11.20.
4.51

Kvantum

Vanyó József
vanyoj@general.elte.hu
P 1.115

1 ZH utolsó órán + UV írás egy hétre

---

hullámfv: igazából semmit nem jelent

Ψ rendszer állapotát meghatározó komplex értékű fv.

$|\Psi^2|$ lesz igazi fiz. mennyiség: részecske megtalálási valószínűségsűrűsége

csak 1D-s problémákkal foglalkozunk

valószínűség: részecske $\in [a,b]$: $\int_a^b |\Psi|^2 dx$

mi a helyzet 1 pontra? 1 pontra elfaj. integr. $\to$ 0 lesz

Fizikai mennyiségek

$\Psi: \mathbb{R} \to \mathbb{C}$ (mechanika: $\underline{r}, \dot{\underline{r}}$ – hely, impulzus ismeretében és a potenciál ismeretében meg tudjuk mondani mi történik majd – elég 2 vektort megadni

itt nem elég 2 skalár

a fiz. menny.-hez operátorokat rendelünk (lineárisak és hermitikusak)

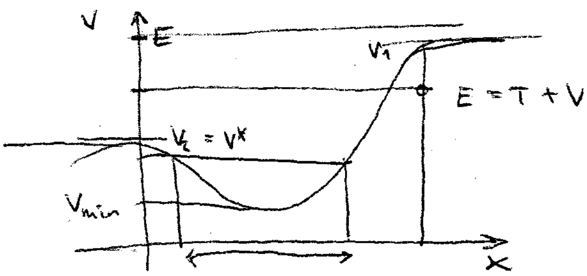
a lehetséges értékeket a hozzá tartozó s.é. rendszer megoldásai adják

$$\hat{O}\Psi = o\Psi$$

o ↑ szám (valós)

$$\begin{array}{ccc} \underline{\underline{A}} & \underline{x} & \lambda\,\underline{x} \\ \begin{pmatrix} \cdot & & \\ & \cdot & \\ & & \cdot \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} \vdots \end{pmatrix} & = \lambda \begin{pmatrix} \vdots \end{pmatrix} \end{array}$$

Kötött állapot: „gödör" állapota: nem tud belőle elmenni $\pm\infty$-be.



$$V^* = \min\{\lim_{x\to-\infty} V(x),\ \lim_{x\to+\infty} V(x)\}$$

$E \in [V_{min}, V^*)$ ők lesznek kötött állapotban

Mi az Energia operátora?

$\hat{H}$ (Hamilton op.)

$$\hat{H}\Psi(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Psi''(x) + V(x)\Psi(x)$$

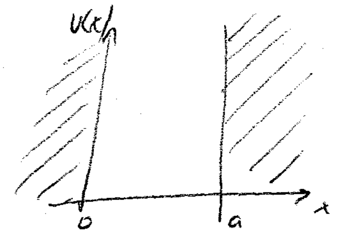
Feltevés: 1D-ben V pot. hatása alatt mozgó m tömegű részecske stacionárius kötött állapotait a $\hat{H}$ operátor azon saját fv-ei írják le, amelyekhez tartozó saját értékek $\in [V_{min}, V^*)$ és ~~ekkor~~ ezen állapotokhoz tartozó energia pont az állapothoz tartozó s.é.

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

Példák:

∞ mély potenciálgödör:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & 0 < x < a \\ \infty & \text{egyébként} \end{cases}$$



$E = ?$ $\qquad E \geq 0$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x) + V(x)\psi(x) = E\psi(x) \qquad \text{időtől független Schr. egyenlet}$$

$|\psi|^2 = 0$ ha a valószínűség $\in (-\infty, 0) \cup (a, \infty)$-en $\Rightarrow$ itt $\psi = 0$ is áll

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

$$\psi''(x) + \overbrace{\frac{2mE}{\hbar^2}}^{\omega^2}\psi(x) = 0$$

$\ddot{x} + \omega^2 x = 0 \qquad x(t) = A\sin x\omega + B\cos\omega x$

$\psi(x) = A\sin\omega x + B\cos\omega x$ $\qquad$ ebből semmit nem tudtunk mondani E-re

illeszkednünk kell 0-ban és a-ban

$\psi(0) = 0 \qquad \psi(a) = 0$

$A\sin\omega 0 + B\cos\omega 0 = 0$

$0 + B = 0$

$\psi = A\sin\omega x$

$\psi(a) = A\sin\omega a = 0$ $\qquad \longrightarrow A = 0$: a rendszerben nincs valószínűség – de nem ez kell nekünk

$\rightarrow A \neq 0, \quad \sin\omega a = 0$

$\omega a = k\pi \qquad k \in \mathbb{Z}$

$$\omega = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}a = k\pi \quad \xrightarrow{E} \quad \Rightarrow E_k = \frac{(k\hbar\pi)^2}{2ma^2} = k^2(\quad)$$

az E nem lehet akármennyi – diszkrét $\quad$ nem k számít, hanem k^2-e

$\rightarrow k$. energiaszint – eltekintünk $k < 0$-tól

A-t még nem számoltuk ki. A valószínűség valahol biztosan van:

$$1 = \int_{-\infty}^{\infty}|\psi|^2 dx = \int_0^a |A\sin\omega x|^2 dx = |A|^2\int_0^a \sin^2\omega x\, dx =$$

$\boxed{\text{linearizáló formula}}$ megtanulni

$$= |A|^2\int_0^a \frac{1-\cos 2\omega x}{2}dx = |A|^2\left(\frac{a}{2} - \left[\frac{\underbrace{\sin 2\omega a}_{a\omega = k\pi} - \underbrace{\sin 2\omega 0}_{0}}{2\cdot 2\omega}\right]\right) =$$

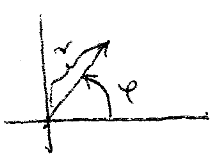
$\int f(ax+b)\,dx = \frac{F(ax+b)}{a} + c$

$\int \frac{f'}{f} \qquad \int f^n f'$ Helyettes.

parciális int $\int \text{polin}\cdot\begin{cases}\sin x\\ \cos x\\ e^x\end{cases}$

$= |A|^2\frac{a}{2} = 1 \qquad |A| = \sqrt{\frac{2}{a}}$

$A = \sqrt{\frac{2}{a}} \qquad A = -\sqrt{\frac{2}{a}} \qquad A = \sqrt{\frac{2}{a}}\cdot e^{i\frac{\pi}{8}} = r\cdot e^{i\varphi}$

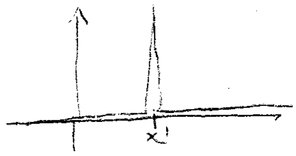


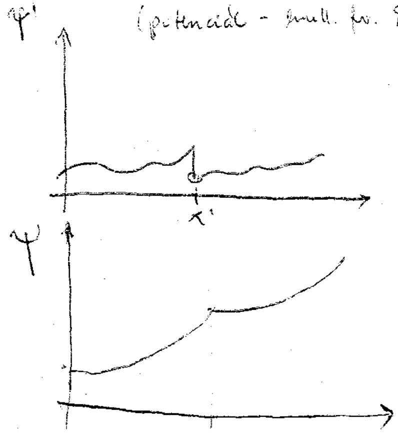
$\int_{-2}^{2} \delta(x)\,dx = 1$

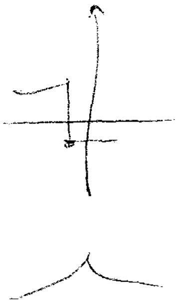
$\int_a^b \beta\delta(x) = \begin{cases} \beta & 0 \in [a,b] \\ 0 & 0 \notin [a,b] \end{cases}$

Tétel. Ha $V(x) = \beta\delta(x-x')$ $\Rightarrow$ Ψ'-nek ugrása van x' helyen

(potenciál - hull. fv. kapcsolata)

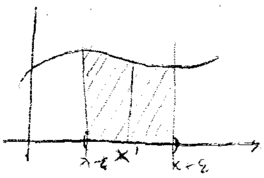


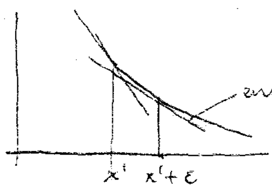




$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Psi''(x) + \beta\delta(x-x')\Psi(x) = E\Psi(x)$$

$$\lim_{\varepsilon\to 0}\int_{x'-\varepsilon}^{x'+\varepsilon} \longrightarrow -\frac{\hbar^2}{2m}\underbrace{\lim_{\varepsilon\to 0}\left[\Psi'(x'+\varepsilon)-\Psi'(x'-\varepsilon)\right]}_{\Psi'_+(x')-\Psi'_-(x')} + \beta\Psi(x') = 0$$





ennek a meredeksége, ami...

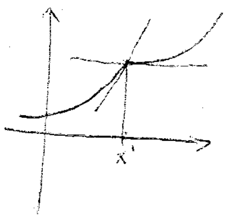
fv. diff. hányadosa jobb oldalról (ugyanígy balról)

Green fv.

$\int_a^b f(x)\delta(x-x')\,dx = f(x')$
$x' \in [a,b]$

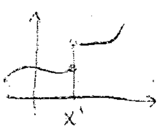
konvolúció

$$\Psi'_+(x') - \Psi'_-(x') = \frac{2m\beta}{\hbar^2}\Psi(x')$$

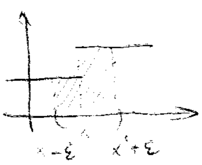


Tétel: Ha V-nek véges ugrása van x' helyen, akkor Ψ' folytonos az x' helyen

(a hullámfv-ben nincs törés)

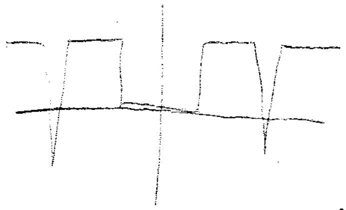


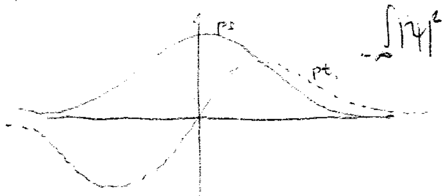
$$\lim_{\varepsilon\to 0}\underbrace{\int_{x'-\varepsilon}^{x'+\varepsilon} V(x)\Psi(x)\,dx}$$



Tétel. Ha V ps. $\Rightarrow \Psi$ ps v. pt.

ps, ha igaz hogy páros, ha az ... kvant. mechan. ...

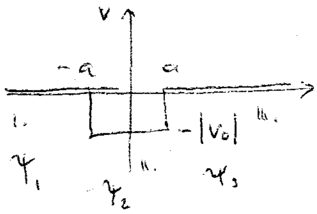




$\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi|^2 = 1$

(Szemléleti bizonyítani)

Feladat:



Biz. be. $\exists$ kötött állapot

Energiája legyen potenciálvölgyben meg

$-|V_0| < E < 0$ (pl. egy kötött... Nagy földről − a energiája)

Írjuk fel a Schrödinger egyenletet!

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

$$V(x) = \begin{cases} 0 & x \notin [-a, a] \\ -|V_0| & x \in [-a, a] \end{cases}$$

Ψ_1 : $-\frac{\hbar^2}{2m}\Psi_1''(x) = E\Psi_1(x)$ alakítsuk át (rendezzük) hom. egy.

$$\Psi_1''(x) + \underbrace{\frac{2mE}{\hbar^2}}_{-k^2 \ (E<0)}\Psi_1(x) = 0$$

$$\Psi_1''(x) - k^2\Psi_1(x)$$

$$\Psi_1 = Ae^{kx} + Be^{-kx}$$ van-e olyan tag, ami nem 0-hoz tart $-\infty$-ben?

$\int |\Psi|^2 = 1 \Rightarrow$ divergáló tag: $B = 0$

Ψ_3 : $-\frac{\hbar^2}{2m}\Psi_3(x) = E\Psi_3(x)$

$$\Psi_3(x) = Ce^{kx} + De^{-kx}$$ $C = 0$

Ψ_2 : $-\frac{\hbar^2}{2m}\Psi_2''(x) - |V_0|\Psi_2(x) = E\Psi_2(x)$

$$\Psi_2''(x) + \underbrace{\frac{2m}{\hbar^2}(|V_0| + E)}_{\text{pozitív lesz} \ : \ \omega^2}\Psi_2(x) = 0.$$

$$\Psi_2''(x) + \omega^2\Psi_2(x) = 0$$

$$\Psi_2(x) = F\cos\omega x + G\sin\omega x$$

Határokon illesszük a megoldásokat

Ψ folytonos, Ψ' is

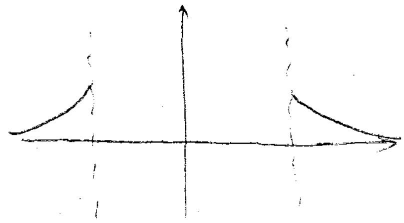
$\Psi_1(-a) = \Psi_2(-a)$ $\quad \Psi_1'(-a) = \Psi_2'(-a)$

$\Psi_2(a) = \Psi_3(a)$ $\quad \Psi_2'(a) = \Psi_3'(a)$

Vizsgáljuk a páros megoldást.

Ψ ps

$$\left.\begin{aligned} \Psi_1(x) &= A e^{kx} \\ \Psi_2(x) &= F\cos\omega x + G\sin\omega x \\ \Psi_3(x) &= D e^{-kx} \end{aligned}\right\} \Rightarrow$$



$$\Psi_3(x) = A e^{-kx}$$

$$\Psi_2(x) = F\cos\omega x$$

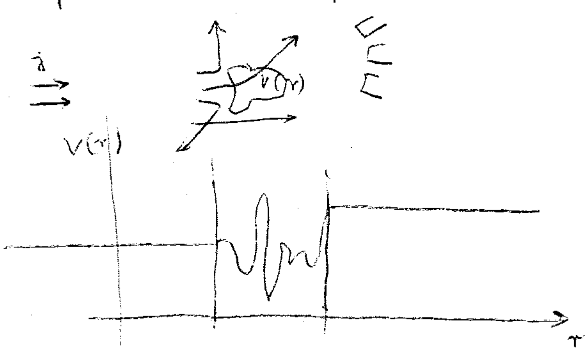
$$\Psi_1'(x) = Ak e^{kx}$$

$$\Psi_2'(x) = -F\omega\sin\omega x$$

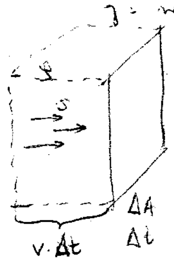
$$\Psi_3'(x) = -Ak e^{-kx}$$

feltételek felírása, ill. ugyanez, ha Ψ ptlan

Szórásproblémák (részecskereprezentációban)



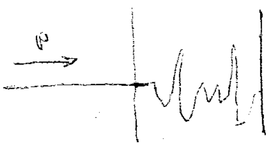
j: részecskeáramsűrűség: egységnyi felületen, egys. idő alatt áthaladó részecskék száma



$$\Delta n = j\Delta A\Delta t = \underbrace{\varrho\, v}_{j}\,\Delta t\Delta A$$

$$j = \frac{i\hbar}{2m}\left(\Psi\,\mathrm{grad}\,\Psi^* - \Psi^*\,\mathrm{grad}\,\Psi\right)$$

1D-s probléma



Fiz. menny.: $\hat{O}$-t rendelek hozzá

↓

mérés

eredményei: $o_1, o_2, o_3, \dots$

(sajátvekt) Ψ_1, Ψ_2, Ψ_3

meg kell oldani $\hat{O}$ s.é. egyenletet,

megoldásai $o_1, o_2, o_3 \dots$

$$\hat{O}\Psi = \boxed{o}\,\Psi$$

Adott értékhez tartozó s.fv.-t kell kiszámolni

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

$$\hat{p}\Psi = p\Psi$$

$$\frac{\hbar}{i}\frac{d\Psi}{dx} = p\Psi$$

$\Psi' = i\frac{p}{\hbar}\Psi$, folytonos megoldás

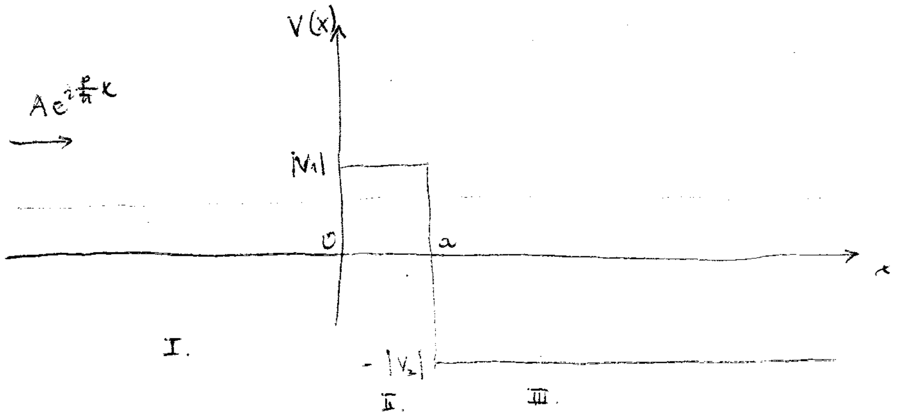
$\boxed{\Psi_{(x)} = A\cdot e^{i\frac{p}{\hbar}x}}$ végtelen sok részecskén van, nem kell az $\int|\Psi|^2 = 1$ telj.

$$\Psi^*_{(x)} = A^*\cdot e^{-i\frac{p}{\hbar}x}$$

$$j = \frac{i\hbar}{2m}\left(A\cancel{e^{i\frac{p}{\hbar}x}}\cdot A^*\left(-i\frac{p}{\hbar}\right)\cancel{e^{-i\frac{p}{\hbar}x}} - A^*\cdot\cancel{e^{-i\frac{p}{\hbar}x}}\cdot A\cdot\cancel{e^{i\frac{p}{\hbar}x}}\cdot i\frac{p}{\hbar}\right) =$$

$$= \frac{\cancel{i}\cancel{\hbar}}{\cancel{2}m}\left(-\cancel{2}\cancel{i}\frac{p}{\cancel{\hbar}}\right)\cdot|A|^2 = \underbrace{|A|^2}_{\varrho}\cdot\underbrace{\frac{p}{m}}_{v}$$

$0 < E < |V_1|$



Mindhárom részre felírjuk a Schr. egyenletet, megoldjuk, határokon illesztjük

I.

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

$$\psi'' + \underbrace{\boxed{\frac{2mE}{\hbar^2}}}_{k^2}\psi = 0$$

$k = \frac{p}{\hbar}$ – megmondható E, p kapcsolata

$$\psi_1 = Ae^{ikx} + Ce^{-ikx}$$

$e^{i\frac{-p}{\hbar}x}$: megjelent a tag, ami leírja a visszaverődő részecskéket

$|C|^2$: a visszaverődött részecskék számát adja

$\frac{|C|^2}{|A|^2} = |R_1|^2$: a visszaverődő részecskék aránya

II.

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi'' + |V_1|\psi = E\psi$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi'' + \underbrace{(|V_1| - E)}_{>0}\psi = 0$$

$$\psi'' - \underbrace{\frac{2m(|V_1| - E)}{\hbar^2}}_{\kappa}\psi = 0$$

$$\psi_2 = Fe^{\kappa x} + Ge^{-\kappa x}$$

III.

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi'' - |V_2|\psi = E\psi$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi'' - (|V_2| + E)\psi = 0$$

$$\psi'' + \underbrace{\frac{2m(|V_2| + E)}{\hbar^2}}_{\xi^2}\psi = 0$$

$$\psi_3 = De^{i\xi x} + \underset{=0}{B}e^{-i\xi x}$$

$\frac{|D|^2}{|A|^2} = |T_1|^2$: továbbhaladó részecskék aránya

$B = 0$; most csak balról jön részecskeáram

$$\psi_1(0) = \psi_2(0) \qquad A + C = F + G$$

$$\psi_2(a) = \psi_3(a) \qquad F e^{\kappa a} + G e^{-\kappa a} = D e^{i\xi a}$$

$$\psi_1'(0) = \psi_2'(0) \qquad ik(A - C) = \kappa(F - G)$$

$$\psi_2'(a) = \psi_3'(a) \qquad \kappa(F e^{\kappa a} - G e^{-\kappa a}) = i\xi D e^{i\xi a}$$

Hf.: megoldani A paraméterrel (homogén és lineáris → tehát egyszerű)

$$C(A) = R_1 A$$

$$D(A) = T_1 A$$

Ha $B \neq 0$: szuperponálva

$$\begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} = \underline{\underline{T}} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} \qquad \underline{\underline{T}} = \begin{pmatrix} T_1 & R_1 \\ R_2 & T_2 \end{pmatrix}$$ transzfer mátrix

Bejövő kimenő

$$C = T_1 \cdot A + R_1 \cdot B$$

III. 20.

Kvantumagyar

Mérési valószínűségek, várható érték

Fizikai mennyiség $\longrightarrow$ hermitikus operátor $\quad \hat{C}\Psi_i = c_i \Psi_i$

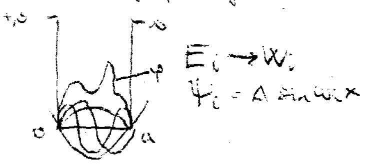
pl. E csak diszkrét értékeket vehet fel

Lehetséges értékek (s. é.)

Ha a rendszer Ψ_i állapotban van $\longrightarrow$ c_i-t mérek

Viszont ha a rsz. nem egy op. s fv-e írja le, akkor is fogok c_i közül valamit mérni, de mit még

pl. ∞ mély pot. gödör



Mi van, ha nem E s állapotban van, megmérve a fizikai mennyiséget mit fogunk valószínűleg mérni?

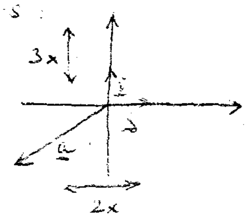
(Ha pl. $\Psi = Ax(x-a)$ állapotban van a rsz (nem sajátállapot), az energiát mit mérek?)

W_i · mérési valószínűség

Nem s. áll. melyik en. értéket milyen valószínűséggel fogom mérni

Ψ_i saját fv-ek — belőlük kiválasztható egy bázis

pl. 2D-s:



Ez a nyújtási mód $\begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 3 \end{pmatrix}$ mátrixnál nyo. irányokat a tengelyekre ‖ vektorok tartják meg. Ezekből választhatom $\underline{i}, \underline{j}$ bázist, amivel tetsz. $\underline{a}$ vektort felírható $\underline{i}, \underline{j}$ lin. komb.

$\underline{a} = -3\underline{i} + (-2)\underline{j} \qquad (-2, -2)$ a koordináták

Ha mindkét irányba $3x$-os nyújtást teszünk — minden vektor saját, a bázist tetszőlegesen választhatjuk 2 választott vektorból. Ugyanez kv. mechanikában:

normáljuk (a fv-eket) 1-re : $\int |\Psi|^2 dx = 1$

ortogonálisak : $(\Psi_i, \Psi_j) = \delta_{ij}$ (ortonormált bázis)

$\qquad\qquad i \neq j \quad i = j$

Most a tetszőleges Ψ állapotot felírhatjuk:

$\Psi = \sum_{i=1}^{\infty} c_i \Psi_i$

Van egy állapotom, amit ez a áll. lin. kombinációjaként, de $\forall$ állapotnak van egy c súlya. c_i-nek van köze W_i-hez. $c_i \longleftrightarrow W_i$

Ha egy s. fv. adott áll. nagy súllyal vesz részt, akkor a mérési val.-e is jóval nagyobb. De mi pontosan c_i és W_i között a kapcsolat?

$$\sum W_i = 1$$

$$(\Psi, \Psi) = 1 = \underbrace{\left(\sum_{i=1}^{\infty} c_i \Psi_i , \sum_{j=1}^{\infty} c_j \Psi_j\right)}_{\text{csak azok a tagok maradnak meg, amik } i=j} = \sum |c_i|^2 = 1$$

Feltételezzük a kapcsolatot a képletekre nézve:

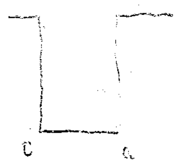
$$W_i = |c_i|^2$$

Kísérletek igazolják mindezt. Hogy számoljuk ki a várható értéket?

$$\langle E\rangle = \sum_{i=1}^{\infty} W_i E_i$$

Nem biztos, hogy ennek mérték ez az átlag lesz. (pl. 1,3 mérésnél mérés során soha nem fogok 2-t mérni.) Akkor értelmes, ha egy nagy sokaságon végzünk méréseket.

pl.: ∞ mély pot. gödör



$\psi(x) = Ax(x-a)$

1.) Hat. meg az E lehetséges s.é.-it E_i - ? Illetve a hozzájuk tartozó ψ, a ψ_i-ket

2.) $W_i = ?$

3.) $\langle E\rangle = ?$

1.) $-\frac{\hbar^2}{2m}\psi_i'' = E_i\psi_i$

$$\psi_i'' + \frac{2mE_i}{\hbar^2}\psi_i = \psi_i'' + \omega_i^2\psi_i = 0 \quad \text{; harm. rezg. mozg. egy.}$$

$$\psi_i = A_i'\sin\omega_i x + B\cos\omega_i x$$

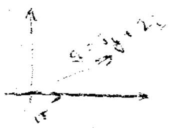
Határfeltételek $\psi(0) = 0 \Longrightarrow B = 0$

$$\psi(a) = 0 \Longrightarrow A_i'\sin\omega_i a = 0$$

$$\omega_i a = i\pi$$

$$\sqrt{\frac{2mE_i}{\hbar^2}}\,a = i\pi$$

$$\boxed{E_i = \frac{i^2\hbar^2\pi^2}{2ma^2}} \qquad \boxed{\psi_i = A_i'\sin\frac{\pi}{a}ix}$$



$(a, b) = 3$

A ψ-hez tartozó vektor (a, ψ) skal. szorzatból nyerjük meg az együtthatót:

$$c_i = (\psi, \psi_i) = \int_0^a [Ax(x-a)]^* A_i'\sin\omega_i x\,dx \overset{\text{parc. int.}}{=}$$

$$= A^*A_i'\int_0^a \underbrace{(x^2-ax)}_{f}\,\underbrace{\sin\omega_i x}_{g'}\,dx =$$

$$\int fg' = fg - \int f'g$$

Akkor érdemes használni, ha f polinom.

$$f = x^2 - ax \qquad g = \frac{-\cos\omega_i x}{\omega_i}$$

$$f' = 2x - a \qquad g' = \sin\omega_i x$$

$$= A^*A_i'\left\{\underbrace{\left[(x^2-ax)\frac{-\cos\omega_i x}{\omega_i}\right]_0^a}_{=0} + \int_0^a \underbrace{(2x-a)}_{f}\,\underbrace{\frac{\cos\omega_i x}{\omega_i}}_{g'}\,dx\right\} = A^*A_i'\left\{\underbrace{\left[(2x-a)\frac{\sin\omega_i x}{\omega_i^2}\right]_0^a}_{\substack{=0\\ \omega_i = \frac{i\pi}{a}}} - 2\int_0^a \frac{\sin\omega_i x}{\omega_i^2}\,dx\right\} =$$

$$f = 2x - a \qquad g = \frac{\sin\omega_i x}{\omega_i^2}$$

$$f' = 2 \qquad g' = \frac{\cos\omega_i x}{\omega_i}$$

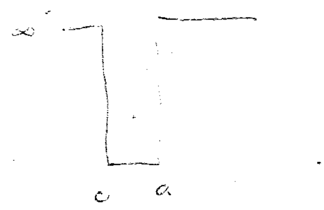
$$= +A^*A_i'\frac{2}{\omega_i^3}\left[\cos\omega_i x\right]_0^a = \begin{cases} \cancel{\text{i ps}}\ 0 & \text{ha } i \text{ ps} \Rightarrow W_{i_{ps}} = 0 \\ -A^*A_i'\frac{4}{\omega_i^3} & \text{ha } i \text{ ptl} \Rightarrow W_{i_{ptl}} = \frac{16|A|^2|A_i'|^2}{\omega_i^6} \sim \frac{1}{i^6} \end{cases}$$

A megoldás attól függ i paritásának függvényében. Mire számíthatunk! Ha i ps akkor $E_2, E_4, \ldots$ nem fogok mérni biztosan. mivel $\sim\frac{1}{i^6}$, ha nagyméretű $i=1$-et, akkor $i=3$-at $\frac{1}{729}$, $i=5$-öt $\frac{1}{15625}$ valószínűséggel mérek ilyen sok E_i.

$$\psi = Ax(x-a)\left(x-\frac{a}{2}\right) \qquad \langle E\rangle = \sum W_i E_i$$

$D^2(\xi) = E\left((\xi - E(\xi))^2\right) = E(\xi^2) - (E(\xi))^2$

Szórás



Ψ állapot Fiz. mennyi. $\hat{O}$

$\langle (\Delta \hat{O})^2 \rangle = \langle \hat{O}^2 \rangle_\Psi - (\langle \hat{O} \rangle_\Psi)^2$

$\hat{O} - \langle \hat{O} \rangle \qquad \langle \hat{O} \rangle_\Psi = (\Psi, \hat{O}\Psi)$

$\Psi = Ax(x-a) \qquad \hat{x}$

$\langle \hat{x} \rangle_\Psi = \int_0^a \underbrace{[Ax(x-a)]^*}_{\Psi^*} \underbrace{x}_{\hat{x}} \underbrace{Ax(x-a)}_{\Psi} dx = \ldots$ Hazi: valamennyi 6-tól feltöltve az eredményt

$\langle \hat{x}^2 \rangle = \int_0^a \underbrace{[Ax(x-a)]^*}_{\Psi^*} \underbrace{x^2}_{\hat{x}^2} \underbrace{Ax(x-a)}_{\Psi} dx = .$ Házi: valamennyi 7-től feltölteni eredményt

$\langle (\Delta \hat{x})^2 \rangle = \frac{a^2}{28}$ (ell. hogy jól számoltam-e)

Arra kell figyelni: $\hat{O}$ és Ψ olyan legyen, hogy az $\int_0^a$ kiszámítható legyen

$\hat{p}$ is meg egyszerű
Ψ helyett E sajátfv is jó lesz gyakorolni } erősen ajánlott pár ilyen példát gyártani és megoldani (2 db)

$\hat{x}, \hat{p}, \Psi_1, \Psi_2$-ben

$\Psi = A \cdot x(x-a)(x-\frac{a}{3})$ ezeknek szóló adott nem érdemes megtanulni

Időtől függő Schr.-egy.

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

$\Psi(x,t)$ adott nagyon adott helyen $\int |\Psi(x,t)|^2$-mennyi valószínűséggel van ott a részecske

meg kell adni $\Psi = (x, t=0)$ ha $t=1$ adott: $t=1$-et kell kivonni $t=$-ból és tovább számolni.

Hogyha Ψ_i stac. akkor függ. a Schr. egyenletet két felírhatod: $\Psi_i(x,t) = \Psi_i(x) f(t)$

$\hookrightarrow t=0$-ban $\rightarrow$ függ. az idő-től Schr.-egy.-et

$\hat{H}\Psi_i = E_i \Psi_i$

Ha behívom, mit kapok?

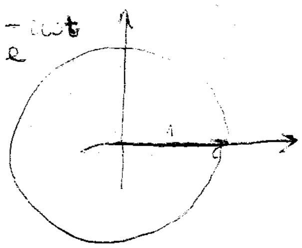
$i\hbar \cancel{\Psi_i(x)} f'(t) = E_i \cancel{\Psi_i(x)} \cdot f(t)$

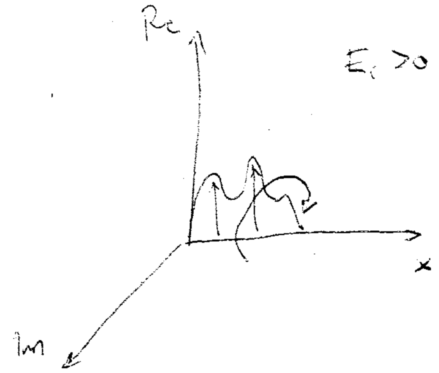
$f'(t) = \frac{E_i}{\hbar}(-i) f(t) \qquad \frac{1}{i} = -i$

$f(t) = e^{-i\frac{E_i}{\hbar}t}$ miért nincs az elején konstans? Mert már az időfüggetlen rész tartalmazza, mert azt már normáltuk. Ill. a konstans 1.

$$\Psi_i(x,t)=\underline{\varphi_i(x)}\cdot\underline{e^{-i\frac{E_i}{\hbar}t}} \quad (\omega t)$$

$e^{-i\omega t}$



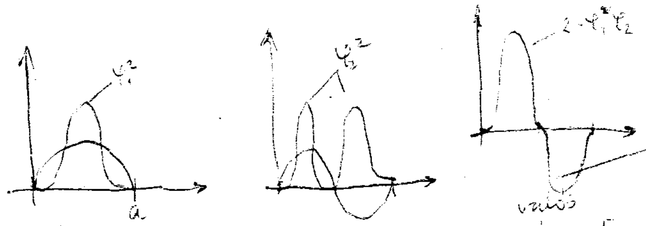


$E_i > 0$

Időben forog fázisa

- stac.: időben nem változik a fiz. jelentése $|\Psi_i|^2$-nek van, ami persze nem változik

Viszont nem stac. állapot: stac. állapotok lin. kombinációjaként felírható.

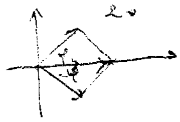


$\Psi_1(x,t)=\varphi_1(x)$

$$\Psi(x,t)=\underbrace{\frac{1}{\sqrt2}}\left(\Psi_1(x,t)+\Psi_2(x,t)\right)=\frac{1}{\sqrt2}\left(\overset{\text{valós}}{\varphi_1(x)}e^{-i\frac{E_1}{\hbar}t}+\overset{\text{valós}}{\varphi_2(x)}\cdot e^{-i\frac{E_2}{\hbar}t}\right)=\frac{1}{\sqrt2}\underbrace{\left(\varphi_1+\varphi_2 e^{-i\frac{E_2-E_1}{\hbar}t}\right)}e^{-i\frac{E_1}{\hbar}t}$$

normálási tényező, mert a normálást elrontotta az összeadás | kompl. konjugáltja: $\varphi_1+\varphi_2 e^{i\frac{E_2-E_1}{\hbar}t}$

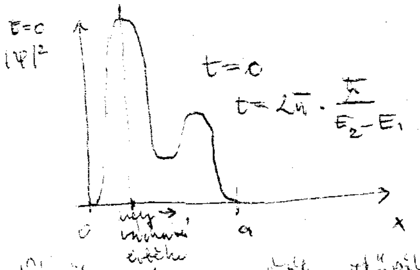
$$|\Psi(x,t)|^2=\frac12\left[\varphi_1^2+\varphi_2^2+\varphi_1\varphi_2\underbrace{\left(e^{-i\frac{E_2-E_1}{\hbar}t}+e^{+i\frac{E_2-E_1}{\hbar}t}\right)}_{2\cos}\right]=\frac12\left(\varphi_1^2+\varphi_2^2+\varphi_1\varphi_2\cos\Big(\underbrace{\frac{E_2-E_1}{\hbar}}_{\omega}t\Big)\right)$$



Program

tetszőleges időpillanatban kirajzolja az $|\Psi|^2$-et (hogy változik időben)

$t=0$-ban $|\Psi(x,t=0)|^2=\frac12(\varphi_1^2+\varphi_2^2+2\varphi_1\varphi_2)$



$t=0$

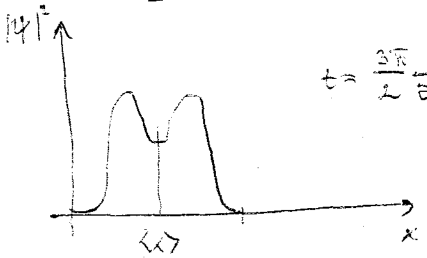
$t=2\pi\cdot\frac{\hbar}{E_2-E_1}k \qquad k\in\mathbb{Z}$

arg cos értéke: π

$t=\pi\frac{\hbar}{E_2-E_1}$

Nézzük meg egy másik időpillanatra!

$t=\frac{\pi}{2}\frac{\hbar}{E_2-E_1}$ (arg cos értéke $\frac{\pi}{2}$)



$t=\frac{3\pi}{2}\frac{\hbar}{E_2-E_1}$

Adott a kezdeti állapot és a $\hat{H}$

$$\hat{H},\ \varphi = \Psi(t=0) \Rightarrow \Psi(t) = ?$$

Egyszerűbb – kétállapotú rendszer: $E_1 \quad E_2$, $\Psi_1 \quad \Psi_2$

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} F_1 & V \\ V^+ & F_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e_0 & \sqrt{3}e_0 \\ \sqrt{3}e_0 & 3e_0 \end{pmatrix}$$

Ha véges sok mennyiség (a bázis) van → reprezentálható 2 a dim. vektor

$$\Psi = \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix}$$

Ha a $\hat{H}$ egy rendszer energiaop. és $\varphi = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ kezdeti állapotú, $\Psi(t) = ?$ $\quad (\varphi = \Psi(t=0))$

$$\Psi(t) = C_1 s_1 e^{-i\frac{E_1}{\hbar}t} + C_2 s_2 e^{-i\frac{E_2}{\hbar}t}$$

először meg kell határozni s_i s.f.-eket (amik az időfüggetlen Schr. egy. mo.-ai)

de mivel az energiamátrixtól függnek

1.) E_i megkeres. az időfügg. Schr.

2.) E_i-k alapján s_i-k megkeres

3.) φ alapján s_i-ket szorzófaktor → C_i

$$\hat{H}\Psi_i = E_i \Psi_i$$

1) s.é. meghatározása $\lambda_i = E_i$ (mindent majd csak a normált s.é.-ek [illegible])

$$\begin{vmatrix} e_0-\lambda & \sqrt{3}e_0 \\ \sqrt{3}e_0 & 3e_0-\lambda \end{vmatrix} = 0 \qquad \text{kar. polinom: } (e_0-\lambda)(3e_0-\lambda) - 3e_0^2 = 0$$

$$\lambda^2 - 4e_0\lambda + \cancel{3e_0^2} - \cancel{3e_0^2} = 0$$

$E_1 = \lambda_1 = 0$ (mindig mo.)

$E_2 = \lambda_2 = 4e_0$

Visszaírjuk az egyenleteket a Schr. egy.-be és megoldjuk az egyenletrendszert.

λ_1-re egy. (1) $e_0u_1 + \sqrt{3}e_0u_2 = 0$ — mivel $\det(\hat{H}) = 0$ → lineárisan öf-ek

$\sqrt{3}e_0u_1 + 3e_0u_2 = 0$ — az egyik egyenlet fölösleges

(1) $u_1 = -\sqrt{3}u_2$ — pl. 1 mo: $s_1 = \underbrace{\frac{1}{2}}_{\text{norma}}\begin{pmatrix} -\sqrt{3} \\ \underbrace{1}_{u_2=1} \end{pmatrix}$ — úgy kell választani, hogy normált legyen; norma: $\sqrt{u_1^2+u_2^2}$, hogy 1 legyen meg kell osztani a normával.

λ_2-re egy.

$-3e_0u_1 + \sqrt{3}e_0u_2 = 0$ — ezek is lin. öf-ek

(2) $\sqrt{3}e_0u_1 - e_0u_2 = 0$

$u_2 = \sqrt{3}u_1$ $\qquad s_2 = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 \\ \sqrt{3} \end{pmatrix}$

$$\begin{pmatrix} e_0 & \sqrt{3}e_0 \\ \sqrt{3}e_0 & 3e_0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix} = \lambda_i \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix} = \lambda\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \lambda & 0 \\ 0 & \lambda \end{pmatrix}\begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{pmatrix} e_0-\lambda & \sqrt{3}e_0 \\ \sqrt{3}e_0 & 3e_0-\lambda \end{pmatrix}\begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \underline{0}$$

c_i: súlyok, „koordináták" , S_1, S_2 ortogonálisak $(S_1, S_2) = 0$

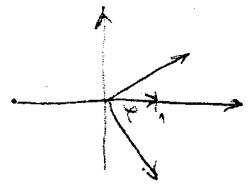
$c_i = (\Psi_i, \varphi)$

$\varphi = c_1 S_1 + c_2 S_2$

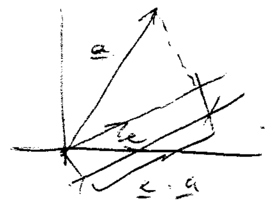
$c_1 = \left(\frac{1}{2}\begin{pmatrix}-\sqrt{3}\\1\end{pmatrix}, \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}\right) = -\frac{\sqrt{3}}{2}$

$c_2 = \left(\frac{1}{2}\begin{pmatrix}1\\\sqrt{3}\end{pmatrix}, \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}\right) = \frac{1}{2}$

Ha $\hat{H}$ differenciál op.
→ az integrált kell végrehajtanom!



Mik φ koordinátái az elforgatott KR-ben



$$\boxed{\Psi(t) = \underbrace{-\frac{\sqrt{3}}{2}}_{c_1}\underbrace{\left(\frac{1}{2}\begin{pmatrix}-\sqrt{3}\\1\end{pmatrix}\right)}_{S_1} e^{-i\frac{0}{\hbar}t} + \underbrace{\frac{1}{2}}_{c_2}\underbrace{\frac{1}{2}\begin{pmatrix}1\\\sqrt{3}\end{pmatrix}}_{S_2} e^{-i\frac{4e_0}{\hbar}t}}$$

Ez a hull. fv. idő beli változása

$$\Psi(t) = \frac{1}{4}\begin{pmatrix}3\\-\sqrt{3}\end{pmatrix} + \frac{1}{4}\begin{pmatrix}1\\\sqrt{3}\end{pmatrix} e^{-i\frac{4e_0}{\hbar}t}$$

egy menet ugyanabba irányban

Miért jó ez nekünk

Kísérleti eredményeket meg tudjuk mondani előre

Otthon megnézni a ∞ mély gödör

2 gyakorlat – új / ismétlés? 3. gyak: ZH

IV. 24. [illegible] Operátorok

$\boxed{2.17}$ Elmfiz 3.

$\hat{A} = \frac{d}{dx} + x \qquad \hat{B} = \frac{1}{x}\frac{d}{dx}x$

$$\hat{A}\Psi(x) = \frac{d\Psi}{dx} + x\Psi(x)$$

Gyak. fel.: $\hat{B}\hat{A} = ?$ kommutátor, $\hat{A}^2$, $\hat{B}^2$ ...

$$\hat{B}\Psi(x) = \frac{1}{x}\frac{d}{dx}(x\cdot\Psi(x))$$

$$\hat{A}\hat{B} = \hat{A}\left(\frac{1}{x}\frac{d}{dx}(x\cdot\Psi(x))\right) = \hat{A}\,\frac{1}{x}\cdot\left(\Psi(x) + x\Psi'(x)\right) =$$

$$= \hat{A}\left(\frac{1}{x}\Psi(x) + \Psi'(x)\right) = \frac{d}{dx}\left(\frac{1}{x}\Psi(x) + \Psi'(x)\right) + x\left(\frac{1}{x}\Psi(x) + \Psi'(x)\right) =$$

$$= -\frac{1}{x^2}\Psi(x) + \frac{1}{x}\Psi'(x) + \Psi''(x) + \Psi(x) + x\Psi'(x) = \Psi''(x) + \Psi'(x)\left(\frac{1}{x} + x\right) + \Psi(x)\left(1 - \frac{1}{x^2}\right) =$$

$$= \frac{d^2}{dx^2}\Psi(x) + \left(\frac{1}{x} + x\right)\frac{d}{dx}\Psi(x) + \left(1 - \frac{1}{x^2}\right)\Psi(x) = \underbrace{\left[\frac{d^2}{dx^2} + \left(\frac{1}{x} + x\right)\frac{d}{dx} + \left(1 - \frac{1}{x^2}\right)\right]}_{\hat{A}\cdot\hat{B}}\Psi(x)$$

kommutátor:

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

Mi az operátornak önadjungált? Ha $\forall\, \varphi, \psi$-re igaz, hogy $(\varphi, \hat{O}\psi) = (\hat{O}\varphi, \psi)$

$\hat{p} = \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}$ önadjungált (tudjuk, hogy persze, az)

$$(\varphi, \hat{p}\psi) = \int_{-\infty}^{\infty} \varphi^* \cdot \frac{\hbar}{i}\psi'_{(x)} dx =$$

$$= \frac{\hbar}{i}\left\{ \underbrace{\left[\varphi^*(x)\psi(x)\right]_{-\infty}^{\infty}}_{0} - \int \varphi^*(x)\psi(x)\,dx \right\} =$$

itt már: $(\varphi, \psi) = \int_{-\infty}^{\infty} \varphi^* \psi$

addig kéne alakítani:

$$\int_{-\infty}^{\infty}\left(\frac{\hbar}{i}\varphi'(x)\right)^* \psi(x)\,dx = (\hat{p}\varphi, \psi)$$

parc. integrálás

$f = \varphi^*$ $f' = \varphi^{*\prime}$

$g = \psi$ $g' = \psi'$

$\left(-\frac{\hbar}{i}\right)^* = \frac{\hbar}{i} = (\hbar i)^* = (-\hbar i) =$

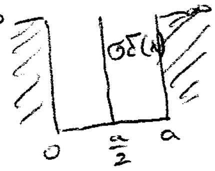
$\frac{1}{i} = -i$

Mi lesz a ZH-ban? (következő óra – 3 hét múlva)

6. típ. feladat a mai óra

1) időfüggetlen Schr. egy. megoldása

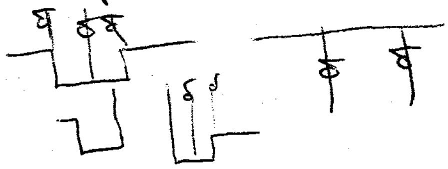
$\rightarrow V(x) = \begin{cases} \sigma\,\delta(x - \frac{a}{2}) & \text{ha } 0 \le x \le a \\ \infty & \text{egyébként} \end{cases}$



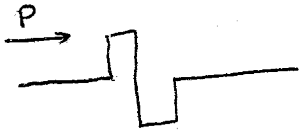
$\Rightarrow$ Energiaminták

$E = ?$ $\varphi_i(x) = ?$

véges potenciálgödör dirac-deltákkal

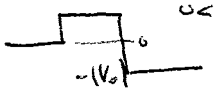


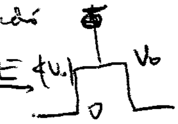
2.) szórásprobléma



transzfermátrix

visszaverő, áthaladó





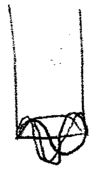
(1/2 valószínű lesz)

3.) mérési valószínűségek meghat.

$W_i = ?$ adott: E_i; $\varphi_i(x)$; $\psi(x)$ állapot;

$\psi(x) = x(x-a)\left(x - \frac{a}{3}\right)$

$c_i =$ ($\psi(x)$ integrálható kell legyen)



$\varphi_i = A \cdot \sin w_i x$

4.) Várható érték, szórás számítása

adott ψ állapot, $\hat{O}$ $\langle \hat{O} \rangle_\psi = ?$ $\langle \Delta\hat{O} \rangle_\psi = ?$ $\hat{O} = \hat{p}$

$\langle \hat{p} \rangle_\psi = ?$ ψ (fenti)

$\langle \Delta\hat{p} \rangle_\psi = ?$ $\langle \hat{x} \rangle_\psi = ?$ $\langle \Delta\hat{x} \rangle = ?$

$\langle \hat{A} \rangle = ?$

$\langle \hat{B} \rangle = ?$

érettség
2-3 feladat
Szerda utolsó?
14^{00} 1.115

5.) Időfüggő Schr. egyenlet

a) adott E_i, φ_i kezdeti állapot $\psi_0(x) = \psi(x, t=0)$

$\psi(x,t) = ?$

$\psi(x, t=0) = A\left[\varphi_1(x) + \varphi_3(x)\right]$

$|\psi_1(x,t)|^2 = ?$ nem lüktetősebb kép: hol található meg a részecske

b) $\hat{H} = \begin{pmatrix} E_1 & V \\ V^* & E_2 \end{pmatrix} \rightarrow$ s.é. + s. áll.

$\psi = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ kezdeti vektor

$\psi(t) = ?$

$\hat{H} = \begin{pmatrix} 2 & \sqrt{3} & 0 \\ \sqrt{3} & 4 & 0 \\ 0 & 0 & 8 \end{pmatrix}$ $\psi = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$

időben hogy fejl. a rendszer