^{i\omega_{kl}\cdot t}$$

ahol $\omega_{kl} = \frac{1}{\hbar}\left(E_k^0 - E_l^0\right)$

n. közelítés

Iterációval oldjuk meg. Ha ismert $a_k^{(n)}(t)$ beírjuk a jobb oldalba, és integrálással megkapjuk $a_k^{(n+1)}(t)$

0. közelítés: $a_k^{(0)}(t) = \delta_{ki}$

$$a_k^{(n+1)}(t) = \delta_{ki} - \frac{i}{\hbar}\sum_l \int_0^t \langle k|\hat{V}(t')|l\rangle\, a_l^{(n)}(t')\cdot e^{i\omega_{ki}t'}\cdot dt'$$

(itt a közelítés nem ugyanazt jelenti, mint az időfüggetlennél: ott +korrekciós ~~tagokat~~ kaptunk közelítésként, itt magát a teljes megoldást adja minden közelítés, csak egyre pontosabban)

$$a_k^{(1)}(t) = \delta_{ki} - \frac{i}{\hbar}\int_0^t dt' \langle k|\hat{V}(t')|i\rangle e^{i\omega_{ki}\cdot t'}$$

a t''-s tagok jöttek az első köz.-ből

$$a_k^{(2)}(t) = \delta_{ki} - \frac{i}{\hbar}\int_0^t dt' \langle k|\hat{V}(t')|i\rangle e^{i\omega_{ki}\cdot t'} + \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^2 \sum_l \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt''\cdot$$

$$\cdot \langle k|\hat{V}(t')|l\rangle e^{i\omega_{kl}\cdot t'}\cdot \langle l|\hat{V}(t'')|i\rangle e^{i\omega_{li}\cdot t''}$$

...

$$a_k(t)=\delta_{ki}+\sum_{\nu=1}^{\infty}\left(-\frac{i}{\hbar}\right)^{\nu}\cdot\sum_{l_1}\sum_{l_2}\dots\sum_{l_{\nu-1}}\int_0^t\int_0^{t_1}\dots\int_0^{t_{\nu-1}}\langle k|\hat V(t_1)|l_1\rangle\langle l_1|\hat V(t_2)|l_2\rangle\cdot$$

$$\cdot\langle l_2|\dots\langle l_{\nu-1}|\hat V(t_{\nu-1})|i\rangle\, e^{i\left(\omega_{kl_1}\cdot t_1+\omega_{l_1 l_2}\cdot t_2+\dots+\omega_{l_{\nu-1}i}\,t_{\nu-1}\right)}\cdot dt_1\dots dt_{\nu-1}$$

Mivel:

$$\langle k|\hat V(t)|l\rangle e^{i\omega_{kl}t}=\langle e^{-\frac{i}{\hbar}E_k t}\cdot k|\,\hat V(t)\,|e^{-\frac{i}{\hbar}E_l t}\cdot l\rangle=$$

$$=\langle k|\,\hat V_k(t)\,|l\rangle$$

kölcsönhatási képbeli operátor

$$\hat V_k(t)=e^{\frac{i}{\hbar}\hat H_0 t}\cdot\hat V(t)\cdot e^{-\frac{i}{\hbar}\hat H_0\cdot t}$$

$$\Downarrow$$

$$\underline{\underline{a_k(t)}}=\delta_{ki}+\sum_{\nu=1}^{\infty}\left(-\frac{i}{\hbar}\right)^{\nu}\cdot\int_0^t\int_0^{t_1}\dots\int_0^{t_{\nu-1}}dt_1\dots dt_{\nu-1}\,\langle k|\hat V_k(t_1)\cdot\hat V_k(t_2)\dots\hat V_k(t_{\nu-1})|i\rangle=$$

itt $t_1\geq t_2\geq t_3\geq\dots\geq t_{\nu-1}$

$$=\delta_{ki}+\sum_{\nu=1}^{\infty}\left(-\frac{i}{\hbar}\right)^{\nu}\cdot\frac{1}{\nu!}\int_0^t\int_0^t\dots\int_0^t\langle k|\,T\left(\hat V_k(t_1)\,\hat V_k(t_2)\dots\hat V_k(t_{\nu-1})\right)|i\rangle\cdot$$

$$\cdot\, dt_1\dots dt_{\nu-1}=$$

jelölés: olyan operátor, ami megfelelő sorba rendezi az operátorokat az időargumentumuk nagysága szerint

$$\underline{\underline{=\langle k|\,T\left(e^{-\frac{i}{\hbar}\int_0^t\hat V_k(t')\,dt'}\right)|i\rangle}}$$

T időrendezett szorzat, pl.:

$$T\left(\hat{A}_1(t_1)\hat{A}_2(t_2)\right) = \underset{\substack{\uparrow \\ \text{lépcsőfv.}}}{\Theta}(t_1-t_2)\cdot\hat{A}_1(t_1)\hat{A}_2(t_2) + \Theta(t_2-t_1)\hat{A}_2(t_2)\cdot\hat{A}_1(t_1)$$

17. óra

- Példa:

$$\hat{V}(t) = \begin{cases} \hat{V} = \text{const} & t>0 \\ 0 & t<0 \end{cases}$$

- 1. közelítés:

$$a_k^{(1)}(t) = \delta_{ki} - \frac{i}{\hbar}\int_0^t \langle k|\hat{V}|i\rangle e^{i\omega_{ki}t'}dt' = \delta_{ki} - \frac{1}{\hbar}\frac{e^{i\omega_{ki}t}-1}{\omega_{ki}}\cdot$$

$$\cdot\langle k|\hat{V}|i\rangle$$

Ez akkor nagy, ha $\boxed{\omega_{ki}=0}$, akkor:

$$\frac{e^{i\omega_{ki}t}-1}{\omega_{ki}} = it$$ (→ nem túl jó közelítés, mert az együtthatók t-vel mennek ↔ normálás)

$$\left|\frac{e^{i\omega t}-1}{\omega}\right| = \frac{\sqrt{2(1-\cos\omega t)}}{\omega} = \frac{2\left|\sin\frac{\omega t}{2}\right|}{\omega} < \frac{2}{\omega}$$

azonos energiájú állapotba nagy az átmenet.

↓

• Ha $\langle k|\hat{V}|i\rangle = 0$, a 2. közelítés kell

$$a_k^{(2)}(t) = \delta_{ki} + \frac{1}{\hbar^2} \sum_{l \neq i} \frac{\langle k|\hat{V}|l\rangle\langle l|\hat{V}|i\rangle}{\omega_{ki}} \left(\frac{e^{i\omega_{ki}t}-1}{\omega_{ki}} - \frac{e^{i\omega_{kl}t}-1}{\omega_{kl}} \right)$$

ha $\omega_{ki} \approx 0$, ez a tag elhagyható

Olyan, mint az 1. közelítés, de $\langle k|\hat{V}|i\rangle \Rightarrow \langle k|\hat{V}|l\rangle\langle l|\hat{V}|i\rangle / E_k - E_l$

$|l\rangle$-et <u>közbenső állapotnak</u> szokás hívni, mivel $i \to l$, $l \to k$ átmenetek révén.

– Előfordul, hogy a végállapotban a spektrum folytonos.
Legyen ν a folyt. spektrum indexe.

$$\Psi_f = \sum_k a_k(t)\, \Psi_k^{(0)} \cdot e^{-\frac{i}{\hbar}E_k^{(0)}t} + \int d\nu \cdot a_\nu(t)\, \Psi_\nu^{(0)}\, e^{-\frac{i}{\hbar}E_\nu^{(0)}t} \cdot \rho(\nu)$$

végállapot sűrűség = adott ν-höz tartozó állapotok száma (degeneráció)

$|a_\nu(t)|^2 \rho(\nu)\, d\nu$ a valószínűség a $(\nu, \nu + d\nu)$ intervallumba történő átmenetnek

ha $\boxed{\omega_{\nu i} = 0}$ (azonos energiájú állapotba való átmenet)

• 1. közelítés: $w = |\langle \nu|\hat{V}|i\rangle|^2 \cdot 4 \dfrac{\sin^2 \frac{\omega_{\nu i}}{2} t}{\hbar^2 \omega_{\nu i}^2}\, \rho\, d\nu =$

$$= |\quad|^2 \cdot \frac{\pi t}{\hbar^2} \cdot \underbrace{\frac{\sin^2 \frac{\omega_{\nu i}}{2} t}{\pi t \left(\frac{\omega_{\nu i}}{2}\right)^2}}_{t \to \infty\ \ \delta\left(\frac{\omega_{\nu i}}{2}\right)} \rho\, d\nu$$

Az időegységre eső átmeneti valószínűség:

$$dw = \left|\langle \nu|\hat{V}|i\rangle\right|^2 \cdot \frac{\pi}{\hbar^2}\cdot \delta\left(\frac{\omega_{\nu i}}{2}\right)\rho(\nu)\,d\nu$$

$$\boxed{dw = \frac{2\pi}{\hbar}\left|\langle \nu|\hat{V}|i\rangle\right|^2 \cdot \delta\left(E_\nu - E_i\right)\rho(\nu)\,d\nu}$$

Fermi-féle aranyszabály

- Elsőrendben tiltott átmenetnél:

$$\langle \nu|\hat{V}|i\rangle \to \sum_{l\neq i} \frac{\langle \nu|\hat{V}|l\rangle\langle l|\hat{V}|i\rangle}{E_\nu - E_i}$$

- Pl. bomló részecskére:

$w = \int dw$ adja az időegység alatti bomlás val.-ét.

Ha t_0-ban N_0 részecske van

$$N(t) = N_0 \cdot e^{-tw}\ ;\quad w = \frac{1}{\hbar\Gamma}$$

Elektromágn. térben mozgó elektron H operátora

A Hamilton fv.: $H = \frac{1}{2m}\left(\underline{p} + \frac{e}{c}\underline{A}\right)^2 - e\phi$

$\underline{p}$ = kanonikus imp. (nem $m\cdot\underline{v}$!)

$(\underline{A}, \phi)$ = (vektor, skalár) potenciál

$$\Rightarrow m\ddot{\underline{r}} = e\left(\underline{E} + \frac{1}{c}\underline{v}\times\underline{B}\right)$$

$$\underline{\underline{\hat{H}}} = \frac{1}{2m}\left(\hat{p} + \frac{e}{c}\underline{A}\right)^2 - e\phi = \qquad p = \frac{\hbar}{i}\nabla$$

$$= \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{e}{2mc}\underbrace{\left(\hat{p}\,\underline{A} + \underline{A}\,\hat{p}\right)}_{?} + \frac{e^2}{2mc^2}\underline{A}^2 - e\phi$$

---

mn.: $\left(\underline{\nabla}\,\underline{A} - \underline{A}\,\underline{\nabla}\right)\psi = \left(\underline{\nabla}\,\underline{A}\right)\psi$

Mértékválasztás: $\operatorname{div}\underline{A} = 0$, ekkor egyértelmű a kifejezés

- pl. $\underline{B} = \text{const} \Rightarrow \underline{A} = \frac{1}{2}\underline{B}\times\underline{r} \Rightarrow \operatorname{div}\underline{A} = 0$ teljesül

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{e}{2mc}\underline{B}\left(\hat{\underline{r}}\times\hat{\underline{p}}\right) +$$

mn.: $\hat{p}\cdot\left(\underline{B}\times\underline{r}\right) = \underline{B}\left(\underline{r}\times\hat{p}\right) = 2\hat{p}\underline{A} = 2\underline{A}\hat{p}$

$$+ \frac{e^2}{8mc^2}\left(\underline{B}\times\underline{r}\right)^2 - e\phi$$

kicsi, elhagyjuk

Indukált emisszió és abszorpció

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$$

- $\hat{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V_{\text{Coulomb}}(r)$

- $\hat{V} = -\frac{e}{mc}\underline{A}\cdot\hat{p} + \cancel{\frac{e^2}{2mc^2}\underline{A}^2} - e\phi \quad ; \operatorname{div}\underline{A} = 0$

kicsi, elhagyjuk $\quad \phi = 0$ mivel $\hat{H}_0$-ba raktuk

$$\underline{A} = \underline{e}\, A_0 \cdot \cos(\underline{k}\underline{r} - \omega t)$$

$$\operatorname{div} \underline{A} = 0 \Rightarrow \underline{e} \cdot \underline{k} = 0$$

$$\underline{B} = -A_0 \sin(\underline{k}\underline{r} - \omega t)\, \underline{\underline{k \times e}}$$

$$\underline{E} = -A_0 \cdot \sin(\underline{k}\underline{r} - \omega t) \cdot \underline{e} \cdot \frac{\omega}{c} + \text{Coulomb-tér}$$

$$\hat{V} = \hat{K} e^{i\omega t} + \hat{K}^* \cdot e^{-i\omega t} \quad \text{ahol}$$

$$\hat{K} = -\frac{e A_0}{2mc} \cdot e^{-i\underline{k}\underline{r}} \cdot \underline{e} \cdot \hat{\underline{p}}$$

- 1. rendben:

$$K_{ni}^* \cdot e^{i(-\omega + \omega_{ni})t}$$

$$w_{ni} = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_0^\tau \langle n|\hat{V}|i\rangle \cdot e^{i\omega_{ni} t} dt \right|^2 = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_0^\tau dt \left(K_{ni} e^{i(\omega + \omega_{ni})t} + \right) \right|^2 =$$

$$= \frac{1}{\hbar^2} \left| K_{ni} \frac{e^{i(\omega + \omega_{ni})\tau} - 1}{i(\omega + \omega_{ni})} + K_{in} \frac{e^{i(-\omega + \omega_{ni})\tau} - 1}{i(-\omega + \omega_{ni})} \right|^2$$

akkor nagy a valószínűség, ha a nevezők 0-k:

- ha $\omega + \omega_{ni} = 0$ fénykibocsájtás $E_n + \hbar\omega = E_i$
- ha $-\omega + \omega_{ni} = 0$ abszorpció $E_n = E_i + \hbar\omega$

A foton energia kvantáltsága az atomi energiai kvantáltságából jön

pl. fénykibocsájtás:

$$\frac{w}{\tau} = \frac{2\pi}{\hbar} |K_{ni}|^2 \rho(E_n), \quad \text{ahol } E_n = E_i - \hbar\omega$$

(akkor is lehet kibocsájtás, ha az elektromos tér 0 →)
→ QED -ből a vákuum fluktuációiból az el. tér várható értéke
0, de négyzetének várható értéke nem → ...)

$$K_{ni} = -\frac{eA_0}{2mc}\left(\underline{e}\hat{\underline{p}}\, e^{-i\underline{k}\underline{r}}\right)_{ni}$$

Ha $|\underline{k}\underline{r}| \ll 1$, $e^{-i\underline{k}\underline{r}} \simeq 1$

$E_n^{(0)}, E_i^{(0)}$ $\hat{H}_0$ energiasajátjai

$$\langle \Psi_n | \hat{\underline{p}} | \Psi_i \rangle = \langle \Psi_n | \frac{i}{\hbar} m \left[\hat{H}_0, \hat{\underline{r}}\right] | \Psi_i \rangle = \frac{i}{\hbar} m \left(E_n - E_i\right) \underbrace{\langle \Psi_n | \hat{\underline{r}} | \Psi_i \rangle}_{\text{átmeneti dipól-momentummal } (\underline{d}_{ni}) \text{ arányos}}$$

$$K_{ni} = i\left(E_n - E_i\right) \frac{A_0}{2c\hbar}\, \underline{e}\underline{d}_{ni}$$

$\underline{d}_{ni} = 0$ tiltott átmenet

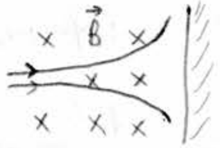
$\underline{d}_{ni} \neq 0$ megengedett –||– , ha $\Delta l = \pm 1$, $\Delta m = 0, \pm 1$

A kvantummechanika leírja az indukált emissziót (és az abszorpciót). A spontán emissziót nem írja le, ehhez az el. mágn. teret is kvantálni kell.

18. óra

Spin

1) Kísérletek ⇒ az elektronnak van saját imp. momentuma

Stern – Gerlach 

⇒ kvantált a mágn. mom.

Einstein – de Haas

2) $\underline{L} = \underline{r} \times \underline{p} \Rightarrow \underline{M} = \frac{e}{2mc}\underline{L}$ $\qquad \underline{M} = \frac{e}{mc}(1+\mu)\underline{S}$ $\quad$ μ: anomális mágn. mom.

ált. ban $\qquad$ proton ($m = m_p$, $\mu = \mu_p = 1{,}79$)

neutron ($m = m_n$, $\mu = \mu_n = -1{,}9$)

$$\underline{S} \Rightarrow \underline{M}_S = \frac{e}{mc}\underline{S} \quad (e^-\text{-ra: } m = m_e)$$

(μ_{el} pici, de nem egzaktul 0)

itt más a szorzófaktor! (giromágneses faktor) $\qquad$ QED

– Láttuk, hogy az imp. mom. szabja meg egy rendszer transzformációs tulajdonságát forgatás esetén. Elképzelhető, hogy nyugvó részecskének lehet imp. momentuma (nem kell hozzá mozgás).

- Teljes imp. mom. $\quad \hat{\underline{J}} = \hat{\underline{L}} + \hat{\underline{S}}$ $\quad$ („vektoroperátorok")

teljes = pálya + saját

$\qquad\qquad\qquad\qquad$ ‖

$\qquad\qquad\qquad$ spin → nincs klasszikus megfelelője

- A kommutátorok:

$$\hat{\underline{J}} \times \hat{\underline{J}} = i\hbar\,\hat{\underline{J}}$$

$$\Rightarrow [\hat{L}_i, \hat{S}_j] = 0 \quad , \quad (\hat{\underline{S}} \times \hat{\underline{S}}) = i\hbar\,\hat{\underline{S}}$$

– A hullámfv.-e a részecskének meghatározza a spinállapotát is:

$$\Psi(x, y, z; \sigma)$$

$\uparrow$ spinváltozó

- $\hat{\underline{S}}^2$ s. értékei: $\hbar^2 s(s+1)$ (hasonlóan $\hat{\underline{L}}^2$-hez)

pl. elektron, pozitron, proton, neutron $s=\frac{1}{2}$ fermion

pion, kaon $s=0$ vektor mezonok, $s=1$ bozon

(„rezonancia részecskék" spinje lehet jóval nagyobb is)

- S_z s. értékei: $(-s, -s+1, \dots, s)\cdot\hbar$

3) A spinoperátor mátrixa $s=\frac{1}{2}$-re:

$$\hat{S}_z \Psi(\sigma) = \hbar\sigma \cdot \Psi(\sigma) \qquad \sigma = \pm\frac{1}{2}$$

$$\hat{S}_\pm \Psi = \left(\hat{S}_x \pm i\hat{S}_y\right)\Psi(\sigma) = \hbar\sqrt{s(s+1) - \sigma(\sigma\pm 1)}\;\Psi(\sigma\pm 1)$$

Bázisvektorok: $\Psi\left(\frac{1}{2}\right)$, $\Psi\left(-\frac{1}{2}\right)$

$$\left\langle \tfrac{1}{2} \right| \hat{S}_z \left| \tfrac{1}{2} \right\rangle = \frac{\hbar}{2}, \quad \left\langle -\tfrac{1}{2} \right| \hat{S}_z \left| -\tfrac{1}{2} \right\rangle = -\frac{\hbar}{2}$$

$$\left\langle \tfrac{1}{2} \right| \hat{S}_z \left| -\tfrac{1}{2} \right\rangle = -\frac{\hbar}{2} \cdot \left\langle \tfrac{1}{2} \middle| -\tfrac{1}{2} \right\rangle = 0$$

$$\Rightarrow \hat{S}_z = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$\langle \tfrac{1}{2} | \hat{S}_x | \tfrac{1}{2} \rangle = \langle \tfrac{1}{2} | \tfrac{1}{2}(\hat{S}_+ - \hat{S}_-) | \tfrac{1}{2} \rangle = 0$$

$$\langle -\tfrac{1}{2} | \hat{S}_x | -\tfrac{1}{2} \rangle = \langle \quad | \quad - \| - \quad | \quad \rangle = 0$$

$$\langle \tfrac{1}{2} | \hat{S}_x | -\tfrac{1}{2} \rangle = \langle \quad | \quad - \| - \quad | \quad \rangle = \frac{\hbar}{2}\sqrt{\tfrac{1}{2}\left(\tfrac{1}{2}+1\right) - \left(-\tfrac{1}{2}\right)\left(-\tfrac{1}{2}+1\right)} = \frac{\hbar}{2}$$

$\Rightarrow \quad \hat{S}_i = \frac{\hbar}{2}\sigma_i \qquad i = 1,2,3$, ahol:

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

(hasonlóan lehet magasabb spinekre is felírni a spinoperátorokat)

<u>Spinorok</u> = spin hullámfv.-ek

$$\Psi = \begin{pmatrix} \Psi(\tfrac{1}{2}) \\ \Psi(-\tfrac{1}{2}) \end{pmatrix}$$

4) Hogyan transzformálódnak a spinorok forgatásra?

$$\delta\Psi_{L,M} = \frac{i}{\hbar}\,\delta\underline{\varphi}\cdot\underline{\hat{L}}\cdot\Psi_{L,M}$$

most $\underline{\hat{L}} \to \underline{\hat{J}}$ (általánosabban)

Ha $l=0$, $s=1$: z tengely körüli forgatás

$$\delta\Psi(\sigma) = \frac{i}{\hbar}\,\delta\varphi\,\hat{S}_z\Psi(\sigma) = i\sigma\cdot\delta\varphi\cdot\Psi(\sigma)$$

$$\frac{d\Psi}{d\varphi} = i\sigma \cdot \Psi$$

$$\Psi(\sigma)' = \Psi(\sigma) \cdot e^{i\sigma\varphi}$$ véges elforgatásra

Ha $\varphi = 2\pi \Rightarrow \Psi(\sigma)' = (-1) \cdot \Psi(\sigma)$

kap egy fázist a hullámfv. (de ez $| \, |^2$ miatt nem számít → pályaimp. mom.-nál extra kitétel volt, hogy 2π forgatásra önmagukba transzformálódjanak)

Tetszőleges elforgatásnál:

$$\Psi(\sigma)' = \sum_{\sigma'} a_{\sigma\sigma'} \cdot \Psi(\sigma')$$

függnek a szögektől

- $s = 1/2$

$$\Psi\left(\tfrac{1}{2}\right)' = \alpha \Psi\left(\tfrac{1}{2}\right) + \beta \Psi\left(-\tfrac{1}{2}\right)$$

$$\Psi\left(-\tfrac{1}{2}\right)' = \gamma \Psi\left(\tfrac{1}{2}\right) + \delta \Psi\left(-\tfrac{1}{2}\right)$$

- Normálási feltétel:

$$\left|\Psi\left(\tfrac{1}{2}\right)\right|^2 + \left|\Psi\left(-\tfrac{1}{2}\right)\right|^2 = \left|\Psi\left(\tfrac{1}{2}\right)'\right|^2 + \left|\Psi\left(-\tfrac{1}{2}\right)'\right|^2$$

$$\Rightarrow |\alpha|^2 + |\gamma|^2 = 1, \quad |\beta|^2 + |\delta|^2 = 1, \quad \alpha\beta^* + \gamma\delta^* = 0$$

végül $\Psi' = U\Psi \quad \Psi^+ \Psi = \Psi'^+ \Psi' = 1 \Rightarrow U^+ U = 1$ unitér mátrixok

és még $\det(U) = 1$ — SU(2) mátrixok

($\frac{1}{2}$ spin forgatását írják le)

5) 2 elektron rendszer lehetséges spinállapotai:

$s=1$

$\Psi\left(\frac{1}{2}\right)\varphi\left(\frac{1}{2}\right)$, $\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\Psi\left(\frac{1}{2}\right)\varphi\left(-\frac{1}{2}\right)+\Psi\left(-\frac{1}{2}\right)\varphi\left(\frac{1}{2}\right)\right)$, $\Psi\left(-\frac{1}{2}\right)\varphi\left(-\frac{1}{2}\right)$ szimm. hullámfv.-ek

1. e^- hullámfv.-e ; 2. e^- hullámfv.-e

$\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\Psi\left(\frac{1}{2}\right)\varphi\left(-\frac{1}{2}\right)-\Psi\left(-\frac{1}{2}\right)\varphi\left(\frac{1}{2}\right)\right)$ antiszimm. hullámfv.

$s=0$

$\hat{\underline{S}}=\hat{\underline{S}}_1+\hat{\underline{S}}_2$ imp. momentum összeadás $S_z = 1, 0, -1$; $s=0,1$

0

2 féle 0 vetületű állapot van

- Forgatáskor az azonos s-ű állapotok keverednek

pl. $s=0$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\left[\Psi\left(\frac{1}{2}\right)\varphi\left(-\frac{1}{2}\right)-\Psi\left(-\frac{1}{2}\right)\varphi\left(\frac{1}{2}\right)\right]=\frac{1}{\sqrt{2}}\left[\Psi'\left(\frac{1}{2}\right)\varphi'\left(-\frac{1}{2}\right)-\Psi'\left(-\frac{1}{2}\right)\varphi'\left(\frac{1}{2}\right)\right]$$

$\Rightarrow \alpha\delta-\beta\gamma=1$, azaz $\det U=1$

- A teljes imp. mom. $\hat{\underline{J}}=\hat{\underline{L}}+\hat{\underline{S}}$

a $\hat{\underline{J}}^2$ s. értékei $J = L+S, L+S-1, \dots, |L-S|$

6) Hogyan módosul a Schr. egyenlet?

A klasszikus Hamilton-fv. ismert

Legyen $\underline{B}=$ áll, így $\underline{A}=\frac{1}{2}\underline{B}\times\underline{r}$

$\Downarrow$

ellhagyjuk

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{e}{2mc} \underline{B} \left(\underline{\hat{L}} + 2\underline{\hat{S}}\right) + \frac{e^2}{8mc^2}\left(\underline{B}\times\underline{r}\right)^2 - e\phi$$

klassz. fizikában nem lenne

(CGS egységekben)

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(x,y,z) - \underline{H}\cdot\underline{\hat{M}}$$

ahol $\underline{M} = \frac{e}{2mc}\left(\underline{\hat{L}} + 2\underline{\hat{S}}\right)$ (mágn. mom.)

$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H}\Psi$, ahol Ψ spinor → Pauli-egyenlet

Ha $\underline{H} = 0$ $\Psi(-\frac{1}{2})$ és $\Psi(\frac{1}{2})$ ugyanazt az egyenletet tudja.

Nézzük a H atomot, $\underline{H} = (0,0,H)$ (mágn. tér)

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

$\hat{L}$; $2\hat{S} = \sigma_z$ most

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi - \frac{e^2}{r}\Psi + \frac{e\hbar}{2mc} H\left(-i\frac{\partial\Psi}{\partial\varphi} + \sigma_z\Psi\right) = E\Psi$$

A H atom energia sajátfv.-e kielégíti az egyenletet egy spin taggal kiegészítve:

$$\Psi = \frac{1}{r}\chi_n(r)\, Y_{lm}(\vartheta,\varphi)\cdot\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$$

$$-\,\|\,- \quad \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$$

normális Zeeman-effektus

(erős mágn. tér esetén)

de az energiasajátértékek: (ez a mágn. kv. szám)

$$E_{nlm} = -\frac{me^4}{2\hbar^2 n^2} + \frac{e\hbar}{2mc} H(m + 2\sigma) \to E \text{ függ } m\text{-től is!}$$

tömeg

Eddig a nemrelativisztikus kvantummechanikát tárgyaltuk.

Ehhez vannak relativisztikus (spec. rel.) korrekciók.

Spin-pálya kölcsönhatás

- Relat. korrekció. Nagyon gyenge külső H (mágn. tér) esetén kap szerepet, mivel ilyenkor a Zeeman-effektussal összemérhető, v. nagyobb.
- $\underline{E}$ el. térben mozgó $\underline{M}^s$ mágn. mom. energiája:

$$E_{sp} = \frac{1}{c}\,\underline{M}^s\cdot(\underline{v}\times\underline{E}) = -\frac{1}{cr}\frac{d\Phi}{dr}\,\underline{M}^s\cdot(\underline{v}\times\underline{r}) = \frac{1}{cmr}\frac{d\Phi}{dr}\,\underline{M}^s\cdot\underline{L} =$$

$$\underline{E} = -\frac{d\Phi}{dr}\cdot\frac{\underline{r}}{r}$$

$$= \frac{e}{m^2c^2 r}\frac{d\Phi}{dr}\,\underline{S}\cdot\underline{L} \quad \text{(klasszikusan)}$$

$$\hat{H}_{sp} = \frac{e^2}{2m^2c^2 r}\frac{d\Phi}{dr}\,\hat{\underline{S}}\cdot\hat{\underline{L}}$$

(az $\frac{1}{2}$ nem jön ki a klasszikus levezetésből)

de a Dirac-egyenletből igen

$$\hat{\underline{S}}\cdot\hat{\underline{L}} = \frac{1}{2}\left(\hat{\underline{J}}^2 - \hat{\underline{L}}^2 - \hat{\underline{S}}^2\right) = \hbar^2 \begin{cases} \frac{1}{2}l, & \text{ha } j = l+\frac{1}{2} \\ -\frac{1}{2}(l+1), & \text{ha } j = l-\frac{1}{2} \end{cases} \quad (s=\tfrac{1}{2}) \to$$

minden pálya (l) 2 energiaszintre hasad fel

- A teljes $\hat{H}$ forgatásra invariáns $\Rightarrow$ $\hat{\underline{J}}^2$ a megmaradó kv. szám,

$\hat{\underline{L}}$ nem megmaradó!

Ψ_{nlm} helyett Ψ_{njlm_j}

– H atom:

$n=1 \quad l=0 \quad j=\frac{1}{2} \quad \Delta E=0$

$n=2 \quad l=0 \quad j=\frac{1}{2} \quad \Delta E=0$

$\qquad l=1 \quad j=\frac{3}{2} \quad \Delta E \propto \frac{l}{2}=\frac{1}{2}$

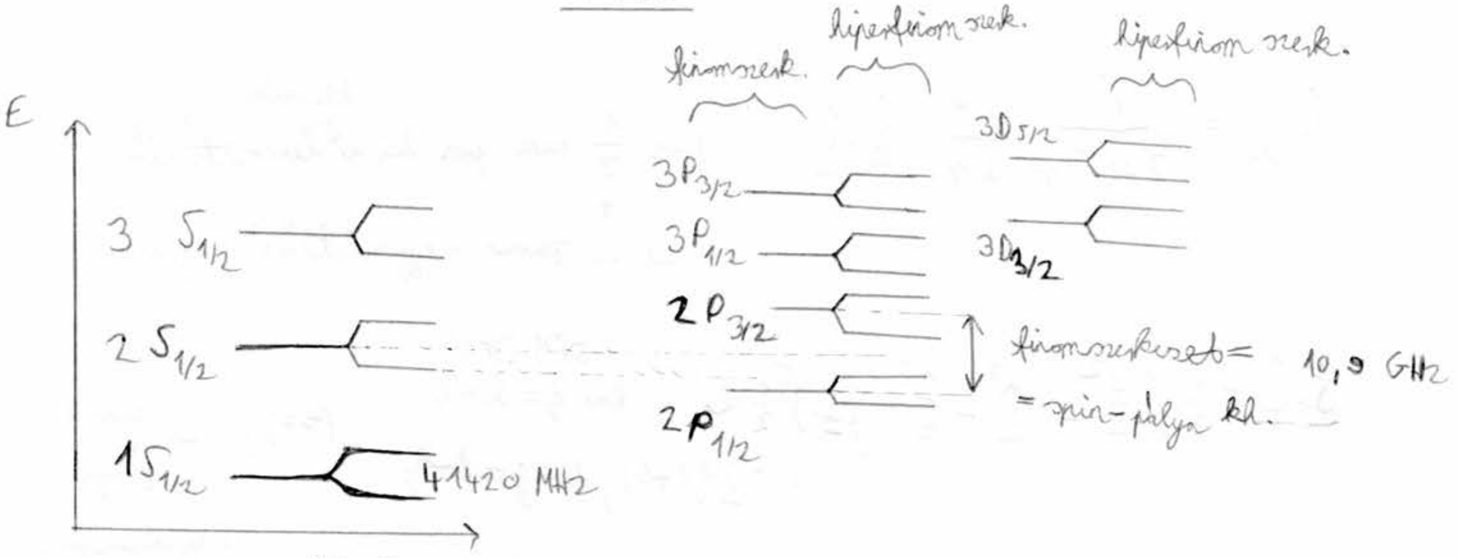
$\qquad\qquad j=\frac{1}{2} \quad \Delta E \propto -\frac{l+1}{2}=-1$

$\vdots$

⇒ A spinpálya k.h. adja a spektrum finom szerkezetét.

Egyéb relativisztikus korrekciók is vannak (pl. hiperfinom felhasadás, …)

19. ábra



nlj

hiperfinom szerkezet (a p^+ mágneses momentuma által létrehozott mágneses tér adja a felhasadást)

$E_{2S_{1/2}} - E_{2P_{1/2}} = 1057$ MHz Lamb-shift

az EM tér vákuum fluktuációjával való kölcsönhatás (QED)

$\hat{H}_{hiperfinom} = -\frac{e}{mc}\,\underline{\hat{S}}\cdot\underline{B} \qquad \underline{A} = -\frac{1}{4\pi}\mu_n \times \nabla\left(\frac{1}{r}\right), \quad \underline{B} = \text{rot}\,\underline{A}$

Azonos részecskék kérdése

- Klasszikus mechanikában 2 azonos részecske megkülönböztethető, mert pl. látjuk.

- Kvantummechanikában nincs pálya, ezért nem lehet őket nyomonkövetni. A 2 részecske hullámfv. $\Psi(\underline{r}_1, \sigma_1, \underline{r}_2, \sigma_2)$ megkülönbözteti a részecskéket (ami ellentmond a megkülönböztethetetlenségnek).

σ_1: spin vált.

$\Rightarrow$ Meg kell követelni, hogy $\Psi(\underline{r}_2, \sigma_2, \underline{r}_1, \sigma_1)$ ugyanaz az állapot legyen:

$$\Psi(\underline{r}_2, \sigma_2, \underline{r}_1, \sigma_1) = e^{i\alpha}\,\Psi(\underline{r}_1, \sigma_1, \underline{r}_2, \sigma_2) =$$
$$= e^{i2\alpha}\,\Psi(\underline{r}_2, \sigma_2, \underline{r}_1, \sigma_1)$$

$$e^{i2\alpha} = 1, \quad e^{i\alpha} = \pm 1$$

A hullámfv. szimm. vagy antiszimm. a 2 részecske változóinak cseréjére.

$\Rightarrow$ <u>Pauli-elv:</u> bozonokra szimmetrikus
fermionokra antiszimm.

(eredeti megfogalmazás: 2 elektron sose fordulhat elő ugyanabban a kvantumállapotban)

Slater-determináns

- N független fermion esetén
$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \Psi_1(q_1) & \Psi_1(q_2) & \dots & \Psi_1(q_N) \\ \Psi_2(q_1) & \dots & & \\ & & & \\ & \dots & & \Psi_N(q_N) \end{vmatrix}$$

(ez pont antiszimm. a részecskék cseréjére)

- N független bozon esetén:

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{r_i \text{ permutáció}} \psi_{r_1}(q_1)\, \psi_{r_2}(q_2) \dots \psi_{r_N}(q_N)$$

Ha a kh. nem függ a spintől (pl. Coulomb-kh.) a Pauli-egy. megoldása:

$$\Psi(q_1, q_2, \dots) = \chi(\sigma_1, \sigma_2, \dots)\, \varphi(\underline{r}_1, \underline{r}_2, \dots)$$

spin hullámfv. — térbeli hullámfv. → térbeli Schr.-egy megoldása

Fermionok esetén, ha φ szimm. χ antiszimm

φ antiszimm χ szimm.

pl. 2 atomos fermion:

$$\varphi(\underline{r}_1, \underline{r}_2) = \Phi\left(\frac{\underline{r}_1 + \underline{r}_2}{2}\right) \cdot \varphi(\underline{r}_1 - \underline{r}_2)$$

$\underline{r}_2 \leftrightarrow \underline{r}_1$ a térbeli tükrözéssel ekvivalens

Ha a potenciál centrális, $(-1)^l$ ~~szorzót~~ ad a tükrözés, így a spinhullámfv.-re $(-1)^{l+1}$ jön ki.

He atom energiaszintjei (Pauli-elv segítségével)

$$\hat{H} = \underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_1 - \frac{\hbar^2}{2m}\Delta_2 - \frac{2e^2}{r_1} - \frac{2e^2}{r_2}}_{\hat{H}_0} - \frac{e^2}{r_{12}}$$, ahol

$$r_{12} = |\underline{r}_1 - \underline{r}_2|$$

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$$

$\hat{H}_0$ 2 független H-atom Hamiltonjának összege, $\hat{H}$ ennek a perturbált változata

$\hat{H}_0$ sfv. szorzatalakú:

(szinglet) $\varphi_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\varphi_a(1)\varphi_b(2) + \varphi_b(1)\varphi_a(2)\right]$ téreli h.fv. szimm.

(triplet) $\varphi_3 = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\varphi_a(1)\varphi_b(2) - \varphi_b(1)\varphi_a(2)\right]$ —"— antiszimm.

mindegyikhez $E^{(0)} = E_a + E_b$

degenerált eset → pert. szám.:

$$\langle\varphi_1 \,|\, \frac{e^2}{r_{12}} \,|\, \varphi_3\rangle = \underbrace{\int_{-\infty}^{+\infty} d\underline{r}_1\underline{r}_2}_{\text{szimm}} \frac{1}{2}\underbrace{\left[\varphi_a^*(1)\varphi_b^*(2) + \varphi_b^*(1)\varphi_a^*(2)\right]}_{\text{szimm. } \underline{r}_1 \leftrightarrow \underline{r}_2 - R}\underbrace{\frac{e^2}{r_{12}}}_{\text{szimm.}} \cdot$$

$$\underbrace{\left[\varphi_a(1)\varphi_b(2) - \varphi_a(2)\varphi_b(1)\right]}_{\text{antiszimm.}} = 0$$

ekkor $\hat{V}$ diagonális: $\Delta E_1 = \langle\varphi_1|\frac{e^2}{r_{12}}|\varphi_1\rangle = C + K$

$$\Delta E_3 = \langle\varphi_3|\frac{e^2}{r_{12}}|\varphi_3\rangle = C - K$$

ahol $C = \int d\underline{r}_1\, d\underline{r}_2\, |\varphi_a(1)|^2 |\varphi_b(2)|^2 \frac{e^2}{r_{12}}$ Coulomb-járulék

$\Uparrow$

$\int d\underline{r}_1 \overbrace{|\varphi_a(1)|^2 \cdot e}^{\rho_a(1)} = q_a (=e)$

$\int d\underline{r}_2 \underbrace{|\varphi_b(2)|^2 \cdot e}_{\rho_b(2)} = q_b (=e)$

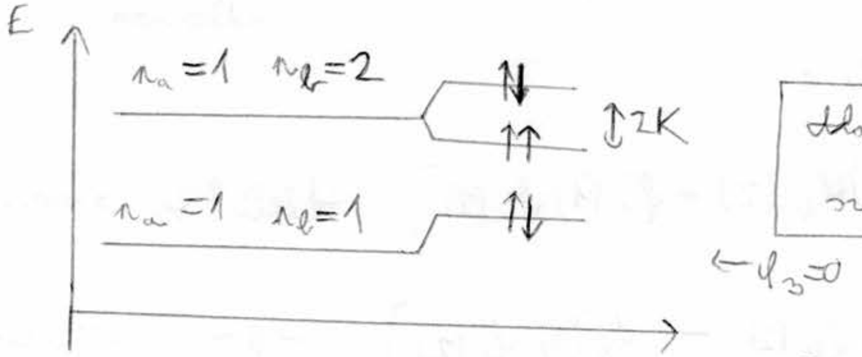
$K = \int d\underline{r}_1\, d\underline{r}_2\, \varphi_a^*(1)\varphi_b(1) \cdot \underbrace{\varphi_b^*(2)\varphi_a(2)}$

kicserélődési energia $\leftarrow$ ezeket kicserélve visszajön a Cb.-tag

(klasszikusan nincs)

akkor nagy, ha nagy az átfedés a pályák között (ez okozza a „Pauli-taszítást" atomok között)

$K > 0, \quad K > C > 0$



Alapállapotban csak spin szinglett van. — Pauli-elv bizonyítéka

Szinglett He: parahélium

Triplett He: ortohélium

Orto $\leftrightarrow$ para sugárzási átmenet.

Az atomok energiaszintjeinek általános jellemzése

Nemrelativisztikus közelítésben a Schr.-egyenletet kell megoldani.

Egy stacionárius állapotot jellemez: L (teljes pályamom.), S (teljes spin), P ((teljes) paritás), mivel ezek külön-külön megmaradó mennyiségek.

Elfajult nívók: $(2L+1)(2S+1)$ állapot

(Finomabb, pl. relativisztikus effektusok is vannak.

Csak $\underline{J} = \underline{L} + \underline{S}$ a megmaradó mennyiség, mis van spin-pálya komponensek illetve spin-spin kölcsönhatás is

A degeneráció felhasad. Adott $\underline{L}$, $\underline{S}$ -re:

$$J = L+S,\ L+S-1,\ \ldots,\ |L-S|$$

A degeneráció $\begin{cases} 2L+1 & \text{ha } L>S \\ 2S+1 & \text{ha } S>L \end{cases}$)

Az energiaszintek jelölése: $\boxed{{}^{2S+1}L_J}$

$L = 0,\ 1,\ 2,\ 3,\ \ldots$

$S,\ P,\ D,\ F,\ \ldots$

Eljárás: Schrödinger-egyenlet megoldása (közelítésekkel)

<u>Hartree-módszer</u> (független részecske közelítés)

Feltesszi, hogy minden elektronnak van külön hullámfv.-e, így mindegyik elektron a többi elektron és a mag által keltett pot. térben mozog. (összhullámfv. = hullámfv.-ek szorzata)

$$\boxed{V(\underline{r}_j) = -\frac{Ze^2}{r_j} + \sum_{k \neq j} \int |\Psi_k(\underline{r})|^2 \cdot \frac{e^2}{|\underline{r}_j - \underline{r}|}\, d\underline{r}}$$

($\underline{r}_j$ helyen j. elektronra ható potenciál)

Hartree-egy.:

$$\boxed{\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_j + V(\underline{r}_j)\right] \Psi_j(\underline{r}_j) = \varepsilon_j \Psi_j(\underline{r}_j)}$$

Megoldás: centrális potenciállal közelítünk:

$$V(r_j) = \frac{1}{4\pi}\int V(\underline{r}_j)\, d\Omega_j$$

A megoldás:

$$\Psi_j(\underline{r}_j) = \Psi_{nlm}(\underline{r}_j) = \frac{\chi_{nl}(r_j)}{r_j} Y_{lm}(\vartheta_j, \varphi_j)$$

χ_{nl}-nek $(n-l-1)$ zérushelye van (ez határozza meg a csomósíkokat),

és E_{nl} n-nel nő.

Az egyenleteket iterációval oldjuk meg. Önkonzisztens-tér = = self consistent field (addig iterálunk, amíg a potenciál nem változik)

(Megj.: Hartree-közelítésben nincs spin)

„független rész. módszer" → nem teljesen függetlenek, mert van kh. tag, de szorzatalakban keressük a teljes rendszer hullámfv.-ét

20. óra

Hartree-egyenletek levezetése:

$$\hat{H} = \sum_{j=1}^{Z} \hat{H}_j + \underset{\uparrow}{\frac{1}{2}} \sum_{\substack{j,k=1 \\ j\neq k}}^{Z \leftarrow \text{rendszám}} \frac{e^2}{r_{jk}}$$

a kölcsönhatási energiát elég az egyik tagnál beleszámolni

ahol:

$$\hat{H}_j = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_j - \frac{Ze^2}{r_j}$$

Variációs módszer:

$$\underset{\text{(hatás)}}{I} = \int \dots \int \Psi^* \hat{H} \Psi \, d\underline{r}_1 \dots d\underline{r}_Z \quad \text{és} \quad \int \Psi^* \Psi \, d\underline{r}_1 \dots d\underline{r}_Z = 1$$

Hartree-feltevés: $\Psi = \prod_{j=1}^{Z} \Psi_j(\underline{r}_j)$

$$I = \sum_{j=1}^{Z} \int \Psi_j^* \hat{H}_j \Psi_j \, d\underline{r}_j + \frac{1}{2} \sum_{\substack{j,k=1 \\ j \neq k}}^{Z} \iint \Psi_j^* \Psi_k^* \frac{e^2}{r_{jk}} \Psi_j \Psi_k \, d\underline{r}_j \, d\underline{r}_k$$

és $\prod_j \int \Psi_j^* \Psi_j \, d\underline{r}_j = 1$

Variáció (áll.: elég csak Ψ_j^*-t vagy Ψ_j-t variálni):

$$\delta I = \sum \int \delta \Psi_j^* \left[\hat{H}_j + \sum_k \int \Psi_k^* \frac{e^2}{r_{jk}} \Psi_k \, d\underline{r}_k \right] \Psi_j \, d\underline{r}_j$$

A normálás variációja $\int \delta \Psi_j^* \Psi_j \, d\underline{r}_j$

Lagrange-multiplikátor $(-E_j)$

$$\sum_{j=1}^{Z} \int \delta \Psi_j^* \underbrace{\left[\hat{H}_j + \sum_{k \neq j} \int \Psi_k^* \frac{e^2}{r_{jk}} \Psi_k \, d\underline{r}_k - E_j \right] \Psi_j}_{=0\text{, ami a Hartree-egyenleteket adja}} \, d\underline{r}_j = 0$$

Hiányosságok:

1, Független részecske hullámfv. (térbeli korrelációk nincsenek belerakva)

2, Pauli-elv sérül (2 e^- cseréjére a hullámfv. nem változik), de ez javítható

↓

Hartree - Fock - egyenletek:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_i \Psi_i(r_i) - \frac{Ze^2}{r_i}\Psi_i(r_i) + \sum_j \overbrace{\int d\underline{r}_2 |\Psi_j(\underline{r}_2)|^2 \cdot \frac{e^2}{|\underline{r}_2-\underline{r}_1|}}^{\left(\frac{\rho}{|\underline{r}|}\text{ tag}\right)} \Psi_i(\underline{r}_i) -$$

$$-\sum_j \left[\sum_\sigma \chi_i^*(\sigma)\chi_j(\sigma)\right]\left[\int \Psi_j^*(\underline{r}_2)\cdot\frac{e^2}{|\underline{r}_2-\underline{r}_i|}\Psi_i(\underline{r}_2)\,d\underline{r}_2\,\Psi_j(\underline{r}_i) =\right.$$

↑ kicserélődési tag

$$=E_i\Psi_i(\underline{r}_i)$$

⇒ A teljes hullámfv. Slater-determináns

= Az 1 elektron hullámfv.-t jellemzi: $\underbrace{n, l}_{\text{elektronpálya}}(m, \sigma)$

- Pl. He atom egy állapota:

$$1s \quad 2p \quad {}^3P_0$$

($3 \leftarrow 2s+1$; $P \to l$; $0 \to j$)

- Adott n, l mellett $\underset{\text{spin}}{2}\cdot(2\underset{m}{l}+1)$ elektronállapot, a Pauli-elv miatt mindegyikben csak 1 elektron lehet.

- Ha adott az elektron konfiguráció (az összes elektron pálya)

  L, M_L, S, M_S még nincs meghatározva, az impulzus momentum összeadás és a Pauli-elv adja a lehetőségeket.

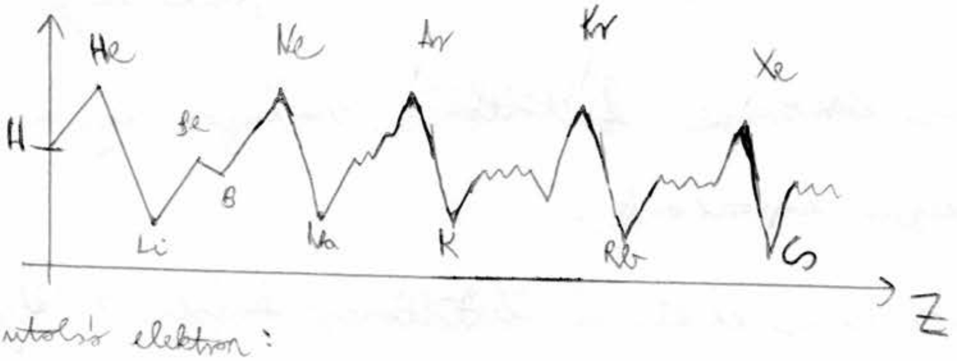
  Zárt héj esetén, azaz ha annyi elektron van n állapotban, ami maximálisan lehet, ^1S az állapot, mivel kompenzálódnak az impulzus momentumok.

Matematikailag: csak 1 Slater-determináns képezhető!

Periódusos rendszer

Az atomok alapállapotának az elektronkonfigurációja érdekel. Ahogy nő Z periodikus változások vannak.

pl. az utolsó elektron kötési energiája



utolsó elektron:

H 1s

He $1s^2$

Li 2s ← a 2s energiája az 1s-nél magasabb (gyengébb kötés), de közben Z is nő (erősíti a kötést).

:

1s	2 db
2s, 2p	8 db
3s, 3p	8 db
4s, 3d, 4p	18 db
5s, 4d, 5p	18 db
6s, 4f, 5d, 6p	32 db
7s, 6d, 5f	:

Hidrogén szerű hullámfv.-re E csak n-től függ, de természetesen:

$E_s < E_p < E_d$

(általános esetben l-től is függ E)

- A kémiai tulajdonságokat az elektronhéjak külső részei szabják meg.

- A d és f elektronok az s és p elektronokénál lényegesen közelebb vannak a maghoz.

· Főcsoport: amikor az s és p elektronok töltődnek

· Mellékcsoport: — " — d és f — " — , ezek eléggé hasonlóak

A főcsoportban az elektronok feltöltődése szabályos, így a periódusok eléggé hasonlóak.

A mellékcsoportban az elektronok feltöltődése kevésbé szabályos

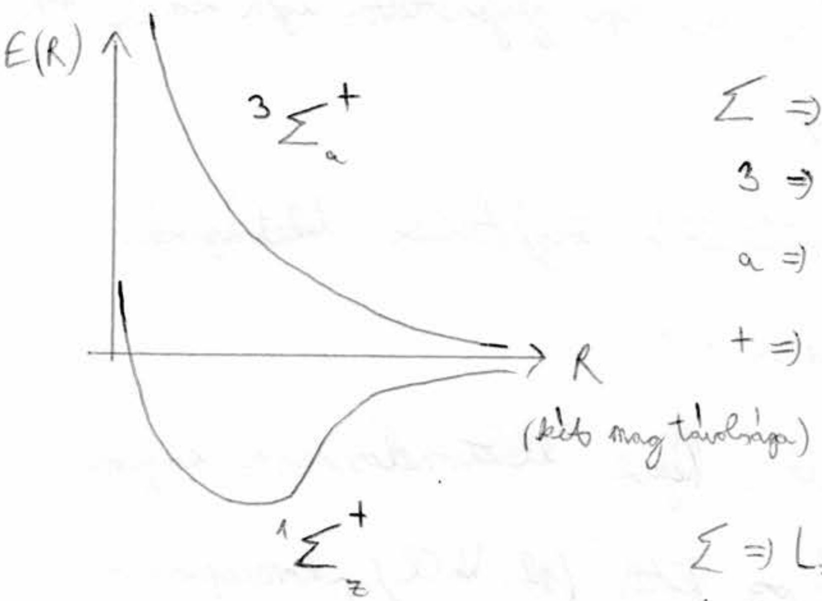
pl. $d^n s^2$ (28 Ni) után $d^{n+1} s^2$ (ami nincs) helyett $d^{n+2} s$ (29 Cu) vagy d^{n+3} ... jön.

Az elektronkonfigurációk, S, L, J értékei az irodalomban megtalálhatók.

(2 atomos) molekulák

$\frac{m_p}{m_e} \approx 2000$ Born - Oppenheimer közelítés álló magokkal indul, és a geometriát rögzítve meghatározzuk az elektron energiát, aminek minimuma adja a molekula geometriát.

- pl. H_2 molekula



$\Sigma \Rightarrow L_z = 0$
$3 \Rightarrow$ spin multiplicitás $(s=1)$
$a \Rightarrow z=0$ síkra tükrözésre antiszimm.
$+ \Rightarrow$

$\Sigma \Rightarrow L_z = 0$
$1 \Rightarrow s=0$
$sz \Rightarrow z=0$ síkra tükrözésre szimm.

antiszimm. esetnél a 2 mag között 0 az állapotsűrűség → nincs e^-, ami leárnyékolná a magok taszítását ⇒ nincs ilyen H_2 molekula.

(H_2 molekulát majd számoljuk)

- Általában a molekulák teljes spinje 0 (mint H_2 molekulánál)

Heitler - London - szabály : a spinek kölcsönösen kompenzálódnak, a vegyérték 2× spin.

- Ez elég jól működik, ha figyelembe vesszük, hogy a molekulában nem csak alapállapotú atomok lehetnek, hanem a közeli gerjesztett állapotok is.
- pl. Li, Na, K, ... $s=\frac{1}{2}$ vegyérték: 1

  Be, Mg, Ca, ...

  $s=0 \Rightarrow$ vegyérték 0 lenne, de a külső e^- konfiguráció s^2 alapállapotban, amihez az sp gerjesztett igen közel van.

  $\Rightarrow s=1$, vegyérték 2.
- Főcsoportok esetén, ha különböző vegyértékek lehetségesek, ezek 2-vel különböznek.

– A molekulákban a betöltetlen héjak elektroneloszlása nagyon megváltozhat. Heteropoláros kötés (pl. NaCl); homeopoláros kötés (H_2).

– Átmeneti csoportoknál d, f elektronok töltődnek, amik közel vannak a maghoz, így a molekulában kevésbé hatnak kölcsön. Vannak telítetlen kötések, azaz nem zérus spinű molekulák $\Rightarrow$ A különböző vegyértékek 1-gyel is különbözhetnek.

H_2 molekula

- Kicsit módosított perturbáció számítás:

$$\hat H = \hat H_a^0 + \lambda \hat H_a^1 = \hat H_b^0 + \lambda \hat H_b^1$$

(λ megint mesterséges paraméter, a rendeket képviseli)

$\hat H_a^0$ sfv.-e Ψ_a^0, s.érték E_a^0

$\hat H_b^0$ —||— Ψ_b^0, —||— E_b^0

Vegyük $E_a^0 = E_b^0 = E^0$ esetet:

$$E = E^0 + \lambda \cdot E^1$$

$$\Psi = \Psi^0 + \lambda \Psi^1 = \frac{\Psi_a^0 + \Psi_b^0}{\sqrt{2}} + \lambda \Psi^1$$

(lesz $\frac{\Psi_a^0 - \Psi_b^0}{\sqrt{2}}$ is mint kezdeti hullámfv.)

$(\hat H - E)\Psi = 0$-ba beírva:

$$(\hat H - E)(\Psi^0 + \lambda \Psi^1) = 0$$

$$\lambda (\hat H - E)\Psi^1 + \frac{1}{\sqrt{2}}\left(H_a^1 \Psi_a^0 + H_b^1 \Psi_b^0\right) - \lambda E^1 \cdot \frac{\Psi_a^0 + \Psi_b^0}{\sqrt{2}} = 0$$

Skalárisan beszorozzuk $\Psi_a^0 + \Psi_b^0$-lal

$$\lambda \underbrace{\langle \Psi_a^0 + \Psi_b^0 | (\hat H - E) | \Psi^1 \rangle} + \frac{1}{\sqrt{2}} \langle \Psi_a^0 + \Psi_b^0 | \hat H_a^1 \Psi_a^0 + \hat H_b^1 \Psi_b^0 \rangle -$$

$$- \lambda \frac{E^1}{\sqrt{2}} \langle \Psi_a^0 + \Psi_b^0 | \Psi_a^0 + \Psi_b^0 \rangle = 0$$

$$\sqrt{2} \langle \cancel{\Psi} - \lambda \Psi^1 | (\hat H - E) | \Psi^1 \rangle = -\lambda \sqrt{2} \langle \Psi^1 | (\hat H - E) | \Psi^1 \rangle$$ $\Rightarrow$ Az 1. tag tehát elhagyható (λ^2-es nagyságrendű)

↳ ezzel 0-t ad $(\hat H - E)\Psi$

még λ-val szorzódik

nincsenek kereszttagok ⇑ ez közelítés, de

$$E^1 = \frac{1}{2}\langle \Psi_a^0 + \Psi_b^0 \mid \hat H_a^1 \Psi_a^0 + \hat H_b^1 \Psi_b^0 \rangle$$ ha $\langle \Psi_a^0 | \Psi_b^0 \rangle = S = 0$ (ami jól teljesül)

(átfedési integrál)

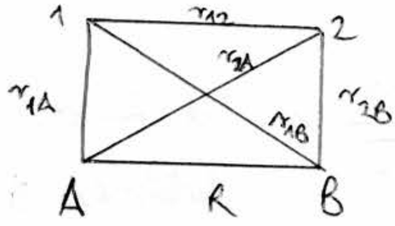
$\frac{\Psi_a^0 - \Psi_b^0}{\sqrt{2}}$ -ből kiindulva E^1 hasonló, csak − előjelek vannak benne

(ha $S \neq 0$ → általánosabb alak)

21. óra

H_2 molekulára való alkalmazás

$$\hat H = -\frac{\hbar^2}{2m}(\Delta_1 + \Delta_2) + e^2\left(\frac{1}{R} + \frac{1}{r_{12}} - \frac{1}{r_{1A}} - \frac{1}{r_{2A}} - \frac{1}{r_{1B}} - \frac{1}{r_{2B}}\right)$$



→ kölcsönhatások (A, B: magok

1, 2: e^--ok)

$$\hat H = \hat H_a^0 + \lambda \hat H_a^1 = \hat H_b^0 + \lambda \hat H_b^1$$

- $$\hat H_a^0 = -\frac{\hbar^2}{2m}(\Delta_1 + \Delta_2) - e^2\left(\frac{1}{r_{1A}} + \frac{1}{r_{2B}}\right)$$ (1. e^- az A, 2. e^- a B körül van)

  ⇓

  $$\hat H_a^1 = e^2\left(\frac{1}{r_{12}} - \frac{1}{r_{1B}} - \frac{1}{r_{2A}} + \frac{1}{R}\right);$$ (1 ↔ 2 csere nem szimm., mert a potenciál $\sim\left(\frac{1}{r_{1B}} + \frac{1}{r_{2A}}\right)$)

  $$\Psi_a^0 = \Psi_A(r_{1A})\Psi_B(r_{2B})$$

- $$\hat H_b^0 = -\frac{\hbar^2}{2m}(\Delta_1 + \Delta_2) - e^2\left(\frac{1}{r_{2A}} + \frac{1}{r_{1B}}\right)$$ 2. e^- A körül, 1. e^- B körül

  $$\hat H_b^1 = -e^2\left(\frac{1}{r_{2B}} + \frac{1}{r_{1A}} - \frac{1}{r_{12}} - \frac{1}{R}\right)$$

$$\Psi_b^0 = \Psi_A(\underline{r}_{1B}) \cdot \Psi_B(\underline{r}_{2A})$$

$$E^0 = -\frac{e^2}{2\rho}\left(\frac{1}{n_A^2} + \frac{1}{n_B^2}\right) \qquad \rho = \frac{\hbar^2}{me^2}$$

$$E^1(R) = \frac{1}{2}\langle \Psi_a^0 \pm \Psi_b^0 | \hat{H}_a^1 \Psi_a^0 \pm \hat{H}_b^1 \Psi_b^0 \rangle$$

A perturb. számítás $\frac{\Psi_a^0 \pm \Psi_b^0}{2}$-ből indul ki, feltettük, hogy:

$$\langle \Psi_a^0 | \Psi_b^0 \rangle \ll 1$$

1. e^- az A, 2. e^- a B körül van; 1. e^- a B, 2. e^- az A körül van $\rightarrow$ kicsi az átfedés

az spin, nem az átfedési int.

spinkv.: spin szinglett: $(S=0) \Leftrightarrow \left(\frac{\Psi_a^0 + \Psi_b^0}{2}\right)$

spin triplett: $(S=1) \Leftrightarrow \left(\frac{\Psi_a^0 - \Psi_b^0}{2}\right)$

$$E^1(R) = C \pm K$$

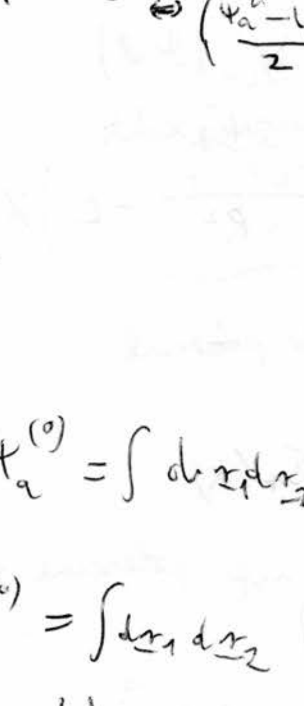
C: Coulomb-energia; K: kicserélődési-energia

töltéssűrűség A atom körül; — || — B atom körül

$$C = \int d\underline{r}_1 d\underline{r}_2\, \Psi_a^{(0)*} \hat{H}_a^{(1)} \Psi_a^{(0)} = \int d\underline{r}_1 d\underline{r}_2\, |\Psi_A(\underline{r}_{1A})|^2 |\Psi_B(\underline{r}_{2B})|^2 \hat{H}_a^{(1)}$$

$$K = \int d\underline{r}_1 d\underline{r}_2\, \Psi_b^{(0)*} \hat{H}_a^{(1)} \Psi_a^{(0)} = \int d\underline{r}_1 d\underline{r}_2\, \Psi_A^*(\underline{r}_{2B}) \cdot \hat{H}_a^{(1)} \Psi_A(\underline{r}_{1A}) \cdot$$

$$\cdot \Psi_B^*(\underline{r}_{2A}) \cdot \Psi_B(\underline{r}_{2B})$$



Magmozgás

Eddig csak álló magokkal kölcsönható elektronok hullámfv.-eit számoltuk. Ha van magmozgás is, akkor a teljes energia:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2M}\left(\Delta_{\underline{R}_1}+\Delta_{\underline{R}_2}\right)+\underset{\substack{\uparrow\\ \text{elektron energia}}}{\mathcal{E}}(R)-E_{\text{teljes}}\right)\Phi(\underline{R}_1,\underline{R}_2)=0$$

(ebben már benne van az e^- – mag k.h.)

e^--ok gyorsan mozognak a magokhoz képest $\Downarrow$ adott R-re ezt kiszámoljuk, majd ha változik R, újra kiszámítjuk

ahol

$R := |\underline{R}_1-\underline{R}_2|$

A relatív koord.-ra vonatkozó egyenlet $\left(M_{rel}=\frac{M}{2}\right)$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{M}\Delta_{\underline{R}}+\mathcal{E}(R)-E\right]\phi(\underline{R})=0$$

Centrális a pot.:

$$\phi(R,\vartheta,\varphi)=\frac{\chi(R)}{R}Y_{LM_L}(\vartheta,\varphi)$$

$$-\frac{\hbar^2}{M}\frac{d^2\chi}{dR^2}+\Big(\underbrace{\mathcal{E}(R)+\overbrace{\frac{\hbar^2L(L+1)}{MR^2}}^{\text{centrifugálgát}}}_{\text{effektív potenciál}}-E\Big)\chi=0$$

Kötés eset $\mathcal{E}(R)=\mathcal{E}_+(R)$

Ha L kicsi, az eff. potenciál minimuma $\approx \mathcal{E}_+(R)$ minimuma (R_1)

$$u(R)=u_0+\frac{1}{2}D(R-R_1)^2+b(R-R_1)^3+c(R-R_1)^4+\dots$$

Legalacsonyabb közelítésben oszcillátor egyenlet:

$$E_n = U_0 + \hbar\sqrt{\frac{2D}{M}}\left(n+\frac{1}{2}\right) \qquad n=0,1,2,\dots$$

rezgési színképet adja

$$U_0 = -\mathcal{E}_+(R_1) + \frac{\hbar^2 L(L+1)}{MR_1^2}$$ (a forgási energia)

a rotációs színképet adja

$\eta := \left(\frac{m_e}{M}\right)^{1/4}$ dimenziótlan

színkép:

$\Rightarrow$ Elektron energiák : η^0 $\quad E_0 \sim \frac{\hbar^2}{m_e \cdot a^2}$ (a: a rendszer lin. mérete) látható fény, közeli UV

Rezgési —"— : η^2 $\quad E_r \sim \hbar\sqrt{\frac{D}{M}}$ közeli IR

Forgási —"— : η^4 $\quad E_f \sim \frac{\hbar^2}{\Theta}$ $\quad (\Theta = MR_1^2)$ távoli IR

Van der Waals erők

A kémiai hatótávolságnál sokkal nagyobb hatótávolságú erők.
Semleges atomok és molekulák között hatnak.

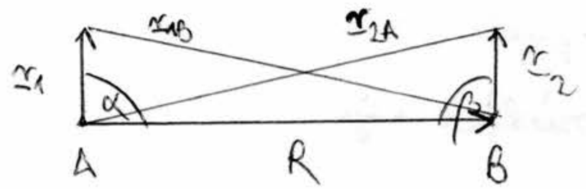
$$V(R) = -\frac{A}{R^6}$$

Vegyünk 2 alapállapotú H atomot:

$R \gg$ atomsugár $\Rightarrow$ a K kicserélődési energia ≈ 0.

$$\hat{H} = \hat{H}_A(r_1) + \hat{H}_B(r_2) + \hat{H}'(r_1, r_2, R) \qquad \hat{H}_A(r_1) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_1 - \frac{e^2}{r_1}$$

$$H' = \frac{e^2}{R} + \frac{e^2}{r_{12}} - \frac{e^2}{r_{2A}} - \frac{e^2}{r_{1B}} \qquad \hat{H}_B(r_2) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_2 - \frac{e^2}{r_2}$$



(konfiguráció)

$\frac{r_1}{R}, \frac{r_2}{R} \to 0$ $\qquad r_{1B} = |\underline{r}_1 - \underline{R}|$ $\qquad$ mindegyik

$r_{2A} = |\underline{r}_2 + \underline{R}|$ $\qquad |\underline{R} - \underline{r}|$ alakú

$r_{12} = |\underline{r}_1 - (\underline{r}_2 + \underline{R})|$

$$\frac{1}{|\underline{R}-\underline{r}|} = \frac{1}{\sqrt{R^2+r^2-2\underline{r}\underline{R}}} = \frac{1}{R}\frac{1}{\sqrt{1-\frac{2\underline{r}\underline{R}}{R^2}+\frac{r^2}{R^2}}} = \frac{1}{R}\left(1+\frac{\underline{r}\underline{R}}{R^2}+\frac{3}{2}\left(\frac{\underline{r}\underline{R}}{R^2}\right)^2 - \right.$$

$$\left. - \frac{r^2}{2R^2} + \mathcal{O}\left(\frac{r^3}{R^3}\right)\right)$$

$$\Rightarrow \hat{H}' = \frac{e^2}{R^3}\left(\underline{r}_1\underline{r}_2 - 3\frac{(\underline{r}_1\cdot\underline{R})(\underline{r}_2\cdot\underline{R})}{R^2}\right) + \mathcal{O}\left(\frac{1}{R^4}\right)$$ ez a dipól - dipól kölcsönhatás!

$\underline{R} = (0, 0, R)$

$$\hat{H}' = \frac{e^2}{R^3}\left(x_1x_2 + y_1y_2 - 2z_1z_2\right)$$

Perturbáció számítás: $\hat{H}_0 = \underbrace{\hat{H}_A}_{\text{A mag Ham.-op.-a}} + \underbrace{\hat{H}_B}_{\text{B mag Ham.-op.-a}}$

- $E_0 = 2E_{n=1}$ nem degenerált

$\Psi_0 = \Psi_{100}(\underline{r}_1)\cdot\Psi_{100}(\underline{r}_2)$ $\qquad$ spin hullámfv. $S=0$

(antiszimm.)

$\Delta E = E^{(1)} = \langle\Psi_0|\hat{H}'|\Psi_0\rangle \to \Psi_0$ x_1, y_1, z_1 és x_2, y_2, z_2-től úgy függ, hogy:

$\Psi_0\left(\sqrt{x_1^2+y_1^2+z_1^2}, \sqrt{x_2^2+y_2^2+z_2^2}\right)$

első rendben: $\Downarrow$

$\Delta E = 0$ mert páratlan fv.-t kell integrálni

második rendben:

$$\Delta E = E^{(2)} \equiv V(R) = \sum_{\substack{n \\ n\neq 0}} \frac{|H'_{0n}|^2}{E_0 - E_n}$$

mert az nem baj, ha valamelyik másik ($n\neq 0$) szint degenerált

Nem is kell $|H'_{0n}|$-et kiszámolni, mert látjuk $\propto \frac{1}{R^3}$

Kijön $V(R) \propto \frac{1}{R^6}$ (sőt $V(R) < 0$)

mert $E_n > E_0 \Rightarrow E_0 - E_n < 0$ $\forall n \neq 0$-ra

$$E_0 - E_n = -\frac{e^2}{\rho} + \frac{e^2}{2\rho n_1^2} + \frac{e^2}{2\rho n_2^2}$$

$n_1, n_2 \neq 1 \to$ mert $H'_{01} = 0$

$$-\frac{e^2}{\rho} < E_0 - E_n < -\frac{3}{4}\frac{e^2}{\rho}$$

($n_1, n_2 = 2$-re kijön a felső határ)

$$\sum_{\substack{n \\ n\neq 0}} |H'_{0n}|^2 = (H'^2)_{00} - |H'_{00}|^2 = (H'^2)_{00}$$

$$\sum_n \langle 0 | H' | n \rangle \langle n | H' | 0 \rangle$$

$$\Psi_{100} = \frac{2}{\sqrt{4\pi \rho^3}} e^{-\frac{r}{\rho}} \Rightarrow (H'^2)_{00} = \frac{6 e^4 \rho^4}{R^6}$$

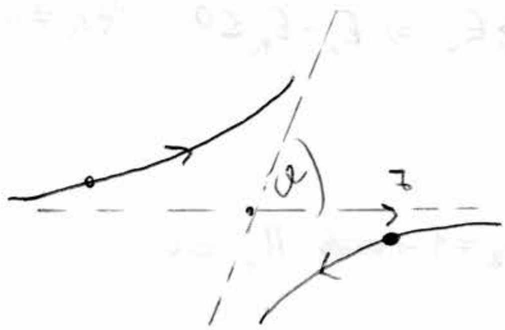
$$\Rightarrow \quad -\frac{8 e^2 \rho^5}{R^6} \leq V(R) \leq -\frac{6 e^2 \rho^5}{R^6}$$

22. óra

Szóráselmélet

Rugalmas szórás

Az ütköző részecskék belső szerkezete nem változik meg.
Nem relativisztikus esetben m_1 és m_2 tömegű részecskék szórása
$U(\underline{r})$ $\underline{r} = \underline{r}_1 - \underline{r}_2$ potenciál esetén leírható az $m = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$
redukált tömegű részecske szórásaként az $U(\underline{r})$ potenciálon.



ϑ = TKP rendszerbeli szórásszög
Galilei-transzf.-val a labor rendszerben (2. rendszer áll)

$$\operatorname{tg}\vartheta_1 = \frac{m_2 \sin\vartheta}{m_1 + m_2\cos\vartheta}, \quad \vartheta_2 = \frac{\pi - \vartheta}{2}$$

Időbeli leírás helyett stacionárius feladatot oldunk meg:
folytonos részecskeáram a ∞-ből a kölcsönhatás során a kiszépülő (szórt) részecskeáramba megy át.

- A bejövő részecskék hullámfv.-e : e^{ikz} $\left(U \underset{r\to\infty}{\longrightarrow} 0\right)$
  (síkhullám)
- A kifutó —"— gömbhullám : $\frac{f(\vartheta)}{r} e^{ikr}$

A hullámfv. asszimptotikája : $\Psi \simeq e^{ikz} + \frac{f(\vartheta)}{r} e^{ikr}$

- bejövő áramsűr.: $j_{be} = \frac{i\hbar}{2m}\left(\psi \cdot \frac{\partial \psi^*}{\partial z} - \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial z}\right) = \frac{\hbar k}{m}$

- kifutó — " — $j_{ki} = \frac{i\hbar}{2m}\left(\psi \cdot \frac{\partial \psi^*}{\partial r} - \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial r}\right) = \frac{\hbar k}{m} \cdot \frac{1}{r^2} |f(\vartheta)|^2$

A $dF = r^2 d\Omega$ felületelemen áthaladó részecskék száma/sec:

$$dN = j_{ki}\, dF = \frac{\hbar k}{m} \left| f(\vartheta) \right|^2 d\Omega .$$

Másrészt: $dN = \sigma(\vartheta, \cancel{\varphi})\, j_{be}\, d\Omega \qquad \sigma(\vartheta,\varphi) =$ differenciális hatáskeresztmetszet

$\sigma(\vartheta, \cancel{\varphi}) = |f(\vartheta)|^2 \qquad f(\vartheta) =$ szórásamplitudó

↳ hengerszimm. a pot.

A feladat: a Schrödinger-egyenletet egzaktul megoldjuk, az asszimptotikus megoldásból leolvassuk $f(\vartheta)$-t $\Rightarrow \sigma(\vartheta)$ adódik

A Schrödinger-egyenlet megoldása $E>0$ miatt nem normálható (úgy normáljuk mégis, hogy asszimptotikusan e^{ikz} legyen a mo.).

Parciális hullámok módszere

Az egzakt ψ impulzus mom. szerinti kifejtésen alapul.

Tfh. gömbszimm. a potenciál: $U(r)$

$$\psi = \sum_{l=0}^{\infty} A_l\, P_l(\cos\vartheta)\, \frac{\chi_{kl}(r)}{r}$$

$$\chi'' - \left[\frac{l(l+1)}{r^2} + \frac{2m}{\hbar^2} U - k^2\right] \chi = 0$$

$$\chi \xrightarrow{r\to\infty} \sqrt{\frac{2}{\pi}}\cdot\sin\left(kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l\right)$$ ez nem a potenciálgödör l-je!

$U=0$ esetén a pontos megoldás: $\dfrac{J_{l+\frac{1}{2}}(kr)}{\sqrt{kr}} \to \sqrt{\frac{2}{\pi}}\sin\left(kr - \frac{l\pi}{2}\right)$

azaz $\delta_l = 0$. δ_l neve fázis eltolás (megmutatja, hogy a szabad esethez képest mennyivel tolódik el a fázis).

Ha $\delta_l = 0$, nincs szórás.

$$\psi \simeq \sqrt{\frac{2}{\pi}}\,\frac{1}{r}\sum_l A_l P_l(\cos\vartheta)\sin\left(kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l\right) = \frac{i}{2}\sqrt{\frac{2}{\pi}}\,\frac{1}{r}\sum_l A_l P_l \cdot$$

$$\cdot\left\{e^{-i\left(kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l\right)} - e^{i\left(kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l\right)}\right\}$$

$$e^{ikz} \approx \frac{i}{2kr}\sum_l i^l (2l+1)\cdot P_l \cdot \left\{e^{-i\left(kr - \frac{l\pi}{2}\right)} - e^{i\left(kr - \frac{l\pi}{2}\right)}\right\}$$

Feltétel: $\left(\psi - e^{ikz}\right)$-ben csak kifutó gömbhullám van, így:

$$A_l = \frac{1}{k}\sqrt{\frac{\pi}{2}}\,(2l+1)\,i^l e^{i\delta_l}$$. Megvan $A_l(\delta_l)$.

Visszahelyettesítve:

$$\psi \approx \frac{i}{2kr}\sum_l (2l+1)\cdot P_l \cdot \left[(-1)^l e^{-ikr} - e^{2i\delta_l}\cdot e^{ikr}\right]$$

$\psi - e^{ikz}$-ből leolvasva:

$$\boxed{f(\vartheta) = \frac{1}{2ik}\sum_l (2l+1)\cdot\left(e^{2i\delta_l} - 1\right)P_l(\cos\vartheta)}$$

$\sigma(\vartheta) = |f(\vartheta)|^2$ differenciális s.f keresztmetszete!

$$\boxed{\text{Teljes h.k.}: \quad \sigma = 2\pi \int_0^\pi |f(\vartheta)|^2 \sin\vartheta \, d\vartheta = \frac{4\pi}{k^2} \sum_l (2l+1) \sin^2 \delta_l}$$

$$\boxed{\text{Optikai-tétel}: \quad \sigma = \frac{4\pi}{k^2} \cdot \operatorname{Im} f(\vartheta = 0)}$$

Szórás operátor: $|\Psi_{ki}\rangle = S|\Psi_{be}\rangle$

Ha imp. mom. megmarad:

$$S_{l'l} = \delta_{l'l} S_l \text{, ahol } S_l = e^{2i\delta_l}$$

$$\frac{\langle \Psi_{be}^l | \Psi_{ki}^l \rangle}{\langle \Psi_{be,0}^l | \Psi_{ki,0}^l \rangle}$$

$\leftarrow$ $\delta_l = 0$, azaz a szórás nélküli hullámfv.-t kell beírni

Kis energiájú szórás véges hatótávolságú V esetén

Klasszikusan $L = m \cdot v \cdot \rho_{\text{impakt}} \Rightarrow$ kis energia kis L-et ad

Pl. magerők hatótávolsága: $2 \cdot 10^{-15}\ m = a$

protonon szórás: $E = \frac{mv^2}{2} = \frac{(mva)^2}{2ma^2} \underset{l=1}{=} \frac{\hbar^2}{2m\,(2 \cdot 10^{-5}\, m)^2} \sim 10\ \text{MeV}$

Ez alatt elég az $l=0$ parciális hullám.

A szórásamplitúdó pólusai és a kötött állapotok kapcsolata

Adott potenciál esetén változtatjuk az energiát:

$E>0$	$E<0$
szórás,	kötött állapotok
folytonos spektrum	diszkrét spektrum

- Legyen $l=0$:

$$\psi_{r\to\infty}=\frac{1}{r}\left(a(k)\,e^{ikr}+b(k)\cdot e^{-ikr}\right)$$

$a(k)$, $b(k)$ a Schr.-egyenlet egzakt megoldásából adódik

- Kis r-re a feltétel: ψ $r=0$-ban véges

A hullámfv. valós (nem elfajult áll.) $\Rightarrow$ $b(k)=a^*(k)$

Ha $k\to -k$ $\quad a(-k)=b(k)$

- Folytassuk el k-t komplex értékekre úgy, hogy ψ mindig a Schr.-egyenlet megoldása, ami véges az origóban.

ψ a térben ($\underline{r}$-ben) nem mindenhol véges, míg az $r\to\infty$ asszimptotikában az első v. a 2. tag ∞.

Ha k tiszta képzetes $E<0$, kötött állapotok vannak: E_b

bound

$$E_b \Rightarrow k_b=\pm i\sqrt{2m|E_b|}\,/\hbar$$

ψ véges $r\to\infty$ esetén, ha $b(i|k_b|)=0$ ← ezt választjuk

vagy $a(-i|k_b|)=0$

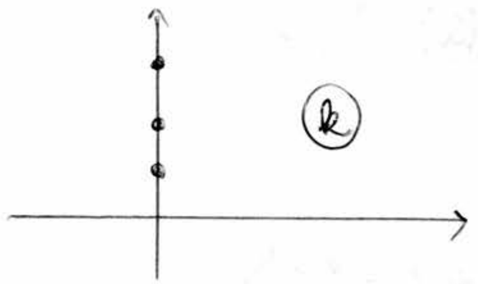
$E>0$ hullámfv. asszimptotikusan

$$\psi = \sqrt{\frac{2}{\pi}}\,\frac{1}{2ir}\left(e^{i(kr+\delta_0)} - e^{-i(kr+\delta_0)}\right) = \sqrt{\frac{2}{\pi}}\,\frac{1}{r}\sin(kr+\delta_0)$$

$$S_{l=0} = e^{2i\delta_0(k)} = \frac{a(k)}{b(k)}$$ ennek pólusa van, ha $b(k)=0$, azaz a kötött állapotnál

A parc. hullámamplitúdó:

$$f_{l=0} = \frac{1}{2k}\left(e^{2i\delta_0}-1\right)$$ pólusa van a felső félsíkon



Példák: Kis energiájú szórás ($l=0$) pot. gödrön

1)
$$U(r) = \begin{cases} -U_0 & r<a \\ 0 & r>a \end{cases}$$

$$\Delta\psi + k^2\psi = \frac{2m}{\hbar^2}U(r)\cdot\psi$$

Feltételek: $ka \ll 1$, $k \ll K$ $\quad K = \frac{\sqrt{2mU_0}}{\hbar}$

- $r<a$

$$(r\psi)'' + K^2(r\psi) = 0$$

$r=0$-ban véges m. o. $\quad r\psi = A\sin(Kr)$

• $r > a$ $\quad (r\psi)'' + k^2 (r\psi) = 0$

$$r\psi = B \sin(kr + \delta_0)$$

Határfeltétel: $\frac{\psi'}{\psi}$-t illesztjük: $K \operatorname{ctg}(Ka) = k \operatorname{ctg}(ka + \delta_0) \approx \frac{k}{ka + \delta_0}$

$$\Rightarrow \delta_0 = \frac{k \operatorname{tg} Ka}{K} - ka$$

A szórásamplitúdó:

$$f = \frac{e^{2i\delta_0} - 1}{2ik} \underset{\uparrow}{=} \frac{\operatorname{tg} Ka - Ka}{K} > 0$$

$$= \frac{2i\delta_0}{2ik} =$$

A szórás izotróp és energiafüggetlen*.

A számítás nem jó, ha U_0 és a olyan, hogy $Ka = \frac{\pi}{2}(2n+1)$

(l. később: ilyenkor van olyan kötött állapot, ahol $E \approx 0$)

* Ez igaz, ha $U(r) \xrightarrow[r \to \infty]{} \frac{1}{r^{3+\varepsilon}}$ $\quad \varepsilon > 0$ (Coulomb-pot. nem ilyen!)

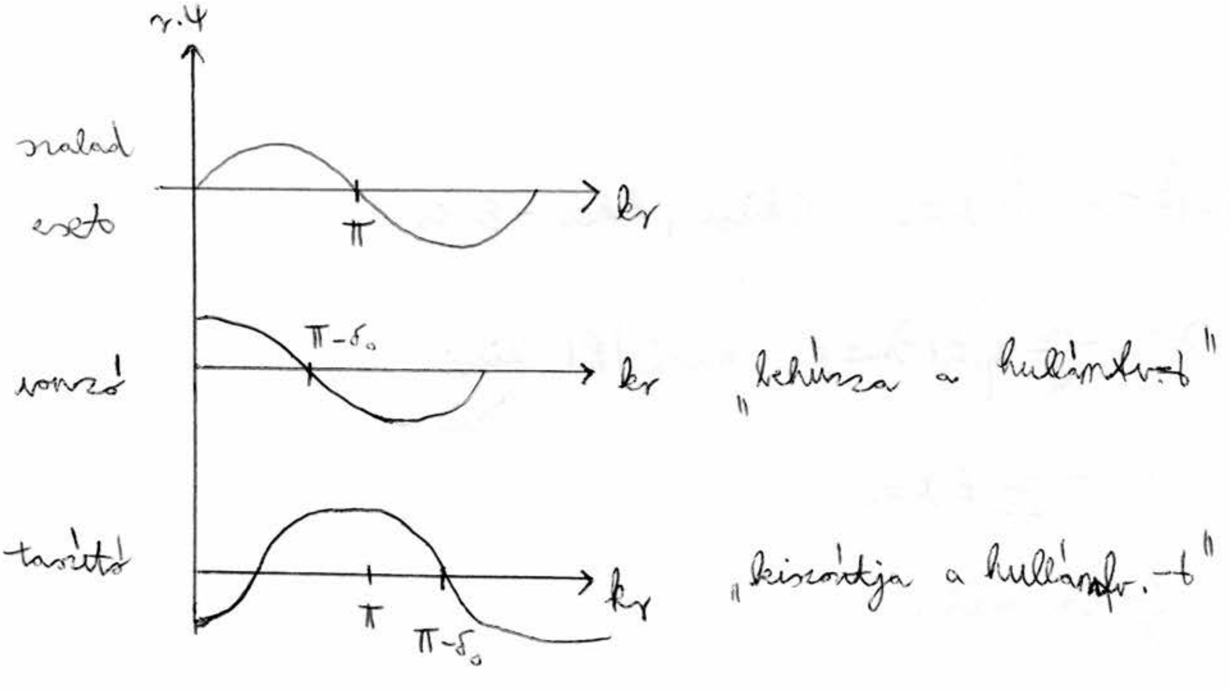
23. óra

Példák (folyt.)

2) Derékszögű pot. hegy (3 dim.) $\qquad$ 1)-nél $\delta_0 > 0$

Végeredmény $\underset{\substack{\uparrow \\ \text{szórás} \\ \text{amplitúdó}}}{f} = \frac{e^{2i\delta_0} - 1}{2ik} \underset{\substack{ka \ll 1 \\ k \ll |K|}}{\approx} \frac{\delta_0}{k} = \frac{\operatorname{th}|K|a - |K|a}{|K|}$; $\delta_0 < 0$

$K = i\sqrt{\frac{2mU_0}{\hbar^2}}$



Ha $U_0 \to \infty$, $|K| \to \infty$

$f \to -a$

$\sigma = 4\pi a^2$ az a sugarú merev gömbön

Kl. mechanikában a geom. keresztmetszet: $a^2\pi$

Kötött állapotok: f (szórásampl.) pólusai

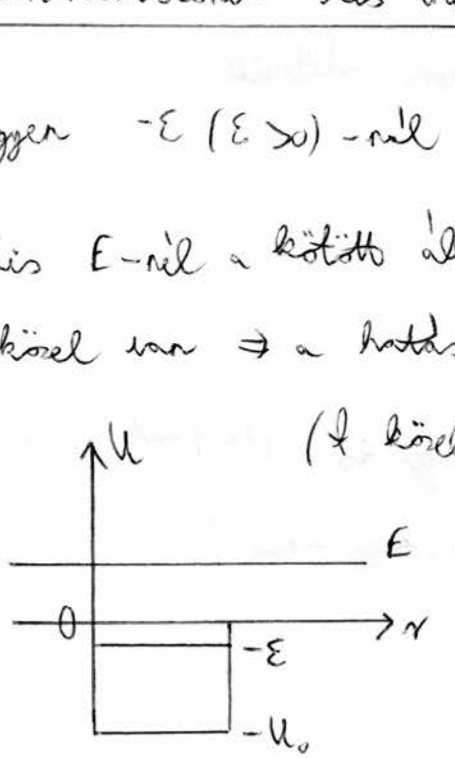
Rezonanciaszórás kis energián

Legyen $-\varepsilon$ ($\varepsilon > 0$)-nál kötött $l=0$ állapot és $\varepsilon \ll |U|$

↑ a hatótávolságon belül

Kis E-nél a kötött állapot komplex k-térben közel van $\Rightarrow$ a hatáskeresztmetszet megnő

(f közel van a pólushoz)



$\chi = r \cdot \psi$

$$\chi'' + \frac{2m}{\hbar^2}\left[E - U(r)\right]\chi = 0$$ E kicsi, lehet $-\varepsilon$ is

$r \leq a$ $\quad \chi'' - \frac{2m}{\hbar^2} U(r)\chi = 0$ mivel $|E|$ kicsi

$r \gg a$ $\quad \chi'' + \frac{2m}{\hbar^2} E\chi = 0$

Illeszteni $\frac{\chi'}{\chi}$-t kell.

Belül: $\frac{\chi'}{\chi}$ $E(k^2)$ független, U-ra jellemző állandó: $-\bar{K}$

(kis E és a kötött állapotra is)

Kívül: kötött áll. $\quad \chi = \mathrm{const.}\, e^{-\frac{\sqrt{2m\varepsilon}}{\hbar}r}$

$$\Rightarrow \frac{\chi'}{\chi} = -\frac{\sqrt{2m\varepsilon}}{\hbar} \quad \text{így} \quad \bar{K} = \frac{\sqrt{2m\varepsilon}}{\hbar}$$

Szórási állapot: $\chi = \mathrm{const.} \sin(kr + \delta_0)$

$r = a$ helyett $r=0$-ban illesztünk ($\frac{\chi'}{\chi}$ lassan változik)

$$\left.\frac{\chi'}{\chi}\right|_{r=0} = -\bar{K} \Rightarrow k \cdot \mathrm{ctg}\,\delta_0 = -\bar{K}$$

$\mathrm{ctg}\,\delta_0 = -\frac{\bar{K}}{k} = -\sqrt{\frac{\varepsilon}{E}}$, δ_0 lehet nagy is (ez pont az az eset, amit kihagytunk a potenciál gödör/hegy-nél)

$$f = \frac{1}{2ik}\left(e^{2i\delta_0} - 1\right) \equiv \frac{1}{k(\mathrm{ctg}\,\delta_0 - i)} = -\frac{1}{\bar{K} + ik}$$

$k = i\bar{K}$ helyen az f szórásamplitúdónak pólusa van.

$$\boxed{\sigma = 4\pi |f|^2 = \frac{4\pi}{\bar{K}^2 + k^2} = \frac{2\pi\hbar^2}{m}\frac{1}{E + \mathcal{E}}}$$ rezonancia szórás

Wigner

izotróp ($l=0$ választás miatt), de <u>energiafüggő</u> a szórás

– előfordul, hogy $U(r)$-re nincs kötött állapot, de $U(r)$-et kissit megváltoztatva már van. Akkor $f = -\frac{1}{\bar{K} + ik}$, $\sigma = \frac{4\pi}{\bar{K}^2 + k^2}$)

($\bar{K}$ a megváltoztatott potenciálra vonatkozik)

ilyenkor $\mathcal{E} = \frac{\hbar^2 \bar{K}^2}{2m}$ nem kötött állapot kötési energiája.

'virtuális állapot' van

Pl. deuteron (p, n állapot)

$\uparrow\uparrow$ spin $\quad E = 2{,}23$ MeV kötött áll. $\quad -\mathcal{E}$ is.

$\uparrow\downarrow$ spin $\quad |\mathcal{E}| = 0{,}067$ MeV virtuális áll.

Mindkettő látszik a energiafüggésben

Born-közelítés (rugalmas szórás másik leírása)

- Feltétel: a pot. a részecskék mozgására kis hatással van, perturbációnak tekinthető.

- Perturbálatlan mozgás: (szabad rész.)

$$\psi^{(0)} = e^{i\underline{k}\,\underline{r}}$$

$$\Delta\psi^{(0)} + k^2\psi^{(0)} = 0 \qquad k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

- A szórási feladat:

$$\Delta\psi + \left(k^2 - \frac{2m}{\hbar^2}U\right)\psi = 0$$

- Megoldás $\psi = \psi^{(0)} + \psi^{(1)}$

elhagyjuk ($U\cdot\psi^{(1)}$ már kicsi)

$$\Delta\psi^{(1)} + k^2\psi^{(1)} = \frac{2m}{\hbar^2}U\left(\psi^{(0)} + \psi^{(1)}\right)$$

(további rendekig is el lehet így menni)

- Megoldás:

$$\psi^{(1)}(\underline{r}) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int U(\underline{r}')\, e^{i(\underline{k}\underline{r}' + kR)}\,\frac{d\underline{r}'}{R}$$

ahol $R = |\underline{r} - \underline{r}'|$

- $r \gg r'$ $\qquad \frac{1}{R} \approx \frac{1}{r}$

$$R = |\underline{r} - \underline{r}'| = r - \frac{\underline{r}}{r}\cdot\underline{r}' + \dots$$

$$e^{ikR} \approx e^{ikr - ik\frac{\underline{r}}{r}\cdot\underline{r}'}$$

Legyen $\underline{k}' = k \cdot \frac{\underline{r}}{r}$

$$\psi^{(1)} = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \frac{e^{ikr}}{r} \int U(\underline{r}') \, e^{i(\underline{k} - \underline{k}')\underline{r}'} \, d\underline{r}'$$

$$\boxed{f = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int U(\underline{r}) \cdot e^{-i\underline{q}\underline{r}} \, d\underline{r}}$$

ahol $\underline{q} = \underline{k}' - \underline{k}$ $\quad q = 2k \sin\frac{\theta}{2} \leftarrow \theta$: szórásszög

$\Rightarrow$ A szórásamplitúdó a potenciál Fourier-transzformáltja

$$\boxed{d\sigma = \frac{m^2}{4\pi^2\hbar^4} \left| \int U \cdot e^{-i\underline{q}\underline{r}} \, d\underline{r} \right|^2 d\Omega}$$

- Ha $U = U(|\underline{r}|)$ (centrális pot.):

$$\int U(r) \, e^{-i\underline{q}\underline{r}} \, d\underline{r} = 2\pi \int U(r) \cdot e^{-iqr\cos\vartheta} \, d\cos\vartheta \, r^2 \, dr = \ldots$$

$$f = -\frac{2m}{\hbar^2 q} \int_0^\infty U(r) \, r \sin(qr) \, dr$$

- A potenciál hatótávolsága: „a"

$\rightarrow$ Ha $ka \ll 1$

$\sin qr = qr$ $\qquad f = -\frac{2m}{\hbar^2} \int_0^\infty U(r) \, r^2 \, dr$ izotróp, energiafüggetlen

$\rightarrow$ Ha $ka \gg 1$

anizotróp a szórás, a $\Delta\theta \sim \frac{1}{ka}$ nyílásszögű kúp dominál

$\sin(qr) \approx \sin\left(\frac{\theta}{2} \cdot \frac{r}{a}\right)$ $\quad \theta \gg \frac{1}{kr}$ esetén kiöszcillál ($\int$ ø lesz)

– Born-közelítés érvényessége:

Feltétel: $|\psi^0| \gg |\psi^{(1)}|$

$$\uparrow$$

$$|\psi^{(1)}(r=0)|$$

R (origóban vagyunk, r=0)

$$\psi^{(1)}(0) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int U(\underline{r}')\, e^{i(\underline{k}\underline{r}' + kr')}\,\frac{d\underline{r}'}{r'} \leftarrow R$$

• Ha $ka \ll 1$, kis energia:

$$\psi^{(1)}(0) \sim \frac{m|U|}{\hbar^2 a}\, a^3$$

$$\Rightarrow \quad |U| \ll \frac{\hbar^2}{ma^2} \quad \text{a feltétel}$$

• Ha $ka \gg 1$

$$\psi^{(1)}(0) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int_0^\infty\int_0^\pi U(r')\, e^{ikr'(\cos\vartheta + 1)} \cdot 2\pi \sin\vartheta\, d\vartheta\, r'\, dr' =$$

$$= -\frac{m}{\hbar^2 ik}\underbrace{\int U(r')\,(\underset{\substack{\downarrow\\ \text{pici járulék}}}{e^{2ikr'}} - 1)\, dr'}_{-|U|\cdot a}$$

$\Rightarrow$ A feltétel nagy energián:

$$|U| \ll \frac{\hbar^2 ka}{ma^2} = \frac{\hbar v}{a} \quad \to \text{mindig teljesül}$$

Példa: Yukawa-pot.

$$U(r) = \frac{\alpha}{r} \cdot e^{-\frac{r}{a}}$$ (~ véges hatótávolságú, mert gyorsan lecseng)

$$f = -\frac{2m}{\hbar^2 q} \int_0^{\infty} U(r) \sin(qr)\, r\, dr = \frac{2m\alpha}{\hbar^2} \frac{a^2}{1+a^2q^2}$$

$$q = 2k \sin\frac{\theta}{2}, \qquad dq = 2k \cdot \cos\frac{\theta}{2} \cdot \frac{1}{2}\, d\theta$$

$$\Downarrow$$

$$d\Omega = \frac{2\pi\, q\, dq}{k^2} \Leftarrow \frac{q\, dq}{k^2} = \sin\theta\, d\theta$$

$$d\Omega = 2\pi \sin\theta\, d\theta$$

$$\boxed{\frac{d\sigma}{d\Omega} = 4a^2 \left(\frac{\alpha m a}{\hbar^2}\right)^2 \frac{1}{(1+a^2q^2)^2}} \quad (= f^2)$$

$$\boxed{\sigma_{tot} = 16\pi a^2 \left(\frac{\alpha m a}{\hbar^2}\right)^2 \frac{1}{1+4k^2a^2}}$$

- $a \to \infty$ (∞ hatótávolság):

Yukawa-pot $\to$ Coulomb-pot.

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{4\alpha^2 m^2}{\hbar^4 q^4}$$

$$\alpha = Ze^2 \qquad \hbar k = mv$$

$$\frac{d}{d\Omega} = \left(\frac{Ze^2}{2mv^2}\right)^2 \frac{1}{\sin^4\frac{\theta}{2}}$$ ~ klasszikus eredmény, kvantummechanikából egzaktul is ez jön ki

$\sigma_{tot} \xrightarrow[a \to \infty]{} \infty$ minden részecske szóródik, de gyakorlatilag az elektronhéj leárnyékolja a Coulomb-potenciált

Azonos részecskék szórása

$\frac{1}{2}$ spin

Térbeli hullámfv. szimm. $s=0$

antiszimm. $s=1$

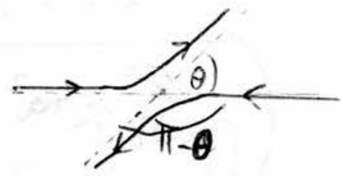
Részecskék cseréje: $\underline{r} \to -\underline{r}$ $\quad$ (ϑ eddig θ volt)

$r \to r$

$\vartheta \to \pi - \vartheta$

Aszimmetrikus hullámfv.:

$$\psi \approx e^{ikz} \pm e^{-ikz} + \frac{1}{r} e^{ikr} \left(f(\vartheta) \pm f(\pi - \vartheta) \right)$$



$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left| f(\vartheta) + f(\pi - \vartheta) \right|^2 \qquad s=0$$

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left| f(\vartheta) - f(\pi - \vartheta) \right|^2 \qquad s=1$$

Kicserélődési tagok

Polarizálatlan eset: $d\sigma = \frac{1}{4} \, d\overset{\text{0-ás spin}}{\sigma_0} + \frac{3}{4} \, d\overset{\text{1-es spin, 3 állapot}}{\sigma_1}$

– pl. el.-el. szórás, polarizálatlan eset, TKR-ben:

a Rutherford-formulában $m = \frac{m_e}{2}$

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left(\frac{e^2}{m_e v^2} \right)^2 \cdot \left(\frac{1}{\sin^4 \frac{\theta}{2}} + \frac{1}{\cos^4 \frac{\theta}{2}} - \frac{1}{\sin^2 \frac{\theta}{2} \cos^2 \frac{\theta}{2}} \right)$$

24. óra

Rugalmatlan ütközések

Rugalmatlan ütközés: az ütköző részecskék belső állapota megváltozik

pl. gerjesztés, ionizáció (atom)

bomlás (új részecske keletkezése (relat. eset))

Ha az ütközésben különböző folyamatok lehetségesek, különböző reakciócsatornákról beszélünk.

1) A részletes egyensúly elve

Feltesszük az időtükrözési szimmetriát.

Egyszerűség kedvéért véges V térfogatot veszünk, a végén $V \to \infty$

$\Rightarrow$ Az impulzus diszkrét

$$\underbrace{a+b}_{\substack{i \\ \text{(initial)}}} \to \underbrace{c+d}_{\substack{f \\ \text{(final)}}} \quad \text{folyamat}$$

Az $i \to f$ átmenet valószínűsége w_{fi}

Időtükrözés: $\underline{v} \to -\underline{v}$

$L_z \to -L_z$

kezdeti állapot $\to$ végállapot

$i \to i^*$

$f \to f^*$

$\boxed{w_{fi} = w_{i^* f^*}}$ részletes egyensúly elve

2 – 2 részecske szórásra írjuk át részletes egyensúly elvét a hatáskeresztmetszetekre.

p_i, v_i ill. p_f, v_f a relatív mozgásra vonatkozzanak

$d\sigma_{fi}$ a diff. hatáskeresztmetszet a $d\Omega_f$

$$d\sigma_{fi} \quad \delta(E_f - E_i)\, dE_f$$

$$d\sigma_{fi} = \frac{w_{fi}}{v_i \cdot \frac{1}{V}} dN_f \qquad dN_f = \frac{V p_f^2 \cdot dp_f \cdot d\Omega_f}{(2\pi\hbar)^3}$$

áramsűrűség részecskeszám sűrűség

$$d\sigma_{fi}\, \delta(E_f - E_i)\, dE_f = \frac{w_{fi}}{v_i/V} \frac{V p_f^2 \cdot dp_f\, d\Omega_f}{(2\pi\hbar)^2}$$

Mivel $w_{fi} = w_{i^* f^*}$:

$$\boxed{\frac{d\sigma_{fi}}{p_f^2\, d\Omega_f} = \frac{d\sigma_{i^* f^*}}{p_i^2\, d\Omega_i}}$$

ui: $w_{fi} = \delta(E_f - E_i) \cdot (2\pi\hbar)^3 \cdot \frac{v_i}{V} \cdot \frac{v_f}{V} \frac{d\sigma_{fi}}{d\Omega_f} \cdot \frac{1}{p_f^2}$

$$\frac{dE_f}{dp_f} = \frac{d\left(\frac{p_f^2}{2m}\right)}{dp_f} = \frac{p_f}{m} = v_f$$

$V \to \infty$ esetén is igaz a fenti számolás

A teljes σ-ra

Összegzünk a végállapotbeli spinekre

Átlagolunk a kezdeti állapotbeli spinekre

Integrálunk a vég- és kezdeti állapotbeli impulzusokra.

$$\bar{\sigma}_{tot\, fi} = \frac{1}{(2s_{i_1}+1)(2s_{i_2}+1)} \sum_{m_s} \int d\sigma_{fi}\, d\Omega_i$$

$$\boxed{p_i^2 (2s_{i_1}+1)(2s_{i_2}+1)\, \bar{\sigma}_{tot\, fi} = (2s_{f_1}+1)(2s_{f_2}+1)\, p_f^2\, \bar{\sigma}_{tot\, i^* f^*}}$$

Felhasználható pl. egyik részecske spinjének a meghatározására

($\bar{\sigma}_{tot}$-t mérjük)

2) Rugalmas szórás rugalmatlan folyamatok jelenlétében

A rugalmatlan csatornák jelenléte hatással van a rugalmas szórásra.

A rugalmas szórás hullámfv.-e:

$$\psi = \frac{i}{2kr} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1)\, P_l(\cos\vartheta) \cdot \left[(-1)^l e^{-ikr} - S_l \cdot e^{ikr} \right]$$

$\uparrow$ a szórás operátor mátrixeleme

Csak rugalmas szórás esetén $S_l = e^{2i\delta_l}$, δ_l valós, azaz $|S_l| = 1$ (fáziseltolás)

Ha van rugalmatlan szórás, kevesebb a kifutó gömbhullám ⇒

$\Rightarrow |S_\ell| < 1$

A szórásamplitúdó:

$$f = \frac{1}{2ik} \sum_\ell (2\ell+1)(S_\ell - 1) \cdot P_\ell(\cos\vartheta)$$

$$\underline{\sigma^{tot}_{rug}} = \sum_\ell \frac{\pi}{k^2} (2\ell+1) \left|1 - S_\ell\right|^2$$

A rugalmatlan szórásra:

$$\underline{\sigma^{tot}_{reakció}} = \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{\pi}{k^2} (2\ell+1) \left(1 - |S_\ell|^2\right)$$

mivel Ψ-ben a kifutó gömbhullám $1 \to |S_\ell|^2$

$$\underline{\sigma^{tot}} = \sigma^{tot}_{rug} + \sigma^{tot}_{reak} = \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{\pi}{k^2} (2\ell+1) \left(2 - S_\ell - S_\ell^*\right)$$

- Ha $S_\ell = 1$ semmiféle szórás nincs $\sigma^{\ell,tot}_{rug} = \sigma^{\ell,tot}_{reak} = \sigma^{\ell,tot} = 0$
- Ha $S_\ell = 0$ az adott parc. hullám teljesen elnyelődik, nincs kifutó gömbhullám

Rugalmas szórás lehetséges, ha nincs rugalmatlan, fordítva nem lehetséges, ha van rugalmatlan mindig van rugalmas is.

Előre (rugalmas) szórás $\vartheta = 0 \Rightarrow P_\ell(\vartheta = 0) = 1$

$$\boxed{\mathrm{Im}\, f(0) = \frac{k}{4\pi} \cdot \sigma^{tot}}$$ optikai tétel

3) Lassú részecskék rugalmatlan ütközése

Csak $l=0$ kell

$S_0 = e^{2i\delta_0}$ $\quad$ δ_0-nak képzetes része is van

$\delta_0 = k\cdot\beta \qquad \beta = \beta' + i\beta''$

$$S_0 = e^{2ik\beta} \approx 1 + 2ik\beta = 1 + 2ik\beta' - 2k\beta''$$

$$\sigma^{tot}_{rug} = \frac{\pi}{k^2}\left|1 - S_0\right|^2 = 4\pi\left|\beta\right|^2$$ izotróp, energiafüggetlen a rugalmas szórás

$$\sigma^{tot}_{rak} = \frac{\pi}{k^2}\left(1 - \left|S_0\right|^2\right) = \frac{\pi}{k^2}\left(1 - \left[(1-2k\beta'')^2 + 4k^2\beta'^2\right]\right) \approx \frac{4\pi\beta''}{k} \propto \frac{1}{v}$$

sebesség

(H. Bethe 1935)

(ha csökken a sebesség, a rugalmatlan szórás szerepe nő)

4) Kis energiájú rezonanciaszórás véges hatótávolság esetén

Hatótáv.: a, $l=0$

$$r\cdot\Psi(r) = e^{-ikr} + S_0 e^{ikr}$$ (ez szokott $\chi(r)$ lenni)

$$\sigma_{rak} = \frac{\pi}{k^2}\left(1 - \left|S_0\right|^2\right)$$

$$\sigma_{rug} = \frac{\pi}{k^2}\left|1 - S_0\right|^2$$

S_0 kifejezhető a hullámfv. linearizálatlanított logaritmikus deriváltjával

$$f(E) \equiv a \cdot \frac{\frac{d}{dr}(r\psi)}{r \cdot \psi}\Bigg|_{r=a} = \qquad x = ka$$

(szórásamplitúdó)

$$= -ix \, \frac{1 - S_0 \cdot e^{2ix}}{1 + S_0 \cdot e^{2ix}}$$

$$f(E) \equiv f_0 - ih$$

$$S_0 = e^{-2ix} \, \frac{(x-h) - if_0}{(x+h) + if_0}$$

$$\sigma_{reak} = \frac{4\pi}{k^2} \, \frac{xh}{(x+h)^2 + f_0^2}$$

$$\sigma_{rug} = \frac{4\pi}{k^2} \left| \frac{-x}{i(x+h) - f_0} + e^{ix} \sin x \right|^2$$

Legyen $f_0(E_r) \equiv 0$ $\quad E_r =$ rezonancia energia

$\rightarrow \sigma_{reak}, \sigma_{rug}$ E_r-nél maximális

Írjuk $f_0(E) = \frac{\partial f_0}{\partial E}\Big|_{E=E_r} (E - E_r) + \dots$

Def.: $\quad \Gamma_{rug} = \frac{2x}{\frac{\partial f_0}{\partial E}\Big|_{E_r}}$, $\Gamma_{reak} = \frac{2h}{\frac{\partial f_0}{\partial E}\Big|_{E_r}}$, $\Gamma = \Gamma_{rug} + \Gamma_{reak}$

$$\Rightarrow \sigma_{reak} = \frac{\pi}{k^2}\,\frac{\Gamma_{rug}\cdot\Gamma_{reak}}{(E-E_r)^2+\frac{1}{4}\Gamma}$$

Breit–Wigner-formula

$$\sigma_{rug} = 4\pi\left|A_{rezonáns}+A_{potenciál}\right|^2$$

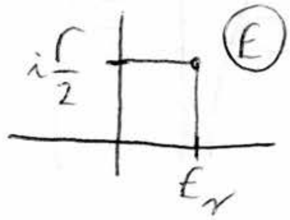
$$A_{rezonáns} = \frac{1}{k}\,\frac{\frac{1}{2}\Gamma_{rug}}{E-E_r-\frac{i}{2}\Gamma}$$

a rezonanciaszórás amplitúdója

↓

pólusa van: $E=E_r+\frac{i}{2}\Gamma$

$$A_{pot} = \frac{1}{k}\,e^{ix}\cdot\sin x$$



$$\sigma_{rug} = \frac{4\pi}{K^2}$$

(Ha $A_{rezonáns}=0 \Rightarrow \sigma_{rug}\approx 4\pi a^2$)

$$\sigma_{rug} = \frac{4\pi}{k^2}\left|\frac{-x}{i(x+\lambda)-\ell_0}+e^{ix}\sin x\right|^2 = \frac{4\pi}{k^2}\left|\frac{\frac{1}{2}\Gamma_{rug}}{E-E_r-\frac{i}{2}\Gamma}+e^{ika}\cdot\sin ka\right|^2 =$$

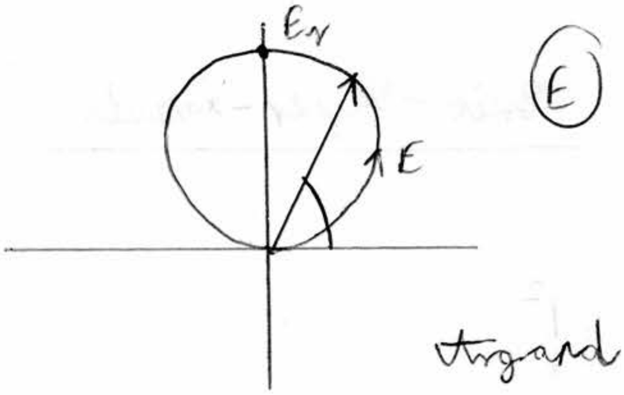
$$= \frac{4\pi}{k^2}\left|\underbrace{-\frac{\Gamma_{rug}}{\Gamma}\sin\delta\cdot e^{-i\delta}}_{f_{rez}}+\sin(ka)\cdot e^{ika}\right|^2 = f_{rez}$$

ahol $2(E-E_r) = \Gamma\cdot ctg\,\delta$

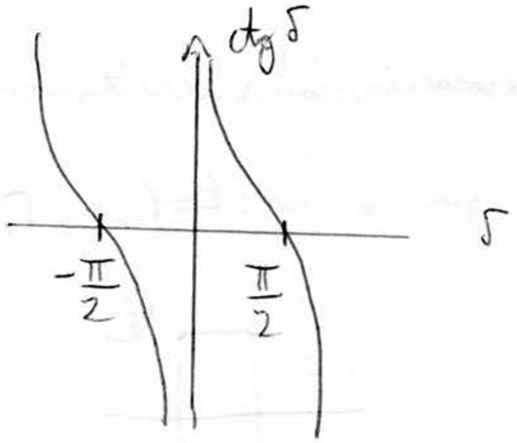
Ha $E\approx E_r$ a 2. t kicsi, elhagyva:

$$\boxed{\sigma_{rug} = \frac{\pi}{k^2}\,\frac{\Gamma_{rug}^2}{(E-E_r)^2+\frac{\Gamma^2}{4}}}$$

Breit-Wigner



Argand -
diagram



$$\mathrm{Re}\, f_{sz}^2 + \Big(\mathrm{Im}\, f_{sz} \underbrace{- \ldots}_{\text{kör középpontja}}\Big)^2 = \frac{\Gamma_{rug}^2}{4}$$

Mn.:

$$\frac{\frac{1}{2}\Gamma_{rug}\left(E-E_r+\frac{i}{2}\Gamma\right)}{(E-E_r)^2+\frac{\Gamma^2}{4}} \qquad \frac{1}{4}\Gamma_{rug}^2\left[(E-E_r)^2+\Big(\underbrace{\frac{\Gamma}{4}-\ldots}_{\substack{\text{kör középpontja}\\ \text{a diagramon}}}\Big)^2\right]=\frac{\Gamma_{rug}^2}{4}$$

E_r ott van, ahol E növelésével a szög $\frac{\pi}{2}$ lesz.

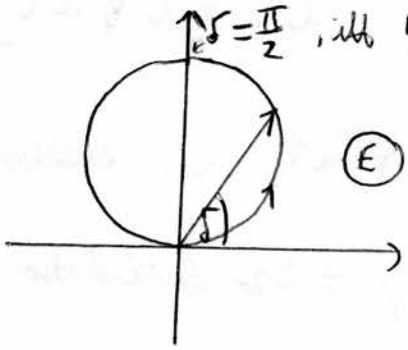
4) Im. kiegészítés:

$$\sigma = \frac{\pi}{k^2} \frac{1}{(E-E_r)^2 + \frac{\Gamma^2}{4}} \cdot \begin{cases} \Gamma_{rug} \cdot \Gamma_{reak} & \text{reakciócsat.} \\ \Gamma_{rug}^2 & \text{rugalmas csat.} \end{cases}$$

$$A_{rez} = (f_{rez}) = \frac{1}{k} \frac{\frac{1}{2}\Gamma_{rug}}{E-E_1-\frac{i}{2}\Gamma}$$

(rez. amplitúdó)

$\delta = \frac{\pi}{2}$, itt $\frac{\Gamma_{rug}}{\Gamma}$



Argand-diagram

Rezonancia olyan energiánál van, ahol a szórásamplitúdó E növelésével átmegy a $\frac{\pi}{2}$ fázisszögön

$$k \cdot A_{rez} = \frac{\frac{1}{2}\Gamma_{rug}\left(E-E_r+\frac{i}{2}\Gamma\right)}{(E-E_r)^2 + \frac{\Gamma^2}{4}} = \frac{\Gamma_{rez}}{\Gamma} \sin\delta \cdot e^{-i\delta}$$

$$-2(E-E_r) = \Gamma \cdot \mathrm{ctg}\,\delta$$

$$\left(\mathrm{Re}(k \cdot A_{rez})\right)^2 + \left(\mathrm{Im}(kA_{rez}) - \frac{\Gamma_{rug}}{2\Gamma}\right)^2 = \left(\frac{\Gamma_{rug}}{2\Gamma}\right)^2$$

5) Gyors elektronok rugalmas ütközése atomokkal

rugalmas ütk.: az atom nem gerjesztődik / ionizálódik

Born közelítés jó, ha: ütk. el. sebessége >> atomi el. sebessége

Magtömeg nagy, így TKP rendszer megegyezik a laborrendszerrel

A Born közelítésben: $U_{\underline{p}',\underline{p}}$ $\underline{p}$ befutó, $\underline{p}'$ kifutó $\underline{k} = \underline{p}' - \underline{p}$

Atom hullámfv.-e $\Psi_0(\underline{r}_1, \dots \underline{r}_Z)$

Fourier-trafó $\underline{r}$ szerint

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{m^2}{4\pi^2\hbar^4}\left|\overbrace{\iint\dots\int}^{Z\text{ db }\int}\Psi_0^* U e^{-i\underline{q}\underline{r}}\Psi_0\, d\underline{r}\, d\tau\right|^2$$

$$d\tau = dV_1\, dV_2 \dots dV_Z$$

$\int \Psi_0^* U \Psi_0\, d\tau$ az elektron atommal vett kölcsönhatásának az átlaga. Ez felírható úgy is, hogy $e\cdot\varphi(\underline{r})$.

Ha az atomban az átlagsűrűség $\rho(\underline{r})$:

$$\Delta\varphi(\underline{r}) = -4\pi\rho(\underline{r})$$

$$e\,\underset{\text{Fourier-tr.}}{FT}(\varphi) = e\int\varphi\cdot e^{-i\underline{q}\underline{r}}\, d\underline{r} = \frac{4\pi e}{q^2}\int\rho\, e^{-i\underline{q}\underline{r}}\, d\underline{r}$$

$$\rho = -|e|\underbrace{n(\underline{r})}_{\text{el. szám sűrűség}} + Z\cdot|e|\cdot\delta(\underline{r})$$

$$\Rightarrow \int\rho\cdot e^{-i\underline{q}\underline{r}}\, d\underline{r} = \underbrace{\int\Psi_0^* e^{-i\underline{q}\underline{r}}\Psi_0\, d\underline{r}\, d\tau}$$

$$= Z|e| - |e|\int n\, e^{-i\underline{q}\underline{r}}\, d\underline{r}$$

$d\tau$-t is véve:

$$\int\Psi_0^* U\cdot e^{-i\underline{q}\underline{r}}\Psi_0\, d\underline{r}\, d\tau = -\frac{4\pi e^2}{q^2}\left(Z - F(\underline{q})\right),$$

ahol $F(\underline{q}) = \int n\, e^{-i\underline{q}\underline{r}}\, d\underline{r}$ = atomi formfaktor

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{4m^2e^4}{\hbar^4 q^4}\left[Z - F(q)\right]^2$$

$$q = |\underline{q}| = \frac{2mv}{\hbar}\sin\left(\frac{\vartheta}{2}\right)$$

atomi el. seb.

- Ha $q \cdot a \ll 1$ kis szögű szórás dominál : $\vartheta \ll \frac{v_0}{v}$

szóródó el. seb.

$F(q)$ sorbafejthető

$$F(q) = F(0) + q F'(0) + \frac{q^2}{2}F''(0) + \ldots$$

$$F(0) = \int n \, d\underline{r} = Z$$

$F'(0) \propto \int \underline{r}\, n \, d\underline{r}$ = az atomi dipólmom. átlaga $= 0$

$$Z - F(q) = \frac{1}{2}\int (\underline{q}\underline{r})^2 n \, d\underline{r} = \frac{q^2}{6}\int n \underline{r}^2 d\underline{r}$$

$$\Rightarrow \frac{d\sigma}{d\Omega} = \left|\frac{me^2}{3\hbar^2}\int n \underline{r}^2 d\underline{r}\right|^2$$

- Ha $qa \gg 1$

$e^{-i\underline{q}\underline{r}}$ erősen oszcillál $\Rightarrow F(q) = 0$

Minden egyes atomi elektronon Rutherford-szórás:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left(\frac{Ze^2}{2mv^2}\right)^2 \frac{1}{\sin^4\frac{\vartheta}{2}}$$

6) Gyors elektronok rugalmatlan ütközése atomokkal

Az atom gerjesztődhet, vagy ionizálódhat

$v \gg v_0$, TKP rendszer ≈ laborrendszer

$$p' - p = \hbar q$$

- Ha $a \cdot q \gg 1$ az atomi elektronok szabadnak tekinthetők

→ a Rutherford-formula adja az eredményt.

- Ha $a \cdot q \ll 1$ az eltérés és az átadott energia is kicsi az atomi elektronok energiájához képest.

azaz $|p| \approx |p'| \Rightarrow |\hbar q| \approx p\vartheta$

($\vartheta \to 0$ esetén nem jó, mivel $q_{min} = \frac{p-p'}{\hbar}$, ezért:

$$\underset{\substack{\uparrow \\ \text{gerjesztett atom} \\ \text{energiája}}}{E_n} - E_0 \overset{\text{energia megmarad}}{=} \frac{1}{2m}\left(p^2 - p'^2\right) \simeq \frac{p}{m}\left(p - p'\right) = v\left(p - p'\right)$$

$$\Rightarrow \hbar \cdot q_{min} = \frac{E_n - E_0}{v} \quad)$$

Born-közelítésben hasonló a képlet a rugalmas szórás esetéhez, csak $\psi_0 \to \psi_n$:

→ az $\int$ értéke: $\underset{\uparrow}{\overset{\psi_n \text{ és } \psi_0 \text{ ortogonális}}{0}}$, $\frac{4\pi}{q^2} e^{-iqr_a}$

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{m^2}{4\pi^2\hbar^4}\left|\int U \cdot e^{-iqr} \cdot \psi_n^* \psi_0 \, dr \, d\tau\right|^2 \quad \text{ahol } U = \underbrace{-\frac{Ze^2}{r}}_{\text{maggal való kh.}} + \underbrace{\sum_{a=1}^{Z} \frac{e^2}{|r - r_a|}}_{\text{atomi el.-al való kh.}}$$

$$\frac{d\sigma_n}{d\Omega} = \left(\frac{2me^2}{\hbar^2}\right)^2 \left| \underbrace{\left(\sum_a e^{-i\underline{q}\,\underline{r}_a}\right)_{n,0}}_{\sum_a \int e^{-i\underline{q}\,\underline{r}_a}\psi_n^* \psi_0 \, d\tau} \right|^2 \cdot \frac{1}{q^4}$$

$$e^{-i\underline{q}\,\underline{r}_a} = 1 - i\underline{q}\,\underline{r}_a \underset{\underline{q} = (0,\,0,\,q)}{=} 1 - iq\, z_a$$

$$= -iq \left(\sum_a z_a\right)_{n,0} = -\frac{iq}{e}\left(d_z\right)_{n0}$$

átmeneti dipólmom. a z irányban n és 0 állapot között

$$d\Omega = 2\pi \sin\vartheta \, d\vartheta \approx 2\pi\vartheta \, d\vartheta \underset{\hbar q = p\vartheta}{=} 2\pi \left(\frac{\hbar}{mv}\right)^2 q \, dq$$

$$\boxed{\frac{d\sigma_n}{dq} = 8\pi \left(\frac{e}{\hbar v}\right)^2 \left|\left(d_z\right)_{n0}\right|^2 \cdot \frac{1}{q}}$$

alap és gerjesztett állapot közötti dipólmom. (d_z) határozza meg