

Kvantumfizika vizsgatétel-kidolgozás

Mivel én csináltam ezt, ezért nyilván van benne hiba, hiányosság, talán nem is ezt kéne elmondani a tételnél... tehát a jegyzetet is tanuld azért, legyél okos úgy egészében. Ennek az anyagnak a visszabüfögése még nem jelent 5-öst (sőt, mást se jelent), meg is kell érteni, de tényleg.

A Coulomb problémát jó elmondani a H atom spektrumánál is. Ha egyszer már úgyis megtanultad, süsd el mind több helyen!

Az utolsó tételt nem értem. De a tanár szerint az is nagyon jó és szép.

A gitár (nemzetközi szó a spanyol guitarra-ból, ez pedig – arab közvetítéssel – a görög kithara-ból, görög lantféleség) a húros hangszerek, ezen belül a pengetős hangszerek csoportjába tartozó hangszer.

Megszólaltatása pengetővel, illetve ujjal történik.

Általában hat húros, ezek hangolása E-A-d-g-h-e'. Mint láthatjuk, ezen húrok nagy része kvart távolságra van egymástól, kivétel: g-h, ami nagyterc, így a gitáros több mint három oktáv hangterjedelem fölött rendelkezik.

A gitár kivitele szerint lehet klasszikus, akusztikus, elektromos, vagy elektro-akusztikus. A gitár napjainkra hihetetlen népszerűsége tette szert. Szinte minden zenei stílusban képviselteti magát valamilyen formában. Ez leginkább sokoldalúságának köszönhető, hiszen az egyes gitárok típusuktól és zenei stílustól függően betölthetnek szólista szerepet, de megállják helyüket a ritmusszekcióban is. Gitáron éppúgy előadhatók klasszikus darabok, mint napjaink modern popzenéi, sőt a rock például elképzelhetetlen lenne a hangszer megléte nélkül.

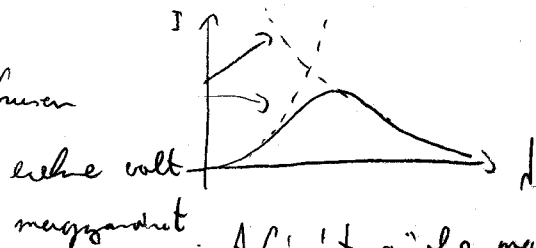


A gitárkészítés – bár napjainkban már tömeggyártásról beszélünk – megőrizte a kézműves hangszerkészítők hagyományait. A gitárok fejlődése napjainkban is tart köszönhetően annak, hogy a zenészek és mérnökök egymással karöltve aknázzák ki a hangszer felépítésében rejlő lehetőségeket. Jó példa erre az elektromos gitárok megjelenésében úttörő szerepet vállaló Leo Fender, aki rádiómérnök tudását kamatoztatva vett részt a mágneses hangszedő kifejlesztésében, illetve a zenész Les Paul, aki saját zenei elvárásainak megfelelően alakította ki hangszerét. [Forrás: wiki]

1/ Kvantummechanika előzménye és háttere

voltak jelenségek melyeket a klasszikus fizika nem írt le megmagyarázhatóan

- hőmérsékleti sugárzás: klasszikusan



A hirtét görbe magyarázható, ha $E = h\nu$

- fotoeffektus: a foton impulzusát rendelhető részecske: $p = \frac{E}{c} = \frac{h\nu}{c} = \frac{h}{\lambda}$

$$p = \frac{h}{\lambda}$$

- Compton effektus

Bohr: korlátozott modell (de elismerték, ösztönöz)

De Broglie: az e^- hullám is $\Rightarrow$ de Broglie: $\lambda = \frac{h}{p} \Rightarrow \frac{h}{m v} = \frac{h}{p}$

Heisenberg: operátorok a mennyiségek és a rajta lévő a mért eredmény

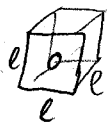
Schrödinger: mat. modell (hullámok)

AQM a mikroreális tárgyaláshoz alkalmas. Alapfeltevése, hogy egy rendszer minél kisebb fizikai jelölésének megismeréséhez azt a minél nagyobb befolyásolást, és minél nagyobb változtatást várja.

Hőm. sugárzás: minden test kibocsát és elnyel EM sugárzást, mely anyagi minőség és T függő. Anyagi minőségét meghatározza, hogy azaz. felhő test legyen. Először csak T függő. Az azaz. felhő test minőségét jelölje el!

Wien: "fénysugárzó" és kibocsátó lefolyás ^{analógia} kibocsátó λ -khoz adott T-n állandó.

Da σ fehlerhaft idealis. vereinf., auch oben $\hookrightarrow$ l. oben $\hookrightarrow$ (peremfeldtheorie):



$$\text{div } \underline{B} = 0 \quad \text{mit } \underline{B} = \underline{\dot{D}} + \frac{\partial \underline{D}}{\partial t}$$

$$\text{div } \underline{D} = \begin{matrix} S \\ 0 \end{matrix} \quad \text{mit } \underline{E} = \underline{\nabla} \frac{\partial \Phi}{\partial t}$$

$$\underline{B} = 0 \quad \underline{\dot{D}} = 0 \quad \text{ferromagnetisches}$$

$$\underline{D} = \epsilon \underline{E}$$

$$\underline{B} = \frac{1}{\mu} \underline{H}$$

$$\Downarrow \quad \square \underline{E} = 0 \Leftrightarrow \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \underline{E} = \Delta \underline{E} \quad \text{H-wa. ungenau} \quad \underline{E}(x, y, z, t) = \begin{pmatrix} E_x \\ E_y \\ E_z \end{pmatrix} \cdot E(t)$$

peremfeld:

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

$$H_x = 0 \quad \text{für } x = 0 \vee l$$

$$E_y = 0 \quad \text{für } \begin{cases} x = 0 \vee l \\ z = 0 \vee l \end{cases}$$

$$H_y = 0 \quad \text{für } y = 0 \vee l$$

$$E_z = 0 \quad \text{für } \begin{cases} x = 0 \vee l \\ y = 0 \vee l \end{cases}$$

$$H_z = 0 \quad \text{für } z = 0 \vee l$$

A. Ladungsfeldtheorie $\Rightarrow \square E = 0$ -t. beliebig:

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

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

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

$$\underline{q}_n = (q_{n,x}, q_{n,y}, q_{n,z}) \quad \underline{n} = (n_x, n_y, n_z) \quad \underline{q}_n = 0$$

$$\text{div } \underline{D} = S = \text{div } \epsilon \underline{E} = 0 \quad \text{div } \underline{E} = 0 \Rightarrow \sum_n (q_{n,x} n_x + q_{n,y} n_y + q_{n,z} n_z) = 0$$

$$\underline{q}_n = q_n^{(1)} \underline{e}_n^{(1)} + q_n^{(2)} \underline{e}_n^{(2)} (+ q_n^{(3)} \underline{e}_n^{(3)})$$

$$\frac{1}{c^2} \ddot{q}_n^{(1)} + \left[\left(\frac{n_x \pi}{l} \right)^2 + \left(\frac{n_y \pi}{l} \right)^2 + \left(\frac{n_z \pi}{l} \right)^2 \right] q_n^{(1)} = 0$$

polarisation
index

Schwingung

$$v_n^2 = \left(\frac{c}{2\pi l} \sqrt{n^2} \right)^2$$

z-es ist erst

$$\ddot{q}_n^{(1)} + \frac{4\pi^2 c^2}{l^2} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2) q_n^{(1)} = 0 \rightarrow q_n^{(1)} = A_n^{(1)} \cos(2\pi v_n t + \delta)$$

$$N = \frac{2 \ell^3}{c^3} \nu_n$$

$$2. \frac{4}{3} n^3 \pi = \overline{N(\nu)} = 2 \frac{4}{3} \left(\frac{2 \ell^3}{c^3} \nu_n \right)^3 \pi = \frac{8 \ell^3}{3 c^3} \nu_n^3 \pi = \frac{8 \pi V}{3} \frac{\nu_n^3}{c^3}$$

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

let $h\nu$ werden $h\nu$ in E-ben.

$$U(\nu) d\nu = dN(\nu) \overline{\epsilon(\nu)} \quad \text{klam. für: } \overline{\epsilon(\nu)} = \frac{1}{2} h\nu = h\nu$$

$$\frac{1}{V} U(\nu) = \frac{8 \pi}{c^3} h\nu^2 \quad \text{Rayleigh - Jeans Formel}$$



rem $\nu \rightarrow \infty$, meist divergieren,

$$\text{Ha } \epsilon_n(\nu) = n \epsilon_0(\nu) \quad n \in \mathbb{N} \quad (\text{Planck'sche Quantenhypothese})$$

$$\overline{\epsilon_n(\nu)} = \frac{\sum_{n=0}^{\infty} \epsilon_n e^{-\frac{\epsilon_n}{kT}}}{\sum_{n=0}^{\infty} e^{-\frac{\epsilon_n}{kT}}} = \frac{\epsilon_0 \sum_{n=0}^{\infty} n e^{-\frac{\epsilon_n}{kT}}}{\frac{1 - e^{-\frac{\epsilon_0}{kT}}}{1 - e^{-\frac{\epsilon_0}{kT}}}}$$

$$\frac{1}{V} \frac{dU}{dT} = \frac{8 \pi}{c^3} h\nu^2 \quad \text{Flüssigkeit}$$

aus thermodynamisch wenn
engest, in $T \rightarrow 0$ gehen $\rightarrow 0$ hde

$$e^{-\frac{\epsilon_n}{kT}} = \left(e^{-\frac{\epsilon_0}{kT}} \right)^n = q^n$$

$$\sum_{n=0}^{\infty} n q^n = \frac{q}{1-q^2}$$

$$(1-q)^2 (q + 2q^2 + 3q^3 + \dots) = q + 2q^2 + 3q^3 + \dots - 2q^2 - 4q^3 - 6q^4 - \dots = q + 2q^4 + 3q^5 = q + n q^{n+2}$$

$$(1-q)^2 (q + 2q^2 + 3q^3 + \dots) = \frac{q + n q^{n+2}}{(1-q)^2} \quad q < 1 \Rightarrow n \rightarrow \infty \text{ gehen} = \frac{q}{(1-q)^2}$$

$$\overline{\epsilon_n(\nu)} = \epsilon_0 \left(1 - e^{-\frac{\epsilon_0}{kT}} \right) \frac{e^{-\frac{\epsilon_0}{kT}}}{(1 - e^{-\frac{\epsilon_0}{kT}})^2} = \frac{\epsilon_0 e^{-\frac{\epsilon_0}{kT}}}{1 - e^{-\frac{\epsilon_0}{kT}}} \Rightarrow \frac{1}{V} U(\nu) = \frac{8 \pi \nu^2}{c^3} \frac{\epsilon_0}{e^{\frac{\epsilon_0}{kT}} - 1}$$

$$\text{ha } \epsilon_0 = h\nu \quad \frac{1}{V} U(\nu) = \frac{8 \pi h}{c^3} \frac{\nu^3}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1} \quad \checkmark \quad \text{Planck Formel}$$

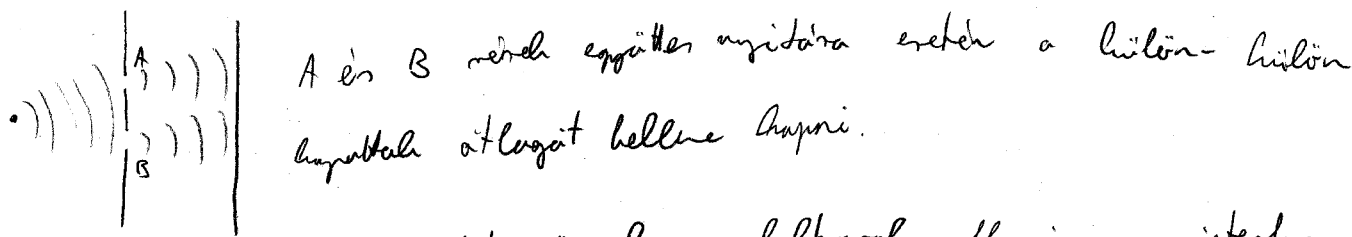
$$U = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{V} U(\nu) d\nu = \dots \propto T^4 \quad \text{Stefan-Boltzmann Formel. Wien - felle elektromagnetische Strahlung}$$

$$\nu_{\text{max}} = \frac{kT}{h} \cdot \text{konstante}$$

Riemann-Zeta

2/ A kvantummechanika alapjai (határoztalanosság elv, valószínűségi hullámfüggvények, szuperpozíció)

Davidson - gemma: e^- interferencia. Ha e^- mindig véletlenszerűen válik, akkor az



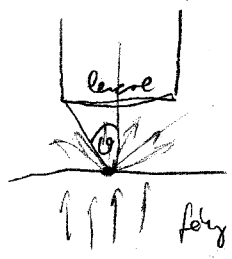
A és B rések együttes mozgására érkező a hullón-hullón
 hullámok által okozott hullámcsoporth.

Ha egyenlő távolságra van elhelyezve, akkor is van interferencia $\Rightarrow$

egy e^- -nek is van hullám tulajdonsága, nincs a pályájának értelme, nem $x(t)$ sem $y(t)$.

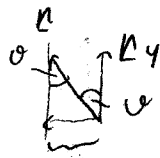
Körültekintés olyan valószínűségi eloszlás, melyet "mérés" és az e^- -nek költésért,
 megvalósított állapotot. QM kimondja, hogy az a hirtelen elvileg nem lehet 0.

Amit tekinthetünk: kvantált mérési eredményből következtetünk a jelenlegi állapotra,
 1-1 mérés a hullámhull. becsült feltevést adja. A kapott eredmény val. eloszlás



$$\lambda = \frac{h}{p}$$

$$p = \frac{h}{\lambda}$$



$$|p_x| = p \sin \theta = \frac{h}{\lambda} \sin \theta$$

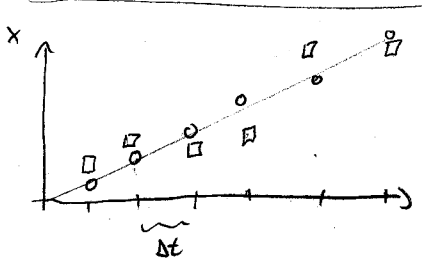
Kellatárolás:

$$\Delta x = \frac{\lambda}{\sin \theta}$$

és mivel pontosság,
 annál nagyobb a zavar
 hirtelen.

$$-\frac{h}{\lambda} \sin \theta \leq p_x \leq +\frac{h}{\lambda} \sin \theta$$

$$\Delta p \Delta x \approx \frac{h}{\lambda} \sin \theta \frac{\lambda}{\sin \theta} = h \quad \text{ugyanígy } e^- \text{ na}$$



o kis pontosság

□ nagy pontosság: jól látható az eredmények

$$\lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\Delta x}{\Delta t}$$

impulzus és hely egyenre nem mérhető lehet.
 pontosság

Szabad részre hullámfüggvény: komplex, egyértelmű, folytonosan differenciálható függvény, az. határozatlan integrál, $\psi(x,t)$.

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

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

Dawson - generálási elv alapján de Broglie: $\psi(x,t) = A \cdot e^{i(\hbar k x - \omega t)}$

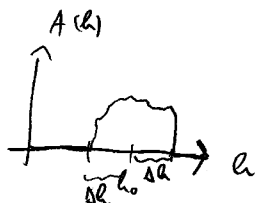
$$\hbar = \frac{2\pi \hbar}{\lambda} = \frac{2\pi \hbar}{\hbar k} = \frac{\hbar}{k}$$

diszkrét ψ_1 és ψ_2 egy rendszer lehetséges állapotainak hullámfüggvénye, lineáris kombinációja is. ψ_1, ψ_2 impulzusok, a kettőt rendszer impulzusra vizsgáljuk. $\psi = a_1 \psi_1 + a_2 \psi_2$, akkor

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

folytonos

$$\psi(x,t) = \int_{\hbar_0 - \Delta \hbar}^{\hbar_0 + \Delta \hbar} A(\hbar) e^{i(\hbar x - \omega t)} d\hbar$$



$$\hbar = \hbar_0 + \hbar'$$

$$\omega = \omega(\hbar) = \omega_0 + \left. \frac{d\omega}{d\hbar} \right|_{\hbar_0} (\hbar - \hbar_0) + \dots$$

$$\psi(x,t) \approx A(\hbar_0) e^{i(\hbar_0 x - \omega_0 t)} \int_{-\Delta \hbar}^{+\Delta \hbar} e^{i(x - t \frac{d\omega}{d\hbar}|_{\hbar_0})(\hbar - \hbar_0)} d(\hbar - \hbar_0)$$

$$e^{i(\hbar x - \omega t)} = e^{i(\hbar_0 x - \omega_0 t - t \frac{d\omega}{d\hbar} (\hbar - \hbar_0))} =$$

$$e^{i(\hbar_0 x - \omega_0 t)} e^{i(x - t \frac{d\omega}{d\hbar}|_{\hbar_0})(\hbar - \hbar_0)}$$

$$\hbar' = \hbar - \hbar_0$$

$$\hbar = \hbar_0 - \Delta \hbar = \hbar' + \hbar_0 \quad \hbar' = -\Delta \hbar$$

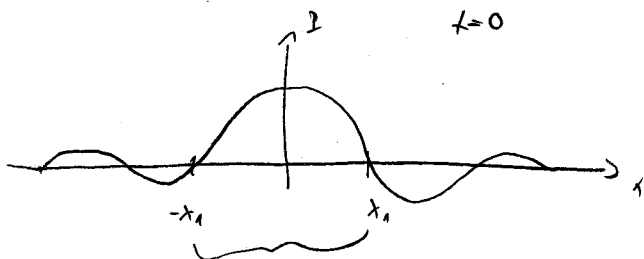
$$d\hbar = d\hbar'$$

$$\psi(x,t) = e^{i(\hbar_0 x - \omega_0 t)} A(\hbar_0) \frac{e^{i(x - t \frac{d\omega}{d\hbar}) \Delta \hbar} - e^{-i(x - t \frac{d\omega}{d\hbar}) \Delta \hbar}}{i(x - t \frac{d\omega}{d\hbar})}$$

$$\psi(x,t) = 2 A(\hbar_0) e^{i(\hbar_0 x - \omega_0 t)} \frac{\sin[(x - t \frac{d\omega}{d\hbar}|_{\hbar_0}) \Delta \hbar]}{x - t \frac{d\omega}{d\hbar}|_{\hbar_0}}$$

$$v_{cs} := \frac{d\omega}{d\hbar} = \frac{\hbar}{m} \hbar = \frac{\hbar}{m}$$

$$v_f := \frac{\omega}{\hbar} = \frac{\hbar \hbar}{2m} = \frac{\hbar}{2m}$$



hullám kiterjedése $2x_1 = \Delta x$

$$x_1 = \frac{\hbar}{\Delta \hbar} \quad \Delta t = \frac{2\pi}{\Delta \omega}$$

$$\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left(a + \frac{i \hbar k}{m a} t \right)^{-1/2} e^{-\frac{x^2}{2(a^2 + \frac{i \hbar k}{m} t)}} \rightarrow \text{Gauss}$$

enne $\Delta p \Delta x = \frac{\hbar}{2}$ minimális $\Delta x \Delta p = \frac{2\pi}{\Delta \hbar} \hbar \Delta \hbar = 2\pi \hbar$

3/ kvantummechanika alapjai (hullámfun. valószínűségi értelmezése, lineáris algebra bevétele)

Darwin - Genet: e^- elektron 141²-tel arányos. Mivel egy e^- t lehet kimutatni, így nem valószínűségi, hanem megfigyelési valószínűségi jelent.

$$P(x \text{ helyen van}) \sim \underbrace{|\psi(x)|^2}_{\text{valószínűségi sűrűség}} d^3x$$

$$\text{valószínűségi sűrűség, ha } \int |\psi(x)|^2 d^3x = 1$$

portahatáron $P \sim |\psi(x_1, x_2, \dots)|^2 d^3x_1 d^3x_2 \dots$, valószínűségi sűrűség, ha

$$\int |\psi(x_1, x_2, \dots)|^2 d^3x_1 d^3x_2 \dots = 1$$

Ha $\|\psi\| \neq 1$ de $\psi \in L^2 \Leftrightarrow \int |\psi|^2 d^3x = N \in \mathbb{R}^+ \Rightarrow \tilde{\psi} := \frac{1}{\sqrt{N}} \psi$ már normált.

Ha nem normálható, akkor még megfigyelési valószínűségi analízis értelmezhető: $\frac{|\psi(q_1^n, q_2^n, \dots)|^2}{|\psi(q_1^n, q_2^n, \dots)|^2}$

Egy részecske nem normálható. Ezért vegyük L oldalú dobozt periodikus határfeltétellel

$$\psi_{\underline{k}}(\underline{x}) = \sqrt{\frac{1}{V}} e^{i \underline{k} \cdot \underline{x}} \quad \underline{k} = \frac{2\pi}{L} \underline{n} \quad \underline{n} = (n_1, n_2, n_3) \in \mathbb{N}^3$$

$\mu = \hbar \underline{k}$ diszkrét impulzusértékek

$$\begin{aligned} \psi(x, y, z) &= \\ &= \psi(x+L, y, z) = \\ &= \psi(x, y+L, z) = \\ &= \psi(x, y, z+L) \end{aligned}$$

$$\int \psi_{\underline{k}'}^*(\underline{x}) \psi_{\underline{k}}(\underline{x}) d^3x = \frac{1}{V} \int e^{i(\underline{k}' - \underline{k}) \cdot \underline{x}} d^3x = \delta(\underline{k}' - \underline{k}) \quad \text{Normált}$$

$\psi_{\underline{k}}(\underline{x})$ -ek teljes ortonormált rendszert alkotnak a periodikus, normált fű. -ek terében.

$$\psi(\underline{x}) = \sum_{\underline{k}} a_{\underline{k}} \psi_{\underline{k}}(\underline{x}) \quad \text{ahol} \quad a_{\underline{k}} = \int_V \psi_{\underline{k}}^*(\underline{x}) \psi(\underline{x}) d^3x$$

Mivel normált: $1 = \int_V \psi^*(\underline{x}) \psi(\underline{x}) d^3x = \int_V \sum_{\underline{k}'} a_{\underline{k}'}^* \psi_{\underline{k}'}^*(\underline{x}) \sum_{\underline{k}} a_{\underline{k}} \psi_{\underline{k}}(\underline{x}) d^3x =$

$$= \sum_{\underline{k}, \underline{k}'} a_{\underline{k}'}^* a_{\underline{k}} \overbrace{\int_V \psi_{\underline{k}'}^* \psi_{\underline{k}}}^{\delta_{\underline{k}' \underline{k}}} = \sum_{\underline{k}} |a_{\underline{k}}|^2 = 1$$

$|a_{\underline{k}}|^2$ a valószínűsége, hogy $\underline{k} = \frac{2\pi}{L} \underline{n}$ értéket kapunk $\psi(\underline{x})$ hullámfüggvényű állapotban a részecske.

A megvalósuló fizikai rendszer hullámfüggvényét kibontás lehet előírni:

lineáris leh

van skalariszat értelmezése, így normát is adhat, $\|\psi\| = \langle \psi | \psi \rangle = \int_V \psi^* \psi dV$

teljes

$f(\underline{r})$: megvalósuló valószínűség, $f(\underline{r}) = \psi^* \psi$ ha $\|\psi\| = 1$

$$\text{Ehhez } \int f(\underline{r}) d^3r = \langle 1 \rangle = \int \psi^* \psi d^3r$$

$$a_{\underline{a}} = \int \psi(\underline{r}) \psi_{\underline{a}}^*(\underline{r}) d\underline{r} \rightarrow |a_{\underline{a}}|^2 \text{ a valószínűség, ha } \hbar = \hbar \text{ -t használ}$$

$$\langle K \rangle = \sum_{\underline{a}} |a_{\underline{a}}|^2 \hbar = \hbar \sum_{\underline{a}} a_{\underline{a}}^* a_{\underline{a}} \hbar \quad \underline{a} \quad \psi_{\underline{a}}(\underline{r}) = -i \nabla \psi_{\underline{a}}(\underline{r})$$

$$\boxed{\langle K \rangle} = \hbar \sum_{\underline{a}} \int \psi^*(\underline{r}) \psi_{\underline{a}}(\underline{r}) d^3r \int \overbrace{\psi_{\underline{a}}^*(\underline{r})}^{i \nabla \psi_{\underline{a}}^*(\underline{r})} \underline{a} \psi(\underline{r}) d^3r =$$

$$= -i \hbar \sum_{\underline{a}} \int \psi^*(\underline{r}') \psi_{\underline{a}}(\underline{r}') (\psi_{\underline{a}}^*(\underline{r}) \nabla \psi(\underline{r}) d^3r d^3r' =$$

$$\psi \nabla (\psi_{\underline{a}}^*) = \nabla (\psi \psi_{\underline{a}}^*) - \psi_{\underline{a}}^* \nabla \psi$$

↑
integrálja a

deriváltak határfeltétel
nulla

$$= -i \hbar \int \psi^*(\underline{r}') \delta(\underline{r} - \underline{r}') \nabla \psi(\underline{r}) d^3r d^3r' \left(\sum_{\underline{a}} \psi_{\underline{a}}(\underline{r}') \psi_{\underline{a}}^*(\underline{r}) \delta(\underline{r} - \underline{r}') \right) \\ = -i \hbar \int \psi^*(\underline{r}) \nabla \psi(\underline{r}) d^3r$$

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

$$\text{pl: lineáris energia } \left\langle \frac{p^2}{2m} \right\rangle = \int \psi^*(\underline{r}) \frac{-\hbar^2}{2m} \Delta \psi(\underline{r}) d^3r = \left[\sum_{\underline{a}} \psi_{\underline{a}}(\underline{r}') \int \psi_{\underline{a}}^*(\underline{r}) \left(\frac{-\hbar^2}{2m} \Delta \right) \psi(\underline{r}) d^3r \right] \\ = \sum_{\underline{a}} \psi_{\underline{a}}(\underline{r}') a_{\underline{a}, \phi} = \phi(\underline{r}')$$

4/ Terlihat menunjukkan operasi, rajat fuggu, rajatlah

Tentukan matriks operator secara analitis, $F \rightarrow \hat{F}$, $F = \langle \hat{F} \rangle = \langle \psi | \hat{F} | \psi \rangle$.

$$\text{Ha } F(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = f_1(r) + f_2(r') \Rightarrow \hat{F} = \hat{f}_1\left(\frac{\mathbf{r}}{r}\right) + \hat{f}_2(\hat{r}') = \int \psi^* \hat{F} \psi d^3r$$

help operators: $\hat{v} = \underline{v}$.

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

$$L_x = -i\hbar (y d_z - z d_y)$$

$$L_z = -i\hbar (z \partial_x - x \partial_z)$$

comp. sphere $\vec{\mu} = \frac{c}{k} \nabla$

$$L_y = -i\hbar (x \partial_y - y \partial_x)$$

Act 1.4.10: linearitas (representatio mea) is unitaritas $\Leftrightarrow R \ni \langle F \rangle = \langle 4 | F | 4 \rangle \equiv$

$$= \langle \psi | P \psi \rangle = \langle P^\dagger \psi | \psi \rangle =$$

$$\hat{\mu}^+ = \hat{\mu}^-$$

periodicities with 0

$$= \langle \psi | P^+ \psi \rangle^* = \langle P^+ \rangle$$

$$\int \psi^*(x) (-i\hbar) \frac{\partial}{\partial x} \psi(x) dx = -i\hbar \int \frac{\partial}{\partial x} [\psi^*(x) \psi(x)] - \psi(x) \frac{\partial}{\partial x} \psi^*(x) dx =$$

$$= i \hbar \int \psi(x) \frac{\partial}{\partial x} \psi^*(x) dx = \int \left(-i \hbar \frac{\partial}{\partial x} \psi(x) \right)^* \psi(x) dx$$

$$(AB)^{\dagger} = B^{\dagger}A^{\dagger} \Leftrightarrow \langle \psi | (AB) \psi \rangle = \langle A^{\dagger} \psi | B \psi \rangle = \langle B^{\dagger} A^{\dagger} \psi | \psi \rangle = \langle (A^{\dagger} B)^{\dagger} \psi | \psi \rangle$$

Wird A, B vertauscht $\rightarrow [A, B] = 0 \Rightarrow AB = (AB)^+$

→ $\frac{AB + BA}{2}$ ist $\frac{AB - BA}{2i}$ äquivalent

$$[v_i, v_h] = 0$$

$$[r_i, r_a] = 0$$

$$[m, n] = 5 \pm 6$$

$$[L_i, L_0] = \epsilon_{ijk} L_k$$

$$[L^2, L_i] = 0$$

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

$\langle (\Delta \hat{F})^2 \rangle$ minimumérték, $\hat{F}$ értéke határozott, ha $\langle \Delta \hat{F}^2 \rangle = 0 = \langle \psi | \Delta \hat{F}^2 | \psi \rangle = \langle \psi |$

$\hat{F}$ értéke a sajátértékkel leírható,

$$= \langle \Delta \hat{F} \psi | \Delta \hat{F} \psi \rangle = \| \Delta \hat{F} \psi \|^2 = 0$$

sajátállapotban 1, hogy a sajátérték létezik

$$\hat{F} \psi = \langle F \rangle \psi$$

A spektrum lehet folytonos és diskret.

ψ sajátállapota $\hat{F}$ -nek $\langle F \rangle$ v.é-ként

Degenerált, ha ψ -k egy s.d.-ben vannak.

Endre az állapotok a sajátállapotok bázisát képezik:

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

$$\hat{F} \psi_m = F_m \psi_m$$

helyoperátor: $\hat{r} \rightarrow r$

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

$$\Rightarrow \psi(r) = \delta(r - r)$$

$$r \psi(r)$$

$$\left. \begin{aligned} \langle \psi_n | \hat{F} \psi_m \rangle &= F_m \langle \psi_n | \psi_m \rangle \\ \langle \hat{F} \psi_n | \psi_m \rangle &= F_n \langle \psi_n | \psi_m \rangle \end{aligned} \right\} \begin{aligned} &\text{ha } F_n \neq F_m \\ &\Downarrow \\ &\langle \psi_n | \psi_m \rangle = 0 \end{aligned}$$

imp. op. $\hat{p}_x \psi(x) = p_x \psi(x)$

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \psi(x)$$

$$\Rightarrow \psi(x) = A \cdot e^{\frac{i}{\hbar} p_x x} \text{ racionális vagy nem normalizálható}$$

nem elem az L^2 -ben

impulzusmomentum: $L_z = -i\hbar (x \partial_y - y \partial_x) = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \phi}$

$$\frac{\partial}{\partial \phi} \psi = \frac{i}{\hbar} L_z \psi$$

$$\psi = \sqrt{\frac{1}{2\pi}} e^{im\phi} \quad m = \frac{L_z}{\hbar} \in \mathbb{Z}$$

Dirichlet spektrum értéke: $|\psi\rangle = \sum_n a_n |\psi_n\rangle \quad a_n = \langle \psi | \psi_n \rangle = \sum_n \tilde{a}_n \underbrace{\langle \psi_n | \psi_n \rangle}_{\delta_{nn}} = a_n$

A kv. sajátértékű határ s.f.-ek ortogonálisak. Degenerált (l. nem) lehet a s.d.-ok egy l. d. lin. altérben vannak, melyben valószínűleg ortogonálisak.

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

4/ Folgerung: gelte es anson $\hat{F}|\psi\rangle = F_n|\psi\rangle$ also gilt $\|\psi_n\| = 1$

Es gilt in eigen: $\psi = \int |a_F|^2 \psi_F dF$

$|a_F|^2 dF$ a. verteilung, wo $\langle F \rangle$ entsteht $[F, F+dF]$ -bereich.

$\int |a_F|^2 dF = 1, u. i.$

Normalisierte h.f.ve
 $1 = \langle \psi | \psi \rangle = \left\langle \int a_F \psi_F dF \middle| \int a_{F'} \psi_{F'} dF' \right\rangle = \iint a_F^* a_{F'} \overbrace{\langle \psi_F | \psi_{F'} \rangle}^{\delta_{F'F}} dF dF' = \int |a_F|^2 dF$

Außerdem ergibt sich formal a. maßnahmen: $\hat{G}$ in $\hat{F}$

$\psi = \int a_F \psi_F dF = \int a_G \psi_G dG$

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

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

$a_G = \langle \psi_G | \psi \rangle =$

$= \langle \psi_G | \int |\psi_F\rangle \langle \psi_F| dF \psi \rangle =$

$= \int \langle \psi_G | \psi_F \rangle \overbrace{\langle \psi_F | \psi \rangle}^{a_F} dF = \int a_F \langle \psi_G | \psi_F \rangle dF$

Einheit erhalten $a_F = \begin{pmatrix} a_{F1} \\ a_{F2} \\ \vdots \end{pmatrix} \quad a_G = \begin{pmatrix} a_{G1} \\ a_{G2} \\ \vdots \end{pmatrix}$

$a_F = \langle \psi_G | \psi_F \rangle a_G$

lin. abhängig, matrix

	koord. repr.	imp. repr.
admitt belogen all	$\int (\underline{r} - \underline{r}_0)$	$\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{-i\hbar \underline{r}}$
admitt imp. all	$\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{i\hbar \underline{r}}$	$\int (\underline{k} - \underline{k}_0)$
testf.	$\psi(\underline{r})$	$\tilde{F}(\psi(\underline{r}))$

Kommutáló operátorok

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

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

$$\begin{aligned} \hat{M}\hat{F}|\psi_n\rangle &= \hat{F}\hat{M}|\psi_n\rangle \Rightarrow [\hat{M}\hat{F} - \hat{F}\hat{M}]|\psi_n\rangle = 0 & |\psi\rangle = \sum_n a_n |\psi_n\rangle \\ \uparrow & \qquad \qquad \qquad \downarrow \\ \hat{M} \cdot F|\psi_n\rangle & \qquad \qquad \qquad F\hat{M}|\psi_n\rangle \\ \uparrow & \qquad \qquad \qquad \uparrow \\ MF|\psi_n\rangle &= FM|\psi_n\rangle & [\hat{M}, \hat{F}] = 0 \end{aligned}$$

Körös közös sajátáll. rendelkezők kommutálóak. Fordítva is igaz (ha nem degenerált r.e.)

$$\hat{M}|\psi_M\rangle = M|\psi_M\rangle$$

$$\hat{M}\hat{F}|\psi_M\rangle = \hat{F}\hat{M}|\psi_M\rangle = \hat{F}M|\psi_M\rangle = M\hat{F}|\psi_M\rangle \Rightarrow \hat{F}|\psi_M\rangle = c \cdot |\psi_M\rangle$$

5/ Hasonlíttassuk relatív

$\hat{A}, \hat{B}$ lineáris nemz. operátora, $[\hat{A}, \hat{B}] = i\hat{C}$, ahol $\hat{C}^\dagger = \hat{C}$
 Hermitikus

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

$$\Delta\hat{A} = \hat{A} - \langle\hat{A}\rangle \hookrightarrow \Delta\hat{A} = (\hat{A} - \langle\hat{A}\rangle)$$

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

$$[\Delta\hat{A}, \Delta\hat{B}] = [\hat{A} - \langle\hat{A}\rangle, \hat{B} - \langle\hat{B}\rangle] = [\hat{A}, \hat{B}] - \overbrace{[\hat{A}, \langle\hat{B}\rangle]}^0 - \overbrace{[\langle\hat{A}\rangle, \hat{B}]}^0 + \overbrace{[\langle\hat{A}\rangle, \langle\hat{B}\rangle]}^0 = i\hat{C}$$

$$0 \leq \langle (\alpha \Delta\hat{A} + i \Delta\hat{B}) | (\alpha \Delta\hat{A} + i \Delta\hat{B}) \rangle = \langle \psi | (\alpha \Delta\hat{A} - i \Delta\hat{B}) (\alpha \Delta\hat{A} + i \Delta\hat{B}) | \psi \rangle =$$

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

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

$= 0$ akkor is α -val

pl: $\left. \begin{matrix} \hat{A} = \hat{x} \\ \hat{B} = \hat{p} \end{matrix} \right\} \hat{C} = \hbar \Rightarrow \Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$

pl: $\left. \begin{matrix} \hat{A} = \hat{U} \\ \hat{B} = \hat{L}_z \end{matrix} \right\} \hat{C} = \hbar \Rightarrow \Delta \psi \Delta L_z \geq \frac{\hbar}{2}$

$\Delta E \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}$ értelmezése nem trív., nem időoperátor $\Delta E \frac{\Delta B}{|\frac{dB}{dt}|} \geq \frac{\hbar}{2}$

$$\frac{d}{dt} \langle B \rangle = \frac{d}{dt} \langle \psi | B | \psi \rangle = \langle \psi | \frac{d}{dt} B | \psi \rangle = -\frac{i}{\hbar} \langle \psi | [B, \hat{H}] | \psi \rangle$$

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

$$\Delta E \frac{\Delta B}{|\frac{dB}{dt}|} \geq \frac{\hbar}{2}$$

ennyi idő kell az átlagérték ΔB -nyi megváltozásához

Eigenlösung: $\left(\underbrace{\frac{\langle \hat{U} \rangle}{2 \langle \Delta A^2 \rangle}}_d \Delta A + i \Delta B \right) |\psi\rangle = 0$

ha $\hat{A} = \hat{x}$ $\langle \hat{A} \rangle = 0 \Rightarrow \Delta \hat{A} = \hat{x} - x_0$

$\hat{B} = \hat{p}$ $\langle \hat{B} \rangle = 0 \Rightarrow \Delta \hat{B} = \hat{p} = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$

$$\left(\frac{\hbar}{2 \langle x^2 \rangle} x + \hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \psi = 0 \Rightarrow \psi = A \cdot e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{x^2}{2 \langle x^2 \rangle}} \quad \text{Wahrscheinl (Gauss)}$$

erre $\Delta x \Delta p = \frac{\hbar}{2}$

6/ Klassikus határozat, Hamilton függvény, Schrödinger egyenlet, stb. ill.

A CM olyan határozata a QM-nek, mely a geom. optikához hullámoptikához, melynek az eikonal közelítést részesíti.

Optikában Fermat elv: $\int_A^B n ds$ legyen minimális, vagyis $\delta \int_A^B n ds = 0$. Ez a kvázi-klaszikus optikát jelenti, vagyis a fénysűrűség legyen minimális.

QM-ben fűződik a határértékkel felül meg: $\psi = a \cdot e^{\frac{i}{\hbar} S}$ ↑ dinamikus mérték

A hullámfüggvény hordozza az energiát, így időfüggés is $\Rightarrow \hat{H}$:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H} \psi \quad \text{ahol } \hat{H} \text{ mindenkorin } \text{Hermitikus (szelfadjungált).}$$

$$\text{Ha } |\psi|^2 \text{ valószínűség-sűrűség} \Rightarrow \forall t \quad \int \psi^* \psi dq = 1 \Rightarrow \frac{d}{dt} \int \psi^* \psi dq = 0$$

↓

$$\hat{H} = \hat{H}^\dagger \Leftrightarrow \int \frac{\partial}{\partial t} (\psi^* \hat{H} \psi) - \psi^* \frac{\partial}{\partial t} \hat{H} \psi = 0 \Leftrightarrow \int \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \psi + \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} dq = 0$$

$$\text{Ha a CM-ben a Hamilton fu-nak megf. op. egyenlet} \quad \frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{i}{\hbar} \frac{\partial S}{\partial t} \psi$$

CM-ben Hamilton fu-t adja

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

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

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

$$\text{Zárt rendszerben } \frac{\partial \hat{H}}{\partial t} = 0, [\hat{H}, \hat{H}] = 0 \text{ mindig} \Rightarrow \frac{d}{dt} \langle \hat{H} \rangle = 0$$

$H\psi_n = E_n\psi_n$ Az időfüggő Sch. egyenletet megoldjuk $t=0$ -ban, ψ_n -ak az energiák.

$\Psi_n(q,t) = e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} \psi_n(q)$ konstans a megoldás kétféleképpen $t=0$. Ez a stacionárius megoldás.

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = E_n \psi_n$$

$$\Rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} \psi_n(q) = E_n \Psi$$

Azért stacionárius, mert a megoldás valószínűségfüggvénye állandó: $|\Psi(q,t)|^2 = \left| e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} \cdot \psi_n(q) \right|^2 = \psi_n(q)^2$

Superpozíció: $\Psi(q,0) = \sum_n a_n \psi_n(q)$ $|a_n|^2$ a P , hogy ψ_n

$$\Psi(q,t) = \sum_n a_n \psi_n(q) e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} \quad |a_n e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t}|^2 = |a_n|^2 \quad P.u.a.$$

megmaradó mennyiségek stac. állapotban felvehetők határozott értékűnek, mert $[F, H] = 0$

Ha $F \neq c \cdot id$, akkor $\exists$ elfajult E_n : $H\psi_n = E_n \psi_n \Rightarrow F H \psi_n = F E_n \psi_n$

$$H F \psi_n = E_n F \psi_n \Rightarrow F \psi_n \text{ is}$$

ugyan ahhoz az E_n -hez tartozik

Az energiaspektrum lehet diszkrét és folytonos

normálható

alt. nem normálható

7/

$$\dot{\langle \hat{F} \rangle} := \frac{d}{dt} \langle \hat{F} \rangle = \frac{d}{dt} \langle \psi | \hat{F} | \psi \rangle = \int \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \hat{F} \psi + \psi^* \frac{\partial \hat{F}}{\partial t} \psi + \psi^* \hat{F} \frac{\partial \psi}{\partial t} dq =$$

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

Ha ψ op. idöfuggetlen $\frac{\partial \hat{F}}{\partial t} = 0$ és $[\hat{H}, \hat{F}] = 0 \Rightarrow \langle \hat{F} \rangle$ állandó.

Schrödinger legr

$t=0$ kezdőfeltétel $\Psi_s(q, t) = \hat{S}(t) \psi(q) \quad \hat{S}(t=0) = 1$

$\langle \psi' | \psi \rangle = 1 = \langle \hat{S} \psi' | \hat{S} \psi \rangle \Rightarrow \hat{S} \hat{S}^\dagger = 1 \Rightarrow \hat{S}$ unitár

$\left(i \hbar \frac{\partial \hat{S}}{\partial t} - \hat{H} \hat{S} \right) \psi = 0 \quad \forall \psi \Rightarrow i \hbar \frac{\partial \hat{S}}{\partial t} = \hat{H} \hat{S} \Rightarrow \hat{S}(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t}$

Az állapotfüggvény idöfuggó, az operátorok nem.

Kezmenhang:

Az állapotfüggvény idöfuggó, az operátorok az idöfuggók.

$\Psi_\# = \hat{S}^{-1} \Psi_s(q, t) = \psi(q) = \Psi_s(q, 0)$

$\hat{F}_\# = \hat{S}^{-1} \hat{F}_s \hat{S} = \hat{F}_\#(t)$ unitár transzformáció $\Leftrightarrow$ más ábrázolás

$\hat{F}_\#(0) = \hat{F}_s \quad \hat{S} = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t} \quad \hat{S}^{-1} = e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H} t}$

$\frac{d \hat{F}_\#}{dt} = \frac{i}{\hbar} \hat{H} \hat{S}^{-1} \hat{F}_s \hat{S} + \hat{S}^{-1} \frac{d \hat{F}_s}{dt} \hat{S} + \frac{i}{\hbar} \hat{S}^{-1} \hat{F}_s \hat{H} \hat{S} = -\frac{i}{\hbar} [\hat{F}_\#, \hat{H}]$

ha $t=0$, $\hat{F}_\# = \hat{F}_s$
 idöben állandó
 $\hat{F}_\# = \hat{F}_s, \forall t$

$[\hat{H}, \hat{S}] = 0$ mert $\hat{S}$ hatványgyörs
 kifejtése $\hat{H}$ -t tartalmazó csak

keletőrhatalmú légi

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}_{int} \leftarrow \text{keletőrhatalmú légi}$$

↑
nem lehet megoldani légi

$$\psi_{KH} = \hat{S}_K^{-1} \psi_s(q, t) \quad \hat{S}_K(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 t}$$

$$\psi_s = \hat{S}_K \psi_{KH}$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (\hat{S}_K \psi_{KH}) = (\hat{H}_0 + \hat{V}_{int}) (\hat{S}_K \psi_{KH})$$

$$-\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 t \hat{S}_K \psi_{KH} + \hat{S}_K \frac{\partial \psi_{KH}}{\partial t}$$

$$i\hbar \hat{S}_K \frac{\partial \psi_{KH}}{\partial t} = \hat{V}_{int} \hat{S}_K \psi_{KH} \quad (=) \quad i\hbar \frac{\partial \psi_{KH}}{\partial t} = \hat{S}_K^{-1} \hat{V}_{int} \hat{S}_K \psi_{KH}$$

$$i\hbar \frac{\partial \psi_{KH}}{\partial t} = \hat{V}_{KH} \psi_{KH}$$

$$\frac{d\hat{F}_K}{dt} = -\frac{i}{\hbar} [\hat{F}_K, \hat{H}_0]$$

Időtükrözés (CM -ben nem)

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = H \psi \quad \text{ha } \phi(r, t) \text{ megoldás, } \phi(r, -t) \text{ is?}$$

$$-i\hbar \frac{\partial \psi^*}{\partial t} = H \psi^* \quad \text{megoldás } \phi^*(r, t)$$

Enélkül $t \mapsto -t$ trafo:

$$-i\hbar \frac{\partial \psi(r, -t)}{\partial t} = H \psi(r, -t) \text{ analóg megoldás } \phi(r, -t)$$

↓

$$i\hbar \frac{\partial \psi^*}{\partial t} = H \psi^* \text{ ennek a megoldása } \phi^*(r, t), \text{ melyki Sch. egylet}$$

Az időtükrözés operátora: $\hat{T} \phi(r, t) = \phi^*(r, -t)$ konjugált lineáris, antiunitér.

8/ Poisson zárójel

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

kvantum $\{\hat{H}, \hat{F}\} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{F}]$

klasszikusan $\frac{dF}{dt} = \frac{\partial F}{\partial t} + \frac{\partial F}{\partial q_i} \frac{dq_i}{dt} + \frac{\partial F}{\partial p_i} \frac{dp_i}{dt} + \dots$

$$\frac{dF}{dt} = \frac{\partial F}{\partial t} + \sum_a \left(\frac{\partial F}{\partial q_a} \frac{dq_a}{dt} - \frac{dq_a}{dt} \frac{\partial F}{\partial p_a} \right)$$

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

$$\{t, q\} = -\{q, t\}$$

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

$$\{t, t_1 q\} = t_1 \{t, q\} + \{t_1, q\} t$$

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

QM-ben is teljesül

$$\{q_i, q_a\} = 0$$

$$\{p_i, p_a\} = 0$$

$$\{q_i, p_a\} = \delta_{ia}$$

CM-ben is ugyan ez

Ha QM rendszert, ahol $\exists$ CM-beli megfelelője, az operátorok kommutátorai ugyan olyan felírhatóak.
Ez a kanonikus kvantálás.

9/ Symmetrie ist unverändert messungseigentlich

$$\hat{O} \psi(x) := \psi(x-a) = \psi(x) - a \psi'(x) + \frac{a^2 \psi''(x)}{2!} + \dots = \left(1 + (-a \partial_x) + \frac{(-a \partial_x)^2}{2!} + \dots \right) \psi(x) = e^{-a \partial_x} \psi(x)$$

$$\hat{p}_x = -i\hbar \partial_x \quad \partial_x = \frac{i \hat{p}_x}{\hbar}$$

$$\hat{O} = e^{-a \frac{i}{\hbar} \hat{p}_x}$$

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

$$\hat{O} \approx 1 - \partial_x \frac{i}{\hbar} \hat{p}_x \quad \text{infinitesimales Fortsetzen}$$

$$[\hat{p}_x, \hat{H}] = 0 \quad , \quad \frac{\partial \hat{p}_x}{\partial t} = 0 \Rightarrow \langle \hat{p}_x \rangle = \text{allgemein}$$

Ungewissheitssatz: $\psi(x_1, x_2, \dots) \mapsto \psi(x_1-a, x_2-a, \dots)$ - das ist, eben $\hat{O} = 1 - \delta x \sum_a \hat{p}_a$

produziert

$$\delta x_a = \delta \psi \times x_a \quad \text{infinitesimales Fortsetzen}$$

$$(\delta \psi \times x_a) \hat{p}_a = \delta \psi (\underline{x}_a \times \hat{p}_a)$$

$$\begin{aligned} \hat{O} \psi(x_1, x_2, \dots) &= \psi(x_1 - \delta x_1, x_2 - \delta x_2, \dots) = \dots = \left[1 - \sum_a \delta x_a \hat{p}_a \right] \psi(x_1, x_2, \dots) \\ &= \left[1 - \delta \psi \sum_a (\underline{x}_a \times \hat{p}_a) \right] \psi(x_1, x_2, \dots) \end{aligned}$$

$$\underline{x} \times \hat{p} = \underline{x} + \frac{\hat{p}}{i\hbar} = \frac{\hat{L}}{i\hbar}$$

$$[\hat{O}, \hat{H}] = 0 \Rightarrow \delta \psi \sum_a \frac{\hat{L}_a}{i\hbar} = \text{all} \Rightarrow \sum_a \hat{L}_a = \text{all}$$

Parität

$x \mapsto -x$ térhővőeske nős klamikus megmaradó mennyiség.

$$\hat{P} \psi(x,t) = \psi(-x,t) \quad \hat{P} \text{ paritás operátor.} \quad \hat{P}^2 \psi(x,t) = \hat{P} \psi(-x,t) = \psi(x,t)$$

$$\Rightarrow \hat{P} = \text{id}$$

$$\hat{P}^2 \psi(x,t) = \mu \hat{P} \psi(x,t) = \mu^2 \psi(x,t) \quad \leftarrow \text{ha } \psi \text{ sajátállapot}$$

$$\mu^2 = 1 \text{ mert } \hat{P}^2 = \text{id} \Rightarrow \mu = \pm 1$$

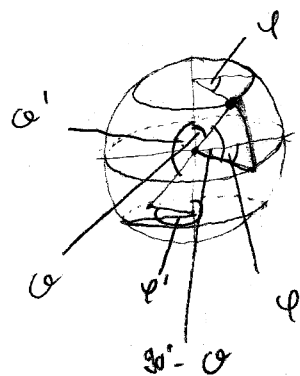
$\hat{P}$ időfüggetlen, várható értéke nem függ t-től

Zárt rendszerben v. centrális erőkben esetén a térhővőes szimmetria, $[\hat{P}, \hat{H}] = 0$

$$[\hat{P}, \hat{L}] = 0 \Rightarrow \text{létezik közös sajátállapotok}$$

Térhővőes poláriszámok:

$$\begin{aligned} r &\mapsto r \\ \vartheta &\mapsto \pi - \vartheta, \quad \cos \vartheta \mapsto -\cos \vartheta \\ \varphi &\mapsto \pi + \varphi \end{aligned}$$



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

$$\begin{aligned} Y_{lm}(\vartheta, \varphi) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi} \cdot \underset{\text{valami}}{f(l,m)} \cdot |\sin \vartheta|^m \cdot \frac{d^{l+m} (\sin \vartheta)^{2\vartheta}}{[d(\cos \vartheta)]^{l+m}} \\ &\downarrow \\ e^{im(\varphi + \pi)} &= (-1)^m e^{im\varphi} \\ &\downarrow \\ Y_{lm}(\cos \vartheta, \varphi) \cdot (-1)^{m+l+m} &= Y_{lm}(\cos \vartheta, \varphi) (-1)^l \\ &\downarrow \\ [d(\cos \vartheta)]^{l+m} &= (-1)^{m+l} [d(\cos \vartheta)]^{l+m} \\ &= (-1)^{m+l} [d(\cos \vartheta)]^{l+m} \end{aligned}$$

számképe $(-1)^l = \mu$

10/ Impulzusmomentum sajátérték problémája

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

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

↓ lehet közös sajátállapot

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

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

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

$$\hat{L}_x = \frac{\hat{L}_+ + \hat{L}_-}{2}$$

$$\hat{L}_y = \frac{\hat{L}_+ - \hat{L}_-}{2i}$$

$$\hat{L}_z = \frac{-i}{\hbar} x \partial_y - y \partial_x = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi}$$

$$\hat{L}_z = x p_y - y p_x$$

$$\hat{L}_z \psi_m = m \psi_m$$

$$\psi_m = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi} \quad m \in \mathbb{Z}$$

$\hat{L}_z |\psi_m\rangle := m |\psi_m\rangle$ és ez legyen $\hat{L}^2$ -nek is sajátállapota!

$\hbar=1$

$$\hat{L}_z \hat{L}_{\pm} |\psi_m\rangle = [\hat{L}_{\pm} \hat{L}_z \pm \hbar \hat{L}_{\pm}] |\psi_m\rangle = (m \pm 1) \hat{L}_{\pm} |\psi_m\rangle$$

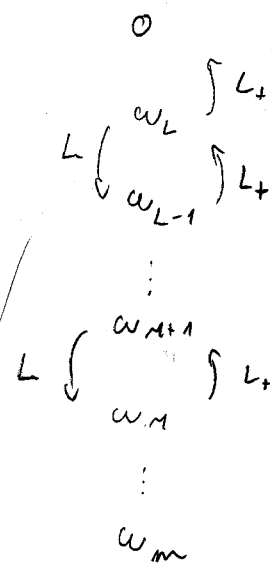
újabb sajátállapot

$$\hat{L}_+ \omega_m := r_{m+1} \omega_{m+1}$$

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

$$\hat{L}_+ \omega_L = 0 = \underbrace{r_{L+1}}_0 \omega_{L+1}$$

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



$$\hat{L}_+ \hat{L}_- \omega_m = (\hat{L}_- \hat{L}_+ + 2\hat{L}_z) \omega_m = (r_{m+1} + 2m) \omega_m$$

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

$$r_{m+1} = \underbrace{(r_{m+1} - r_{m+2})}_{2(m+1)} + \underbrace{(r_{m+2} - r_{m+3})}_{2(m+2)} + \dots + \underbrace{(r_L - r_{L+1})}_{2L} + r_{L+1}$$

$$r_{m+1} = 2(L-m) \frac{L+m+1}{2} = L(L+1) - m(m+1)$$

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

M értéke $-L$ és L között lehet, $2L+1$ db $\Rightarrow L$ feltehetően $0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \dots$

$\exists m, L$ azaz legkisebb és legnagyobb

Normális vektork

$$L^2 \omega_M = (L_x^2 + L_y^2 + L_z^2) \omega_M = \left(\frac{L_+ L_- + L_- L_+}{2} + L_z^2 \right) \omega_M = \left(\frac{1}{2} (r_M + r_{M+1}) + M^2 \right) \omega_M$$

$$r_M + r_{M+1} = L(L+1) - \overbrace{M(M-1)}^{-M^2+M} + L(L+1) - \overbrace{M(M+1)}^{-M^2-M} = 2L(L+1) - 2M^2$$

$$L^2 \omega_M = L(L+1) \omega_M$$

Normalis

$$\langle L_+ \omega_M | L_+ \omega_M \rangle = \langle \omega_M | \overbrace{L_- L_+}^{r_{M+1} \omega_M} \omega_M \rangle = \langle \omega_M | [L(L+1) - M(M+1)] \omega_M \rangle = [L(L+1) - M(M+1)] \|\omega_M\|^2$$

$$\langle r_{M+1} \omega_{M+1} | r_{M+1} \omega_{M+1} \rangle = [L(L+1) - M(M+1)]^2 \|\omega_{M+1}\|^2$$

$$\psi_{L,M} := \left[\frac{(L+M)!}{(L-M)!} \right]^{1/2} \omega_M \quad \text{Es muss normiert}$$

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

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

$$\langle \psi_{L,M} | \psi_{L,M} \rangle = \underbrace{[L(L+1) - M(M+1)]}_{L^2+L+1-M^2-M-1} \frac{1}{(L-M)(L+M+1)} \langle \psi_{L,M+1} | \psi_{L,M+1} \rangle$$

$\stackrel{L^2-M^2-M+L}{=} \Rightarrow$ normiert u.a.

$$L_+ \psi_{L,M} = \sqrt{L(L+1) - M(M+1)} \psi_{L,M+1} \quad \# 2L+1$$

L beliebig, $M \in [-L, L] \cap \mathbb{Z}$

$$L_- \psi_{L,M} = M \psi_{L,M}$$

letzte Rückrechnung ist: $\int_0^{2\pi} \int_0^\pi \psi_{l,m}^*(\vartheta, \varphi) \psi_{l,m}(\vartheta, \varphi) \sin \vartheta d\vartheta d\varphi = \delta_{l'l} \delta_{m'm}$

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

^{11/} Impulsmomentum szögfüggvények transformálás tulajdonságai, invariancia

inf. Permutationen operatoren: $\hat{O} = 1 + \frac{i}{\hbar} \underbrace{\delta\varphi_z \hat{L}_z + \delta\varphi_1 L_x + \delta\varphi_4 L_y + \delta\varphi_2 L_z}_{L_x = \frac{L_+ + L_-}{2} \quad L_y = \frac{L_+ - L_-}{2i} + \frac{\delta\varphi_1 + i\delta\varphi_2}{2} L_+ + \frac{\delta\varphi_1 - i\delta\varphi_2}{2} L_-}$

$$\hat{O} \psi_{L,M} = \psi_{L,M} + \left(\delta\phi_3 M \psi_{L,M} + \frac{\delta\phi_1 - i\delta\phi_2}{2} \sqrt{L(L+1) - M(M+1)} \psi_{L,M+1} + \frac{\delta\phi_1 + i\delta\phi_2}{2} \sqrt{L(L+1) - M(M-1)} \psi_{L,M-1} \right) \cdot i$$

Az inf. elforgatásja előáll az egyes lin. kombinációjaként. Véges mértékű forgatás: $\bar{O}^n$

$$\hat{O}^m \psi_{L,M} = \sum_{M'=-L}^L a_{M,M'} \psi_{L,M'} \quad \psi_{L,M} = Y_{L,M}(\theta, \varphi)$$

$$\hat{O} Y_{LM}(v, \varphi) = Y_{LM}(v', \varphi') = \sum_{M'} a_{MM'} Y_{LM'}(v, \varphi)$$

$$a_{mm'} = \int \psi_{L,m'}^*(\vartheta, \varphi) \hat{O} \psi_{L,m}(\vartheta, \varphi)$$

jo readers

2. Angewandte rechnerische, $\psi_1(q_1)$ & $\psi_2(q_2)$ $\psi(q_1, q_2) = \psi_1(q_1) \cdot \psi_2(q_2)$

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

$$\hat{L}_{(1)} \otimes 1 + 1 \otimes \hat{L}_{(2)}$$

$$\hat{L}_3 \psi = \hbar (M_1 + M_2) \psi \Rightarrow M = M_1 + M_2 \quad \text{kommutativ, weil } \hat{L}_3 \text{ - nach } \psi \text{ o.d.}$$

$L^2 \psi \neq c \cdot \psi$ nem rajátallego L^2 .

L_2 "handwritten" allayelbol $2L_1 + 1$ dr va

$$L_2 - \text{cool } 2L_2 + 1$$

L_2 - hat $2L_2 + 1$ fester von
 L_1 0-es reduziert in L_2 0-es reduzierbar $(2L_1 + 1)(2L_2 + 1) = 4L_1 L_2 + 2L_2 + 2L_1 + 1$

① well-def., M_1	② well-def., M_2	③ well-def., M	④ L beliebig z.B. L	⑤ Klammersym., $\psi_{L_1 M_1 L_2 M_2}$
L_1	L_2	$L_1 + L_2$	$L_1 + L_2$	$\psi_{L_1 L_2 L_1 + L_2 L_1 L_2}$
L_1	$L_2 - 1$	$L_1 + L_2 - 1$	$L_1 + L_2, L_1 + L_2 - 1$	$\psi_{L_1 + L_2 L_1 + L_2 - 1 L_1 L_2 - 1}$
$L_1 - 1$	L_2			$\psi_{L_1 + L_2 L_1 + L_2 - 1 L_1 - 1 L_2}$
L_1	$L_2 - 2$		$L_1 + L_2$	$\psi_{L_1 + L_2 - 1 L_1 + L_2 - 1 L_1 - 1 L_2}$
$L_1 - 1$	$L_2 - 1$	$L_1 + L_2 - 2$	$L_1 + L_2 - 1$	$\psi_{L_1 + L_2 - 1 L_1 L_2 - 1 L_1 L_2 - 1}$
$L_1 - 2$	L_2		$L_1 + L_2 - 2$	...

M minimum? bei $L_1 - L_2 - 1$ ($L_1 > L_2$)

$L_1 \quad -L_2 - 1 \leftarrow$ wenn ja, wenn beliebig. bei $L_1 - L_2 = \text{Max.}$, abh. ja.

$L_1 - 1 \quad -L_2$
 $\vdots \quad \vdots$

$L_1 \quad -L_2$
 $L_1 - 1 \quad -L_2 + 1$
 $\vdots$

Eltern L beliebiges Intervall: $L_1 - L_2$
 $L_1 - L_2 + 1$
 $\vdots$
 $L_1 + L_2$ } $2L_2 + 1$ db

Algebraisch: $2(L_1 - L_2) + 1$
 $+ 2(L_1 - L_2 + 1) + 1$
 $+ 2(L_1 - L_2 + 2) + 1$
 $\vdots$
 $+ 2(L_1 + L_2) + 1 = (2L_1 + 1)(2L_2 + 1)$ ↖ allg. ↗ db

$\psi_{L_1 M_1 L_2 M_2}$ an $L_0 L_0$, an

$L \leq L_1$ ist $L \leq L_0$ auch es auf.

$$L_0 L_0 = \frac{1}{2} L^2 - L_0^2 - L_0^2 = L_0 L_0$$

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

Clebs-Gordan k.k.

a fürs am ersichtlichen, konventionell bezeichnen

12/ időfüggő Schrödinger, szabad részecske, sebesség, gyűrűs, ábraműködés

ψ hf. maximális info tartalom, így $\exists \hat{H}: i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H} \psi \Rightarrow \hat{H}$ lin. a megp. miatt

ha $|\psi|^2$ val. rővids, $\int \psi^* \psi = 1 \Rightarrow \frac{d}{dt} \int \psi^* \psi = 0 = \int \underbrace{\frac{\partial \psi^*}{\partial t} \psi}_{\frac{i}{\hbar} \hat{H}^* \psi^*} + \underbrace{\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t}}_{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} \psi} =$

$\psi = e^{\frac{i}{\hbar} S t}$ kvantumos hf-re

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

Hamiltonian

$\hat{H} = -i\hbar \nabla$

$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left(\frac{\hat{H}^2}{2m} + V(r,t) \right) \psi$ szabad részecske $V=0$

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

$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi$

Ezzel megoldható $\psi = e^{\frac{i}{\hbar} \hbar r \cdot Et}$ ha $\frac{\hbar^2}{2m} = E$

Polystrom spektrum, nem normalizálható

Main stat. megoldás: $\psi(r) = \frac{1}{r} f(r) Y_{lm}(\theta, \varphi)$

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

$E \psi = \frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{f''(r)}{r} - \frac{l(l+1)\hbar^2}{r^3} \right) Y_{lm} = E \frac{1}{r} f Y_{lm}$

$f'' + \left(\frac{2mE}{\hbar^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) f = 0$ $J(kr) \sqrt{kr} = f(r)$

Megoldások: Gömbi Bessel és Neumann $J_{1/2} \sim \frac{\sin m}{\sqrt{r}}$

$N_{1/2} \sim \frac{\omega^m}{\sqrt{r}} \leftarrow$ nem normalizálható

$\psi \sim \sqrt{\frac{\hbar}{r}} J_{l+1/2}(\hbar r) Y_{lm}(\theta, \varphi) \sim r^l$ ha r kicsi

$\sim \frac{1}{r} \sin\left(\hbar r - \frac{l\pi}{2}\right)$ ha r nagy

$$\hat{v} = \frac{d\hat{r}}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{r}] = \frac{i}{\hbar} \left[\frac{-\hbar^2}{2m} \Delta + V, r \right]$$

$$\Delta(r\psi) - r(\Delta\psi) =$$

$$\frac{(\Delta r)\psi + r\Delta\psi + 2\nabla\psi - r(\Delta\psi) = 2\nabla\psi}{0}$$

radial kommutator

$$\hat{v} = \frac{i}{\hbar} \frac{-\hbar^2}{2m} 2\nabla = \frac{-i\hbar\nabla}{m} = \frac{\hat{p}}{m}$$

$$\hat{H} = \hat{p}^2/2m + V \quad \text{Kommutator}$$

$$\frac{d\hat{v}}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{v}] = \frac{i}{\hbar} [\hat{V}, \hat{v}] = \frac{1}{m} [\hat{V}, \nabla]$$

akkor következik, ha $(\nabla u) \sim \nabla u|_{r=\infty}$

Newton egyenlet: $m \frac{d\hat{v}}{dt} = -\nabla \hat{U}$ Newton operátora.

Ha ∇u
lassan változik $|\psi|^2$ -ben
lehet

változik

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \psi^* \psi &= \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} + \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t} = \frac{i}{\hbar} \left(\psi^* \hat{H} \psi - \psi \hat{H}^* \psi^* \right) = \frac{i}{\hbar} \frac{(\hbar^2)}{2m} (\psi \Delta \psi^* - \psi^* \Delta \psi) \\ &= \frac{-i\hbar}{2m} \nabla \cdot (\psi (\nabla \psi^*) - \psi^* (\nabla \psi)) = -\text{div } \underline{j} \end{aligned}$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div } \underline{j} = 0$$

$$\psi(r, t) = R(r, t) e^{i\phi(r, t)} \quad |R|^2 = \rho \quad R \text{ lassan változik}$$

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

13/ energiájáértékét dlt. tulajdonságai

ψ egyértelmű, komplex, jó ha folyt. differenciálható

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U(r, \varphi, z) \right] \psi = E \psi \quad \text{ahol } U \rightarrow 0 \text{ ha } r \rightarrow \infty. \text{ A.o. } E_n, \psi_n$$

$$1/ \quad E_n \geq U_{\min} \quad U_{\min} = \min_n \{U(r_n)\}$$

$$\langle E_n \rangle = \underbrace{\langle T \rangle}_{\geq 0} + \underbrace{\langle U \rangle}_{\geq U_{\min}} \geq U_{\min}$$

2/ $E_n < 0$ rájátszhatóan döröszken van. Ha polynomos lenne, ψ_n nem lenne normalizálható $\Rightarrow \psi_n$ nem lenne normalizálható, tehát leges merre, ahol $U=0$ is lenne valószínűség a megtalálásra $\Rightarrow E_n = E_{\text{kin}} > 0$ y

$E_n > 0$ rájátszhatóan polynomos

3/ Hamiltonian 1 helyen van a végtelenbe, s ekkor $E \geq U$

Kvantumban nincs 1 helyen mert $\exists [a, b]$ tartomány, ahol $\psi \neq 0$. Itt $E < U$ is lehet. Ekkor ha lokalizáljuk a részecskét, márt nem lesz $\hat{H}$ sajátállapota, mert $[\hat{H}, \hat{x}] = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$

$$10: \quad \frac{d^2 \psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U(x)) \psi = 0$$

1/ $E > 0$ $|x| \rightarrow \infty$ esetén $U=0$, aszimptotikus megoldás

$$\psi = A e^{i \frac{\mu x}{\hbar}} + B e^{-i \frac{\mu x}{\hbar}} \quad \text{ahol } \mu = \sqrt{2mE}$$

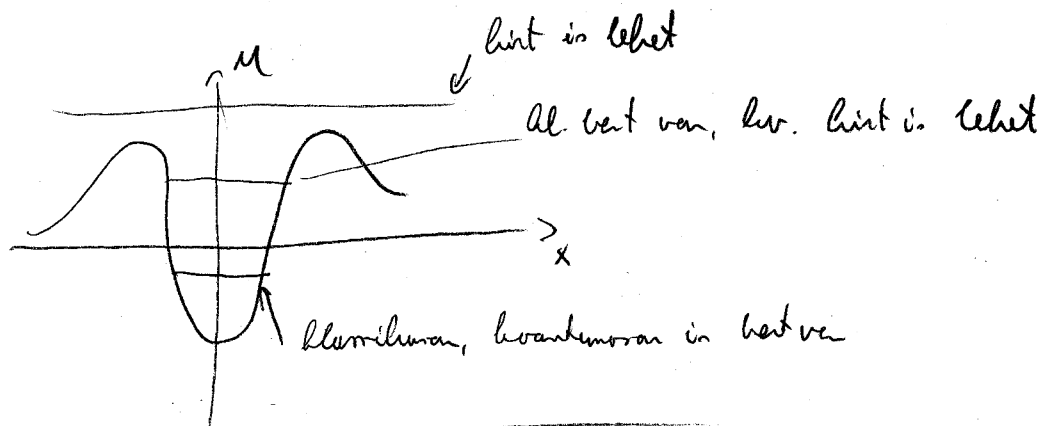
nem normalizálható, E tetrvéleges

$E < 0$

$$\psi = \begin{cases} A e^{kx} \\ B e^{-kx} \end{cases}$$

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

Ar liegen kaporen in jö, er normalhato.



$$0 < x < a \quad \psi'' + k^2 \psi = 0 \quad k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

$$\psi = A \sin kx$$

aniny

$$\psi'' - k^2 \psi = 0$$

$$k = \sqrt{\frac{2m(\mu_0 E)}{\hbar^2}}$$

$$\psi = B e^{-kx} \quad x > a$$

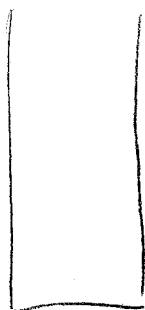
$$\psi = C e^{kx} \quad x < 0$$

ψ polytomen

ψ' - nok in beht: hylgett

$$\int_{a-\Delta a}^{a+\Delta a} \psi'' + \frac{2m}{\hbar^2} (\mu - E) \psi dx = \psi'(a+\Delta a) - \psi'(a-\Delta a) + \frac{2m}{\hbar^2} \int_{a-\Delta a}^{a+\Delta a} (\mu - E) \psi dx \rightarrow 0$$

Endemes $\frac{\psi'}{\psi}$ -t illesteri: $ka = (2n+1)\pi - 2 \arcsin\left(\frac{\hbar k}{\sqrt{2m\mu_0}}\right) \Rightarrow k$ is E dntelhei



uoghtelen potentialgöchtön

hünnyer lathato, hony hört $\psi > 0$, $\psi' > 0 \Rightarrow \psi$ bent minnos

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} n^2 \quad n \in \mathbb{N} \quad \psi_n = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a} x\right)$$

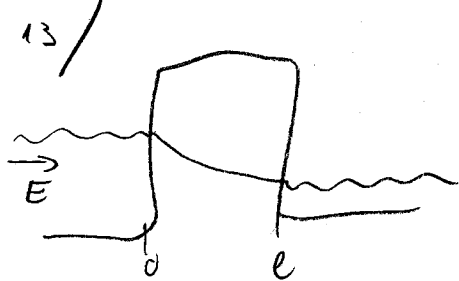
30. Gen

$X(x) \cdot Y(y) \cdot Z(z) = \psi(x, y, z)$ alahban hesehebo

$$\frac{x''}{x} + \frac{y''}{y} + \frac{z''}{z} + k^2 = 0$$

$$E_{n_x, n_y, n_z} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m} \left(\frac{n_x^2}{a^2} + \frac{n_y^2}{b^2} + \frac{n_z^2}{c^2} \right)$$

$$\psi_{n_x, n_y, n_z} = \sqrt{\frac{8}{abc}} \sin\left(\frac{n_x \pi}{a} x\right) \sin\left(\frac{n_y \pi}{b} y\right) \sin\left(\frac{n_z \pi}{c} z\right)$$



$$\psi_I = A e^{\frac{i}{\hbar} p x} + B e^{-\frac{i}{\hbar} p x}$$

$$\psi_{III} = C e^{\frac{i p x}{\hbar}}$$

$$\hat{j} = \frac{i\hbar}{2m} (\psi \nabla \psi^* - \psi^* \nabla \psi) \Rightarrow \left. \begin{aligned} j_I &= (|A|^2 - |B|^2) \frac{p}{m} \\ j_{III} &= |C|^2 \frac{p}{m} \end{aligned} \right\} \begin{aligned} \text{Gladf} &= 0 \\ \downarrow \\ j_I &= j_{III} \Rightarrow |A|^2 - |B|^2 = |C|^2 \end{aligned}$$

reflexiv: $\frac{|B|^2}{|A|^2} = R$

$$R + T = 1$$

transmissiv: $\frac{|C|^2}{|A|^2} = T$

$$\psi_{II} = \frac{1}{\sqrt{k}} \left\{ \alpha e^{\int_0^x k(y) dy} + \beta e^{-\int_0^x k(y) dy} \right\}$$

$$k = \sqrt{2m(U-E)}/\hbar$$

ψ : $\sqrt{V_0} e^{\frac{i}{\hbar} p x} = \alpha e^{\gamma} + \beta e^{-\gamma}$
 $\gamma = \frac{1}{\hbar} \int_0^x \sqrt{2m(U-E)} dy$

ψ : $k(0) := a \Rightarrow A+B = \frac{\alpha+\beta}{\sqrt{a}}$

ψ' : $\frac{i}{\hbar} p(A-B) = \sqrt{a}(\alpha-\beta)$

ψ' : $\frac{i p}{\hbar} C e^{\frac{i}{\hbar} p x} = \sqrt{V_0} [\alpha e^{\gamma} - \beta e^{-\gamma}]$

$b := k(l)$

$\alpha = \frac{1}{2} \left[\sqrt{a} + \frac{i p}{\hbar \sqrt{V_0}} \right] C e^{\frac{i p l}{\hbar} - \gamma}$
 $\beta = \frac{1}{2} \left[\sqrt{a} - \frac{i p}{\hbar \sqrt{V_0}} \right] C e^{\frac{i p l}{\hbar} + \gamma}$

for $\gamma = \hat{U} l \gg 1 \Rightarrow \alpha \ll \beta$

$\alpha \approx 0 \Rightarrow \frac{C}{A} = \frac{4 e^{-\frac{i p l}{\hbar} - \gamma}}{\left(\frac{1}{\sqrt{a}} - \frac{\sqrt{a} \hbar}{i p} \right) \left(\sqrt{V_0} - \frac{i p}{\hbar \sqrt{V_0}} \right)}$

$T = \left| \frac{C}{A} \right|^2 \approx e^{-\frac{2}{\hbar} \int_0^l \sqrt{2m(U-E)} dy}$

Nem feltétlen 0! Alagát
 effektus, nagyobb méré hibák

14 / Linear oscillator

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 \hat{x}^2 \quad \text{for } x \rightarrow \infty \quad U \rightarrow \infty$$

$$x \rightarrow 0 \quad U = 0$$

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

$$\hat{a}^\dagger := \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \hat{x} - i \sqrt{\frac{1}{2m\omega\hbar}} \hat{p}$$

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

$$\hat{H} = \hbar\omega (a^\dagger a + 1/2)$$

$$E_n = \hbar\omega (n + 1/2)$$

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

lifele ~~optet~~ $\hat{a}|\psi_0\rangle = 0$

$\hat{a}^\dagger$ felfele ~~optet~~

$$(x + \frac{i}{m\omega} p) |\psi_0\rangle = 0$$

$$\psi_0 = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2}$$

$$(\hat{a}^\dagger)^n |\psi_0\rangle = c \cdot |\psi_n\rangle$$

$$\langle \psi_m | \hat{a}^\dagger | \psi_n \rangle = \hat{a}_{mn}^\dagger = \hat{a}_{nm} =$$

$$= \langle \psi_n | \hat{a} | \psi_m \rangle = \sqrt{n+1} \delta_{n+1,m} = \delta_{n,m-1} \sqrt{n}$$

$$x_{mn} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \left(\sqrt{n} \delta_{n,n-1} + \sqrt{n+1} \delta_{n,n+1} \right)$$

$$p_{mn} = i \sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}} \left(-\sqrt{n} \delta_{n,n-1} + \sqrt{n+1} \delta_{n,n+1} \right)$$

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

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

$$a = \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & & \\ & 0 & \sqrt{2} & \\ & & \ddots & \ddots \end{pmatrix}$$

$$\frac{d^2 \psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E - \frac{m\omega^2 x^2}{2} \right) \psi = 0 \quad \xi := \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x$$

$$\frac{d^2 \psi}{d\xi^2} + \left(\frac{2E}{\hbar\omega} - \xi^2 \right) \psi = 0 \quad \text{Asymptotik: } \text{megoldandó, ha } \xi \text{ nagy: } \frac{d^2 \psi}{d\xi^2} + \xi^2 \psi = 0$$

$$\psi = \psi_a \cdot \chi \quad \chi \text{ hatványok alakban}$$

$$\psi_a = e^{\pm \xi^2/2}$$

amely csak lör. megoldás

$$\frac{d^2 \psi}{d\xi^2} = \psi'' = \psi'' \psi + 2\psi' \psi' + \psi \psi''$$

$$\psi'' = (\xi^2 - 1) \psi$$

$$\psi'' - 2\xi\psi' + \left(\frac{2E}{\hbar\omega} - 1\right)\psi = 0$$

$\underbrace{\hspace{10em}}_{=2n}$

$$\psi = \sum_{\ell=0}^{\infty} a_{\ell} \xi^{\ell} \quad \psi' = \sum_{\ell=0}^{\infty} \ell a_{\ell} \xi^{\ell-1}$$

$$\psi'' = \sum_{\ell=0}^{\infty} a_{\ell} \ell(\ell-1) \xi^{\ell-2} = \sum_{\ell=0}^{\infty} a_{\ell+2} (\ell+2)(\ell+1)$$

$$\sum_{\ell} \left(a_{\ell+2} (\ell+2)(\ell+1) + a_{\ell} (-2\ell+2n) \right) \xi^{\ell} = 0 \Rightarrow \ell \cdot a = 0 \Rightarrow a_{\ell+2} = \frac{2(\ell-n)}{(\ell+2)(\ell+1)} a_{\ell}$$

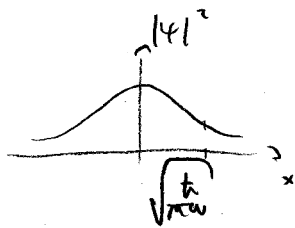
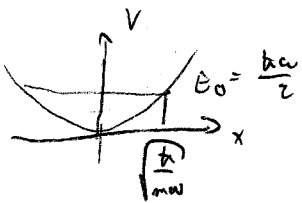
Kell, hogy a hatványok véges legyenek, különben (e^{ξ}) a végtelenségig növekszik

Ha n egész, akkor 0 lesz $\Rightarrow \frac{2E}{\hbar\omega} - 1 = 2n \Leftrightarrow E_n = \frac{\hbar\omega}{2} (2n+1) \quad n \in \mathbb{N}$

$\psi = H_n(\xi)$ Hermite polinomok $\Rightarrow \psi_n = c \cdot e^{-\xi^2/2} H_n(\xi)$

$$\psi_0 = \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{1/4} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2}$$

$$\psi_1 = c \cdot x \cdot e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2}$$



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

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

$$\langle H \rangle = \frac{\Delta p^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} \Delta x^2 \neq 0 \quad \Delta x \cdot \Delta p \geq \hbar/2$$

Térbeli oszcillátor:

$$\psi = \psi_1(x) \psi_2(y) \psi_3(z) \quad \frac{\psi_i''}{\psi_i} + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E_i - \frac{m\omega_i^2}{2} x_i^2 \right) \psi_i = 0$$

$$E = E_1 + E_2 + E_3 = \left(n_1 + n_2 + n_3 + \frac{3}{2} \right) \hbar\omega$$

15/ Centales erörtern, Coulomb problem

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

↑
1-er 2-er räumliche

$$r = r_2 - r_1$$

$$U(r) = U(r)$$

centales

$$R := \frac{m_1 r_1 + m_2 r_2}{m_1 + m_2} \quad \text{TKP}$$

$$r_1(x_1, y_1, z_1)$$

$$r_2(x_2, y_2, z_2)$$

$$R(X, Y, Z)$$

$$r(x, y, z)$$

$$\frac{dX}{dx_1} = m_1 / (m_1 + m_2)$$

$$\frac{dx}{dx_1} = 1 \quad \frac{dz}{dx_2} = -1$$

$$\frac{\partial \psi}{\partial x_1} = \frac{\partial \psi}{\partial X} \frac{dX}{dx_1} + \frac{\partial \psi}{\partial x_2} \frac{dx_2}{dx_1}$$

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x_1^2} = \frac{\partial^2 \psi}{\partial X^2} \frac{dX}{dx_1} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial x_2^2} \frac{dx_2}{dx_1} + \frac{m_1^2}{(m_1 + m_2)^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial X^2}$$

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x_2^2} = \frac{\partial^2 \psi}{\partial X^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial x_1^2} \frac{dx_1}{dx_2} + \frac{m_2^2}{(m_1 + m_2)^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial X^2}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2} \left[\left(\frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2} \right) \Delta_r + \frac{1}{m_1 + m_2} \Delta_R + U(r) \right] \psi = E \psi$$

folgt TKP ergibt
↓
 $E = E_0 + E_{kin} \leftarrow$ relativ "fugare"

$$\psi = \psi(R) \psi(r)$$

$$\mu := \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2(m_1 + m_2)} \Delta_R \psi = E_0 \psi \quad \text{TKP leinere}$$

$$-\frac{\hbar^2}{\mu} \Delta_r \psi + U(r) \psi = E_a \quad \text{relativ weniger leinere. Nämlich:}$$

$$\Delta = \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} r - \frac{L^2}{r^2 \hbar^2} \quad \psi(r) = \frac{1}{r} \chi(r) Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$$

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

centrifugalgat

$$U_{eff}(r) = U(r) + \frac{l(l+1)}{r^2} \frac{\hbar^2}{2\mu}$$

ebener oben, mit 10 weniger

$$\chi(r) \rightarrow 0 \quad \text{für } r \rightarrow \infty \quad \text{a normales mess.}$$

Da $U(r)$ an $\frac{1}{r^2}$ -ell. Kerne' singularis. (pl. Coulomb), asymptotisch exp. 0-Gren

$$\chi_a'' - \frac{l(l+1)}{r^2} \chi_a = 0 \quad \chi_a = c \cdot r^l \text{ statisch abh. jäh, bei } n = \begin{matrix} l+1 \Rightarrow \psi = c \cdot r^l Y_{lm} \\ -l \leftarrow \text{negativ} \end{matrix}$$

$n \rightarrow \infty$ ne $U(r) = 0$: $\chi_a'' + \frac{2mE}{\hbar^2} \chi_a = 0$

bei $E > 0$ neu kritisch, folgt. nehmen : $k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$, $\psi_a = c \cdot \frac{\sin(kr - \frac{\pi}{2}l + \delta_l)}{r} Y_{lm}$
↑
 ergab
 regulärlös

bei $E < 0$ $k = \sqrt{\frac{-2mE}{\hbar^2}}$ $\chi = c \cdot e^{\pm kr}$ $\psi = c \cdot \frac{1}{r} e^{-kr} Y_{lm}$

15/ Coulomb problem

$$U = -\frac{e^2}{r} \quad m = \frac{m_p m_e}{m_p + m_e} \approx m_e$$

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

löst sich allezeit: $E < 0$

$\xi := c \cdot r^2 \cdot E$, nach E -Wert unter $\frac{1}{4}$ liegen

$$\frac{d^2 \chi}{d\xi^2} - \left[\frac{1}{4} - \frac{\xi}{3} + \frac{\ell(\ell+1)}{\xi^2} \right] \chi = 0$$

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

abhängig

$$\xi = \frac{m e^2 m_0}{\hbar^2}$$

$\xi \rightarrow \infty$ asymptotisches Verhalten

$$\frac{d^2 \chi}{d\xi^2} - \frac{1}{4} \chi = 0 \Rightarrow \chi_a = e^{-1/2 \xi}$$

0-Ordnung $\xi^{\ell+1}$ ist eine Lösung $\Rightarrow \chi = \xi^{\ell+1} e^{-\xi/2} W(\xi)$

$$\xi W'' + (2\ell+2-\xi) W' + (\xi-\ell-1) W = 0$$

$$W = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \xi^n$$

$$W' = \sum_{n=0}^{\infty} n a_n \xi^{n-1}$$

$$W'' = \sum_{n=0}^{\infty} n(n-1) a_n \xi^{n-2}$$

$$\sum_{n=0}^{\infty} \left[a_{n+1} (n+1) (2\ell+2+n) + a_n (\xi-\ell-1-n) \right] \xi^n = 0$$

$$a_{n+1} = \frac{-(\xi-\ell-1-n)}{(n+1)(2\ell+2+n)} a_n$$

Wachstum oder asymptotisch

$$n = \frac{m e^2}{\hbar} \frac{1}{\sqrt{2m|E|}}$$

$$\xi = \ell+1, \ell+2 \dots := n \text{ gleich}$$

$$\ell=0 \Rightarrow n \in \mathbb{N}^+$$

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

$$\psi_{n=1, \ell=0} \sim e^{-\frac{r}{a_0}}$$

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{m e^2}$$

Erwartungswert

$$\psi_{n=2, \ell=0} \sim \left(\frac{r}{a_0} - \frac{1}{2} \right) e^{-\frac{r}{2a_0}}$$

ℓ : Drehimpuls

$$\langle r \rangle \sim \frac{3a_0^2 - \ell(\ell+1)}{2}$$

$$\frac{1}{r} = c \cdot (\text{elliptisches hypergeometrisches Polynom})$$

6/ Löfögegeben perturbede system

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$$

$$\hat{H}_0 \psi_n^{(0)} = E_n^{(0)} \psi_n^{(0)}$$

$$(\hat{H}_0 + d\hat{V})\psi = E\psi$$

$\hat{H}\psi = (\hat{H}_0 + \hat{V})\psi$ heißt $(\hat{H}_0 + d\hat{V})\psi$ problema, naja $d \rightarrow 1$

$$\psi = \sum_m c_m \psi_m^{(0)} \Rightarrow \sum_m c_m (E_n^{(0)} + d\hat{V}) \psi_m^{(0)} = \sum_m c_m E \psi_m^{(0)} \quad / \psi_h^{(0)}$$

$$\sum_m c_m (E_n^{(0)} \delta_{hm} + d \langle \psi_h^{(0)} | \hat{V} | \psi_m^{(0)} \rangle) = \sum_m c_m E \delta_{hm} \quad |h\rangle := \psi_h$$

$$(E - E_n^{(0)}) c_h = d \sum_m \langle h | V | m \rangle c_m$$

$$E = E_n^{(0)} + d E_n^{(1)} + d^2 E_n^{(2)} + \dots$$

$$c_m = \delta_{m\bar{n}} + d c_m^{(1)} + d^2 c_m^{(2)} + \dots$$

$$[E_n^{(0)} + d E_n^{(1)} + \dots - E_n^{(0)}] [\delta_{h\bar{n}} + d c_h^{(1)} + d^2 c_h^{(2)} + \dots] = d \sum_m \langle h | V | m \rangle \cdot$$

Az eh-nak stimmel nicht hell:

$$\cdot (\delta_{m\bar{n}} + d c_m^{(1)} + d^2 c_m^{(2)} + \dots)$$

bei $\bar{n} = h$ $d^0 = \checkmark$

$$d^1: E_n^{(1)} = \langle \bar{n} | V | \bar{n} \rangle$$

$$d^2: E_n^{(2)} + E_n^{(0)} c_n^{(2)} = \sum_m \langle \bar{n} | V | m \rangle c_m^{(1)}$$

bei $\bar{n} \neq h$

$$d^1: (E_n^{(0)} - E_h^{(0)}) c_n^{(1)} = \langle h | V | \bar{n} \rangle$$

$$d^2: E_n^{(1)} c_n^{(1)} + (E_n^{(0)} - E_h^{(0)}) c_n^{(2)} =$$

$$= \sum_m \langle h | V | m \rangle c_m^{(1)}$$

also berechnen: $E = E_n^{(0)} + \langle \bar{n} | V | \bar{n} \rangle$

$$\psi = \psi_n^{(0)} + \sum_{m \neq \bar{n}} \frac{\langle m | V | \bar{n} \rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \psi_m^{(0)} + c_{\bar{n}}^{(0)} \psi_{\bar{n}}^{(0)} \quad \langle \psi | \psi \rangle \stackrel{!}{=} 1 \quad \|\psi_n^{(0)}\| = 1$$

$$0 = \|\psi\|^2 - 1 = 2 \sum_{m \neq \bar{n}} \text{Re} \frac{\langle m | V | \bar{n} \rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \overbrace{\langle \psi_n^{(0)} | \psi_m^{(0)} \rangle}^0 + 2 \text{Re} c_{\bar{n}}^{(1)} \|\psi_n^{(0)}\|$$

$\text{Re } c_n^{(1)} = 0$ für, weil $|c_n^{(1)}|^2$ aditiv, für ein Lebesgue

2. Löseleiten

$$E_n^{(1)} = \sum_{\tilde{n} \neq n} \frac{\langle \tilde{n} | V | n \rangle \langle n | V | \tilde{n} \rangle}{E_n^{(0)} - E_{\tilde{n}}^{(0)}} \rightarrow \approx 0$$

$\rightarrow < 0$ in adäquater

effektiv ersetzt: $E_n^{(0)}$ auf: $\psi_n^{(0)} \quad n \in \{1, 2, \dots, P\} \Rightarrow \psi = \sum_{j=1}^P a_j \psi_n^{(0)} + \sum_{n \neq \tilde{n}} c_n \psi_n^{(0)}$

$$\sum_j a_j (E_n^{(1)} - E) \delta_{nj} + \sum_{\tilde{n}} \langle n | V | \tilde{n} \rangle + \sum_{m \neq \tilde{n}} c_m \langle n | V | m \rangle = 0$$

$$E = E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \dots \quad c_n = \lambda c_n^{(1)} + \lambda^2 c_n^{(2)} + \dots \quad a_j = a_j^{(0)} + \lambda a_j^{(1)} + \dots$$

$$\lambda^1 \text{-te: } \sum_j \left[(E_n^{(1)} - E_n^{(0)} - E_n^{(1)}) a_j^{(0)} \delta_{nj} + \langle n | V | \tilde{n} \rangle a_j^{(0)} \right] = 0$$

$\Downarrow$

$$\det(-E_n^{(1)} \delta_{nj} + \langle n | V | \tilde{n} \rangle) = 0 \Rightarrow E_n^{(1)} \text{ ist } a_j^{(0)}$$

$$\psi_{\tilde{n}}^{(0)} = \sum_j a_{j\tilde{n}}^{(0)} \psi_{\tilde{n}}^{(0)} \quad \text{wobei} \quad (\psi_{\tilde{n}} | V | \psi_{\tilde{n}}) = \delta_{\tilde{n}\tilde{n}} E_{\tilde{n}}^{(0)}$$

$$\psi = \sum_{j=1}^P \psi_{\tilde{n}}^{(0)} b_j + \sum_{n \neq \tilde{n}} c_n \psi_n^{(0)}$$

$$b_j = \delta_{j\tilde{n}} + \lambda b_j^{(1)}$$

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

$$E = E_{\tilde{n}}^{(0)} + \lambda E_{\tilde{n}}^{(1)} + \dots$$

$$E = E_{\tilde{n}}^{(0)} + \langle \tilde{n} | V | \tilde{n} \rangle + \dots$$

$$\psi = \psi_{\tilde{n}}^{(0)} + \sum_{n \neq \tilde{n}} \frac{\langle n | V | \tilde{n} \rangle}{E_{\tilde{n}}^{(0)} - E_n^{(0)}} \psi_n^{(0)} + \dots$$

17/ |dörfiggö partikuláris megoldás

Egyek stat. állapotból másikká megy az

$$i\hbar \frac{d\psi}{dt} = (H_0 + V(t))\psi$$

$$V(t) = \begin{cases} V(t) & \text{in } 0 < t < T \\ 0 & \text{elsewhere} \end{cases}$$

ilyen alakban
névű áll.

$$\psi(t) = \sum_n a_n(t) \psi_n^{(0)} e^{-\frac{i}{\hbar} E_n^{(0)} t}$$

$$H_0 \psi_n^{(0)} = E_n^{(0)} \psi_n^{(0)} \text{ ismeretes}$$

$$t < 0 \text{ --} a_n(t) = \delta_{ni} \text{ kezdete}$$

$$\psi_i = \psi_i^{(0)} e^{-\frac{i}{\hbar} E_i^{(0)} t} \text{ egyáltalán}$$

$$t > T \text{ --} a_n(t) = \text{dél}$$

$$\psi_f = \sum_n a_n(\infty) \psi_n^{(0)} e^{-\frac{i}{\hbar} E_n^{(0)} t}$$

all ar időkben, átmenet valószínűsége:

$$w_{fi} = |a_{fi}|^2$$

$$\sum_e \left(i\hbar \frac{d}{dt} a_e(t) + E_e^{(0)} a_e(t) \right) \psi_e^{(0)} e^{-\frac{i}{\hbar} E_e^{(0)} t} =$$

$$= \sum_e \left(E_e^{(0)} + V(t) \right) a_e(t) e^{-\frac{i}{\hbar} E_e^{(0)} t} \psi_e^{(0)}$$

$$i\hbar \frac{d}{dt} a_e(t) = \sum_l \langle a | V | l \rangle e^{\frac{i}{\hbar} (E_l^{(0)} - E_e^{(0)}) t} a_l$$

$$w_{ee} := \frac{1}{\hbar} E_e^{(0)} - E_e^{(0)}$$

0. közelítés: $a_n^{(0)}(t) = \delta_{ni}$

$$a_n^{(1)}(t) = -\frac{i}{\hbar} \sum_l \int_0^t \langle n | V(t') | l \rangle e^{i\omega_{nl}t'} a_l^{(0)}(t') dt' + \delta_{ni}$$

$$\Downarrow$$

$$a_n = \delta_{ni} - \frac{i}{\hbar} \int_0^t \langle n | V(t') | i \rangle e^{i\omega_{ni}t'} dt + \delta_{ni}$$

$$\lim_{n \rightarrow \infty} a_n^{(n)} = \delta_{ni} + \sum_{s=1}^{\infty} \left(-\frac{i}{\hbar} \right)^s \sum_{l_1, l_2, \dots} \int_0^t \int_0^{t_1} \dots \int_0^{t_{s-1}} \langle n | V(t_s) | l_s \rangle \langle l_s | V(t_{s-1}) | l_{s-1} \rangle \dots \langle l_1 | V(t_1) | i \rangle \dots$$

erőse nem = 1

$$V(t) \cdot e^{i\omega_{ee}t} = V_e(t)$$

↗ kit-ilep

$$e^{i\omega_{ee}t_s + \omega_{e,l_1}t_{s-1} + \omega_{l_1,l_2}t_{s-2} + \dots + \omega_{l_{s-1},i}t_1} dt_1 dt_2 \dots$$

$$a_n = \delta_{ni} + \sum_{s=1}^{\infty} \left(-\frac{i}{\hbar} \right)^s \int_0^t \int_0^{t_1} \dots \int_0^{t_{s-1}} \langle n | V_e(t_s) V_e(t_{s-1}) \dots V_e(t_1) | i \rangle dt_1 dt_2 \dots =$$

$t_1 > t_2 > \dots$

$$= \delta_{ei} + \sum_j \left(\frac{-i}{\hbar} \right)^j \frac{1}{j!} \int_0^t \int_0^{t_1} \dots \int_0^{t_{j-1}} \langle h | T(V_e(t_1), V_e(t_2) \dots) | i \rangle dt_1 dt_2 \dots dt_j$$

na!

$$a_e = \langle h | T \cdot e^{-\frac{i}{\hbar} \int_0^t V_e(t') dt'} | i \rangle$$

zeitabhängigkeit

$$T(A(t_1), B(t_2)) = \Theta(t_1 - t_2) A(t_1) B(t_2) +$$

$$+ \Theta(t_2 - t_1) B(t_2) A(t_1)$$

18/ Indukált emissió és abszorpció

i emissió: gerjesztett állapotban van, és jó frekvenciájú foton, legerjesztődött

abszorpció: kezdi a jó frekvenciájú foton, elnyeli az e^- , gerjesztett lesz

spontán emissió
qed tárgyalás

EM tér a part.

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V} \leftarrow \text{EM tér}$$

↑ minden megadva

$$\hat{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + \hat{V}_{\text{ch}}(r)$$

ellengőzölés
levegő

$$\hat{V} = -\frac{e}{mc} \hat{A} \hat{p} + \frac{e^2}{2mc^2} \hat{A}^2 - e\phi \quad \left. \begin{array}{l} \text{másként} \end{array} \right\}$$

$$\hat{V} = \hat{K} e^{i\omega t} + \hat{K}^* e^{-i\omega t} \Rightarrow \hat{K} = -\frac{eA_0}{2mc} e^{-i\omega r} \hat{p}$$

$$\hat{V} = -\frac{e}{mc} \hat{A} \hat{p} \quad \text{div} \hat{A}(r) = 0$$

$$\underline{A} = \underline{e} \cdot A_0 \frac{e^{i(\omega r - \omega t)} + e^{-i(\omega r - \omega t)}}{2} \quad \hat{p} \cos$$

$$\underline{B} = \omega \underline{A} = -A_0 \sin(\omega r - \omega t) (\underline{e} + \underline{e})$$

$$\underline{E} = \frac{\partial \underline{A}}{\partial t} = -A_0 \sin(\omega r - \omega t) \underline{e} \frac{\omega}{c} + \text{Ch. tér}$$

$$\omega_{ni} = \frac{1}{\hbar} (E_n - E_i) = \omega_n - \omega_i$$

$$W_{ni} = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_0^{\tau} \left(\underbrace{\langle n|K|i \rangle}_{K_{ni}} e^{i(\omega + \omega_{ni})t'} + \underbrace{\langle n|K^*|i \rangle}_{K_{in}} e^{i(\omega - \omega_{ni})t'} \right) dt' \right|^2 =$$

$$= \frac{1}{\hbar^2} \left| K_{ni} \frac{e^{i(\omega + \omega_{ni})\tau} - 1}{i(\omega + \omega_{ni})} + K_{in} \frac{e^{i(\omega - \omega_{ni})\tau} - 1}{i(\omega - \omega_{ni})} \right|^2$$

nagy, ha $\omega + \omega_{ni} = 0$ $\nearrow$ fényfelbontás
 $\omega = \omega_n - \omega_i$ $\nwarrow$ befűző fény felbontás

nagy, ha $\omega - \omega_{ni} = 0$

$$\omega = \omega_n - \omega_i = \frac{1}{\hbar} (E_n - E_i)$$

$$\text{ha } \tau \gg \frac{\hbar}{E_n} + \frac{\hbar}{E_i} \Rightarrow \frac{W_{ni}}{\tau} = \frac{2\pi}{\hbar} |K_{ni}|^2 \delta(E_n - E_i + \hbar\omega) \rho(E_n) \quad \left. \begin{array}{l} E_n > E_i \text{ elnyelés} \end{array} \right\}$$

$$K_{ni} = - \frac{e A_0}{2mc} \left(\underline{\hat{p}} e^{-i \underline{\hat{p}} \cdot \underline{\hat{r}}} \right)_{ni}$$

$$\downarrow$$

$$\hat{p}_{ni} =$$

$$\underline{\hat{p}} \ll 1$$

$$a = \frac{1}{\lambda}$$

$\lambda \gg$ jellemző atomméret

$$\text{ahogy } e^{-i \underline{\hat{p}} \cdot \underline{\hat{r}}} \approx 1$$

$$= \langle \psi_n | \hat{r} | \psi_i \rangle = \langle \psi_n | \frac{i}{\hbar} m [\hat{H}_0, \hat{r}] | \psi_i \rangle = \frac{i}{\hbar} m (E_n - E_i) \hat{r}_{ni}$$

$e \cdot \hat{r}_{ni} =$ átmeneti dipólismomentum =

$$K_{ni} = i(E_n - E_i) \frac{A_0}{2c\hbar} \underline{d}_{ni}$$

$$= \underline{d}_{ni}$$

$$\text{ha } \underline{d}_{ni} = 0 \text{ tilkalt átmenet}$$

$$\text{ha } \underline{d}_{ni} \neq 0 \Leftrightarrow \Delta l = \pm 1 \quad \Delta m = 0, \pm 1$$

47 Spén

szeparabilit: e^- -nek van mágneses momentumja akkor is, ha a "pályán" mozog

relativisztikus: $\underline{M} = \frac{e}{mc} \underline{L}$

"relativisztikus": $\underline{M}_S = \frac{e}{mc} \underline{S} (1 + \mu_e) \quad \mu_e < 0.02$

$$\mu_p \approx 1.5 \quad \mu_n \approx -2$$

$$\hat{J} = \hat{L} + \hat{S} \quad \text{teljes imp. momentum,} \quad \hat{J} \times \hat{J} = i\hbar \hat{J}$$

$$\hat{L} \text{ és } \hat{S} \text{ független} \Rightarrow [\hat{L}_i, \hat{S}_j] = 0$$

Kellámfor. hely. h. tartalmának az értéke, $\psi(\underbrace{x, y, z}_L, \underbrace{\sigma}_S)$ utjából kiemelhetjük független

$\hat{S}_z$ sajátértéke $\pm \frac{\hbar}{2}$ lehet a részecske egy bizonyos állapotában, $(\hbar \cdot [-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}] \cap \mathbb{N})$

$\hat{J}^2$ sajátértéke $\approx (j+1) \frac{\hbar^2}{2}$ értéke a részecske állapotától $(p, e^- \dots)$ függ.

$\frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \dots$ fermionokra és $0, 1, \dots$ boszonokra. Az e^-, p^+, n^0 fermion

Az imp. momentum nagyságához hasonló mennyiség, $\hat{S}_z \psi(\sigma) = \hbar \psi(\sigma) \cdot \sigma$

$$S_{\pm} \psi = (S_x \pm i S_y) \psi(\sigma) = \hbar \sqrt{(n \pm 1) - n(n \pm 1)} \psi(\sigma \pm 1)$$

Elektronra $\psi(\frac{1}{2})$ és $\psi(-\frac{1}{2})$ állapotok, $\langle \frac{1}{2} | S_z | \frac{1}{2} \rangle = \hbar/2$

2D vektortér, $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ és $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ bázis

$$\langle -\frac{1}{2} | S_z | -\frac{1}{2} \rangle = -\hbar/2$$

$$\langle \frac{1}{2} | S_z | -\frac{1}{2} \rangle = 0 = \langle -\frac{1}{2} | S_z | \frac{1}{2} \rangle$$

$$\text{Ekkor } S_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$S_x = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad S_y = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

$$S_+ = S_x + S_y$$

$$\langle \frac{1}{2} | S_x | \frac{1}{2} \rangle = \langle \frac{1}{2} | S_+ + S_- | \frac{1}{2} \rangle = 0 = S_{x,11}$$

$$\langle \frac{1}{2} | S_+ + S_- | -\frac{1}{2} \rangle = \langle \frac{1}{2} | \frac{1}{2} \hbar | \frac{1}{2} \rangle = \frac{1}{2} \hbar = \left(\frac{1}{2} \hbar \right)^* = S_{x,12} = S_{x,21}$$

$$S_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$S_y = \frac{S_+ - S_-}{i}$$

$$\langle \frac{1}{2} | S_y | \frac{1}{2} \rangle = \langle \frac{1}{2} | \frac{S_+ - S_-}{i} | \frac{1}{2} \rangle = 0$$

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

$$\langle \frac{1}{2} | \frac{S_+ - S_-}{i} | -\frac{1}{2} \rangle = \frac{1}{i} \left(\frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right) = \frac{1}{i} = -\frac{1}{i} = \left(-\frac{1}{i} \right)^* = S_{y,12} = S_{y,21}$$

Egyes ált. állapot: $\alpha \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \beta \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ ahol $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1 \rightarrow \Psi = \begin{pmatrix} \psi(\frac{1}{2}) \\ \psi(-\frac{1}{2}) \end{pmatrix}$

Funkcionális: $\delta \psi_{j,n} = \frac{i}{\hbar} \delta \psi \psi_{j,n}$

$$S = \frac{1}{2}, L = 0, \delta \psi = (0, 0, \delta \psi)$$

$$\delta \psi(\sigma) = \frac{i}{\hbar} \delta \psi \hat{S} \psi(\sigma) = i\sigma \delta \psi \psi(\sigma)$$

$$\psi(\sigma)' = \delta \psi(\sigma)$$

$$\frac{d\psi}{d\sigma} = i\sigma \psi$$

$$\delta(\psi(\sigma)) = \psi(\sigma) e^{i\sigma\psi} \text{ négyes } \psi\text{-re! } \psi = 20 \text{ akkor } \hat{O}_{\sigma^2}(\psi(\sigma)) = -\psi(\sigma)$$

$$\delta(\psi(\sigma)) = \sum_{\sigma'} a_{\sigma,\sigma'} \psi(\sigma')$$

↑ függhet ℓ -től és függ a maximumtól

$$\text{ha } \sigma = \frac{1}{2} \quad \psi'(\frac{1}{2}) = \alpha \psi(\frac{1}{2}) + \beta \psi(-\frac{1}{2})$$

$$u = \begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ \gamma & \delta \end{pmatrix} \text{ unitár, det } u = 1$$

$$\psi'(-\frac{1}{2}) = \gamma \psi(\frac{1}{2}) + \delta \psi(-\frac{1}{2})$$

$$u \in SU(2)$$

$$1 \quad \psi(\frac{1}{2}) \psi(\frac{1}{2}) \quad \frac{1}{2} [\psi(\frac{1}{2}) \psi(-\frac{1}{2}) + \psi(\frac{1}{2}) \psi(\frac{1}{2})] \quad \psi(-\frac{1}{2}) \psi(-\frac{1}{2}) \quad -1$$

$$\frac{1}{2} [\psi(\frac{1}{2}) \psi(\frac{1}{2}) - \psi(-\frac{1}{2}) \psi(\frac{1}{2})] \quad 0$$

$$\hat{S} = \hat{S}^1 \otimes 11^2 + 11^1 \otimes \hat{S}^2$$

20/ Stark effektus

3D H.O. elektronok térben (pl H atom). Az elektronok tér perturbációt (váltakozó E)

$$\hat{H} = \underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta - \frac{e^2}{r}}_{H_0} + \underbrace{e \mathcal{E} z}_{\hat{V} \text{ perturbáció, } \propto E}$$

$E = (0, 0, \mathcal{E})$

$$\psi_{nlm}^{(0)} = \frac{1}{r} \chi_{nl}(r) Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$$

ha $n=1$, $l=0$, nem degenerált

$$E_n^{(0)} = \frac{-m e^4}{2 \hbar^2} \frac{1}{n^2}$$

$$E_1^{(1)} = \langle \psi_{100} | -e \mathcal{E} z | \psi_{100} \rangle$$

$$\chi \sim e^{-\tilde{r}/a_0} \quad Y_{lm} = C \Rightarrow E_1^{(1)} = 0$$

$n=2$

$l=0, 1$

↑

$m = -1, 0, 1$

$$\psi_{200} = \psi_1$$

$$\psi_{210} = \psi_2$$

$$\psi_{21-1} = \psi_3$$

$$\psi_{211} = \psi_4$$

$$\langle \psi_i | V | \psi_n \rangle = V_{in} =$$

$$\begin{pmatrix} V_{11} & V_{12} & 0 & 0 \\ V_{21} & V_{22} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & V_{33} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & V_{44} \end{pmatrix}$$

↑
nőgy nemzeti integrál miatt áll. 0

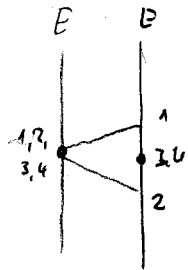
$$V_{21} = V_{12} (= (V_{21})^*) \quad \Rightarrow \quad \psi_{210} \text{ és } \psi_{200} \text{ valószínű}$$

A diagonális elemek is 0-k a fenti $n=1$ -hez hasonlítva $\Rightarrow \Delta l = 1$ A V operátor impulzusmomentuma 1.

$$V_{12} = V_{21} = \int \psi_1(-e \mathcal{E} z) \psi_2 d\mathbf{r} = \dots = e \mathcal{E} a_0 \cdot \text{szám}$$

" 3/2

$$\begin{vmatrix} 0 - E^{(1)} & 3e\mathcal{E}\mathcal{L} & 0 & 0 \\ 3e\mathcal{E}\mathcal{L} & 0 - E^{(1)} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -E^{(1)} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -E^{(1)} \end{vmatrix} = 0$$



néhány feloldódhat a degeneráció

megfelelő n.v.

$$\begin{vmatrix} \sqrt{\frac{1}{2}} \\ \sqrt{\frac{1}{2}} \\ 0 \\ 0 \end{vmatrix} \quad \begin{vmatrix} \sqrt{\frac{1}{2}} \\ -\sqrt{\frac{1}{2}} \\ 0 \\ 0 \end{vmatrix} \quad \begin{vmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{vmatrix} \quad \begin{vmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{vmatrix}$$

$E^{(1)} :$

$3e\mathcal{E}\mathcal{L}$

$-3e\mathcal{E}\mathcal{L}$

0

0

Ha nem 0 lenne az atom, akkor $E(l)$ egy csúcs m névint degenerált

21/ H atom spektruma

Spin-pályák kettős, kicsi (relat) effektus

$E_{\text{spin}} \propto$ körben mozgás az M mágneses momentum e^-

$$E_{\text{spin}} = \frac{1}{c} \underline{M} (\underline{v} \times \underline{E}) \quad \underline{E} = -\nabla\phi = -\frac{d\phi}{dr} \hat{r}$$

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

$$E_{\text{spin}} = \frac{1}{c} \frac{d\phi}{dr} \underline{M} (\underline{v} \times \hat{r}) = \frac{1}{c} \frac{d\phi}{dr} \underline{M} \underline{L} = \frac{e}{m^2 c^2 r} \frac{d\phi}{dr} \underline{S} \underline{L}$$

$$\hat{U}_{\text{spin}} = \frac{e}{2m^2 c^2} \frac{d\phi}{dr} \hat{S} \hat{L}$$

$$\hat{S} \hat{L} = \frac{1}{2} [\hat{J}^2 - \hat{L}^2 - \hat{S}^2]$$

$$\hat{J} = \hat{L} + \hat{S}$$

$$\frac{1}{2} [l(l+1) - l(l+1) - \frac{3}{2}] =$$

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

$$\frac{1}{2} [l(l+1) - l(l+1) - \frac{3}{2}] =$$

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

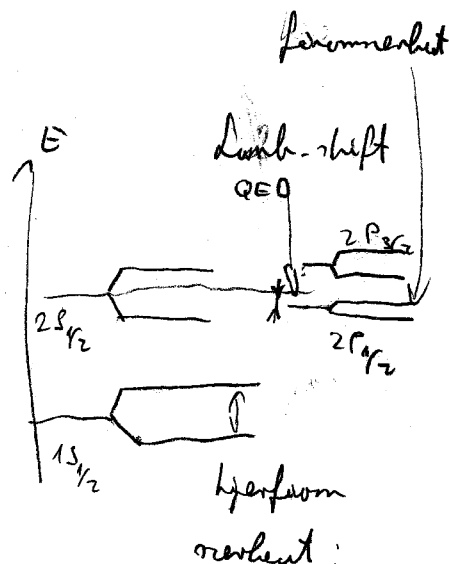
H atomnál nem spin nemeként tekinthetjük
indukálni, hanem teljes impulzusmomentum alapján

$$\psi_{nlm} \rightarrow \psi_{njl m_j}$$

Ha $n=1$ | $l=0$ | $j=1/2$ nincs felhasadás $\Delta E=0$

$n=2$	$l=1$	$j=1/2$	$\Delta E \sim -\frac{l+1}{2} = -1$
		$j=3/2$	$\Delta E \sim \frac{l}{2} = 1/2$
	$l=0$	$j=1/2$	

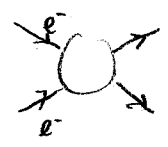
↑
főmomentum



proton mágneses
momentuma is számít

22/ Azonos részecske, Pauli elv

2 azonos tulajdonságú részecske nem lehet azonos állapotban, a pályáit sem tudjuk követni. Pl. nincsen értelme, hogy melyik e^- mennyi megy:



A két részecske tartalmának hullámfüggvénye helyett

legyen r_1 -re és r_2 -re : $\psi(r_1, r_2) = \psi(r_2, r_1)$, legoldhatósági norma'jára

$$\psi(r_1, r_2, \dots) = e^{i\alpha} \psi(r_2, r_1, \dots) = e^{2i\alpha} \psi(r_1, r_2, \dots) \quad |e^{2i\alpha}|^2 = 1$$

pl $e^{i\alpha} = \pm 1$

Tehát ψ szim. vagy antiszim. az azonos részecskékre kiterjedően.

$\uparrow$ boson $\uparrow$ fermion

$\psi(q_1, q_2, \dots)$ -t könnyen győztethetjük $\psi_1(q_1, q_2), \psi_2(q_1, q_2)$ -köl:

fermion

$$\frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_1(q_1) \psi_2(q_2) - \psi_1(q_2) \psi_2(q_1)) = \psi$$

antiszim. Alt: $\psi = \frac{1}{\sqrt{N!}}$

$$\begin{vmatrix} \psi_1(q_1) & \psi_1(q_2) & \dots & \psi_1(q_n) \\ \psi_2(q_1) & \psi_2(q_2) & \dots & \psi_2(q_n) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \psi_n(q_1) & \psi_n(q_2) & \dots & \psi_n(q_n) \end{vmatrix}$$

$\uparrow$ ant a permutáció $\uparrow$ q_i sorára előjelet vált, n din Levi-Civita $\Rightarrow$ determinans

$\nearrow$

örmeget

boson: $\psi = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\text{permutáció}} \psi_{p_1}(q_1) \psi_{p_2}(q_2) \dots \psi_{p_n}(q_n)$

A kv. l. k. győztethető $\Rightarrow$ Pauli ~~szigorú~~ elv megoldható $\psi(q_1, q_2, \dots) = \chi(q_1, q_2, \dots) \phi(r_1, r_2, \dots)$

ha ψ szim $\Rightarrow \chi$ antiszim $\uparrow$ spin hullámfüggvény

$\uparrow$ térbeli

ψ -nek antiszim. kell lennie $\Rightarrow$ ha ψ antiszim $\Rightarrow \chi$ szim

He atom

$$H = \underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_1 - \frac{\hbar^2}{2m} \Delta_2 - \frac{2e^2}{r_1} - \frac{2e^2}{r_2}}_{\hat{H}_0} + \underbrace{\frac{e^2}{r_{12}}}_{\hat{V}}$$

$\hat{H}_0$ rólát függvényei: $\psi^1 = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_a(1) \psi_b(2) + \psi_a(2) \psi_b(1))$ labelineha, ez minem

ψ

a spin nem: antinorm
 $S=0$ (singlet)

$$\psi^3 = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_a(1) \psi_b(2) - \psi_a(2) \psi_b(1))$$
 a térbeli antinorm

a spin nem: norm
 $S=1$ (triplet)

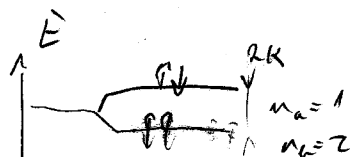
$$E^{(0)} = E_a + E_b$$

$V = \frac{e^2}{r_{12}}$ diagonalizálunk (dől: a fenti két halmazt pont jó)

$$\Delta E_1 = \langle \psi^1 | V | \psi^1 \rangle = C + K \quad C = \iint d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 |\psi_a(1) \psi_b(2)|^2 \frac{e^2}{r_{12}}$$

$$\Delta E_3 = \langle \psi^3 | V | \psi^3 \rangle = C - K \quad K = \iint d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \psi_a^*(1) \psi_b(1) \psi_a(2) \psi_b^*(2) \frac{e^2}{r_{12}}$$

klamikusan meggyanulok ↑ kvantumos hatás



$n_a=n_b=1$ ↑ spin triplet az alapáll Pauli miatt

23/ Atomi energiaszintjei, Hartree-fock, periódus

Nem 1 atom spektruma alapján létezik Elker Sch-t kell

megoldani a mag-elektron, elektron-elektron kötéspálya problémát.

Nem lehet közvetlen, megmérésből megkérdezni: L teljes pályamomentum
 S spin

Elfogalt E szintek: $(2L+1)(2S+1)$ szerint P paritás

Vannak relatív korrekciók, de most $C \approx \infty$, így elhárul

$2L+1$ teljes pályamomentum
 L pályamomentum
 S spin

$L = 0 \ 1 \ 2 \ 3 \ 4 \ 5$
 $S \ P \ D \ F \ G \ H$

Hartree-módszer: - az elektronok van k.f.-e, ezek normálisan a rendszám alapján

- az i a többi átlagolt elektron mozgása

- Pauli elvet nem használjuk

$$V(\underline{r}_j) = -\frac{Ze^2}{r_j} + \sum_{k \neq j} \int |\psi_k(\underline{r})|^2 \frac{e^2}{|\underline{r} - \underline{r}_j|} d\underline{r}$$

↑
mag

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2m} \Delta_j + V(\underline{r}_j) \right] \psi_j(\underline{r}_j) = E_j \psi_j(\underline{r}_j)$$

$$\Psi(\underline{r}_1, \underline{r}_2, \dots) = \psi_1(\underline{r}_1) \psi_2(\underline{r}_2) \dots$$

Ha Pauli elvet is figyelembe vesszük: Hartree-Fock közelítés

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \Delta_i \psi_i(\underline{r}_i) - \frac{Ze^2}{r_i} \psi_i(\underline{r}_i) + \sum$$

$$+ \sum_{j \neq i} \int \left[|\psi_j(\underline{r})|^2 \psi_i(\underline{r}_i) - \left[\sum_{\alpha} \psi_j^*(\alpha) \psi_j(\alpha) \right] \psi_j^*(\underline{r}_j) \psi_i(\underline{r}_i) \right] \frac{e^2}{r_{ji}} d\underline{r}_j = E_i \psi_i(\underline{r}_i)$$

$$\psi_i \quad i \in \{1, 2, \dots, Z\}$$

Staten determinánsal len antiszimm.

egy-elektron állapotát jellemző: n, l, m, σ (er volt egy e^- helyen)

He-ra több elektron kell, pl $1s \ 2p$

↑ ↑
fokoz. szelvény.

← e^- konfiguráció

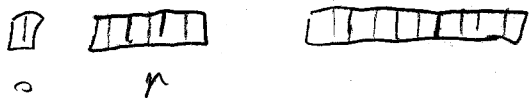
$2p_0 \in J$, a helyes irány

atom állapot

Adott n, l -re $2(2l+1)$ e^- állapot van, mivel egy e^- !

Zárult hélyra az atom: 1S_0 állapotban.

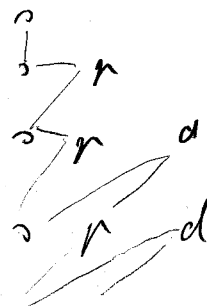
Periodikus rendszer: atomok alapállapotainak konfigurációja növekvő rendszámra.



szimmetria

hellyel a

Atomok hf. → 0. Hartree-Fock-
módszerrel közelítik



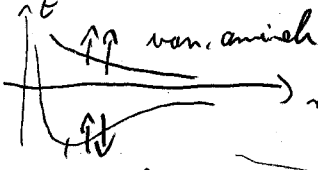
Ha part ψ rendű leírás $\in \mathbb{R}$. $n=0$ -nál $\psi \sim r^l$, így megközelít l -re

közelít van (centrifugál-gát), a leírásból meg is lehet látni.

d is f közelít van, mert n is p , ezért közelítható.

24/ Kémiai kötés, H_2 molekula, H_2^+ ion

Közelítő vizsgál, a magok rögzíthetők, ebben leírjuk meg az e^- mozg.

példaként H_2 :  van, aminek nincs kötési állapot, itt a teljes spin $\neq 0$ elektronok van kötési áll. itt a teljes spin $= 0$

A protonok között van az e^- , ami a protonok között tartózkodhat.

Itt a teljes spin $= 0$, kötési áll. (H_2)

vegyérték = 2 spin pl $S = \frac{1}{2}$ vegyérték 1

$S = 0$ vegyérték 0, de ha a kötés hely s^2 akkor

kötés van az $s^1 p^1$, ahol $S = 1 \rightarrow$ a vegyérték 2 is lehet

Ha egy atom kötés vegyértékei lehetnek, akkor 2 a vegyérték kötés $s^2 p^1$ $S = \frac{1}{2}$
 $\downarrow$
 $s^2 p^2$ $S = 1$

A betöltetlen kötés e^- elektronok igen nagy lehet: NaCl poláros

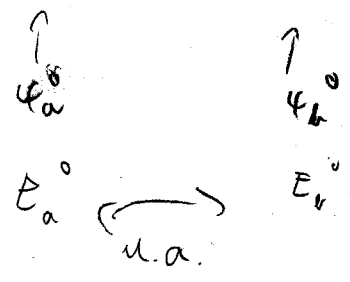
A kémiai kötés elemzése
 rezgési állapot $E \sim \hbar \sqrt{\frac{D}{m}} (n + \frac{1}{2})$
 forgási állapot $E \sim \frac{\ell(\ell+1)}{2I} \hbar^2$

H_2 molekula

$$H = H_a^0 + \lambda H_a^{1*} = H_a^0 + \lambda H_a^1$$

$$E = E^0 + \lambda E^1 + \dots$$

$$\psi = \psi^0 + \lambda \psi^1 + \dots = \frac{\psi_a^0 + \psi_b^0}{\sqrt{2}} + \lambda \psi^1$$



$$(H - E)(\psi^0 + \lambda \psi^1 + \dots) = 0$$

$$\lambda^0: (H - E) \psi^0 = 0$$

$$\hat{H}^1: \quad (H-E) \psi^1 + \frac{1}{\sqrt{2}} \left(H_a^1 \psi_a^0 + H_b^1 \psi_b^0 \right) - E^1 \frac{\psi_a^0 + \psi_b^0}{\sqrt{2}} = 0 \quad / \cdot (\psi_a^0 + \psi_b^0)$$

$$0 = \underbrace{\langle \psi_a^0 + \psi_b^0 | H-E | \psi^1 \rangle} + \frac{1}{\sqrt{2}} \langle \psi_a^0 + \psi_b^0 | H_a^1 \psi_a^0 + H_b^1 \psi_b^0 \rangle - E^1 \frac{1}{\sqrt{2}} \langle \psi_a^0 + \psi_b^0 | \psi_a^0 + \psi_b^0 \rangle$$

$$= \sqrt{2} \underbrace{\langle \psi - \psi^1 | H-E | \psi^1 \rangle}_{\substack{\uparrow \\ \text{einmal } 0}} = -\sqrt{2} \underbrace{\langle \psi^1 | H-E | \psi^1 \rangle}_{\substack{\uparrow \\ \text{orthogonalität}}}$$

$$E^1 = \langle \psi_a^0 + \psi_b^0 | \psi_a^0 + \psi_b^0 \rangle = 2E^1 \quad (\text{hermitisch orthogonale})$$

$$E^1 = \frac{1}{2} \langle \psi_a^0 + \psi_b^0 | H_a^1 \psi_a^0 + H_b^1 \psi_b^0 \rangle \quad \text{bzw. } \frac{\psi_a^0 - \psi_b^0}{\sqrt{2}} \text{ liefert } s=1$$

+ : s=0

Freier Hamiltonian:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} (\Delta_1 + \Delta_2) + e^2 \left(\frac{1}{r} + \frac{1}{r_{12}} - \frac{1}{r_{11}} - \frac{1}{r_{21}} - \frac{1}{r_{13}} - \frac{1}{r_{23}} \right)$$

$$\psi_a^0 = \psi_A(r_{1A}) \psi_B(r_{2B})$$

$\swarrow \nwarrow$ H vertauscht

$$\psi_b^0 = \psi_A(r_{1B}) \psi_B(r_{2A})$$

$$H_a^0 = -\frac{\hbar^2}{2m} (\Delta_1 + \Delta_2) - e^2 \left(\frac{1}{r_{1A}} + \frac{1}{r_{2B}} \right)$$

$$H_b^0 = -\frac{\hbar^2}{2m} (\Delta_1 + \Delta_2) - e^2 \left(\frac{1}{r_{1B}} + \frac{1}{r_{2A}} \right)$$

$$E^0 = -\frac{e^2}{2s} \left(\frac{1}{r_A^2} + \frac{1}{r_B^2} \right) \quad s = \frac{\hbar^2}{me^2}$$

$$E^1 = \frac{1}{2} \langle \psi_a^0 \pm \psi_b^0 | H_a^1 \psi_a^0 \pm H_b^1 \psi_b^0 \rangle = C \pm K$$

$$\begin{aligned} \int \psi_a^0 H_a^1 \psi_a^0 d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 &= \\ &= \int |\psi_A(r_{1A})|^2 |\psi_B(r_{2B})|^2 H_a^1 d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \end{aligned}$$

$$\int d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \psi_a^0 H_a^1 \psi_a^0 = \int d\vec{r}_1 \int d\vec{r}_2 \psi_A(r_{1A}) \psi_A(r_{2A})$$

H_{12} symmetrisch vertauscht

$$\psi_B(r_{2B}) \psi_B(r_{1B}) H_a^1$$

25/ Van der Waals erö

$$V(R) = -\frac{A}{R^6} \text{ ist festzulegen}$$

zylinderförmige H-atom KHa : $R \gg \text{atomradius} = \rho_0 \Rightarrow K \text{ kleiner} \approx 0$

$$\hat{H} = \hat{H}_A(\underline{r}_1) + \hat{H}_B(\underline{r}_2) + \hat{H}'(\underline{r}_1, \underline{r}_2, R)$$

$$\downarrow$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_i - \frac{e^2}{r_i}$$

$$\hat{H}' = \frac{e^2}{R} + \frac{e^2}{r_{12}} - \frac{e^2}{r_{1B}} - \frac{e^2}{r_{2A}}$$

$$\hat{H}' = \frac{e^2}{R^3} \left(\underline{r}_1 \cdot \underline{r}_2 - 3 \frac{\underline{r}_1 \cdot \underline{R} \cdot \underline{r}_2 \cdot R}{R^2} \right) + O\left(\frac{1}{R^4}\right)$$

$$\text{in } \underline{R} = (0, 0, R)$$

$$\hat{H}' = \frac{e^2}{R^3} (x_1 x_2 + y_1 y_2 - 2 z_1 z_2)$$

$$E_0 = E_{A,1} + E_{B,1} = 2E_1$$

am

$$\psi_0 = \psi_{100}(\underline{r}_1) \psi_{100}(\underline{r}_2)$$

↑ 0-ich berechnen

ebenfalls

(Spin nicht antizipieren)

$$E^{(1)} = \langle \psi_0 | \hat{H}' | \psi_0 \rangle = 0$$

$$E^{(2)} = \sum_{n \neq 0} \frac{|\hat{H}'_{0n}|^2}{E_0 - E_n} \sim \frac{1}{R^6} \leftarrow \text{er a Van der Waals erö}$$

$$E_0 - E_n = -\frac{e^2}{\rho_0} + \frac{e^2}{2\rho_0 n^2} - \frac{e^2}{2\rho_0 n^2} = 0$$

= ha G.

$$-\frac{e^2}{\rho_0} < E_0 - E_n < -\frac{3}{4} \frac{e^2}{\rho_0}$$

↙ ha $\frac{n_1=2}{n_2=2}$

$$\sum_{n \neq 0} |\hat{H}'_{0n}|^2 = \overbrace{(\hat{H}')^2}_{=0} - |\hat{H}'_{00}|^2 \sim \frac{e^4 \rho_0^4}{R^6}$$

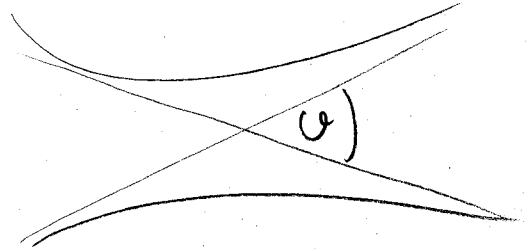
$$\frac{8e^2 \rho_0^5}{R^6} \leq V(R) \leq -\frac{6e^2 \rho_0^5}{R^6}$$

20/ Szóráselmélet (rugalmas)

Kemélet, m_1, m_2 részecskék, $U(r)$ KH, $r = r_1 - r_2$

Leírható, mint $m = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$ red. tömegű részecske mozgása az $U(r)$ potenciálban.

Rugalmas, mert E megmarad, belső
erőket nem volt.



$$\tan \theta_1 = \frac{m_2 \sin \theta}{m_1 + m_2 \cos \theta}$$

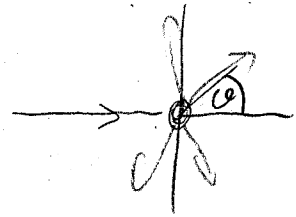
$$\theta_2 = \frac{\pi - \theta}{2}$$

Időbeli leírás helyett - fázisok

feladatokat oldjuk meg:

Aszimptotikus viselkedés a $-\infty$ -ból: e^{ikz}

és lineáris $f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r}$ alakú



Ha $r \rightarrow \infty$: $\psi_a = e^{ikr} + f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r}$

Bejövő áraműrő: $\bar{j}_{be} = \frac{i\hbar}{2m} \left(\psi \frac{\partial \psi^*}{\partial z} - \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial z} \right) = \frac{\hbar k}{m}$

Linéris $\bar{j}_{ki} = \frac{i\hbar}{2m} \left(\psi \frac{\partial \psi^*}{\partial r} - \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) = \frac{\hbar k}{mr^2} |f(\theta)|^2$

$$dN = \bar{j}_{ki} dF = \frac{\hbar k}{mr^2} |f(\theta)|^2 \frac{d\sigma}{r^2} = \frac{\hbar k}{m} |f(\theta)|^2 d\sigma$$

$$dN = \sigma(\theta, \varphi) \bar{j}_{be} d\sigma \Rightarrow \sigma(\theta) |f(\theta)|^2$$

↑
amiatt nem lehet φ függő

Parsvölös hullámok növekedése

Legyen a pot. $U(r) > U(r)$ és $r \rightarrow \infty$ akkor $U \rightarrow 0$

$$\psi = \sum_{l=0}^{\infty} A_l P_l(\cos \vartheta) \frac{\chi(r)}{r} \quad \chi_{l,r} \text{ -ből csak } \chi_{l,0} \text{ a rögzíthető}$$

$$\chi'' - \left(\frac{2m}{\hbar^2} U + \frac{l(l+1)}{r^2} - k^2 \right) \chi = 0 \quad \leftarrow \text{asimptotikus}$$

$$\chi = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \sin\left(kr - \frac{\pi}{2}l + \delta_l\right)$$

$$\psi \sim \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{1}{r} \sum_{l=0}^{\infty} A_l P_l \sin\left(kr - \frac{\pi}{2}l + \delta_l\right) = \frac{i}{2} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{1}{r} \sum_l A_l P_l \left[e^{-i\left(kr - \frac{\pi}{2}l + \delta_l\right)} - e^{i\left(kr - \frac{\pi}{2}l + \delta_l\right)} \right]$$

A_l legyen olyan hogy $e^{ikr} + \frac{f(\vartheta)}{r} e^{ikr}$ legyen az asimptotikus

$$e^{ikr} = \frac{i}{2kr} \sum_l i^l (2l+1) P_l \left[e^{-i\left(kr - \frac{\pi}{2}l\right)} - e^{i\left(kr - \frac{\pi}{2}l\right)} \right]$$

összeegyeztetve

Legyen $\psi = e^{ikr}$ csak határozzuk meg a $f(\vartheta)$ -t: $A_l = \frac{1}{k} \sqrt{\frac{\pi}{2}} (2l+1) i^l e^{i\delta_l}$

$$\text{Végül: } \psi = \frac{i}{2kr} \sum_l (2l+1) P_l(\cos \vartheta) \left[(-1)^l e^{-ikr} - e^{i\delta_l} e^{ikr} \right]$$

$$f(\vartheta) = \frac{1}{2ik} \sum_l (2l+1) P_l(\cos \vartheta) (e^{i\delta_l} - 1) \quad \leftarrow \sum_l \text{ szorzatmérték}$$

$$\sigma = 2\pi \int_0^\pi |f(\vartheta)|^2 \sin \vartheta d\vartheta = \frac{4\pi}{k^2} \sum_l (2l+1) \sin^2 \delta_l$$

26/ Born-közelítés

$$\Delta \psi^{(0)} + k^2 \psi^{(0)} = 0$$

A zérőpotenciál hatása kicsi, perturbatív. A perturbációt $\psi^{(0)} = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$

ψ az a rándít lényeg: $\Delta \psi + \left(k^2 - \frac{2mU}{\hbar^2}\right) \psi = 0$ $\psi = \psi^{(0)} + \psi^{(1)}$

$$\Delta \psi^{(1)} + k^2 \psi^{(1)} = \frac{2m}{\hbar^2} U \left(\psi^{(0)} + \psi^{(1)} \right) \approx \frac{2m}{\hbar^2} U e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$$

↑
elhanyagolható

Megoldás keresés Green függvényre: $(\Delta + k^2) \phi = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)$

$$\phi = \frac{-1}{4\pi} \frac{e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}}{R} \quad \text{ahol } R = |\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|$$

$$\psi^{(1)} = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int U(\mathbf{r}') \frac{e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}' + \mathbf{k}\cdot\mathbf{r})}}{R} d\mathbf{r}'$$

Iteratív megoldás: az elhanyagolt $\psi^{(1)}$ helyére beírjuk a legutóbbi értéket

A visszavibráció $\psi^{(1)}(\mathbf{r} \rightarrow \infty)$ -ből jön.

Kicsi hatótáv esetén $r \gg r'$, $\frac{1}{R} \approx \frac{1}{r}$, $i\mathbf{k}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \approx i\mathbf{k}\mathbf{r} - i\left(\frac{\hbar\mathbf{r}}{r}\right)\mathbf{r}' =$

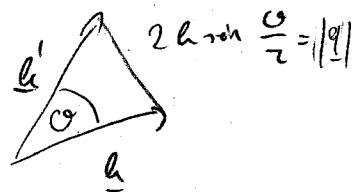
$$= i\mathbf{k}\mathbf{r} - i\mathbf{k}'\mathbf{r}'$$

$$|\mathbf{k}'| = |\mathbf{k}|$$

$$\psi^{(1)}(\mathbf{r}) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \frac{e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}}{r} \int U(\mathbf{r}') e^{i(\mathbf{k} - \mathbf{k}')\cdot\mathbf{r}'} d\mathbf{r}'$$

$$f(\theta) = \frac{m}{2\pi\hbar^2} \int U(\mathbf{r}') e^{i(\mathbf{k} - \mathbf{k}')\cdot\mathbf{r}'} d\mathbf{r}'$$

↑
Fourier transzformáció



$$\mathbf{q} = \mathbf{k}' - \mathbf{k}$$

$$d\sigma = |f(\theta)|^2 d\Omega = \frac{m^2}{4\pi^2\hbar^4} \left| \int U(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} d\mathbf{r} \right|^2 d\Omega$$

Da U kugelsymmetrisch: $\int U(r) e^{-iqr} d\Omega = 2\pi \int U(r) e^{iqr \cos \vartheta} d\cos \vartheta \int r^2 dr \approx$

$$\approx \frac{2\pi}{q} \int U(r) r \sin(qr) dr$$

$$f = -\frac{2m}{\hbar^2 q} \int U(r) r \sin(qr) dr \quad \left| \begin{array}{l} qr \ll 1 \quad (\text{hier Energie}) \\ \sin(qr) \approx qr \end{array} \right.$$

$$f = -\frac{2m}{\hbar^2} \int U(r) r^2 dr \quad \text{Energie ist verfügbar}$$

Da $qr \gg 1$ $q = 2k \sin \frac{\Theta}{2}$, $\Delta \Theta \sim \frac{1}{ka}$ "kleiner" anisotropie ,

mit q wachst, $\sin(qr)$ oszilliert hoch, f klein

27/ Rugalmatlan rúd

$\sim$ ha belső reak. megvalósul

realisei erat: hül. folyamatok megismerése realizációval

Időközökben mindegyik feltétel, vagy kettő, de csak egy.

Általános valószínűségi $W_{fi} = W_{i^*f^*}$ névleges egyenlőség elve

$$u \rightarrow -u$$

$$L_z \rightarrow -L_z$$

$$i \leftrightarrow f$$

$$i, f \leftrightarrow i^*, f^*$$

$$d\sigma_{fi} = \frac{W_{fi}}{V} dN_f \rightarrow \text{megállapítások rólunk}$$

$$\left(\frac{v_i}{V} \right)$$

helyes áramirány

$$dN_f = V n_f^2 d\mathbf{p}_f d\Omega_f \frac{1}{(2\pi\hbar)^3}$$

$$d\sigma_{fi} \cdot \int (E_f - E_i) dE_f = \frac{W_{fi}}{V} \frac{V n_f^2 d\mathbf{p}_f d\Omega_f}{(2\pi\hbar)^3}$$

energiaegyenlőség.

$$W_{fi} = \delta(E_f - E_i) \frac{(2\pi\hbar)^3 v_i v_f}{V^2} \frac{d\sigma_{fi}}{n_f^2 d\Omega_f} \quad \frac{dE_f}{dN_f} = v_f$$

névleges egyenlőség elve:

$$\frac{d\sigma_{fi}}{n_f^2 d\Omega_f} = \frac{d\sigma_{i^*f^*}}{n_i^2 d\Omega_i}$$

Rugalmas rúd rugalmatlan folyamatok jelenléte

$$\psi_{reg} = \frac{e}{2\hbar v} \sum_l (2l+1) P_l(\cos\theta) \left((-1)^l e^{-i\hbar v} - S_l e^{i\hbar v} \right)$$

$$S_l = e^{2i\delta_l} \quad \text{rúd. fázistolás}$$

Ha van rugalmatlan csatorna, létezik a rugalmas csatornák lineáris amplitúdó

$$|S_l| < 1$$

$$f(\theta) = \frac{1}{2i\hbar} \sum_l (2l+1) (S_l - 1) P_l(\cos\theta)$$

$$\sigma_{reg}^{tot} = \sum_l \frac{\pi}{k^2} (2l+1) |1 - S_l|^2$$

$$\sigma_{reak}^{tot} = \sum_l \frac{\pi}{k^2} (2l+1) (1 - |S_l|^2) \quad (\text{rugalmatlan})$$

$$\sigma_{tot} = \sigma_{reak}^{tot} + \sigma_{reg}^{tot}$$

Ws energies regulären reineren (l=0)

$$\psi(r) = e^{-ihr} + S_0 e^{ihr}$$

S. asymptotisch:

$$S_0 = \frac{d \ln \psi}{dr} \bigg|_{r=a} \cdot a = \frac{d}{dr} \ln \psi \bigg|_{r=a} =$$

$$S_0 = f(E) = f_0 - ih$$

$$f_0(E)$$

$$h(E)$$

$$= -iha \frac{1 - S_0 e^{2iha}}{1 + S_0 e^{2iha}}$$

$$S_0 = -e^{-2i\pi} \frac{(x-h) - if_0}{(x+h) + if_0}$$

$$\sigma_{\text{realis}}^{\text{tot}} = \frac{4\pi}{k^2} \frac{xh}{(x+h)^2 + f_0^2}$$

$$\sigma_{\text{regulär}}^{\text{tot}} = \frac{4\pi}{k^2} \left| \frac{x}{i(x+h) - f_0} + e^{i\pi} \cos x \right|^2 \dots \text{komplex}$$

$$\Gamma = \Gamma_{\text{realis}} + \Gamma_{\text{regulär}}$$

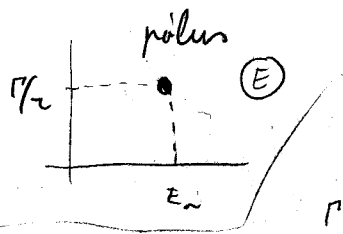
E_n normierte Energie $f_0(E - E_n) \rightarrow 0$

$$f_0(E) = \frac{df_0}{dE} \bigg|_{E_n} (E - E_n) + \dots$$

$$\Gamma_{\text{regulär}} := \frac{2\pi}{\frac{d\sigma}{dE} \big|_{E_n}} \quad \Gamma_{\text{realis}} := \frac{2h}{\frac{df_0}{dE} \big|_{E_n}} \Rightarrow$$

$$\sigma_{\text{realis}}^{\text{tot}} = \frac{\pi}{k^2} \frac{\Gamma_{\text{regulär}} \Gamma_{\text{realis}}}{(E - E_n)^2 + \frac{1}{4} \Gamma^2}$$

$$\sigma_{\text{regulär}} = 4\pi \left| A_{\text{res}} + A_{\text{pot}} \right|^2$$



Ungleichung
 $\Gamma_{\text{chyd}} := -2(E - E_n)$
 wobei, bei $E \approx E_n$

$$\sigma_{\text{regulär}} = \frac{4\pi}{k^2} \left| \frac{\Gamma_{\text{regulär}}}{\Gamma} \cos \delta \cdot e^{i\delta} + \cos(ha) e^{iha} \right|^2$$

$$\sigma_{\text{regulär}} = \frac{\pi}{k^2} \frac{\Gamma_{\text{regulär}}^2}{(E - E_n)^2 + \frac{1}{4} \Gamma^2}$$

