

Görke Teréz, Erdősi György

királyok: Nagy K., Mark Gy., Davidov, London - dicső
Kiss - Gombos

Székelyi Sándor

Tatár: elofic. elte. Rn / ~ iskor

Klasszikus fizika: mech, el. din, termodin, stat. fiz (rel. elm.)
mekanikus fizika testek fizikája

Kvantum fizika: ---

Konvergenziás sugárzás $\equiv$ abszolút fekete test sugárzás, irreguláris
(spektrál eloszlás)

$\Rightarrow$ H. Planck (1900)

az el. sugárzás energiája kvantált: $h\nu$ kvantumokból áll

Fotoeffektus (A. Einstein 1905)

$$h = \frac{L}{\nu} = 1,054 \cdot 10^{-34} \text{ Js}$$

foton

A foton rezekenciája, impulzusa is van

$$p = \frac{E}{c} = h \cdot \frac{\omega}{c} = h \cdot \left| \underline{k} \right|$$

$$\left| \underline{k} \right| = \frac{\omega}{c} = \frac{2\pi}{\lambda}$$

Compton-effektus

$$m_0 c^2 = \sqrt{E^2 - p^2 c^2} = 0 \text{ a foton nyugalmi tömege}$$

De Broglie - hullám komplementaritás általános tulajdonság

(Fotonok nem lehetnek részecskék, relativitáselmélet korr. mech. eloszlás)

A klasszikus mechanika és el. din nem írja le az
atomok és molekulák tulajdonságait

Pl.: Stabilitás nem teljes

Diszkrét energiaspektrum

$\hookrightarrow$ Hs. Frank - Hertz (1914)

Stark - Gerlach (1922)

Szilárd test fajtye

N. Bohr (1913) „jel korallato”, elektronok modelle

Davisson - Germer kísér. (1927) elektron hullámterjesztése

$$\lambda = \frac{h}{p} \quad \text{L. de Broglie (1924)}$$

Kv. elm.: W. Heisenberg (1925), E. Schrödinger (1926)

↓
mátrix mechanika

↓
hullám mechanika

M. Born, N. Bohr, P. Dirac, P. Jordan, W. Pauli

Kv. elm.-et a mikroscopikus világban kell alkalmazni

$$\text{pl.: } m_e = 9 \cdot 10^{-31} \text{ kg} \\ 10^{-8} - 10^{-15} \text{ m}$$

hosszok ismereteket nem rendelkezünk,

hullám mindig (általában sokrészletű) rezonancia

, ami befolyásolja a rendszert

pl.: halványan töltött részecskék

film, emulzió, kristályok, hullámcsövek,

elektronikus eszközök: ionizáló kameranagyítók

Környezeti sugárzás

minden test kibocsát és elnyel el. m. hullámokat

t. fény intenzitása függ az anyagtól és hőm.-tól is.

Maxwell-elmélet az abszolút fekete test.

§ u.i. Kirchhoff törvény: a fényelnyelés

és kibocsátás aránya

abszolút fekete test minden elnyel, a

sugárzás csak T-től függ

t megvalósítás:

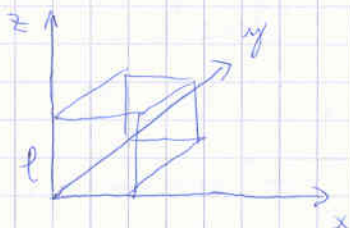


a lyukon eső fény
gyakorlatilag teljesen elnyelődik

Ezért a kisugárzása az absz. fekete test sugárzása
= az üreg belüli sugárzása

Hőmérsékleti egyensúly van a sugárzás és az
anyag fala között.

Egyenértékű eset az üreg anyaga ideális vezetők
alsója körbe



vákuumbeli Maxwell-egyenleteket
 kell megoldani + határfeltételeket

$$\text{rot } \underline{H} = \frac{1}{c} \frac{\partial \underline{E}}{\partial t} \quad \text{div } \underline{E} = 0 \quad \underline{E}_t = 0$$

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

$$\Rightarrow \Delta \underline{E} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \underline{E}}{\partial t^2} = 0 \quad (\underline{H} \text{-ra is})$$

$$E_x = 0 \quad \text{ha} \quad \begin{cases} y=0 \\ y=l \end{cases} \quad \vee \quad \begin{cases} z=0 \\ z=l \end{cases} \quad H_x = 0 \quad \text{ha} \quad \begin{cases} x=0 \\ x=l \end{cases}$$

$$E_y = 0 \quad \text{ha} \quad \begin{cases} x=0 \\ x=l \end{cases} \quad \vee \quad \begin{cases} z=0 \\ z=l \end{cases} \quad H_y = 0, \quad \text{ha} \quad \begin{cases} y=0 \\ y=l \end{cases}$$

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

a határfeltételek

$$E_x = \sum_{\underline{n}} q_{\underline{n},x}(t) \cos\left(n_x \frac{\pi}{L} x\right) \sin\left(n_y \frac{\pi}{L} y\right) \sin\left(n_z \frac{\pi}{L} z\right)$$

$$E_y = \sum_{\underline{n}} q_{\underline{n},y}(t) \sin\left(n_x \frac{\pi}{L} x\right) \cos\left(n_y \frac{\pi}{L} y\right) \sin\left(n_z \frac{\pi}{L} z\right)$$

$$E_z = \sum_{\underline{n}} q_{\underline{n},z}(t) \sin\left(n_x \frac{\pi}{L} x\right) \sin\left(n_y \frac{\pi}{L} y\right) \cos\left(n_z \frac{\pi}{L} z\right)$$

$$\operatorname{div} \underline{E} = 0 \quad \sum_{\underline{n}} \left(n_x q_{\underline{n},x} + n_y q_{\underline{n},y} + n_z q_{\underline{n},z} \right) \sin(\dots) \sin(\dots) \sin(\dots) = 0$$

$$\Rightarrow \underline{n} \cdot \underline{q}_{\underline{n}} = 0$$

$$\underline{n} = (n_x, n_y, n_z)$$

$$\underline{q}_{\underline{n}} = (q_{\underline{n},x}, q_{\underline{n},y}, q_{\underline{n},z})$$

$$q_{\underline{n}} = q_{\underline{n}}^{(1)}(t) \cdot \underline{e}_{\underline{n}}^{(1)} + q_{\underline{n}}^{(2)}(t) \cdot \underline{e}_{\underline{n}}^{(2)}$$

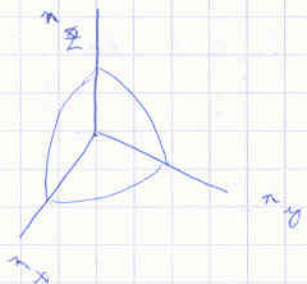
$$\underline{e}_{\underline{n}}^{(r)} \cdot \underline{n} = 0 \quad r = 1, 2$$

$$\text{t. Helmholtzgleichung} \Rightarrow \ddot{q}_{\underline{n}}^{(r)}(t) + 4\pi^2 \cdot v_{\underline{n}}^2 \cdot q_{\underline{n}}^{(r)} = 0$$

$$v_{\underline{n}} = \frac{c}{2L} \sqrt{n^2}$$

$$\text{t. mod.: } q_{\underline{n}}^{(r)} = A_{\underline{n}}^{(r)} \cos(2\pi v_{\underline{n}} t + \delta_{\underline{n}})$$

Wahl $\underline{n}, r$ negativ oder positiv.



t. interpretiert $\rightarrow$ modes

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

$$dN(v) = \frac{8\pi}{c^3} \cdot V \cdot v^2 \cdot dv$$

$\epsilon(v, v+dv)$ - béli módok száma $dN(v)$

az energia: $u(v) dv = dN(v) \cdot \overline{\epsilon(v)}$

$$U = \frac{1}{8\pi} \int (\underline{E}^2 + \underline{H}^2) dV = \sum_n \sum_{r=1}^2 \frac{1}{8\pi} \left(\dot{q}_n^{(r)^2} + 4\pi \cdot v_n^2 \cdot q_n^{(r)^2} \right) \cdot \frac{1}{4\pi^2 v_n^2} \cdot \frac{V}{8}$$

$$\frac{\partial U}{\partial \dot{q}_n^{(r)}} = \dot{q}_n^{(r)} \quad \text{lin. osz. energiák összege}$$

$$U = \sum \left(\frac{64\pi^3 v_n^2}{V} \cdot \dot{q}_n^{(r)^2} + \frac{V}{64} q_n^{(r)^2} \right)$$

Klasszikus tagok összege

$$\text{kl. stat. mechl. - lól} \Rightarrow \overline{\epsilon(v)} = \frac{1}{2} kT \cdot 2$$

↑
relatív fókusz
száma

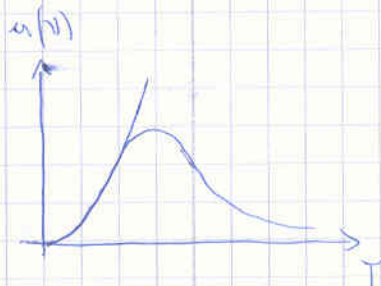
$$u(v) = \frac{8\pi}{c^3} kT \cdot v^2$$

Rayleigh - Jeans törvény

ϵ klasszikus fizika szerint a levegőben töltöttes

az eredmény rossz $\left\{ \begin{array}{l} \text{nem egyezik} \\ U \propto \text{neh. adódik} \end{array} \right.$

$$\frac{du(v)}{dT} = \frac{8\pi k v^2}{c^3} \quad T \text{ független}$$



pedig $T \rightarrow 0$ III. főtétel miatt 0 kell!

Max Planck: a módok energiája diszkrét

$$\epsilon_n(v) = n \cdot \epsilon_0(v) \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

$$\overline{\epsilon(v)} = \frac{\sum_n \epsilon_n \cdot e^{-\frac{\epsilon_n}{kT}}}{\sum_n e^{-\frac{\epsilon_n}{kT}}} = \frac{\epsilon_0 \cdot e^{-\frac{\epsilon_0}{kT}}}{\left(1 - e^{-\frac{\epsilon_0}{kT}}\right)^2} = \frac{\epsilon_0}{e^{\frac{\epsilon_0}{kT}} - 1}$$

$$\xi = -\frac{1}{kT} \quad \text{analóg} = \frac{d}{d\xi} \text{ revers}$$

$$u(\nu) = \frac{8\pi \nu^2}{c^2} \cdot \frac{\epsilon_0}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1}$$

akkor jó, ha $\epsilon_0 = h \cdot \nu$

$$u(\nu) \approx \frac{8\pi h \nu}{c^3} \cdot \frac{\nu^2}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1}$$

Planck-törvény

Kísérlettel egyezik

$$U = \int_0^\infty u(\nu) d\nu = \frac{\pi^2}{15} \cdot \frac{8\pi h^4 T^4}{15 c^3}$$

$$x = \frac{h\nu}{kT}$$

Stefan - Boltzmann tör.

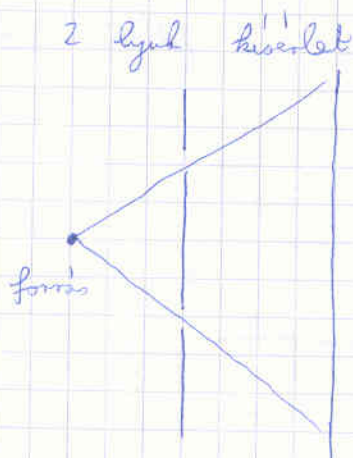
Mikor lesz eltérő a tr. is kijött

$$\nu_{\max} = \frac{hT}{h} \cdot x_{\max} = \left(5,9 \cdot 10^{10} \frac{1}{\text{s}} \right) T$$

↑
"allando"

Katódarálási kísérlet

Davisson - Germer kísérlet $\rightarrow$ az elektronok hull. tul. - a is van



(1927) Kís. mek. jellege vizsgálása

Válasz (kv. mek.): nem ez történt

ha mindkét rés nyitva van, nem

az egy réses kísérleti eredmények

eredőjét kapjuk, interferencia kép

Kis intenzitás esetén is.

Következtetés: nincs értelme az elektron pályájáról beszélni
⇒ Két. elv: a kv. mech. a klasszikus mechanikától
elválasztás, más fogalmak vannak,
pl. a fizika nem determinisztikus.

Mi a kapcsolat a kv. mech. és a kl. mech. között?

Más fogalmak, vizsg. a kl. mech. határesetében a
kv. mech. - el reprodukálható.

A kl. mech. elvül a kv. mech. nem foglalkoztat a rez.

Ita az elektronok nincs pályája, nincs $x(t)$, $y(t)$

Kyzen esetre nézve mechanikailag felépíteni, de tudjuk,
hogy vannak a kl. mech.-nak elvezetett "részek".

Ita az elektron általános mechanikailag egyenletrendszer az
"állapot", az az az elektron jelenléte.

A "nézőcső" a kl. fizikailag elvezetett "részek".

Kérdés feltevés

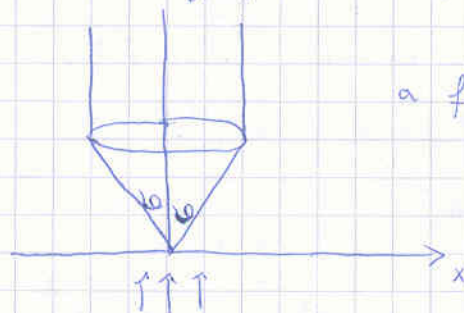
a) Egy fiz. rendszeren ismételt elvégzett mérések eredményeként
az elvégzés, ha ismét a fiz. rendszeren korábban
elvégzett mérések eredménye.

A korábban elvégzett mérések $\equiv$ kezdeti feltétel
az eredmény nem teljes mértékű,
valószínűségi eloszlás a jövedel.

b) Bizonyos fizikai mennyiségek lehetséges értékei.

A kv. mech. mérése rögzítése, hogy a mérése folyamatosan a
rendszer zavaró hatás elvével nem tehető teljesen
kiszűrve. Általában minél pontosabb a mérés, annál
nagyobb a zavaró hatás.

Pl.: Heisenberg féle mikroszkóp kísérlet



a felbontóképesség $\Delta x \geq \frac{\lambda}{\sin \theta}$ ^{fény hullámhossza}

* foton ütközik az elektronnal, majd kijut a mikroszkópból

$$|p_{\text{foton}}| = \frac{h}{\lambda} \quad \text{ütközés után} \quad (p_{\text{foton}})_x + (p_{\text{el}})_x = 0$$

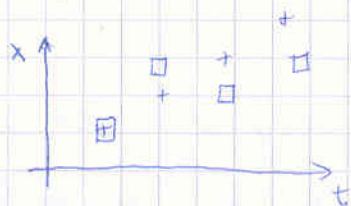
$$-\frac{h}{\lambda} \sin \theta < (p_{\text{foton}})_x < \frac{h}{\lambda} \sin \theta \quad \text{szögnyílás az elektronnal}$$

$$\Delta (p_{\text{el}})_x = \frac{h}{\lambda} \sin \theta = \Delta p_x \quad \Delta x: \text{a hely bizonytalansága}$$

$$\Delta x \cdot \Delta p_x = h \quad \left(\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \frac{h}{2} \right)$$

Koordináts mérés

pl.: részecske részecske, Δt időközben mérés adott pontossággal



Kis pontosság $\times$

Kis idő $\sim \square$

Ha $\Delta t \rightarrow 0$ tökéletesen, kisebb lesz a hibák, de

$\Delta t \rightarrow 0$ után sem lesz jóval, a sebesség nem definiálható!

Is impulzus (sebesség) és a koordináts egyenese nem pontos ismert, így pl. a kitért állapot a kl. mechanikában bizonyos mértékűen ismert

$\Rightarrow$ valószínűségi jelölések használata

Hogyan jellemezhető egy rendszer állapota?

Hogyan kell adni az egyenre elvileg pontos mérhető fizikai mennyiségek értékét.

Hallt imp.-n valódi részecske hullámfr.-e

A rendszer állapotát a hull. fr. (állapotvektor) írja le

1 részecske esetén: komplex, egyértelmű, folytonos, differenciálható fr.-e $(\mathbf{r}, t)$ -nel.

Szálló részecskék jellemzői: $m, \mathbf{p}, E = \frac{\mathbf{p}^2}{2m}$ ($\mathbf{r}$ -en jellemző)

D.-G. kísérlet alapján de Broglie

feltételezte:

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = A \cdot e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)} = A \cdot e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} - E t)}$$

$$\lambda = \frac{2\pi}{k} = \frac{2\pi \hbar}{p} \quad \text{a hullámhossza}$$

$$\omega = \frac{E}{\hbar} = \frac{p^2}{2m \hbar}$$

$$\text{Férfiasab: } v_{\text{ph}} = \frac{\omega}{k} = \frac{E}{p} = \frac{p}{2m} \neq \text{a kl. részecske seb.}$$

Superpozíció elve. Hullámösszeg

1) Ha egy rendszerrel Ψ_1 és Ψ_2 hullámfr. lehetséges állapota $\Rightarrow \Psi = \alpha_1 \Psi_1 + \alpha_2 \Psi_2$ is lehetséges állapota

2) Ψ és $\alpha \Psi$ $\alpha \neq 0$ ugyanazt az állapotot írja le

2 részecske (adott imp.-n áll.) superpozíciója

$$\Psi_1 = e^{i(\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{r} - \omega_1 t)}$$

$$\Psi_2 = e^{i(\mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{r} - \omega_2 t)}$$

$\Psi = a_1 \cdot \Psi_1 + a_2 \cdot \Psi_2$ sein sollte imp.-u. all.

Da $|a_1| > |a_2|$ Ψ ist also Ψ_1 , mit Ψ_2 als
Korrektur auch a. ord.-e, liegt

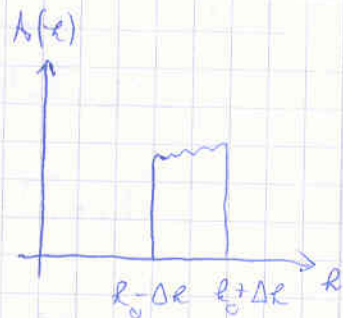
Ψ_1 im Vordergrund (Imp.-all.-st.)

$$\frac{|a_1|^2}{|a_1|^2 + |a_2|^2}$$

Komplettabb. superposition:

z imigen hellenblöb
 $k_0 \pm \Delta k$

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



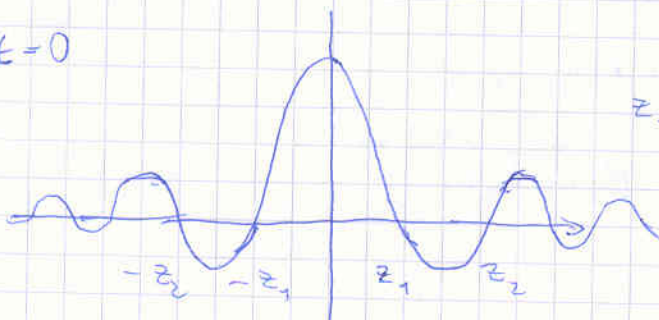
$$\omega(k) = \omega_0 + \left(\frac{d\omega}{dk} \right)_{k_0} \cdot (k - k_0) + \dots$$

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

$$= A(k_0) \cdot e^{i(k_0 z - \omega_0 t)} \cdot \frac{1}{i} \cdot \frac{e^{i \left(z - \left(\frac{d\omega}{dk} \right)_{k_0} \cdot t \right) \Delta k} - e^{-i \left(z - \left(\frac{d\omega}{dk} \right)_{k_0} \cdot t \right) \Delta k}}{z - \left(\frac{d\omega}{dk} \right)_{k_0} \cdot t}$$

$$= 2 \cdot A(k_0) \cdot \frac{\sin \left(\left(z - \left(\frac{d\omega}{dk} \right)_{k_0} \cdot t \right) \Delta k \right)}{z - \left(\frac{d\omega}{dk} \right)_{k_0} \cdot t} \cdot e^{i(k_0 z - \omega_0 t)}$$

$t=0$



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

t hullám hirtelenes elb. $\Delta z = z_1 = \frac{\pi}{\Delta k}$

$$\Delta k = \frac{\Delta p}{\hbar} \Rightarrow \Delta z \cdot \Delta p = \pi \cdot \hbar$$

Compton-elt.: $v_{cs} = \left(\frac{d\omega}{dk} \right)_{k_0}$

$$\omega = \frac{p^2}{2m\hbar} = \frac{\hbar \cdot k^2}{2m} \quad v_{cs} = \frac{\hbar \cdot k}{m} = \frac{p}{m}$$

Különböző k -ra a fázis sebesség különböző

$\Rightarrow t > 0$ a hullámcsomag általánosan szétfolyik

Iskolaváltás nézvése $t=0$ -bn (maximális iskolaváltás)

$$\Psi(x, t=0) = \frac{1}{(\alpha \sqrt{\pi})^{\frac{3}{2}}} \cdot e^{-\frac{x^2}{2\alpha^2}}$$

$$\text{erre } \Delta p_x \Delta x = \frac{\hbar}{2}$$

Iskolaváltás Schrodinger egyenlet alapján

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

az:

$$\Psi(x, t=0) = \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \cdot \tilde{\Psi}(k, t=0) \cdot e^{i k x}$$

$$\Psi(x, t) = \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \tilde{\Psi}(k, t=0) \cdot e^{i(kx - \omega t)}$$

t hullámcsomag szétfolyik

A hullámfr. valószínűségi értelmezése

D.-G. kísérlet:

egy 'értelmezhető' az interferencia, ha az elektronok eloszlása $|\Psi|^2$ -tel arányos.

Mintig csak egyen elektron detektálunk, így $|\Psi|^2$ nem lehet igazán elektron sűrűség. (S-t ki írta le)

Megoldás (M. Born)

$|\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 \cdot d^3r$ arányos az elektron megtalálási valószínűségével az $\mathbf{r}$ helyen t időben

$|\Psi|^2 \equiv$ megtalálási valószínűség sűrűsége,

ha kikötjük: $\int |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 \cdot d^3r = 1$

Postmodern

$$(x_1, y_1, z_1, \dots, x_n, y_n, z_n) = q$$

$$|\Psi(q)|^2 \cdot d^3q = \text{megtalálási való.}$$

$$\text{, ha } \int |\Psi|^2 d^3q = 1$$

A hullámfr. normalizálás szabálya:

$$\text{ha } \int |\Psi(q)|^2 \cdot d^3q = N < \infty$$

$$\Psi' = \frac{1}{\sqrt{N}} \cdot \Psi \quad \text{egységes az állapotok ing. le (Orthonormális elv)}$$

$$\int |\Psi'|^2 d^3q = 1$$

Elfordul: $\int |\Psi|^2 d^3q = \infty$ is lehet (pl.: síkhullám)

Ha meg a normalizáció

Helyben: $\frac{|\Psi(x_1^{(1)}, \dots, x_n^{(1)}, t)|^2}{|\Psi(x_1^{(2)}, \dots, x_n^{(2)}, t)|^2} = \text{a helyek közötti valószínűség aránya}$

A normalizálható hullámf.-ek elterjedése végtelen teljes tér helyett végtelen L oldalú dobozt + periodikus határfeltételt

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

$t=0$ $\Psi_{\underline{k}}(\underline{r}) = \frac{1}{V^{1/2}} \cdot e^{i\underline{k} \cdot \underline{r}}$

a per. hat. feltétel miatt $\underline{k} = \frac{2\pi}{L} \cdot \underline{n}$ $\underline{n} = (n_x, n_y, n_z)$

$\uparrow \quad \uparrow \quad \uparrow$
egén számok

Ihért $\underline{p} = \hbar \underline{k}$ diszkrét impulzus értékek

$$\int_V \Psi_{\underline{k}}^*(\underline{r}) \Psi_{\underline{k}'}(\underline{r}) d^3r = \frac{1}{V} \int_V e^{i(\underline{k} - \underline{k}') \cdot \underline{r}} d^3r = \delta_{\underline{k}, \underline{k}'}$$

$\Psi_{\underline{k}}(\underline{r})$ -ek teljes rendszer alkothatnak, vagyis a per. hat. feltételre teljentes $\Psi(\underline{r})$ kv.-ekre igaz

$$\Psi(\underline{r}) = \sum_{\underline{k}} a_{\underline{k}} \Psi_{\underline{k}}(\underline{r})$$

$$a_{\underline{k}} = \int_V \Psi_{\underline{k}}^*(\underline{r}) \Psi(\underline{r}) d^3r$$

(Forthat)

Normált, periodikus $\Psi(\underline{r})$ esetén:

$$1 = \int_V \Psi^*(\underline{r}) \Psi(\underline{r}) d^3r = \int_V d^3r \left(\sum_{\underline{k}'} a_{\underline{k}'}^* \Psi_{\underline{k}'}^*(\underline{r}) \right) \left(\sum_{\underline{k}} a_{\underline{k}} \Psi_{\underline{k}}(\underline{r}) \right)$$
$$= \sum_{\underline{k}', \underline{k}} a_{\underline{k}'}^* a_{\underline{k}} \delta_{\underline{k}', \underline{k}} = \sum_{\underline{k}} |a_{\underline{k}}|^2 = 1$$

Feltétel: $|a_{\underline{k}}|^2$ csak a val.-s, hogy $\Psi(\underline{r})$
normált hullámfv. esetén impulzus névvel
 $\underline{k} = \underline{k}'$ értéket kapjuk.

te eldönthető alapján az összes hullámfv.:

Hilbert testet alkot, azaz

1) lineáris tér

2) van lineáris skalárszorzat

$$\Psi_1, \Psi_2 \rightarrow \langle \Psi_1 | \Psi_2 \rangle$$

$$a) \langle \Psi_1 | \Psi_2 \rangle = \langle \Psi_2 | \Psi_1 \rangle^*$$

$$b) \langle \Psi_1 | \Psi_2 + \Psi_3 \rangle = \langle \Psi_1 | \Psi_2 \rangle + \langle \Psi_1 | \Psi_3 \rangle$$

$$c) \langle \Psi_1 | c \Psi_2 \rangle = c \langle \Psi_1 | \Psi_2 \rangle$$

$$d) \langle \Psi | \Psi \rangle \geq 0 \quad \text{és} \quad \langle \Psi | \Psi \rangle = 0 \Leftrightarrow \Psi = 0$$

3) a tér teljes

4) Vektortér lin

Ismeretes L_2 tere gondolunk,

négyzetesen integrálható f.-ekre



Lebesgue

* Elektron írt elektron összes lehetséges hullámf. -e
(adott impulzusok állapotok és ezek superpozíciói)

Hilbert tereit alkalmazzuk



tulajdonságai: 1) lineáris tér

2) Van skalariszorzat: ψ_1, ψ_2 $\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle$

def.: ψ normája $\|\psi\|^2 = \langle \psi | \psi \rangle$

Elektron írt elektron

$$\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle = \int \psi_1^*(\vec{r}) \psi_2(\vec{r}) d^3r$$

$$\|\psi\|^2 = \int |\psi(\vec{r})|^2 d^3r$$

3) λ tér teljes

$\forall \psi_n$ sorozata igen, hogy ha $\|\psi_n - \psi_m\| \rightarrow 0$ ($n, m \rightarrow \infty$)

$$\Rightarrow \exists \psi \quad \psi_n \rightarrow \psi$$

4) ∞ dim. Hilbert tér

Koordináta és impulzus kifejezések konstans

Ha $\psi(\vec{r})$ normált ($\|\psi\| = 1$, $\langle \psi | \psi \rangle = 1$)

$\rho(\vec{r}) = \psi^*(\vec{r}) \cdot \psi(\vec{r})$ valószínűségi sűrűség

$$\langle \vec{r} \rangle = \int \rho(\vec{r}) \cdot \vec{r} \cdot d^3r$$

átlagérték, kifejezések, várható értékek

$$\langle f(r) \rangle = \int \psi^* f \psi d^3r$$

Da ψ normiert: $\langle r \rangle = \frac{\int \psi^* r \psi d^3r}{\int \psi^* \psi d^3r}$

Da $a_k = \int \psi_k^*(r) \psi(r) d^3r$

$|a_k|^2 \propto p = \hbar k$ impuls aus Wellenlänge

$$\langle p \rangle = \sum_k |a_k|^2 \hbar k = \hbar \sum_k a_k^* \hbar k a_k$$

hierzu alt.-en Spezialfälle ableiten

Speziell $\hbar k \psi_k(r) = -i \nabla \psi_k(r)$

$$\langle p \rangle = \hbar \sum_k \int \psi^*(r) \psi_k(r) d^3r \cdot \int \psi(r) \underbrace{\hbar k \psi_k^*(r)}_{-i \nabla \psi_k^*(r)} d^3r$$

$$\langle p \rangle = i \hbar \sum_k \int \psi^*(r) \psi_k(r) d^3r \cdot \underbrace{\int \psi(r) \nabla \psi_k^*(r) d^3r}_{\substack{\text{partiell} \\ \text{Integration}}} = - \int \psi_k^*(r) \nabla \psi(r) d^3r$$

$$= -i \hbar \iint \psi^*(r) \cdot \underbrace{\sum_k \psi_k(r) \psi_k^*(r)}_{\delta(r-r')} \cdot \nabla \psi(r) d^3r d^3r'$$

all: $\sum_{\underline{k}} \psi_{\underline{k}}(\underline{r}) \psi_{\underline{k}}^*(\underline{r}) = \delta(\underline{r}-\underline{r})$ teljeségi összefüggés

all: $\int \sum_{\underline{k}} \psi_{\underline{k}}(\underline{r}) \psi_{\underline{k}}^*(\underline{r}) \cdot \phi(\underline{r}) d^3r = \phi(\underline{r})$

$$\int \psi_{\underline{k}}^*(\underline{r}) \phi(\underline{r}) \cdot d^3r = c_{\underline{k}}$$

$$\sum_{\underline{k}} c_{\underline{k}} \psi_{\underline{k}}(\underline{r}) = \phi(\underline{r})$$

□

$$\langle \hat{p} \rangle = -i\hbar \int \psi^*(\underline{r}) \nabla \psi(\underline{r}) d^3r$$

$$\langle F(\hat{p}) \rangle = \int \psi^*(\underline{r}) \cdot F(-i\hbar \nabla) \cdot \psi(\underline{r}) \cdot d^3r$$

pl.: (all) kinetikus energia

$$\left\langle \frac{\hat{p}^2}{2m} \right\rangle = \int \psi^*(\underline{r}) \cdot \left(-\frac{\hbar^2 \Delta}{2m} \right) \psi(\underline{r}) d^3r$$

Fizikai mennyiségek operátorai

Ha $F = F_r(\underline{r}) + F_p(\hat{p})$ átlagérték

$$\langle F \rangle = \int \psi^* \cdot \hat{F} \cdot \psi d^3r$$

↑
operátor

$$\hat{F} = F_r(\underline{r}) + F_p\left(\frac{\hbar}{i} \nabla\right)$$

Minden fizikai (nagy) mennyiséghez egy operátort rendelünk, mivel kimondhatjuk az átlagértéket

Nutzen operatoren betrachten?

lineare operatoren

inversigalt (hermitisch) op.-al.,

nicht a. hermitisch

$$\text{da } \hat{F} = \hat{F}^\dagger$$

$$\begin{aligned}\langle F \rangle &= \int \psi^* (\hat{F} \psi) d^3r = \int (\hat{F}^\dagger \psi)^* \psi d^3r = \\ &= \int \psi (\hat{F} \psi^*) d^3r = \langle F \rangle^*\end{aligned}$$

adjungiert op. definition:

$$\int \psi^* (\hat{A} \phi) d^3r = \int (\hat{A}^\dagger \psi)^* \phi d^3r$$

* für alle reziprok adjungiert lineare
operatoren

$$\text{für } \hat{r} \rightarrow \hat{r}^\dagger = \hat{r}$$

$$\hat{p} \rightarrow \hat{p}^\dagger = -\hat{p}$$

$$F(\hat{r}, \hat{p}) \rightarrow \hat{F} = F(\hat{r}, \hat{p})$$

$$\text{da } F = \hat{p} \cdot \hat{r} \rightarrow \hat{p} \cdot \hat{r} \text{ ist } \hat{r} \cdot \hat{p} \text{ hermitisch}$$

$$\text{Kommutator } \hat{A} \cdot \hat{B} \neq \hat{B} \cdot \hat{A}$$

$$\text{Def. kommutator } [\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A} \cdot \hat{B} - \hat{B} \cdot \hat{A}$$

$$\text{anti-} \{ \hat{A}, \hat{B} \} = \hat{A} \cdot \hat{B} + \hat{B} \cdot \hat{A}$$

$$\text{N: } (\hat{A} \hat{B})^+ ?$$

$$\begin{aligned} \int \psi^* \cdot (\hat{A} \hat{B})^+ \varphi \, d^3r &\stackrel{\text{def.}}{=} \int (\hat{A} \hat{B} \psi)^* \cdot \varphi \, d^3r = \\ &= \int (\hat{B} \psi)^* \hat{A}^+ \varphi \, d^3r = \int \psi^* \cdot \hat{B}^+ \hat{A}^+ \varphi \, d^3r \end{aligned}$$

$$(\hat{A} \hat{B})^+ = \hat{B}^+ \hat{A}^+$$

Se $\hat{A}, \hat{B}$ hermitisch

$\hat{A} \hat{B}$ auch hermitisch, da $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$

Se $\hat{A}, \hat{B}$ nicht hermitisch $\Rightarrow [\hat{A}, \hat{B}] \neq 0$

$$\frac{1}{2} (\hat{A} \hat{B} + \hat{B} \hat{A}) \quad \text{hermitisch}$$

$$\frac{1}{2} i (\hat{A} \hat{B} - \hat{B} \hat{A}) \quad \text{hermitisch}$$

$\hat{p}$ hermitisch:

$$\int \varphi^*(z) \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x_i} \psi(z) \right) d^3r = -i\hbar \int \varphi^* \frac{\partial \psi}{\partial x_i} d^3r$$

$$= -i\hbar \left\{ \psi \cdot \varphi^* \Big|_{\text{Grenze}} - \int \frac{\partial \varphi^*}{\partial x_i} \cdot \psi \, d^3r \right\}$$

↑

per. lat. felt. math. eliminiert

$$= \int i\hbar \frac{\partial \varphi^*}{\partial x_i} \cdot \psi \, d^3r = \int \left(-i\hbar \frac{\partial \varphi}{\partial x_i} \right)^* \cdot \psi \, d^3r$$

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

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

$$\hat{L}_y = -i\hbar \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right)$$

$$\hat{L}_z = -i\hbar \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right)$$

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

$$\text{kommutator } [\hat{r}_i, \hat{r}_j] = 0 \quad i, j = 1, 2, 3$$

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

$$[\hat{r}_i, \hat{p}_j] = i\hbar \cdot \delta_{ij}$$

$$[\hat{x}, \hat{p}_x] \psi = \frac{\hbar}{i} \left(x \frac{\partial}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x} x \right) \psi =$$

$$= \frac{\hbar}{i} \left(x \frac{\partial \psi}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x} (x \psi) \right) = \frac{\hbar}{i} (-\psi) = -i\hbar \cdot \psi$$

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

$$\text{wegen } \underline{L} \times \underline{L} = i\hbar \underline{L}$$

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

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

Operatoren selbstadjungiert

F. allg.

$$\langle F \rangle = \int \psi^* \hat{F} \psi \cdot d^3r$$

F szimmetria

$$\langle (\Delta F)^2 \rangle = \int \Psi^* (\Delta \hat{F})^2 \Psi d^3r =$$

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

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

$$= \int (\Delta \hat{F}^+ \Psi)^* (\Delta \hat{F} \Psi) d^3r = \int |\Delta \hat{F} \Psi|^2 d^3r$$

F-nél határozott értéke van Ψ állapotban,

$$\text{ha } \langle (\Delta F)^2 \rangle = 0$$

$$\int |\Delta \hat{F} \Psi|^2 d^3r = 0 \Rightarrow \Delta \hat{F} \Psi = 0$$

$$\hat{F} \Psi = F \cdot \Psi, \text{ ahol } F = \langle F \rangle$$

sajátérték egyenlet

ismert Ψ, F

ismert $\hat{F}$

F lehetséges értéke a sajátérték

A sajátérték összege a spektrum

van diszkrét spektrum

van folytonos —||—

A Ψ sajátállapotban F névvel leírható a
megfelelő sajátértékhez tartozó

Mivel $\hat{F} = \hat{F}^+$ a sajátérték valós

Ha a sajátértékhez tartozó több sajátfüggvény

$\equiv$ degenerált eset

1. Teil

Hilbertraum $\Psi, \Psi(z), \Psi(q), |\Psi\rangle$ hat Vektor

Komplex konjugiert $\Psi^*, \Psi^*(z), \Psi^*(q), \langle\Psi|$ hat Vektor

||
Skalarprodukt = inneres Produkt

$$\text{Skalarprodukt } \langle\Psi_1|\Psi_2\rangle = \int \Psi_1^*(z) \Psi_2(z) d^3r, \int \Psi_1^*(q) \Psi_2(q) dq$$

Legen $\hat{F} = \hat{F}^\dagger \quad \hat{F}|\Psi_n\rangle = f_n|\Psi_n\rangle$

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

$$\langle\Psi_n|\hat{F}|\Psi_m\rangle = F_{nm} \quad \hat{F} \text{ ist hermitisch} \\ |\Psi_n\rangle \text{ ist } |\Psi_m\rangle \text{ konjugiert}$$

2. Teil

a) $\hat{p}_x$ 1. ord. eig

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Psi}{\partial x} = p \cdot \Psi \rightarrow \text{Lsg.: } \Psi_p = A \cdot e^{i \frac{p}{\hbar} x}$$

p ist

Ψ_p sind vollständige Teilchenketten
nimm eine Hilbert Basis

$$b) \quad \hat{L}_z = \frac{\hbar}{i} \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi} \quad \text{HF}$$

gibst polarkoord.

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi} \Psi = L_z \Psi$$

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

Ψ_m liegen eigenwert $\Rightarrow m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$

Normálás $\int_0^{2\pi} \psi_m^* \psi_m d\varphi = 1$

A normált $\psi_m = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi}$

Általában igaz:

diszkrét spektrum esetén a s. fr. normálható

folgytatva $\parallel$ $\parallel$ $\parallel$ $\parallel$

Diszkrét sp.-ú op.-ok s. fr.-eihez a teljesíthetőségi

$$\hat{F} \psi_n = F_n \psi_n, \text{ ha teljesül az } \hat{F}^\dagger = \hat{F}$$

$$\langle \psi_m | \psi_n \rangle = 0, \text{ ha } m \neq n$$

mi:

$$\begin{aligned} \langle \psi_m | \hat{F} \psi_n \rangle &= \langle \psi_m | \hat{F} \psi_n \rangle = \langle \psi_m | F_n \psi_n \rangle = F_n \langle \psi_m | \psi_n \rangle \\ &= \langle \hat{F} \psi_m | \psi_n \rangle = \langle F_m \psi_m | \psi_n \rangle = F_m \langle \psi_m | \psi_n \rangle \end{aligned}$$

$$0 = (F_n - F_m) \langle \psi_m | \psi_n \rangle \quad \begin{matrix} \uparrow \\ F_m \text{ helyén} \end{matrix}$$

$$\Rightarrow \langle \psi_m | \psi_n \rangle = 0, \text{ ha } F_n \neq F_m$$

Normált s. fr.-ok vége: $\langle \psi_m | \psi_n \rangle = \delta_{mn}$

Az összes s. fr. teljes rendszer ad,

normált esetben teljes ortonormált rendszert.

$$\text{teszt } |\psi\rangle = \sum_n a_n |\psi_n\rangle$$

a_n meghatározása:

$$\langle \psi_n | \psi \rangle = \langle \psi_n | \sum_{n'} a_{n'} |\psi_{n'}\rangle = \sum_{n'} a_{n'} \underbrace{\langle \psi_n | \psi_{n'} \rangle}_{\delta_{nn'}} = a_n$$

ψ teljesség és felbontás

$$\sum_n \psi_n^*(q) \psi_n(q) = \delta(q - q')$$

$$\sum_n |n\rangle \langle n| = 1 = \text{egység operátor}$$

$$\left(\begin{aligned} \langle \psi_n | \psi \rangle &= \langle \psi_n | \sum_{n'} | \psi_{n'} \rangle \langle \psi_{n'} | \psi \rangle = \\ &\quad \underbrace{\qquad\qquad\qquad}_{11} \\ &= \sum_{n'} \underbrace{\langle \psi_n | \psi_{n'} \rangle}_{\delta_{nn'}} \cdot \langle \psi_{n'} | \psi \rangle \end{aligned} \right)$$

Elfajult eset:

$$\hat{F} |n, l\rangle = F_n |n, l\rangle \quad l=1, \dots, f_n$$

Valósághoz tartozó teljes ortogonális rendszer $|n, l\rangle$

$$\int, \text{ melyre } \langle n, l | n', l' \rangle = \delta_{nn'} \cdot \delta_{ll'}$$

megfelelő lin. kombináció az összes n értékes
tartomány n fr. -ból

ψ új jelöléssel

$$\begin{aligned} \langle F \rangle &= \langle \psi | \hat{F} | \psi \rangle = \left\langle \sum_n a_n \psi_n \left| \hat{F} \right| \sum_{n'} a_{n'} \psi_{n'} \right\rangle = \\ &= \sum_{n, n'} a_n^* a_{n'} F_n \langle \psi_n | \psi_{n'} \rangle = \sum_n |a_n|^2 F_n \end{aligned}$$

Feldmodi

$$\hat{F} |\psi_F\rangle = F \cdot |\psi_F\rangle \quad \int |\psi_F|^2 d\mathbf{q} = \infty$$

Normiert ψ kontinuierlich

$$|\psi\rangle = \int a_F |\psi_F\rangle dF$$

$|a_F|^2 dF$ Anzahl an Teilchen, liegt in $(F, F+dF)$ Bereich

$$\int |a_F|^2 dF = 1$$

$$\text{Igor } 1 = \langle \psi | \psi \rangle = \left\langle \int a_F |\psi_F\rangle dF \left| \int a_{F'} |\psi_{F'}\rangle dF' \right. \right\rangle$$

$$= \int dF \int dF' a_F^* a_{F'} \underbrace{\langle \psi_F | \psi_{F'} \rangle}_{\delta(F-F')} =$$

$$= \int dF a_F^* a_F$$

$$\boxed{\langle \psi_F | \psi_{F'} \rangle = \delta(F-F')}$$

normiert!

pl. Impuls o. all

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

Normiert

$$\int \psi_{\mathbf{p}}^*(\mathbf{r}) \psi_{\mathbf{p}'}(\mathbf{r}) d^3r = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3r e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}-\mathbf{p}') \cdot \mathbf{r}} = \delta(\mathbf{p}-\mathbf{p}')$$

Helixoperator 1. int. eigenstate:

$$\hat{r} \psi(\mathbf{r}) = r \psi(\mathbf{r}) = r_0 \psi(\mathbf{r})$$

$$\text{1. int. } \psi_{r_0}(\mathbf{r}) = \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}_0)$$

Kommiss

$$\int d^3r \delta(\vec{r}_0 - \vec{r}) \delta(\vec{r}_0 - \vec{r}) = \delta(\vec{r}_0 - \vec{r}_0)$$

Teljesen $\Psi(\vec{r}) = \int a_{\vec{r}_0} \Psi_{\vec{r}_0}(\vec{r}) d^3r_0$

$$a_{\vec{r}_0} = \langle \Psi_{\vec{r}_0} | \Psi \rangle = \int \delta(\vec{r}_0 - \vec{r}) \Psi(\vec{r}) d^3r = \Psi(\vec{r}_0)$$

$$|a_{\vec{r}_0}|^2 d^3r_0 = |\Psi(\vec{r}_0)|^2 d^3r_0$$

Abstrakt Hilbert tér, reprezentáció

Legyen $|\Psi\rangle$ normált állapot és $\hat{F}$ op.

teljes ortogonálisan rendezett $|\Psi_F\rangle$

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

a_F teljesan jellemzi $|\Psi\rangle$ -t, $a_F \equiv \Psi(F)$ koordináta $\Psi(q)$ helyett.

t fiz. jelentése $|a_F|^2 dF$ az $(F, F+dF)$ intervallumban
és némi eredmény sz. e. $\hat{F} = \hat{r}$ esetén is
ez van.

a_F jelölés $|\Psi\rangle$ F reprezentációjeli jelölés
 $\Psi(q)$ a koordináta reprezentáció

Hogyan Ψ F reprezentációján (a_F) , hogyan
teljesül át G reprezentációra?

$$\hat{F}|\psi_F\rangle = F|\psi_F\rangle$$

$$\hat{G}|\psi_G\rangle = G|\psi_G\rangle$$

$$a_G = \langle \psi_G | \psi \rangle \quad \text{gellendek } |\psi\rangle\text{-t } G \text{ reprezentáció}$$

$$a_G = \langle \psi_G | \underbrace{\int dF |\psi_F\rangle \langle \psi_F |}_{=1} \psi \rangle = \int dF \langle \psi_G | \psi_F \rangle a_F$$

Diszkrét helyeken értékek

$$a_F = \begin{pmatrix} a_{F_1} \\ a_{F_2} \\ \vdots \\ i \end{pmatrix}$$

$$a_G = \begin{pmatrix} a_{G_1} \\ a_{G_2} \\ \vdots \\ i \end{pmatrix}$$

$$a_G = \begin{pmatrix} \uparrow \\ \langle \psi_G | \psi_F \rangle \end{pmatrix} a_F$$

Koord. repr.

Imp. repr.

pl.: adott impulzusok ill.

$$\frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_0}$$

$$\delta(\vec{r}_0 - \vec{r})$$

adott helyek ill.

$$\delta(\vec{r}_0 - \vec{r})$$

$$\frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}_0}$$

tota. áll

$$\psi(\vec{r})$$

$$\psi(\vec{r}) = \text{FT}(\psi(\vec{z}))$$

Olyan operátor esete, melynek folytonos a diszkrét spektruma is van.

$$|\Psi\rangle = \sum_n a_n |\Psi_n\rangle + \int a_F |\Psi_F\rangle dF$$

$$\langle\Psi|\Psi\rangle = 1 = \sum_n |a_n|^2 + \int dF |a_F|^2$$

$$\sum_n |\Psi_n\rangle \langle\Psi_n| + \int dF |\Psi_F\rangle \langle\Psi_F| = 1$$

$$a_n = \langle\Psi_n|\Psi\rangle, \quad a_F = \langle\Psi_F|\Psi\rangle$$

Később mindig adott 1. és 2. rendű, a hullámf. névs. után a 3. értékek megfelelő 1. fr. 4. hullámf. névs. alatti megváltozást, a QM nem írja le!

Kommutáló operátorok 1. fr.-ei

1. hullámf. több op. 1. fr.-e, pl.

$$\Psi_F(x) \quad \hat{F}, \quad \frac{\hat{F}^2}{2m} \text{ -vel is 1. fr.-e,}$$

de $\hat{F}$ -vel nem 1. fr.-e

Ha F és M fizikai mennyiség mindig egyszerre veszem fel határozott értéket $\Rightarrow [\hat{F}, \hat{M}] = 0$

$$\text{mi.} \quad \hat{F} |\Psi_n\rangle = F_n |\Psi_n\rangle$$

$$\hat{M} |\Psi_n\rangle = M_n |\Psi_n\rangle$$

$$(\hat{M}\hat{F} - \hat{F}\hat{M})|\psi_n\rangle = (M_n F_n - F_n M_n)|\psi_n\rangle = 0$$

$$\text{mivel } |\psi\rangle = \sum a_n |\psi_n\rangle \quad [\hat{F}, \hat{M}]|\psi\rangle = 0$$

Ha csak egy adott állagot szeretnénk F és M

$$\text{egysége pontosan} \Rightarrow [\hat{M}, \hat{F}]|\psi\rangle = 0$$

Folytatva: Ha $[\hat{F}, \hat{M}] = 0 \Rightarrow$ közös s.f. rendszere van

u.i. Ha nincs elfajult s.étel

és $\hat{M}|\psi_n\rangle = M_n|\psi_n\rangle \quad \{|\psi_n\rangle, n=1, \dots\}$ teljes rendszere

$$\hat{M}\hat{F}|\psi_n\rangle = \hat{F}\hat{M}|\psi_n\rangle = M_n \hat{F}|\psi_n\rangle$$

$\hat{F}|\psi_n\rangle$ $\hat{M}$ s.f.-re ugyanazzal a sajátértékkel

$$\Rightarrow \hat{F}|\psi_n\rangle = F_n|\psi_n\rangle$$

Elfajult esetben

$$\text{Ha } \hat{M}|\psi_{n,e}\rangle = M_n|\psi_{n,e}\rangle$$

$$\hat{M}\hat{F}|\psi_{n,e}\rangle = M_n \hat{F}|\psi_{n,e}\rangle$$

$$\Rightarrow \hat{F}|\psi_{n,e}\rangle = \sum_k a_{ek} |\psi_{n,k}\rangle$$

Megfelelő lin. kombinációt választva (vagy) elkerülve

$$\hat{F}|\phi_{n,e}\rangle = F_n |\phi_{n,e}\rangle$$

$$, \text{ ahol } |\phi_{n,e}\rangle = \sum_k b_{ek} |\psi_{n,k}\rangle$$

Egy rendszer állapotát a rendszer

Ismeri kell a fiz. mennyiség operátorát

Ha kell keresni a közös (független) kommutáló operátort, a megfelelő fiz. mennyiség pontos értékét rendszer 1 db hullámfüggvényétől függ, ami a közös 2. fr.

Újra kombinálva is állapítható.

pl. szabad elektron, $\hat{p}$

$\hat{r}$

E, L^2, L_z

Ha egy rendszer 2 független részrészecskéből áll,

a teljes rendszer hull.függvénye a részrészecskék hull.függvényeinek a szorzata

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

pl. 1 rendszerre vonatkozó részrészecskék független a Ψ_2 -től

Úgyjárték $\hat{F}$ csak q_1 -től függ

$$\int \Psi^*(q_1, q_2) \hat{F} \Psi(q_1, q_2) dq_1 dq_2 =$$

$$= \int \Psi_1^*(q_1) \Psi_2^*(q_2) \hat{F} \Psi_1(q_1) \Psi_2(q_2) dq_1 dq_2$$

$$= \int \Psi_1^*(q_1) \hat{F} \Psi_1(q_1) dq_1 \cdot \underbrace{\int \Psi_2^*(q_2) \Psi_2(q_2) dq_2}_{=1}$$

$= 1$

F_n nével a valószínűség

$$\Psi(q_1, q_2) = \Psi_1(q_1) \Psi_2(q_2) = \left(\sum_n a_n \varphi_n(q_1) \right) \Psi_2(q_2)$$

$$\begin{aligned} |a_n|^2 &= \left| \int \varphi_n^*(q_1) \Psi_2^*(q_2) \Psi(q_1, q_2) dq_1 dq_2 \right|^2 \\ &= \left| \int \varphi_n^*(q_1) \Psi_1(q_1) dq_1 \right|^2 \underbrace{\left| \int \Psi_2^*(q_2) \Psi_2(q_2) dq_2 \right|^2}_{=1} \end{aligned}$$

Egy rendszer nem mindig jellemezhető hull. fr.-nyel.

$$\text{pl.: } \Psi = a_1 \Psi_1 + a_2 \Psi_2$$

$$\Psi_1 \text{ val.-e } |a_1|^2$$

$$\Psi_2 \text{ —''— } |a_2|^2, \text{ de } a_1 \text{ és } a_2 \text{ rel. fázisa is kell}$$

Van olyan eset, amikor a fázis nem tudjuk

Ha van hull. fr. $\Rightarrow$ töltés állap.

Ha nincs —''— $\Rightarrow$ kevert —''—

A kevert állapotok hull. fr. helyett
"szuperpozíció" inga & a rendszer.

Kanonisch konjugiert relativ

$\hat{A}, \hat{B}$ kanonisch konjugiert

$$[\hat{A}, \hat{B}] = i \hat{C} \quad \hat{C} = \hat{C}^\dagger$$

$$\langle A \rangle = \langle \Psi | \hat{A} | \Psi \rangle \quad \langle B \rangle = \dots$$

$$\Delta \hat{A} = \hat{A} - \langle A \rangle \quad \Delta \hat{B} = \dots$$

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

$$\Delta A^2 = \langle \Psi | \Delta \hat{A}^2 | \Psi \rangle \quad \Delta B^2 = \langle \Psi | \Delta \hat{B}^2 | \Psi \rangle$$

λ wählen

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

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

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

$- \lambda \hat{C}$

$$= \Delta A^2 \left[\lambda^2 - \frac{\langle \hat{C} \rangle}{2 (\Delta A)^2} \right]^2 + (\Delta B)^2 - \frac{\langle \hat{C} \rangle^2}{4 (\Delta A)^2} \geq 0$$

Es minimales, bei: $\lambda = \frac{\langle \hat{C} \rangle}{2 (\Delta A)^2}$, dann ist ≥ 0

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

pl.: $\hat{A} = \hat{x}$, $\hat{B} = \hat{p}_x$ $\hat{C} = \hat{L}_z$

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2} \quad \text{universell best.}$$

pl.: $\hat{A} = \hat{\varphi} = \varphi$ $\hat{B} = \hat{L}_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi}$

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

Mit der Teilweis. or. eigenlös.?

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

$\parallel$
 $\propto$

pl.: $\hat{A} = \hat{x}$, $\hat{B} = \hat{p}_x$ $\langle x \rangle = \langle p_x \rangle = 0$

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

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

$$\psi(x) = A \cdot e^{-\frac{x^2}{4 \langle x^2 \rangle}} \quad \text{lokalisiert all. Nullenfr.-e}$$

erreicht $\Delta x \cdot \Delta p_x = \frac{\hbar}{2}$

Hátfeladat a kvantummechanikában

Klassikus határeset

A kv. mech. a kl. mech.-t nagyon közelíti,
a kapcsolat olyan, mint a hullámoptika és a
geometria optika kapcsolata

$$\left. \begin{array}{l} \text{Hullámoptikában } f = a \cdot e^{ikL} = a \cdot e^{i\varphi} \\ \text{a lassan változik, } L(\varphi) \text{ nagy} \end{array} \right\} \begin{array}{l} \text{lineáris adja} \\ \text{a geometria optikát} \end{array}$$

Kvantummechanikában $\Psi = a \cdot e^{i\varphi}$ hullámfüggvény
változik, a lassan változik, φ nagy

Mi határozza meg a fázist?

Maugerit's elv: adott energiájú részecske
kínált S_0 (rövidített hatás) minimum

Geom. optikában: Fermat elv

$$\delta \int_A^B n \, ds = 0 \quad \text{azaz az int. minimális a fénypálya mentén}$$

$$\int_A^B n \, \underline{\underline{ds}} \quad \text{minimum}$$

$$\text{Mivel } \text{grad } L = \frac{h}{\lambda} \cdot n$$

$$\int_A^B h \, \text{grad } L \cdot \underline{\underline{ds}} \quad \text{minimum, azaz}$$

$$\varphi(B) - \varphi(A) \quad \text{fázisváltozás}$$

minimum

Ext. sejteves neg. a kv. mech.-ban

form $\rightarrow$ határozóintegrál fellet neg.

A kvant. hull. fr., belépve az időfüggésbe is

$$\psi = a \cdot e^{\frac{i}{\hbar} S}$$

Időfüggő Schrödinger egy.

A ψ hull. fr. a rendszerrel a maximális információval
adja, így az időfüggés is.

Lehet $\frac{\partial \psi}{\partial t} = -$ ψ adja meg.

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

$\uparrow$
lin. op. (szárazpontosan elv. miatt)

Minden időpillanatra $\int \psi^* \psi \, dq = 1$

$$\frac{d}{dt} \int \psi^* \psi \, dq = \int \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} \, dq + \int \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \psi \, dq = 0$$

$$\int \psi^* \hat{H} \psi \, dq - \int \psi^* \hat{H}^+ \psi \, dq = 0$$

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

Kvant. hull. fr.-re

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{i}{\hbar} \frac{\partial S}{\partial t} \psi$$

kv. mech.

$$\text{így } \hat{H} \rightarrow -\frac{\partial S}{\partial t} = \text{Hamilton fr.}$$

$$\text{így } \boxed{i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H} \psi}$$

időfüggő Schr. egy.

$\uparrow$
Hamilton op.

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

az állajzók értékei időfüggetlenek, egyenértékű idő szerinti deriváltak

Def. $\hat{F}$ „idő derivált” $\hat{\dot{F}}$

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{F} \rangle = \langle \hat{\dot{F}} \rangle$$

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

$$+ \int \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} \hat{F} \Psi dq + \int \Psi^* \hat{F} \left(\frac{\partial \Psi}{\partial t} \right) dq =$$

$$\uparrow$$

$$\frac{i}{\hbar} \hat{H} \Psi^*$$

$$\uparrow$$

$$-\frac{i}{\hbar} \hat{H} \Psi$$

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

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

Ha $\frac{\partial \hat{F}}{\partial t} = 0$ és $[\hat{H}, \hat{F}] = 0$ $\langle \hat{F} \rangle =$ időben állandó

$\hat{F}$ megmaradási mennyiség

Egyenlő, ha $t=0$ Ψ az $\hat{F}$ sajátállapota, akkor

mindig az.

Stacionarius Algorit

isot rendszer esetén $\hat{H}$ op. nem függ t -től,

így $[\hat{H}, \hat{H}] = 0$, így $\hat{H}$ megmaradó m., energiája

$$\text{Szegye } \hat{H}\Psi_n = E_n \Psi_n$$

Is "időfüggetlen" Schr. egy. m.o.-a $t=0$ -an

Ψ_n kezdeti feltétel:

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

Superpozíció

$$\Psi(q, t \neq 0) = \sum_n a_n \Psi_n(q)$$

$$\Psi(q, t) = \sum_n a_n \cdot \Psi_n(q) \cdot e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t}$$

$\{a_n\}^2$ fiz. jelentése: ---, időfüggetlen

Stac. áll.-kn

$$|\Psi_n(q, t)|^2 dq = |\Psi_n(q)|^2 dq \quad \text{a megval. szl.}$$

időfüggetlen

$\langle F \rangle$ időfüggetlen, ha $\frac{\partial \hat{F}}{\partial t} = 0$

Minden megmaradó mennyiség stac. állapotok felvételét

határozzák meg, mert $[\hat{F}, \hat{H}] = 0$

E_n -ek leletnek elfoglaltak,

pl. Ha $\hat{F}, \hat{G}$ megmarad és $[\hat{F}, \hat{G}] \neq 0$

biztosan elfoglalt s. st.

mi. legyen Ψ $\hat{H}$ és $\hat{F}$ sajátfüggvénye

$$\hat{G} \cdot \Psi \neq \text{const} \cdot \Psi$$

$$\hat{H} (\hat{G} \Psi) = \hat{G} \cdot \hat{H} \cdot \Psi = E \cdot (\hat{G} \Psi), \text{ így } \hat{G} \cdot \Psi \text{ } \hat{H}\text{-nek}$$

fizetett sajátfüggvénye.

E energiaspektrum lehet folytonos $\int |\Psi_n|^2 dq = \infty$,
(diszkrét)

így a rendszert, v. egy részecskét a ∞ -ben van.

diszkrét $\rightarrow \int |\Psi_n|^2 dq = 1$ a rendszert a végesben van

$|\Psi_n|^2$ a ∞ -ben elég gyorsan eltűnik

Kvantummechanika Poisson - egyenlet

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

Klasszikus (Hamiltoni) mechanika $F = F(q, p, t)$

$$\frac{dF}{dt} = \frac{\partial F}{\partial t} + \{H, F\}_{cl}$$

||

$$\sum_k \left(\frac{\partial H}{\partial p_k} \frac{\partial F}{\partial q_k} - \frac{\partial F}{\partial p_k} \frac{\partial H}{\partial q_k} \right)$$

Def. a kv. mech. Poisson - egyenlet

$$\left\{ \hat{H}, \hat{F} \right\}_{kv} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{F}]$$

te analógia miatt belátható, mint az elemi tul.-ok

megjegyzések: $\{f, g\} = -\{g, f\}$

$$\{f, c\} = 0$$

$$\{f_1 + f_2, g\} = \{f_1, g\} + \{f_2, g\}$$

$$\{f_1 f_2, g\} = f_1 \{f_2, g\} + \{f_1, g\} f_2$$

Jacobi-azonosság:

$$\{f, \{g, h\}\} + \{g, \{h, f\}\} + \{h, \{f, g\}\} = 0$$

Koordináták, impulzusok és Poisson-izomorfizmus

$$\{q_i, q_k\}_{cl} = 0$$

$$\{q_i, q_k\}_{qr} = 0$$

$$\{p_i, p_k\}_{cl} = 0$$

$$\{p_i, p_k\}_{qr} = 0$$

$$\{q_i, p_k\}_{cl} = \delta_{ik}$$

$$\{q_i, p_k\}_{qr} = \delta_{ik}$$

↑

a kanonikus op.-ok
adódik

teljesítmény: minden olyan rendszerrel, amivel van kl.

megfelelője felírható az operátorok kommutátorai

fontos analógia alapján.

Es a kanonikus kvantálás

Működés: határozható a kvantálási feltételek

Szimmetria és megmaradási mennyiség

(P.R.) kl. mech.-ban sim. $\leftrightarrow$ megmaradási mennyiség

Eltolódás $\Psi(x_1, x_2, \dots) \rightarrow \Psi(x_1 + a, x_2 + a, \dots)$

Torzítás $\Psi(x_1, x_2, \dots) \rightarrow \Psi(x'_1, x'_2, \dots)$

$$\uparrow \quad \vec{x}' = \underline{R} \cdot \vec{x}$$

Lehet egy fizicso

$\Psi \rightarrow \hat{O} \Psi$ Milyen $\hat{O}$ tulajdonságai sim. esetén?

Superpozíció elv miatt $\hat{O}$ lin. op.

Sim. tr.-ról, azaz ha a tr. rendben elviekus az eredetivel, a fiz. mennyiségek névnyi valószínűségei nem változnak

Lehet $\hat{F}$ sz. Ψ_n a névnyi val. $|\langle \Psi_n | \Psi \rangle|^2$
a tr. rendben $|\langle \hat{O} \Psi_n | \hat{O} \Psi \rangle|^2$

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

Wigner szerint a fiziol. valószínűségek egy, kettő

$$\langle \Psi_n | \Psi \rangle = \pm \langle \hat{O} \Psi_n | \hat{O} \Psi \rangle$$

+ általánosan, kivéve az időtükrözést.

+ előjellel: $\langle \Psi_n | \Psi \rangle = \langle \Psi_n | \hat{O}^\dagger \hat{O} \Psi \rangle$

azaz $\hat{O}$ unitér $\hat{O}^\dagger \hat{O} = \underline{1}$

Szimmetria esetén az energia átlagértéke nem változik

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

$$\hat{H} = \hat{O}^\dagger \hat{H} \hat{O} \quad \text{mivel} \quad \hat{O}^\dagger = \hat{O}^{-1}$$

$$\hat{O} \hat{H} = \hat{H} \hat{O} \quad [\hat{H}, \hat{O}] = 0, \text{ vagy } \hat{O} \text{ megmaradási mennyiség}$$

Eltolás $\leftrightarrow$ impulzus

Infinitesimális tr.

$$\begin{aligned} \Psi(r_1 + \delta r_1, r_2 + \delta r_2, \dots) &= \Psi(r_1, r_2, \dots) + \delta r_1 \sum_a \nabla_a \Psi + \dots \\ &= \underbrace{\left(1 + \delta r_1 \sum_a \nabla_a\right)}_{\hat{O}} \Psi + \dots \end{aligned}$$

Ha sim. az eltolás $[\hat{O}, \hat{H}] = 0$

$$\left[-i\hbar \sum_a \nabla_a, \hat{H}\right] = 0$$

$$-i\hbar \sum_a \nabla_a = \hat{p} = \text{az össimpulzus op.}$$

Környékclassikus hull. fr.-re keltetve

$$\hat{p} \Psi = \hat{p} a \cdot e^{\frac{i}{\hbar} S} = \left(\sum_a \nabla_a S \right) \Psi$$

$$\sum_a \nabla_a S = \text{összimpulzus}$$

$$\boxed{\hat{p} = \frac{\hbar}{i} \sum_a \nabla_a}$$

Torgetés

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

$$\Psi(\mathbf{r}_1 + \delta \mathbf{r}_1, \dots) = \Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots) + \sum_a \delta \mathbf{r}_a \cdot \nabla_a \Psi =$$

$$= \underbrace{\left(1 + \sum_a (\delta \varphi \times \mathbf{r}_a) \cdot \nabla_a \right)}_{\hat{O}} \Psi =$$

$$= \underbrace{\left(1 + \delta \varphi \sum_a (\mathbf{r}_a \times \nabla_a) \right)}_{\hat{O}} \Psi$$

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

$\Rightarrow$ teljes impulzusmomentum $\frac{\hbar}{i} \sum_a (\mathbf{r}_a \times \nabla_a)$

Impulzusmomentum sajátérték problémája =

= az impulzusmomentum sajátérték és a $\hat{H}$ kommutációs

reláció sajátérték problémája

Itt teljes imp. mom. kommutátorok olyanok, mint 1 részecske

esetén:

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

$$[\hat{L}_\pm, \hat{L}_\mp] = 0$$

$$\hat{L}_\pm = \hat{L}_x \pm i\hat{L}_y = \hat{L}_1 \pm i\hat{L}_2$$

$$[\hat{L}_+, \hat{L}_-] = 2\hbar \hat{L}_3$$

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

1. rész: az $\hat{L}_z$ kommutációs relációjának megoldása

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

$$\hat{L}_{\pm} = \hbar \cdot e^{\pm i\varphi} \left(\pm \frac{\partial}{\partial \varphi} + i \sin \vartheta \cdot \frac{\partial}{\partial \vartheta} \right)$$

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

$$\Delta = \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r - \frac{1}{r^2} \hat{L}^2$$

$$\Delta \psi = \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} (r \psi) - \frac{1}{r^2} \hat{L}^2 \psi$$

$\hat{L}_z$ 1. r. sz. f. v.

$$\psi_m = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi} \quad m=0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

1. r. sz. f. v. m sz. f. v. $\int_0^{2\pi} \psi_m^* \psi_n d\varphi = \delta_{mn}$

$\hat{L}^2, \hat{L}_z$ közös sajátérték problémája

Két út: a) kommutációs relációk megoldása

b) a kommutációs relációk, algebrai

$$[\hat{L}^2, \hat{L}_z] = 0 \Rightarrow \text{van közös 1. sz. f. v.}$$

Legyen $\hat{L}_z |\psi_M\rangle = M \cdot |\psi_M\rangle$ és $|\psi_M\rangle \hat{L}^2$ 1. sz. f. v.

$$\hbar = 1 \quad [\hat{L}_3, \hat{L}_{\pm}] = \pm \hat{L}_{\pm}$$

$$[\hat{L}_+, \hat{L}_-] = 2 \cdot \hat{L}_3$$

$$\begin{aligned}\hat{L}_3 (\hat{L}_\pm \psi_M) &= \hat{L}_3 \hat{L}_\pm \psi_M = \\ &= (\hat{L}_\pm \hat{L}_3 \pm \hat{L}_\pm) \psi_M = (M \pm 1) (\hat{L}_\pm \psi_M) \\ &\quad \downarrow \\ &\quad M\end{aligned}$$

$\hat{L}_\pm$ ist als all.- und eig. v. $\hat{L}_3$ eigentümlichkeitsvektoren ausgedr. lassen u. bes. $\hat{L}_3$ z. eig. v. L ist u. s. fr. ω_L

$$\hat{L}_+ \omega_L = 0$$

$$\left. \begin{aligned}\hat{L}_- \omega_L &= \omega_{L-1} \\ \hat{L}_- \omega_{L-1} &= \omega_{L-2} \\ &\vdots\end{aligned} \right\} \text{ neu normiert}$$

$$\hat{L}_+ \omega_M = r_{M+1} \omega_{M+1}$$

$$\hat{L}_+ \omega_{M-1} = \hat{L}_+ \hat{L}_- \omega_M = \underbrace{(\hat{L}_- \hat{L}_+ + 2\hat{L}_3)}_{r_{M+1}} \omega_M =$$

$$= \underbrace{(r_{M+1} + 2M)}_{r_M} \omega_M \quad r_M = 2M + r_{M+1}$$

$$\begin{aligned}r_{M+1} &= (r_{M+1}^- - r_{M+2}) + (r_{M+2}^- - r_{M+3}) + \dots + \\ &\quad + \dots + (r_L^- - r_{L+1}) + \underbrace{r_{L+1}}_0 =\end{aligned}$$

$$= 2(M+1) + 2(M+2) + \dots + 2 \cdot L = \underline{\underline{L(L+1) - M(M+1)}}$$

* laghesebb $\hat{L}_3$ sajátérték legyen m

$$\hat{L}_- \omega_m = \omega_{m-1} = 0$$

$$0 = \hat{L}_+ \omega_{m-1} = r_m \omega_m$$

$$\Rightarrow r_m = 0$$

$$0 = r_m = L(L+1) - m(m+1)$$

$$\Rightarrow m = -L$$

Állott $\hat{L}^2$ sajátérték mellett

$$M = -L, -L+1, \dots, L-1, L$$

$$2L+1 \text{ db}$$

$$\Rightarrow 2L \text{ saját}$$

Írjuk $L = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \dots$ (egész v. félszám)

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

$$\hat{L}^2 \omega_M = \frac{1}{2} (\hat{L}_+ \omega_{M-1} + \hat{L}_- r_{M+1} \omega_{M+1}) + M^2 \omega_M$$

$$= \left[\frac{1}{2} (r_M + r_{M+1}) + M^2 \right] \omega_M$$

$$= \left[\frac{1}{2} (L(L+1) - (M-1)M + L(L+1) - M(M+1)) + M^2 \right] \omega_M$$

$$= \underline{L(L+1) \omega_M}$$

$$\hat{L}_+^\dagger = \hat{L}_-$$

$$\begin{aligned} \langle \hat{L}_+^\dagger \omega_M | \hat{L}_+^\dagger \omega_M \rangle &= \langle \omega_M | \hat{L}_- \hat{L}_+ \omega_M \rangle = \\ &= \langle \omega_M | L_- (L(L+1) - M(M+1)) \omega_{M+1} \rangle = \\ &= (L(L+1) - M(M+1)) \langle \omega_M | \omega_M \rangle \\ &\dots\dots\dots \\ &= \langle \tau_{M+1} \omega_{M+1} | \tau_{M+1} \omega_{M+1} \rangle = \\ &= (L(L+1) - M(M+1))^2 \cdot \langle \omega_{M+1} | \omega_{M+1} \rangle \end{aligned}$$

Def. normale für

$$\psi_{L,M} = \left\{ \frac{(L+M)!}{(L-M)!} \right\}^{1/2} \cdot \omega_M$$

$$\langle \omega_M | \omega_M \rangle = (L(L+1) - M(M+1)) \langle \omega_{M+1} | \omega_{M+1} \rangle$$

$$\frac{(L-M)!}{(L+M)!} \langle \psi_{L,M} | \psi_{L,M} \rangle = (L(L+1) - M(M+1)) \frac{(L-M-1)!}{(L+M+1)!} \langle \psi_{L,M+1} | \psi_{L,M+1} \rangle$$

$$\langle \psi_{L,M} | \psi_{L,M} \rangle = \underbrace{(L(L+1) - M(M+1)) \cdot \frac{1}{(L-M)(L+M+1)}}_1 \langle \dots | \dots \rangle$$

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

$$\langle \psi_{L,M} | \psi_{L,M} \rangle = \langle \psi_{L,M+1} | \psi_{L,M+1} \rangle := 1$$

Vegül

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

$$\hat{L}_3 \Psi_{L,M} = M \cdot \Psi_{L,M}$$

$$L = 0, \frac{1}{2}, 1, \dots$$

$$M = -L, -L+1, \dots, L-1, L$$

Ha a forgástér szimmetria

$$[\hat{L}_i, \hat{H}] = 0, \text{ így } \hat{L}_i \text{ megmaradó mennyiség}$$

tehát $\hat{L}^2$ 1. értéke $L(L+1)$ esetén $2L+1$ -es degeneráció van az energia 1. értékén.

1. részecske impulzusmomentum-jelölésével koordinátareprezentáció

Itt az $Y_{\ell}^m(\vartheta, \varphi)$ jelölés

$$\text{Kronecker} \quad \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} Y_{\ell m}^*(\vartheta, \varphi) Y_{\ell' m'}(\vartheta, \varphi) \sin \vartheta \, d\vartheta \, d\varphi = \delta_{\ell \ell'} \delta_{m m'}$$

Itt 1. érték egy:

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

$$\Psi = Y_{\ell m} = \Phi_{\ell m}(\varphi) \Theta_{\ell m}(\vartheta)$$

$$\Phi_{\ell m} \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi} \quad m = -\ell, -\ell+1, \dots, \ell$$

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

$l \geq |m|$ -re van no.

$P_l^m(\cos \vartheta)$: associated Legendre fun.

$P_l^0(\cos \vartheta)$: Legendre polynom

$$Y_l^0 = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} P_l(\cos \vartheta)$$

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

$$Y_{l,-m}(\vartheta, \varphi) = (-1)^m \cdot Y_{l,m}^*(\vartheta, \varphi)$$

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

$$Y_{1,0} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \vartheta$$

$$Y_{1,\pm 1} = \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \vartheta \cdot e^{\pm i\varphi} \longleftrightarrow \frac{r}{|r|}$$

$$Y_{2,0} = \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (3 \cos^2 \vartheta - 1)$$

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

$$Y_{2,\pm 1} = \mp \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \cos \vartheta \sin \vartheta \cdot e^{\pm i\varphi}$$

$\frac{r_i \cdot r_j}{r^2}$ quadrupol moment

Orthogonalität: $\int d\varphi \int \sin \vartheta d\vartheta Y_{lm} = \delta_{l0} \delta_{m0} \sqrt{4\pi}$

Az imp. norm. s. fr. - el transzformációs függvények

A függvények az -a (his. vektorok)

$$\hat{O} = 1 + \frac{i}{\hbar} \delta\varphi \cdot \hat{L} =$$

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

$$\begin{aligned} \hat{O} \psi_{L,M} &= \psi_{L,M} + i \left(\delta\varphi_3 M \psi_{L,M} + \frac{\delta\varphi_1 - i\delta\varphi_2}{2} \sqrt{L(L+1) - M(M+1)} \psi_{L,M+1} \right. \\ &\quad \left. + \frac{\delta\varphi_1 + i\delta\varphi_2}{2} \sqrt{L(L+1) - M(M-1)} \psi_{L,M-1} \right) \end{aligned}$$

$(\hat{O})^n \psi_{L,M}$ az imp. norm. s. fr. - el lineáris kombinációja

$$= \sum_{M'=-L}^L a_{M,M'} \psi_{L,M'}$$

$\hat{O} \psi_{L,M} \in \mathcal{H}$ s. fr., mivel $[\hat{O}, \hat{L}^2] = 0$

$a_{M,M'}$ csak a vektortól (és L -től) függ

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

↑
vagyis

$$a_{m,m'} = \int Y_{L,m}^*(\vartheta, \varphi) Y_{L,m'}(\vartheta', \varphi') \sin\vartheta d\vartheta d\varphi$$

Egyszerű eset $Y_{00} \rightarrow Y_{00}$ nem változik, skalar

Y_{1m} vektor

Y_{2m} 2. rangú, 0 spinű tenzor

stb.

Vísefoglalt: $\hat{L}^2$ és $\hat{L}_z$ negadom negatívok és
 hullámfüggvény transzformáció tulajdonságait fogatjuk.

Lehet ezt téhiteni az imp. mom. rendeltetés jellezésnek

Impulzusmomentum összeadása

Álljon a rendszer 2 független (nem kölcsönható)
 részrészecskéből.

Írjuk fel a hullámfüggvény $\Psi = \Psi_1(q_1) \Psi_2(q_2)$

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

$\uparrow$ $\uparrow$
 q_1 -től q_2 -től

Ha Ψ_1 L_1, M_1 s.ért

Ψ_2 L_2, M_2 s.ért

mi Ψ impulzusmomentuma?

$$\hat{L}_z \Psi = \hbar (M_1 + M_2) \Psi$$

$$\hat{L}^2 \Psi \neq \text{const.} \Psi$$

Ψ_{L_1, M_1}

Ψ_{L_2, M_2}

nilyen lineáris kombináció

s. f. -ei $\hat{L}^2$ -nek?

L_1 és L_2 impulzusmomentum 'állapota' $(2L_1+1)(2L_2+1)$ db van.
 Típusokhoz ezek egymással 'állapotszerű' kombinációkban
 nemek 'ak' szétlét, hogy adott lin. kombináció

$$\underline{L}^2 = (\underline{L}_1 + \underline{L}_2)^2 \text{ sajátállapota}$$

Miké $L(M)$ lehetséges értékei?

to $\underline{L}^2$ s. fr. elét Ψ_{L,M,L_1,L_2}

Táblázat a normálállapokról

	M_1	M_2	M	L
1.	L_1	L_2	L_1+L_2	L_1+L_2
2.	L_1-1	L_2	L_1+L_2-1	L_1+L_2, L_1+L_2-1
	L_1	L_2-1		
3.	L_1-2	L_2	L_1+L_2-2	$L_1+L_2, L_1+L_2-1, L_1+L_2-2$
	L_1-1	L_2-1		
	L_1	L_2		

1. $\Psi_{L_1+L_2, L_1+L_2, L_1, L_2}$

2. $\underline{L}_- \Psi_{L_1+L_2, L_1+L_2, L_1, L_2} = \text{const.} \cdot \Psi_{L_1+L_2, L_1+L_2-1, L_1, L_2}$

enne ortogonális $\Psi_{L_1+L_2-1, L_1+L_2-1, L_1, L_2}$

3. ---

Kedding folytatható-e a eljárás?

Legyen $L_1 > L_2$

$M = L_1 - L_2 - 1$ -re lehetséges állapotok leírása

$$\begin{array}{ccc} L_1 & M - L_1 = -L_2 - 1 & \leftarrow \text{nem létezik} \\ L_1 - 1 & -L_2 & \end{array}$$

$$\begin{array}{c} \text{---} \\ M - L_2 = L_1 - 2L_2 - 1 > L_2 \\ -L_1 \end{array}$$

$M = L_1 - L_2$ -re még jó-e az eljárás?

Ideát L lehetséges értékei

$$L_1 + L_2, L_1 + L_2 - 1, \dots, |L_1 - L_2|$$

Ellenőrzésként

$$\begin{aligned} & (2(L_1 + L_2) + 1) + (2(L_1 + L_2 - 1) + 1) + \dots + \\ & + (2|L_1 - L_2| + 1) = (2L_1 + 1)(2L_2 + 1) \end{aligned}$$

= a korábbi áll.-ok száma

Ψ_{L, M, L_1, L_2} áll. (norma) az

$$\hat{L}_1 \cdot \hat{L}_2, \hat{L}_1 \cdot \hat{L}_1, \hat{L}_2 \cdot \hat{L}_2 \text{ -vel is s.f.v. e}$$

$$\text{pl.: } \hat{L}_1 \cdot \hat{L}_2 = \frac{1}{2} (\hat{L}^2 - \hat{L}_1^2 - \hat{L}_2^2)$$

$$\Psi_{L, M, L_1, L_2} = \sum_{M_1, M_2} C_{L_1 M_1 L_2 M_2}^{L, M} \Psi_{L_1 M_1} \Psi_{L_2 M_2}$$

$\hat{L}_- : \text{Clebsch - Gordon együtthatók}$
 $\text{Tablákra állva rendezkedtetek!}$
 $\text{Fais konvergens levezetés!}$

$$\hat{L}_- \Psi_{l,m} = \text{const.} \cdot \Psi_{l,m-1}$$

$(\text{const.})^2$ rögzített, a faiss konvergens

pl. Gordon - Shortley konvergens

Paritás

isnt rendben, centrális kulcs" értéke este a
 térképess is sim. $\tau \rightarrow -\tau$

kl. neek - ba ehon nines megmódosított mennyiség

te térképess (paritás) operátora $\hat{P}$

$$\hat{P} \Psi(\tau) = \Psi(-\tau)$$

Mit $\hat{P}$ sajátértékei?

$$\hat{P} \Psi(\tau) = \tau \Psi(\tau) \quad / \hat{P}$$

$$\Psi(\tau) = \hat{P}^2 \Psi(\tau) = \tau \hat{P} \Psi(\tau) = \tau^2 \Psi(\tau)$$

$$\Rightarrow \tau = \pm 1$$

$$\text{Ha } \hat{P} \text{ szimmetria } [\hat{P}, \hat{H}] = 0$$

a ps (ptl) hull. fv. kénélv is ps. (ptl.) marad

$$[\hat{P}, \hat{L}] = 0 \quad \text{lehetek közös s. fv.-ek}$$

$$x \rightarrow -x$$

$$y \rightarrow -y$$

$$z \rightarrow -z$$

$$r \rightarrow r$$

$$\vartheta \rightarrow \pi - \vartheta$$

$$\varphi \rightarrow \varphi + \pi$$

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

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

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

$$P_{\ell m}(-\cos \vartheta) = (-1)^{\ell+m} P_{\ell m}(\cos \vartheta)$$

$$\hat{P} Y_{\ell m}(\vartheta, \varphi) = (-1)^{\ell+m} Y_{\ell m}(\vartheta, \varphi)$$

anses a paritet's s. et. - el $\uparrow = (-1)^{\ell}$

2 fuggellen 'reversibelt' alla reverser paritetson
= a reversibelt paritetsonal a paritet

Schrödinger eqn.

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

Nonrelativistisk mekanik 1 tingeppara:

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

Följt tingeppara:

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

$\uparrow$ kinetisk en. $\uparrow$ pot. en.

Stad. 'all. $\Psi = \psi \cdot e^{-\frac{i}{\hbar} Et}$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2} \sum_{\alpha} \frac{\Delta_{\alpha}}{m_{\alpha}} + U \right) \Psi = E \cdot \Psi$$

überfugelter Schr. eq. = energia 1. ord. eq.

1. ord. Schr. eq.

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

$$\Psi = e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \cdot \mathbf{r}}$$

$$E = \frac{p^2}{2m} \quad \text{kinetische energie}$$

$$E > 0$$

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

von variablen

$$\text{Ansatz: } \Psi = \frac{1}{r} f(r) Y_{\ell m}(\vartheta, \varphi)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} \left(r \cdot \frac{f}{r} \right) - \frac{1}{r^2} \underbrace{\frac{\mathbf{L}^2 \cdot Y_{\ell m}}{Y_{\ell m}}}_{\hbar^2 \ell(\ell+1)} \frac{f}{r} \right) Y_{\ell m} = E \cdot \frac{f}{r} Y_{\ell m}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{r} \frac{d^2 f}{dr^2} - \frac{\ell(\ell+1)}{r^3} f \right) = E \cdot \frac{f}{r}$$

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m} \left(f'' - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} f \right) = E \cdot f}$$

Angen., mit U ist die Schr. eq.

$$U = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \quad \text{potenziell}$$

centrifugale güt

$$\frac{2mE}{\hbar^2} = k^2 \quad \text{geht ein}$$

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

$$f(r) = \sqrt{kr} \cdot f(kr) \quad \text{als Substitution}$$

$$z = kr$$

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

$$\text{ist eine Bessel-Funktion: } J_{l+\frac{1}{2}}(z) \quad (\text{im Falle Bessel-Funktion})$$

$$\text{es ist eine Neumann-Funktion: } N_{l+\frac{1}{2}}(z)$$

$$\text{f. l. } l=0 \quad J_{\frac{1}{2}} = \sqrt{\frac{2}{\pi z}} \sin z$$

$$N_{\frac{1}{2}} = \sqrt{\frac{2}{\pi z}} \cos z$$

$z=0$ - Pol
singulär

$N_{\frac{1}{2}}$ kein J0, kein Sinus

$$\psi = \text{const.} \cdot \sqrt{\frac{r}{r_0}} J_{l+\frac{1}{2}}(kr) \cdot Y_l(\vartheta, \varphi)$$

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

$$r \rightarrow 0 \quad \psi \sim r^l$$

$$r \rightarrow \infty \quad \psi \sim \frac{1}{r} \sin\left(kr - \frac{l\pi}{2}\right)$$

↑
Phasenverschiebung

$$e^{i \frac{\hat{p}}{\hbar} z} = e^{i k r \cos \theta} = \sqrt{4\pi} \sum_{\ell=0}^{\infty} \sqrt{2\ell+1} e^{i\pi \frac{\ell}{2}} \sqrt{\frac{\pi}{2kr}} \cdot j_{\ell+\frac{1}{2}}(kr) \cdot Y_{\ell,0}(\theta, \varphi)$$

Selvény, gyűrűs, ábrák

$$\hat{u} = \hat{r}$$

hisz $\hat{u}$ is deriválható, ami az ábrákhoz adja meg.

$$\hat{u} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{r}] = \frac{i}{\hbar} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(r), \hat{r} \right]$$

↑
D-t ad

$$\Delta(r\psi) - r\Delta\psi = 2 \text{grad } \psi$$

$$\boxed{\hat{u} = -\frac{i\hbar}{2m} 2 \nabla = \frac{\hbar}{m} \nabla}$$

átvezetés, az $\hat{u}$ -re értendő

$$\hat{u} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{u}] = \frac{i}{\hbar} [U, \hat{u}] = \frac{1}{m} [U, \nabla]$$

$$\boxed{m \hat{u} = -\nabla U}$$

Newton egyenlet operátoros

Ehrenfest tétel

Klassikus határeset pontosan a Newton egyenlet

$$\langle \nabla U \rangle \approx \nabla U|_{r=\langle r \rangle}$$

∇U klasszikus változó

$|\psi|^2$ valószínűség sűrűsége

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\psi^* \psi) &= \left(\psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t} + \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} \right) = \\ &= \frac{i}{\hbar} (\psi \hat{H} \psi^* - \psi^* \hat{H} \psi) \end{aligned}$$

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

$$= -\frac{i\hbar}{2m} \operatorname{div} (\psi \nabla \psi^* - \psi^* \nabla \psi)$$

$$\equiv -\operatorname{div} j$$

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

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} j = 0 \quad \text{folytonossági egyenlet}$$

$$\psi(z, t) = R(z, t) \cdot e^{i\phi(z, t)}$$

$$\rho = R^2$$

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

1. Schr.-eggy. m.o.-ban ált. tételről

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

$$U(x) \rightarrow 0 \quad \text{ha} \quad |x| \rightarrow +\infty$$

ψ egyértelmű, differenciálható, folytonos diff. bomlóval.

$$\textcircled{1} \quad \text{Legyen } U_{\min} = \min_x U(x) \Rightarrow E_n \geq U_{\min}$$

$$\text{m.i.: } \langle E \rangle = \langle T \rangle + \langle U \rangle \geq \langle T \rangle + U_{\min} \geq U_{\min}$$

$$\text{, mert } \langle T \rangle \geq 0$$

$$\textcircled{2} \quad E_n < 0 \quad \text{z. értékek létezését}$$

m.i. ha folytonos lenne, akkor ψ_n nem lenne normalizálható,

azaz a részecske tétel. része is lehetne, att

$$\text{ahol } U(x) \neq 0 \quad \text{és} \quad \text{ekkor } E_n \geq 0$$

$E_n > 0$ 1. értelmezhető polynomál

- ③ Ha $E \geq U$ nem, akkor az E helyen, ahol a potenciál előfordul $E \geq U$
Kv. ——— a potenciál mindenhol előfordul, ezért
általában $\Psi_n \neq 0$ véges tartományban.

Ha $E < U$ tartományban nem, akkor lokalizáljuk a potenciált,
a véges utat pedig $\hat{H}$ 2. áll. ———

$$\text{u.i. } [\hat{H}, \hat{x}] = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$$

1. dim. mozgáster

$$\text{Schr. egy.} \quad \frac{d^2 \Psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U(x)) \Psi = 0$$

Ha $E > 0$ $|x| \rightarrow \infty$ esetén az aszimptotikus egy.:

$$\frac{d^2 \Psi_a}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} \Psi_a = 0$$

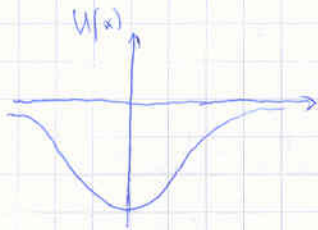
$$\Psi_a = a_1 e^{\frac{i}{\hbar} p x} + a_2 e^{-\frac{i}{\hbar} p x} \quad p = \sqrt{2mE}$$

Ψ_a nem normalizálható, E tetszőleges érték

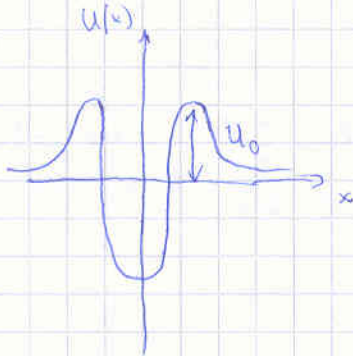
$$E < 0 \quad \Psi_a = \begin{cases} e^{kx} & x \rightarrow -\infty \\ e^{-kx} & x \rightarrow +\infty \end{cases}$$

$$k = \sqrt{\frac{2m|E|}{\hbar^2}}$$

Ad a Ψ egyál jó, u.i. a normál
a ∞ -es tart.



$E > 0$ kl. esetben is van
Kv. esetben $E < 0$ kötött áll.



Kl. esetben $0 < E < U_0$

a részecske a pot. görbe
tartóhéján, mint van találat

Kv. esetben $E > 0$ nincs kötött áll.

meg $E < U_0$ esetben sem

(Kl.) "töltött effektus"

Variációs elv

A Schr. egy. meghatározása, ha

$$\int \Psi^* (\hat{H} - E) \Psi dq \text{ extrémumát keressük}$$

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

Ψ komplex, így Ψ és Ψ^* külön-külön variálható

Ψ^* -ot variálva

$$\int \delta \Psi^* (\hat{H} - E) \Psi dq = 0 \Rightarrow \hat{H} \Psi = E \cdot \Psi$$

Ki kell hatni a normalizációt is

$$\left. \begin{aligned} \delta \int \Psi^* \hat{H} \Psi dq &= 0 \\ \int \Psi^* \Psi dq &= 1 \end{aligned} \right\}$$

E Lagrange multiplikátorként jön be

$$\delta \left\{ \int \psi^* \hat{H} \psi dq - E \int \psi^* \psi dq \right\} = 0$$

$\int \psi^* \hat{H} \psi dq$ minimális a legkisebb energiájú állapotban (E_0)
(alapszállapot) lesz

Módosítunk rajta az alapszállapot meghatározására.
(esetleg kicseréljük —)

Ha $E_1 > E_0 + \epsilon$ keresünk

$$\delta \int \psi^* \hat{H} \psi dq = 0$$

$$\int \psi^* \psi dq = 1 \quad \int \psi^* \psi_0 dq = 0$$

↑

alapszállapot hull. fv.-e

vagy

Tétel: az alapszállapot hull. fv. ψ_0 -nak véges r -re
nincs zérushelye

Tétel: 1 dim. mozgás: $E_0 < E_1 < \dots < E_n < \dots$ a diszkrét spektrum
 $\psi_0 \quad \psi_1 \quad \psi_n$

ψ_n -nek n db zérushelye van.

$\Rightarrow E_0$ nem elfizikális

v. i. ellenkező esetben ψ_0, ψ_0' alapszáll. hull. fv.-ekből

$c \cdot \psi_0 + c' \cdot \psi_0'$ is az, de ezzel van zérushelye

Identities

kl. mech. - l.m. ---

kv. mech. $i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H} \Psi \quad \hat{H}^\dagger = \hat{H}$

laggen $\Psi = \tilde{\Psi}$ konjekt. no., $\tilde{\Psi}(z, -t)$ is konjekt.
no.?

1 Schr. eqg. komplex konj. - ja

$$-i\hbar \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} = \hat{H} \Psi^* \quad \text{no. } \tilde{\Psi}^*(z, t)$$

$t \rightarrow -t$ versuch a Schr. eqg. - l.m.

$$-i\hbar \frac{\partial \tilde{\Psi}}{\partial t} = \hat{H} \tilde{\Psi} \quad \text{no. } \tilde{\Psi}(z, -t)$$

$\Rightarrow \tilde{\Psi}^*(z, -t)$ or exakti Schr. eqg. no. - a

Es or identitätsproblem!

Ja or nein.

$$\Psi^*(z, -t) = \hat{T} \tilde{\Psi}(z, t)$$

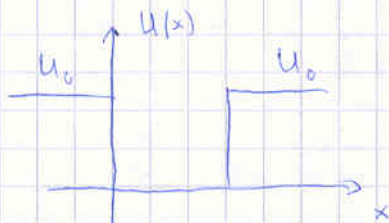
$\hat{T}$ ren linearis op, anti unitär

kl. mech. reversibel

$$\Psi(z, t) = e^{\frac{i}{\hbar}(pz - Et)}$$

$$\hat{T} \Psi = e^{-\frac{i}{\hbar}(pz + Et)} = e^{\frac{i}{\hbar}(-pz - Et)}$$

Potential gödör



Schr. egy $0 < E < U_0$

$$0 < x < a \quad \psi'' + k^2 \psi = 0$$

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

$$\psi = c \cdot \sin(kx + \delta)$$

$$x < 0, x > a \quad \psi'' - \kappa^2 \psi = 0$$

$$\kappa = \sqrt{\frac{2m(U_0 - E)}{\hbar^2}}$$

$$\begin{array}{ll} e^{-\kappa x} & x > a \\ e^{+\kappa x} & x < 0 \end{array}$$

Helvén



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

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

$$\Delta a \rightarrow 0$$

$$+ \frac{2m}{\hbar^2} \int (U-E) \psi \, dx = 0$$

$$\downarrow$$

$$0$$

ψ' folytonos, ahol U ugysz, ha az ugysz véges

ψ is folytonos

Helvén $\frac{\psi'}{\psi}$ -t érdekes

$$k \cdot a = (2n+1)\pi - 2 \arcsin \frac{k \hbar}{\sqrt{2mU_0}}$$

adja $k(E)$ lehetséges értékeit

Vegteléses részecske potenciáljánál

$$x < 0, x > a \quad (U_0 = \infty) \quad \psi = 0$$

Ellenőrizni ψ -re meg $x=0$ és $x=a$ -ban

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} n^2 \quad n=1,2,\dots$$

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

3 dimenziós részecske potenciáljánál (dobozba zárt elektron)

a, b, c 'elzáró' falak távolságai

$$\Delta\psi + k^2\psi = 0$$

$$\psi = X(x) Y(y) Z(z)$$

$$\underbrace{\frac{X''}{X}}_{-k_1^2} + \underbrace{\frac{Y''}{Y}}_{-k_2^2} + \underbrace{\frac{Z''}{Z}}_{-k_3^2} + k^2 = 0$$

$$E_{n_1, n_2, n_3} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m} \left(\frac{n_1^2}{a^2} + \frac{n_2^2}{b^2} + \frac{n_3^2}{c^2} \right)$$

$$\psi_{n_1, n_2, n_3} = \sqrt{\frac{8}{abc}} \sin\left(\frac{n_1 \pi x}{a}\right) \sin\left(\frac{n_2 \pi y}{b}\right) \sin\left(\frac{n_3 \pi z}{c}\right)$$

Lineáris oszcillátor

Kísérleti úton meghatározható frekvencia

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

$$U \rightarrow \infty \quad |x| \rightarrow \infty$$

Algebra no.

$$\text{Def. } \hat{a} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \hat{x} + i \cdot \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}} \hat{p}$$

$$\hat{H} = \hbar\omega \left(\hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2} \right) \quad E_n = \hbar\omega \cdot \left(n + \frac{1}{2} \right)$$

Herstellend $|\varphi_0\rangle$

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

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

$$\hat{p} = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$$

$\varphi_0(x)$ a coord. repr. - bel. hull. fr.

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

$$(\hat{a}^\dagger)^n \varphi_0 \text{ adja } \varphi_{n-1}.$$

$$\begin{aligned} \langle \varphi_n | \hat{a}^\dagger | \varphi_n \rangle &\equiv (\hat{a}^\dagger)_{nn} = (\hat{a})_{nn} = \langle \varphi_n | \hat{a} | \varphi_n \rangle = \sqrt{n+1} \cdot \delta_{n+1,n} \\ &= \sqrt{n} \cdot \delta_{n,n-1} \end{aligned}$$

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

$$(\hat{x})_{nn} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\sqrt{n} \delta_{n,n-1} + \sqrt{n+1} \delta_{n,n+1})$$

$$(\hat{p})_{nn} = i \sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}} (-\sqrt{n} \delta_{n,n-1} + \sqrt{n+1} \delta_{n,n+1})$$

$$\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & & & \\ \sqrt{1} & 0 & \sqrt{2} & & \\ & \sqrt{2} & 0 & \sqrt{3} & \\ & & \sqrt{3} & 0 & \sqrt{4} \\ & & & \sqrt{4} & 0 \\ & & & & \ddots \end{pmatrix}$$

$$\hat{p} = i \sqrt{\frac{\hbar m \omega}{2}} \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & & & \\ -\sqrt{1} & 0 & \sqrt{2} & & \\ & -\sqrt{2} & 0 & \sqrt{3} & \\ & & -\sqrt{3} & 0 & \sqrt{4} \\ & & & -\sqrt{4} & 0 \\ & & & & \ddots \end{pmatrix}$$

$$\hat{a} = \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & & & \\ & 0 & \sqrt{2} & & \\ & & 0 & \sqrt{3} & \\ & & & 0 & \sqrt{4} \\ & & & & 0 \\ & & & & & \ddots \end{pmatrix} \quad \hat{a}^\dagger = \begin{pmatrix} 0 & & & & \\ \sqrt{1} & 0 & & & \\ & \sqrt{2} & 0 & & \\ & & \sqrt{3} & 0 & \\ & & & \sqrt{4} & 0 \\ & & & & \ddots \end{pmatrix}$$

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

koord. repr.-ben a , nyomatékul egyenlet (Schr.-eg.)

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

$$\xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \cdot x$$

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

$\zeta = \pm \infty$ az egyenlet sing. pontja.

Az aszimptotikus egyenlet:

$$\frac{d^2 \Psi_a}{d\zeta^2} - \zeta^2 \cdot \Psi_a = 0 \rightarrow \Psi_a = e^{\pm \frac{\zeta^2}{2}}$$

Korrelátorú megoldás $\Psi_a = e^{-\frac{\zeta^2}{2}}$

A pontos m.o.: $\Psi = \Psi_a \cdot X$

X -t határozó egyenletet megoldva keressük, pontos,

hogy az pontosan az a $\zeta \rightarrow \pm \infty$ aszimptotikus

(Sommerfeld feltételeinek megfelelően)

$$\frac{d^2 \Psi}{d\zeta^2} = \Psi_a'' \cdot X + 2 \cdot \Psi_a' \cdot X' + \Psi_a \cdot X''$$

$$X'' - 2\zeta \cdot X' + \underbrace{\left(\frac{2E}{\hbar \omega} - 1 \right)}_{2n} X = 0$$

$$X = \sum_{l=0}^{\infty} a_l \zeta^l$$

$$X'' = \sum_{l=2}^{\infty} a_l l(l-1) \zeta^{l-2} = \sum_{l=0}^{\infty} a_{l+2} (l+2)(l+1) \zeta^l$$

$$\sum_l \left\{ a_{l+2} (l+2)(l+1) + a_l (-2l+2n) \right\} \zeta^l = 0$$

0 $\forall l \in \mathbb{N}$

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

Hisz a hatványssor nem ér véget $|l| \rightarrow \infty$ -re $e^{\frac{x^2}{2}}$
 a viselkedés, elrontja a normalizáltságot

Itt hatványssor véges, ha n egész szám!

$$\frac{2E}{\hbar\omega} - 1 = 2n \quad \left(E_n = \frac{\hbar\omega}{2} (2n+1) \right) \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

Itt X polinom együtthatóit rekurrens tudjuk

$$X \equiv H_n\left(\frac{x}{\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}}\right) \text{ Hermite polinomok}$$

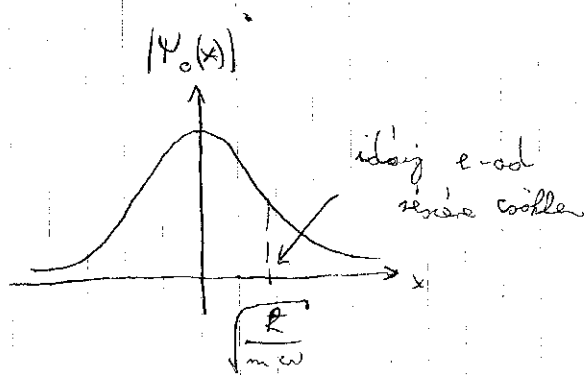
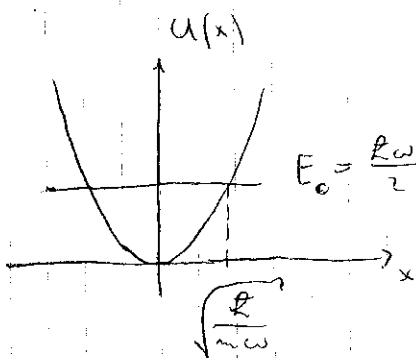
$$\Psi_n = \text{const.} \cdot e^{-\frac{x^2}{2}} \cdot H_n\left(\frac{x}{\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}}\right)$$

Hátréllapot:

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

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

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



Klassikus mechanikában kijelöl
 nem lehet a rezonancia

$$\langle x \rangle = 0 \quad \langle p \rangle = 0$$

$$\langle x^2 \rangle = \Delta x^2 \quad \langle p^2 \rangle = \Delta p^2$$

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

$$\langle \hat{H} \rangle = \frac{\langle \Delta p \rangle^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} \langle \Delta x \rangle^2 \quad \text{von Heit. vers.,}$$

$$\text{resp. } \Delta x \cdot \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$$

3D-Harmonischer Oszillator

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

Versuch Separation

$$\Psi(x, y, z) = \Psi_1(x) \Psi_2(y) \Psi_3(z)$$

$$\frac{\Psi_1''(x)}{\Psi_1(x)} + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E_1 - \frac{m\omega^2}{2} x^2 \right) = 0$$

$$\frac{\Psi_2''(y)}{\Psi_2(y)} + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E_2 - \frac{m\omega^2}{2} y^2 \right) = 0$$

$$\frac{\Psi_3''(z)}{\Psi_3(z)} + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E_3 - \frac{m\omega^2}{2} z^2 \right) = 0$$

$$E = E_1 + E_2 + E_3$$

$$E = \left(n_1 + n_2 + n_3 + \frac{3}{2} \right) \hbar \omega$$

Ψ_{n_1, n_2, n_3} ist separabel

Menni lehet 2 energiasint energiájához a hullámhosszát
 pl. 2 atom molekulához és a hullámhosszát /
 elnyelt foton energiája

Morgan's centralis értéke

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

$$r = r_2 - r_1 \quad r = |r|$$

új változó: r , $R = \frac{m_1 r_1 + m_2 r_2}{m_1 + m_2}$

$$\frac{\partial \Psi}{\partial x_1} = \frac{\partial \Psi}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial x_1} + \frac{\partial \Psi}{\partial X} \frac{\partial X}{\partial x_1}$$

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

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x_2^2} = \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x \partial X} \frac{2m_2}{m_1 + m_2} + \frac{m_2^2}{(m_1 + m_2)^2} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial X^2}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2} \left[\left(\frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2} \right) \Delta_r + \frac{1}{m_1 + m_2} \Delta_R \right] \bar{\Psi} = E_t \cdot \bar{\Psi}$$

↑
teljes

$\bar{\Psi}$ változó képviselhető

$$\bar{\Psi} = \varphi(R) \psi(r)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2(m_1+m_2)} \Delta_{\underline{r}} \varphi = E \cdot \varphi \quad \leftarrow \text{TKP mozgás}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_{\underline{r}} \Psi + U(r) \Psi = E \cdot \Psi \quad \leftarrow \text{a relatív mozgás}$$

$$E_{\text{t}} = E_0 + E$$

$$\Psi(\underline{r}, R, t) = \Psi(\underline{r}) \cdot e^{\frac{i}{\hbar}(\underline{p} \cdot \underline{R} - E_0 \cdot t) - \frac{i}{\hbar} E t}$$

$$E_0 = \frac{p^2}{2(m_1+m_2)} \quad m = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$$

↳ TKP koordinátáin vonatkozó hullámfüggvény
szétfejtése

$\Delta_{\underline{r}}$ -et gömbi polárkoordinátákban vesszük

$$\Delta_{\underline{r}} \equiv \Delta = \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r - \frac{1}{r^2} \Delta^2$$

↳ változóvá választjuk:

$$\Psi(\underline{r}) = \frac{1}{r} X(r) \cdot Y_{\ell m}(\vartheta, \varphi)$$

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

1 dim. Schr. egyenlet

$$U_{\text{eff}}(r) = U(r) + \frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{\ell(\ell+1)}{r^2}$$

↳ normalizációs feltétel $\int |\Psi|^2 d^3 \underline{r} = 1 \Rightarrow \int_0^\infty |X|^2 dr = 1$

$$X(r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} 0 \quad X(0) = 0$$

Ha $U(r) \sim \frac{1}{r^2}$ -nel keresünk $r=0$ -nál

$r \rightarrow 0$ aszimptotikus egy.

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

$$X_a = \text{const.} \cdot r^s$$

$$s(s-1) - l(l+1) = 0 \Rightarrow s = \begin{cases} l+1 & \text{az a jó } r \rightarrow 0 \\ -l & \leftarrow \text{rossz} \end{cases}$$

reguláris $r \rightarrow 0$ $\Psi = \text{const.} \cdot r^l \cdot Y_{lm}$

$r \rightarrow \infty$ $U(r) \rightarrow 0$

$$X'' + \frac{2mE}{\hbar^2} X_a = 0$$

Ha $E > 0$ $k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$, folytonos sz.

$$\Psi = \text{const.} \cdot \frac{\sin(kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l)}{r} Y_{lm}$$

δ_l -et az $r \in (0, \infty)$ -beli pontos megoldás segítségével

↓
frusztráció

Ha $E < 0$ $X = \text{const.} \cdot e^{\pm \kappa \cdot r}$

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

(-) elöl az normalizáció megadást

$$\Psi = \text{const.} \cdot \frac{1}{r} \cdot e^{-\kappa r} \cdot Y_{lm} \quad (r \rightarrow \infty)$$

Keizs Coulomb - térben (H-atom)

$$U = - \frac{e^2}{r} \quad m_p \approx 2000 \cdot m_e \rightarrow \text{redukált tömeg:}$$

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

$E < 0$ esets, létezik állapot

$$\xi = \frac{2r}{r_0} \quad r_0 = \frac{\hbar^2}{\sqrt{2m|E|}}$$

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

$$\xi \rightarrow \infty \quad \frac{d^2 X_a}{d\xi^2} - \frac{1}{4} X_a = 0 \rightarrow X_a = e^{-\frac{1}{2}\xi}$$

(+) előjel a normalizáltságot elrontaná

Sommerfeld f. polinom módszer

$$X = \xi^{l+1} \cdot e^{-\frac{\xi}{2}} \cdot w(\xi)$$

↑
bizonyos, ami nem tartja el
az aszimptotikát

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

$$w = \sum_{j=0}^{\infty} a_j \xi^j$$

$$w' = \dots$$

$$w'' = \dots$$

$$\sum_{j=0}^{\infty} \left[a_{j+1} (j+1)(j+2l+2) + a_j (\xi-l-1-j) \right] \xi^j = 0$$

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

Da $j \rightarrow \infty$ und $l \rightarrow \infty$

$$a_{j+1} = \frac{1}{j+1} a_j$$

$$a_j = \frac{1}{j!} e^{\frac{1}{2} \varepsilon} \text{ a f.}$$

Vergleichen mit, plausibel, also korrekt, da $\varepsilon = l+1, l+2, \dots$ ergeben sich

$$\text{Lsg. } \varepsilon = n$$

$$n = \frac{m e^2 \hbar^2}{L^2} = \frac{m e^2}{L^2} \cdot \frac{L^2}{\sqrt{2 - E}}$$

$$E_n = - \frac{m e^4}{2 L^2 \cdot n^2}$$

n f. h. v. n = 1, 2, ... sequenz E-t

l m. h. v. l = 0, 1, ..., n-1 $\rightarrow L_z - t$

m m. h. v. m = -l, ..., +l $\rightarrow L_z - t$

folgt E-t

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

(vergleichen mit
n. 2)

St. scharfzüggrenzel

$$\underline{n=1} \quad l=0 \quad \psi = \frac{2}{s^{3/2}} \cdot e^{-\frac{r}{s}} \cdot \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$$

$$s := \frac{\hbar^2}{m \cdot e^2}$$

$$\underline{n=2} \quad l=0 \quad \frac{1}{\sqrt{2}} \left(1 - \frac{r}{2s}\right) e^{-\frac{r}{2s}} \cdot Y_{00}$$

$$l=1 \quad \frac{1}{2\sqrt{6}} \cdot \frac{r}{s} \cdot e^{-\frac{r}{2s}} \cdot Y_{1m}$$

$$\underline{n=3} \quad l=0 \quad \frac{2}{3\sqrt{3}} \left(1 - \frac{2}{3} \frac{r}{s} + \frac{2}{25} \frac{r^2}{s^2}\right) e^{-\frac{r}{3s}} \cdot Y_{00}$$

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

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

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

$$\langle r^2 \rangle = \frac{s^2}{2Z^2} [5n^2 + 4 - 3l(l+1)]$$

$$\left\langle \frac{1}{r} \right\rangle = \frac{1}{s} \cdot \frac{Z}{n^2} \quad , \text{geg.}$$

$$\langle U \rangle = 2E \quad , \text{weil} \quad \langle U \rangle = \langle T \rangle$$

$$\frac{1}{r} X_{n,l}(r) = f_{n,l}(r) = N_{n,l} \left(\frac{2Z \cdot r}{s \cdot n} \right)^l \cdot F(-n+l+1, 2l+2, \frac{2Zr}{n \cdot s}) \cdot e^{-\frac{Zr}{n \cdot s}}$$

$F \equiv$ effizient hypergeometrisch fr.

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

$n_3 \equiv n-l-1$ a radialis hullanfiggung
0 helyen van

$E > 0$ eset (elektron proton körül in le)

Folytonos a spektrum

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

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

$$r \rightarrow \infty \quad X'' + l^2 X = 0$$

$$X_a = A \cdot e^{ikr} + B \cdot e^{-ikr}$$

$$r \rightarrow 0 \quad X'' - \frac{l(l+1)}{r^2} X = 0$$

$$X_a \sim r^{l+1}$$

$$X(r) = e^{\pm ikr} \cdot r^{l+1} \cdot \underbrace{\sum_{v=0}^{\infty} \beta_v r^v}_{\text{ne mutat el az aszimptotikát}}$$

$$X_{l,l}(r) = e^{\pm ikr} \cdot \left(\frac{r}{g} \right)^{l+1} F\left(l+1 \pm \frac{Z}{ie g}, 2l+2, \mp 2ikr \right)$$

$$g = \frac{\hbar^2}{me^2}$$

Canonic transmiss, csak $E > 0$ lehetseges

$$X_{\pm, \ell}(r) = e^{\pm i \ell r} \cdot \left(\frac{r}{S}\right)^{\ell+1} \cdot F\left(\ell+1 \mp \frac{r}{i \ell g}, 2\ell+2, \mp 2i \ell r\right)$$

A ll. mech.-vel való kapcsolatot

Látjuk, hogy a kvant. hullámfn. $\psi \in \mathbb{C}^1$

Injunkt $\Psi(z, t) = e^{\frac{i}{\hbar} S(z, t)}$

Képezhetünk S -a Lagrangian.

De mielőtt hullámfüggvény felírható egy.

Beírva a Schr. egyenletbe:

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

(Ha $\hbar \rightarrow 0$ ez a Hamilton-Jacobi egyenlet és S a Lagrangian)

Vegyük adott E -jű áll.-ot

$$\Psi(z, t) = \psi(z) e^{-\frac{i}{\hbar} E t}$$

$$S(z, t) = S_0(z) - E \cdot t \quad (\text{mint a ll. mech.})$$

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

$$-\frac{i\hbar}{2m} \Delta S_0 \rightarrow 0 \quad \text{inva a rövidített H-J egyenlet}$$

$$\text{Ez jó közelítés } (\nabla S_0)^2 \gg \hbar |\Delta S_0| \quad \text{ezt}$$

Ha az ellipszoides lakoságos

$$\nabla S_0 = p, \text{ így } p^2 \gg \hbar \left| \operatorname{div} p \right|$$

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

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

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

Közz. impulzus és lassú változás. U kell

Körrelátsó körelítés (Wigner-Kramers-Brillouin módszer)

A $\hbar$ -beli sorfejtésben tovább megyünk

$$\text{Stör. áll.} \quad \psi(z) = e^{\frac{i}{\hbar} \sigma(z)}$$

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

A Schr. egyenletet:

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

Berendez a sorfejtést

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

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

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

1 dim. eset

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

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

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

M. r.

$$\sigma_0' = \pm p = \pm \sqrt{2m(E-U(x))} \rightarrow \sigma_0 = \pm \int_a^x p(x') dx'$$

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

$$\psi(x) = \frac{C_1}{\sqrt{|p|}} e^{\frac{i}{\hbar} \int_a^x p(x') dx'} + \frac{C_2}{\sqrt{|p|}} e^{-\frac{i}{\hbar} \int_a^x p(x') dx'}$$

A kl.-on megengedett tartomány $E > U(x)$, p valós

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

$$|\psi(x)|^2 \sim \frac{1}{p}$$

Ha $E = U$ $p = 0$, itt nem jó a közelítés

Legyen $E = U(x_0)$, milyen x -ekre jó a közelítés?

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

így az elvágási helyek

$$|x-x_0| \gg \frac{1}{2} \left(\frac{\hbar^2}{m \left| \frac{dU}{dx} \right|} \right)^{1/3}$$

$$\text{vagy } |x - x_0| \gg \frac{\hbar}{2\mu} = \frac{\lambda}{2 \cdot 2\pi}$$

$$p^2 = 2\mu \cdot \left| \frac{dU}{dx} \right| (x - x_0)$$

$$\text{és végül, ha } p^3 \gg \hbar \left| \frac{dU}{dx} \right|$$

$$|x - x_0| \gg \frac{1}{2} \left(\frac{\hbar^2}{\mu \left| \frac{dU}{dx} \right|} \right)^{1/3}$$

$$\text{vagy } \left| \frac{dU}{dx} \right| = \frac{\hbar^2}{2\mu |x - x_0|^2} \text{ -t beírva}$$

$$|x - x_0| \gg \frac{\hbar}{2\mu} = \frac{\lambda}{4\pi}$$

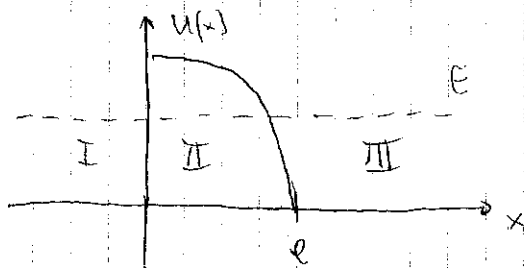
$E < U$ kl.-on nem megengedett tart., $p = i\hbar K$

$$\Psi(x) = \frac{C_1}{\sqrt{K}} e^{-\int_0^x K(x') dx'} + \frac{C_2}{\sqrt{K}} e^{+\int_0^x K(x') dx'}$$

Ha $E < U$ és $E > U$ tart.-t illetően kellene, de ott $p = 0$, így ez nem megy

és hivatalos "helyettesítő" elnevezés a Bohr-Sommerfeld f. kv. feltétel

Atkalin's pot. lygys



E s. fr. t. raskind, o spektrum galytuo

t. stov. reguliškai superpozicija išdėstyta ir la:
 $-\infty$ tol. lėčia rėmske a pot. lygys visame daly
 is atkalin

$$\psi_{II} = A e^{\frac{i}{\hbar} E x} + B e^{-\frac{i}{\hbar} E x}$$

$$\psi_{III} = C e^{\frac{i}{\hbar} E x}$$

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

Siklulimui:

$$A e^{\frac{i}{\hbar} E x}$$

$$j = |A|^2 \cdot \frac{\hbar}{m}$$

I t. t. $j = (|A|^2 - |B|^2) \cdot \frac{\hbar}{m}$

III t. t. $j = |C|^2 \cdot \frac{\hbar}{m}$

$$\oint j dx = 0 \rightarrow j_I = j_{III}$$

$$|A|^2 - |B|^2 = |C|^2$$

Transmissivität eh.: $R = \left| \frac{B}{A} \right|^2$

$R + D = 1$

Reflexivität eh.: $D = \left| \frac{C}{A} \right|^2$

$$\psi_{II} = \frac{1}{\sqrt{\kappa}} \left\{ \alpha \cdot e^{\int_0^x \kappa(y) dy} + \beta e^{-\int_0^x \kappa(y) dy} \right\}$$

$$\kappa(y) = \sqrt{\frac{2m(U(y) - E)}{\hbar^2}}$$

$x=0$ $A + B = (\alpha + \beta) \frac{1}{\sqrt{\alpha}}$ $\alpha = \kappa(0)$

$$\frac{i}{\hbar} (A - B) = \sqrt{\alpha} (\alpha - \beta)$$

$x=l$

$$C \sqrt{\beta} e^{\frac{i}{\hbar} \gamma l} = \alpha \cdot e^{\gamma} + \beta \cdot e^{-\gamma}$$

$$i \frac{\hbar}{2} C \cdot e^{\frac{i}{\hbar} \gamma l} = \sqrt{\beta} (\alpha e^{\gamma} - \beta e^{-\gamma})$$

$$\beta = \sqrt{\frac{2m(U(l) - E)}{\hbar^2}}$$

$$\gamma = \frac{1}{\hbar} \int_0^l \sqrt{2m(U(y) - E)} dy$$

$\gamma = \bar{\kappa} \cdot l \gg 1 \Rightarrow \alpha \ll \beta$, mit
 $\uparrow$
 Boltzmann!

$$\alpha = \frac{1}{2} \left(\sqrt{\beta} + \frac{i \hbar}{2 \sqrt{\beta}} \right) C e^{\left(i \frac{\hbar}{2} \gamma - \gamma \right)}$$

$$\beta = \left(\frac{\hbar}{2 \sqrt{\beta}} - \frac{i \hbar}{2 \sqrt{\beta}} \right) C e^{\left(i \frac{\hbar}{2} \gamma + \gamma \right)}$$

1. Teil $L \neq 0$

$$\frac{C}{A} = \frac{e^{-\frac{i\tau l}{\hbar}} - \gamma}{\left(\frac{1}{\hbar} - \frac{\alpha l}{i\tau}\right) \left(\hbar - \frac{i\tau}{l}\right)}$$

$$D = \left(\frac{C}{A}\right)^2 \approx e^{-\frac{2}{\hbar} \int_0^l \sqrt{2m(U(y) - E)} dy}$$

$D \neq 0 \Rightarrow$ von 'tunneln' absoluteffekt

für ein Teilchen ist D kleiner
z.B. Elektron, Neutron

$$e^{-\sqrt{2000}} = 10^{-18}$$

für $E > U_{max}$

$$\psi_{II} = \frac{\alpha(\hbar)}{\sqrt{\tau(x)}} \sin\left(\frac{1}{\hbar} \int_0^x \tau(y) dy + p\right)$$

Teilchenstrahl:

$$\frac{B}{A} = \frac{i \frac{\tau(l-a)}{\hbar^2} + \left(\frac{1}{\hbar^2} - \alpha l\right) \tan \varphi}{i \frac{\tau(l+a)}{\hbar^2} + \left(\frac{1}{\hbar^2} + \alpha l\right) \tan \varphi}$$

$$\varphi = \frac{1}{\hbar} \int_0^l \sqrt{2m(E - U(x))} dx$$

$$R = \left(\frac{B}{A}\right)^2$$

Ha $U(x) = U(x)$ egyenlő lehet

$$\Rightarrow a = b = \frac{1}{k} \sqrt{2m(E - U(x))}$$

$R = 0$ nincs reflexió

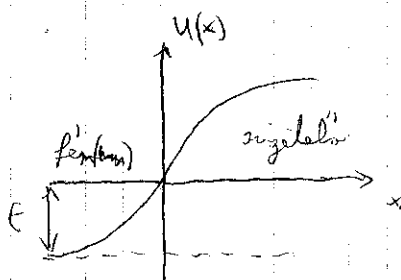
$$\varphi = \frac{1}{k} \int_0^L \sqrt{2m(E - U(x))} dx = n\pi$$

teljesen átlátszó a pot. blyg

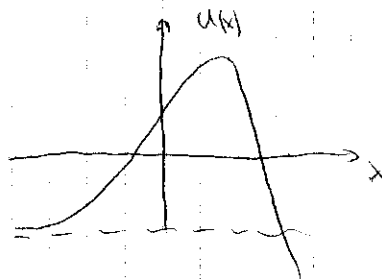
Elérhető a felt. $\frac{1}{k} \int_0^L \sqrt{2m(E - U(x))} dx = n\pi$ vagy $L = n \frac{\lambda}{2}$

transzmisszió pl. körösök (a fennsíkban keresztül áthalad.)
átmenet

hidrogénizáció



hills el. tér



$$U_{\text{hills}} = -e \cdot E \cdot x$$

Elemi reprezentációk

Ha adott rendszer adott időben állapota Hilbert térbeli
hull. f.-ek

$$\text{Ha } \hat{F} = \hat{F}^+ \text{ sz. } \Psi_-, \Psi_+$$

$$\Psi = \sum_n a_n \Psi_n + \int a_F \Psi_F dF$$

Hilbert tere gördük a Dirac jelöléssel

$$|\Psi\rangle = \sum_n a_n |\Psi_n\rangle + \int a_F |\Psi_F\rangle dF$$

$\uparrow$
 $|F_n\rangle$

$\uparrow$
 $|F\rangle$

jelölés

$$a_n = \langle F_n | \Psi \rangle$$

$$a_F = \langle F | \Psi \rangle$$

* Dirac elveztető elhelyezése

$\langle F | \Psi \rangle$ jellemzi az áll.-ot az $|F\rangle$ basisban

$\langle F | \Psi \rangle$ a koordinátákat jelenti

A ketvejelű reprezentáció a basisvektorokhoz az az az egyértelműt jelenti.

* Basisvektorok ortogonálisak, teljes rendszert alkotnak

$$\langle F | F' \rangle = \begin{cases} \delta_{FF'} \\ \delta(F-F') \end{cases}$$

$$\hat{I} = \sum_F |F\rangle \langle F|$$

$$\hat{I} |\Psi\rangle = \sum_F |F\rangle \langle F | \Psi \rangle = \sum_F a_F |F\rangle = |\Psi\rangle$$

A bázis - az országvektorok

$|\psi\rangle \rightarrow$ országvektor

Hogyan kapjuk meg $|\psi\rangle$ M reprezentációját?

$$\langle M | \psi \rangle = \sum_F \langle M | F \rangle \langle F | \psi \rangle$$

↑
transzformáció

↑
F repr. - lili
bázis

Fontos!

$$\langle F | \psi \rangle = \sum_M \underbrace{\langle F | M \rangle}_{\langle M | F \rangle^*} \langle M | \psi \rangle$$

Shorthand F repr.

$$\begin{aligned} \langle \psi | \phi \rangle &= \sum_F \langle \psi | F \rangle \langle F | \phi \rangle \\ &= (\dots) \begin{pmatrix} \vdots \\ \vdots \\ \vdots \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Operátorok hatásele reprezentációk

Koord. repr. $\hat{A} \psi(q) = \varphi(q)$

$$\hat{A} \langle q | \psi \rangle = \langle q | \varphi \rangle$$

$$\langle q | \psi \rangle = \sum_{F'} \underbrace{\langle q | F' \rangle}_{\varphi} \underbrace{\langle F' | \psi \rangle}_{\varphi}$$

lemma $\langle F|q \rangle$ - is:

$$\sum_F \int dq \langle F|q \rangle \hat{A}(q|F) \langle F|\psi \rangle =$$

$$= \sum_F \int dq \langle F|q \rangle \langle q|F \rangle \langle F|\psi \rangle$$

$$\langle F|\hat{A}|F \rangle \langle F|\psi \rangle = \langle F|\psi \rangle$$

$\hat{A}$ is lat. or F repr.-lan

$$\hat{A} \rightarrow \left(\langle F|\hat{A}|F \rangle \right) \quad \left(\quad \right) \left(\quad \right) = \left(\quad \right)$$

$\hat{A}$ hermitian $\Rightarrow \langle F|\hat{A}|F \rangle$ is real

is $\hat{A}$ matrix in repr.-lan?

$$\langle M|\hat{A}|M \rangle = \sum_{F,F''} \underbrace{\langle M|F \rangle}_{\substack{F \rightarrow M \\ \text{tr. matrix}}} \underbrace{\langle F|\hat{A}|F'' \rangle}_{\substack{F \text{ repr.-lat.} \\ \text{matrix}}} \underbrace{\langle F''|M \rangle}_{\substack{M \rightarrow F \text{ tr.} \\ \text{matrix}}}$$

is $\hat{A}, \hat{B}$ op. matrices?

$$\langle F|\hat{A}\hat{B}|F \rangle = \sum_{F''} \langle F|\hat{A}|F'' \rangle \langle F''|\hat{B}|F \rangle$$

$$\left(\hat{A}\hat{B} \right) = \left(\hat{A} \right) \cdot \left(\hat{B} \right)$$

Általános $\langle N | \hat{A} | \Psi \rangle = \left(\begin{pmatrix} \end{pmatrix} \right) \left(\begin{pmatrix} \end{pmatrix} \right) \left(\begin{pmatrix} \end{pmatrix} \right)$

Sajátérték számítás

Koord. repr. $\hat{A} \Psi_A(q) = A \Psi_A(q)$

F repr. $\sum_{F'} \langle F | \hat{A} | F' \rangle \langle F' | \Psi_A \rangle = A \langle F | \Psi_A \rangle$

$= \sum_{F'} A \delta_{FF'} \langle F' | \Psi_A \rangle$

$\sum_{F'} (\langle F | \hat{A} | F' \rangle - A \delta_{FF'}) \langle F' | \Psi_A \rangle = 0$

A mátrix s. érté. egyenlete

Mostan $\text{Det} (\langle F | \hat{A} | F' \rangle - A \delta_{FF'}) = 0$

azaz határozza meg az A sajátértékeket

A s. érté. számítás $\equiv$ mátrix diagonalizálása

az. $|\Psi_A\rangle$ esetén

$\langle \Psi_A | \hat{A} | \Psi_A \rangle = \delta_{AA'} A$

$\langle M | \hat{A} | M' \rangle = \sum_{F, F'} \langle M | F \rangle \langle F | \hat{A} | F' \rangle \langle F' | M' \rangle$

$\left(\begin{pmatrix} \end{pmatrix} \right) = \left(\begin{pmatrix} \end{pmatrix} \right) \left(\begin{pmatrix} \end{pmatrix} \right) \left(\begin{pmatrix} \end{pmatrix} \right)$

$S(F \rightarrow M)$

$S(M \rightarrow F)$

$$S(F \rightarrow M) S(M \rightarrow F) = 1$$

$$S(M \rightarrow F) = S^{-1}(F \rightarrow M)$$

$$S(M \rightarrow F) = S^{-1}(F \rightarrow M)$$

S unitary matrix

Operations rules

$$\hat{A}' = \hat{S} \hat{A} \hat{S}^{-1} \quad \hat{S} \hat{S}^\dagger = 1$$

Mi van függ a repr.-tól?

a) $\hat{A}$ lin. hermitikus op.

b) a kereselődik $[(\hat{A}, \hat{B}) = i\hat{C}]$

c) szimmetrikus

d) algebrai összefüggések

e) a struktúra

Legegyszerűbb a kereselődik

Kelemen-tétel

$$\langle \hat{p}_i | \hat{p}_k \rangle = \frac{k}{i} \delta_{ik} \quad i, k = 1, \dots, 3$$

minden Hilbert-térben abszolút

unitér ekvivalens

ts allg. id. u. invers. a. bew.

(A) Schr. Rep

$$\Psi(q,t) = \hat{S}(t) \cdot \Psi(q)$$

$$\uparrow \\ t=0 \text{ f.w.} \rightarrow \hat{S}(0) = 1$$

$$\langle \Psi | \Psi \rangle = \langle \hat{S} \Psi | \hat{S} \Psi \rangle \Rightarrow \hat{S}^\dagger \hat{S} = 1 \quad \text{unter}$$

Hi $\hat{S}$?

ts id. f.w. Sch. ergibt beides

$$\left(i \hbar \frac{\partial \hat{S}(t)}{\partial t} - \hat{H} \hat{S}(t) \right) \Psi(q) = 0$$

$$\text{wegen } i \hbar \frac{\partial \hat{S}}{\partial t} = \hat{H} \hat{S}$$

$$\text{Formal m.: } \hat{S}(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t}$$

ts operator. id. f.w. bew.

(B) Heisenberg Rep

ts allg. f.w. id. f.w. u. operator. id. f.w. bew.

Legen a. Sch. Rep $\Psi_S(q,t)$

$$\Psi_H(q) = \hat{S}^{-1}(t) \Psi_S(q,t) = \Psi_S(q,0)$$

Unter transformiert wird (operator u. f.w.), eig.

$$\hat{F}_H(t) = \hat{S}^{-1}(t) \hat{F}_S \hat{S}(t)$$

$$\hat{F}_H(0) = \hat{F}_S(0)$$

Wie $\hat{F}_{H+}(t)$ identifizieren?

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

$$\frac{d \hat{F}_{H+}(t)}{dt} = \left(\frac{d}{dt} \hat{S}^{-1} \right) \hat{F}_S \hat{S} + \hat{S}^{-1} \hat{F}_S \frac{d \hat{S}}{dt} =$$

$$= \frac{i}{\hbar} \hat{H} \underbrace{\hat{S}^{-1} \hat{F}_S \hat{S}}_{\hat{F}_{H+}} + \hat{S}^{-1} \hat{F}_S \left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H} \right) \hat{S} =$$

$\uparrow \quad \uparrow$
 Krampfstrich

$$= -\frac{i}{\hbar} [\hat{F}_{H+}, \hat{H}]$$

$$\hat{F}_{H+}(t+\tau) = e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H} \tau} \hat{F}_{H+}(t) e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} \tau}$$

Also $[\hat{F}_{H+}, \hat{H}] = 0 \rightarrow \hat{F}_{H+}$ ist über "stabile" es $\hat{F}_{H+} = \hat{F}_S$

c. Kälvin-Helmholtz (Dense) kör

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V} \leftarrow \text{Kälvin-Helmholtz}$$

$$\hat{S}_K(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 t}$$

$$\Psi_K(q, t) = \hat{S}_K^{-1}(t) \Psi_S(q, t)$$

$$\Psi_S(q, t) = \hat{S}_K(t) \Psi_K(q, t) \quad \text{heavily a Schr. eq. be}$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \left(e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 t} \Psi_K(q, t) \right) = \hat{H} e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 t} \Psi_K(q, t)$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi_K(q, t) = \underbrace{e^{+\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 t} \hat{V} e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 t}}_{\hat{V}_K} \Psi_K(q, t)$$

$$i\hbar \frac{\partial \Psi_K}{\partial t} = \hat{V}_K \Psi_K$$

Heisenberg

$$\frac{d\hat{F}_K}{dt} = -\frac{i}{\hbar} [\hat{F}_K, \hat{H}_0]$$

$$\hat{H}_{0K} = \hat{H}_0$$

E, t. Kälvin-Helmholtz reláció

$$\Delta E \Delta t \geq \frac{\hbar}{2} \quad \text{be mi lehet } \Delta t \text{ jelentése}$$

Heisenberg kör

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{A} \rangle = \frac{d}{dt} \langle \Psi_H | \hat{A}_H | \Psi_H \rangle = \langle \Psi_H | \frac{d\hat{A}_H}{dt} | \Psi_H \rangle =$$

$$= -\frac{i}{\hbar} \langle \Psi_H | [\hat{A}_H, \hat{H}] | \Psi_H \rangle = -\frac{i}{\hbar} \langle [\hat{A}_H, \hat{H}] \rangle$$

$\hat{A}_H$ és $\hat{H}$ -ra átlagolva a ket. rel.

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

Def. $\tau_A = \frac{\Delta A}{\left| \frac{d\langle \hat{A} \rangle}{dt} \right|}$

τ_A idő kell ahhoz, hogy $\langle \hat{A} \rangle$ ΔA -nyit változzon meg

Így $\Delta E \cdot \tau_A \geq \frac{\hbar}{2}$

τ_A függ az állapotól és $\hat{A}$ -tól is

Def. $\tau = \min \tau_A$ Így $\tau \cdot \Delta E \geq \frac{\hbar}{2}$

Pl. Stacion. állapot

$$\frac{d\langle \hat{A} \rangle}{dt} = 0 \rightarrow \tau = \infty \text{ és } \Delta E = 0$$

Pl. Bohr'ské

$$\Psi(t) = \Psi(0) \cdot e^{-\frac{i}{\hbar} E_0 t - \frac{\Gamma}{2\hbar} t}$$

$$|\Psi|^2 \sim e^{-\frac{\Gamma}{\hbar} t}$$

$$\Gamma = \frac{\hbar}{\tau} \quad \Delta E \cdot \tau \geq \hbar$$

$$E_{\text{complex}} = E_0 - i \frac{\Gamma}{2}$$

$$\int \Psi(t) e^{\frac{i}{\hbar} E t} dt \sim \frac{\hbar}{i} \cdot \frac{1}{E - E_0 + i \frac{\Gamma}{2}}$$

Perturbationsmethode

1. Haupttheorem pert. Stam.

Beschreibt energien, eigenwertes und eigenfunktionen.

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V} \leftarrow \begin{array}{l} \uparrow \\ \text{perturbations,} \end{array} \begin{array}{l} \text{unabhängig} \\ \text{enthalten} \end{array} \begin{array}{l} \text{keine} \\ \text{systemeigenen} \end{array} \begin{array}{l} \text{eigenwert} \\ \text{eigenfunktionen} \end{array}$$

Nun erfolgt eset

$$\hat{H}_0 \psi_n^{(0)} = E_n^{(0)} \psi_n^{(0)}$$

↑ ↑
eigen

$$(\hat{H}_0 + \lambda \hat{V}) \psi = E \cdot \psi$$

λ als parameter

oder $\lambda=1$

$$\psi = \sum_n c_n \psi_n^{(0)}$$

$$\sum_n c_n (\hat{H}_0^{(0)} + \lambda \hat{V}) \psi_n^{(0)} = \sum_n c_n E \psi_n^{(0)} \quad / \quad \text{Behandlung} \quad \psi_n^{(0)} \text{ ist}$$

$$\sum_n c_n (E_n^{(0)} \delta_{kn} + \lambda \langle k | \hat{V} | n \rangle) = \sum_n c_n E \delta_{kn}$$

$$(E - E_k^{(0)}) c_k = \lambda \sum_m \langle k | \hat{V} | m \rangle c_m$$

$$E = E_{\bar{n}}^{(0)} + \lambda E_{\bar{n}}^{(1)} + \lambda^2 E_{\bar{n}}^{(2)} + \dots$$

$$c_n = \delta_{n\bar{n}} + \lambda c_n^{(1)} + \lambda^2 c_n^{(2)} + \dots$$

$$(E_{\bar{n}}^{(0)} + \lambda E_{\bar{n}}^{(1)} + \dots - E_k^{(0)}) (\delta_{k\bar{n}} + \lambda c_k^{(1)} + \dots) =$$

$$= \lambda \sum_m \langle k | \hat{V} | m \rangle (\delta_{m\bar{n}} + \lambda c_m^{(1)} + \dots)$$

λ különböző hatványainak együtthatóit egyenként

$k = \bar{n}$

$$\lambda^1: E_{\bar{n}}^{(1)} = \langle \bar{n} | \hat{V} | \bar{n} \rangle$$

$$\lambda^2: E_{\bar{n}}^{(2)} + E_{\bar{n}}^{(1)} c_{\bar{n}}^{(1)} = \sum_m \langle \bar{n} | \hat{V} | m \rangle c_m^{(1)}$$

$k \neq \bar{n}$

$$\lambda^1: (E_{\bar{n}}^{(0)} - E_k^{(0)}) c_k^{(1)} = \langle k | \hat{V} | \bar{n} \rangle \quad *$$

$$\lambda^2: E_{\bar{n}}^{(1)} c_k^{(1)} + (E_{\bar{n}}^{(0)} - E_k^{(0)}) c_k^{(2)} = \sum_m \langle k | \hat{V} | m \rangle c_m^{(1)}$$

1. közelítés $E = E_{\bar{n}}^{(0)} + \langle \bar{n} | \hat{V} | \bar{n} \rangle$

$$\psi = \psi_{\bar{n}}^{(0)} + \sum_{m \neq \bar{n}} \frac{\langle \bar{n} | \hat{V} | m \rangle}{E_{\bar{n}}^{(0)} - E_m^{(0)}} \psi_m^{(0)} + c_{\bar{n}}^{(1)} \cdot \psi_{\bar{n}}^{(0)}$$

Normálás $\langle \psi | \psi \rangle = 1$

$$\underbrace{\langle \Psi | \Psi \rangle}_1 = \underbrace{\langle \psi_{\vec{n}}^{(0)} | \psi_{\vec{n}}^{(0)} \rangle}_1 + 2 \sum_{\vec{n} \neq \vec{n}} \operatorname{Re} \frac{\langle \vec{m} | \hat{V} | \vec{n} \rangle}{E_{\vec{n}}^{(0)} - E_{\vec{m}}^{(0)}} \underbrace{\langle \psi_{\vec{n}}^{(0)} | \psi_{\vec{m}}^{(0)} \rangle}_0$$

$$+ 2 \operatorname{Re} c_{\vec{n}}^{(1)} \underbrace{\langle \psi_{\vec{n}}^{(0)} | \psi_{\vec{n}}^{(0)} \rangle}_1$$

$$\Rightarrow \operatorname{Re} c_{\vec{n}}^{(1)} = 0$$

Nivel ψ första beteckningen, 'isolerat' $c_{\vec{n}}^{(1)} = 0$