Kvantummechanika IX.

Dinamikai egyenlet, valószínűségi értelmezés

→ Egy fizikai rendszer állapotát a ψ hullámfüggvény minden időpontra maradéktalanul meghatározza. Matematikailag ez úgy jut kifejezésre, hogy $\frac{\partial \psi}{\partial t}$-t minden időpontban meghatározza ψ. A kapcsolat lineáris, s a legáltalánosabb alakja:

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

, ahol a külső térben mozgó részecs-

kére: $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(x,y,z) = -\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2 + V(x,y,z)$. Az általános egyenlet:

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2\psi + V(x,y,z)\psi}$$

→ Megoldása az együtthatók szétválasztásával: $\psi(x,t) = \xi(x)\,\varphi(t)$

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = \xi \frac{\partial \varphi}{\partial t} \quad ; \quad \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = \frac{d^2 \xi}{dx^2}\varphi$$

→ Behelyettesítve:

$$i\hbar \xi \frac{d\varphi}{dt} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\xi}{dx^2}\varphi + V\xi\varphi \Rightarrow i\hbar \frac{1}{\varphi}\frac{d\varphi}{dt} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{\xi}\frac{d^2\xi}{dx^2} + V$$

→ Szeparációs konstanst E-nek nevezzük:

$$i\hbar \frac{1}{\varphi}\frac{d\varphi}{dt} = E \longrightarrow \frac{d\varphi}{\varphi} = -\frac{iE\,dt}{\hbar} \longrightarrow \boxed{\varphi(t) = e^{-\frac{iEt}{\hbar}}}$$

(Az integrációs konstanst a ψ hullámfüggvénybe visszük)

→ A jobb oldal: $\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} + V\psi = E\psi}$ (nyilván tetszőleges té-dimenziós általánosítható)

→ A kapott állapotok jelentősége:

1. Stacionárius állapotok: $\psi(x,t) = \psi(x)\,e^{-\frac{iEt}{\hbar}} \longrightarrow |\psi(x,t)|^2 = |\psi(x)|^2$

→ minden várhatóértékek állandó → $\langle x \rangle = \text{áll} \rightarrow \langle p \rangle \overset{!}{=} 0$

/Semmi sem történik egy stacionárius állapotban/

12.) Ezek olyan állapotok, melyek meghatározott energiával rendelkeznek.

$$\hat{H}\psi = E\psi \longrightarrow \sigma_H^2 = 0$$

→ A teljes energia minden mérésre visszatér E értékre!

13.) Az ált. mego. szétválasztható megoldások lineárkombinációjaként áll elő. Az időfüggetlen Sch.-egyenlet végtelen számú megoldást eredményez, melyek mindegyikéhez külön-külön separációs konstans ($E_1, E_2, \dots$) tartozik.

$$\psi_1(x,t) = \psi_1(x)\, e^{-\frac{iE_1 t}{\hbar}} \; ; \quad \psi_2(x,t) = \psi_2(x)\, e^{-\frac{iE_2 t}{\hbar}}$$

→ Mivel minden ~~me~~ lineárkombináció maga is megoldás, így az ált.:

$$\boxed{\psi(x,t) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n(x)\, e^{-\frac{iE_n t}{\hbar}}}$$

Általános statisztikai interpretáció

→ Ha megmérünk egy mérhető mennyiséget $Q(x,p)$, $\psi(x,t)$ állapotban, biztosak vagyunk abban, hogy a $\hat{Q}\left(\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}, x\right)$ operátor egy sajátértékét kapjuk eredményül. Ha $\hat{Q}$ spektruma diszkrét, akkor annak valószínűsége, hogy ez az érték q_n lesz, mely az $f_n(x)$ saj. fv. saj. értéke:

$$|c_n|^2, \text{ ahol } \quad c_n = \langle f_n | \psi \rangle$$

→ Ha a spektrum folytonos, $q(z)$ sajátértékkel, melyek az $f_z(x)$ Dirac-ortonormált sajátfüggvényekhez tartoznak, akkor annak valószínűsége, hogy az eredmény dz intervallumban lesz:

$$|c(z)|^2 dz \quad , \text{ ahol } \quad c(z) = \langle f_z | \psi \rangle$$

A mérés hatására a hullámfüggvény összeomlik a hozzátartozó saj. állapotba.

→ Egy ~~érintő~~ mérhető mennyiség operátorának saj. fv.-ei teljesek, tehát a hullámfüggvény felírható ezek lineárkombinációjaként:

$$\psi(x,t) = \sum_n c_n f_n(x)$$

(→ Feltételezzük, hogy a spektrum diszkrét - könnyen áll.)

→ A sajátfüggvények ortonormalitásából:

$$c_n = \langle f_n | \psi \rangle = \int f_n^*(x)\, \psi(x,t)\, dx$$

→ Kvalitatívan c_n azt mondja meg, hogy mennyi f_n van ψ-ben, s mivel a mérésnek $\hat{Q}$ valmely sajátértékét kell visszaadnia, logikusan következik, hogy a q_n mérési valószínűségét $\hat{Q}$ f_n tartalma határozza meg.

↳ Mivel azonban a valószínűséget a hullámfüggvény abszolútértékének négyzete determinálja, a pontos mérés $|c_n|^2$ lesz.

→ A teljes valószínűség: $\sum_n |c_n|^2 = 1$ ($\langle \psi | \psi \rangle = 1$ - ből)

→ Hasonlóan: $\hat{Q}$ várható értéke: $\langle \hat{Q} \rangle = \sum_n q_n |c_n|^2$

<u>Biz:</u> $\langle Q \rangle = \langle \psi | \hat{Q} \psi \rangle = \langle \sum_{n'} c_{n'} f_{n'} | \hat{Q} \sum_n c_n f_n \rangle =$

$$= \sum_{n'} \sum_n c_{n'}^* c_n q_n \langle f_{n'} | f_n \rangle = \sum_{n'} \sum_n c_{n'}^* c_n q_n \delta_{n'n} = \sum_n q_n |c_n|^2$$

⊕ $\phi(p,t)$ és $\psi(x,t)$