# Kvantummechanika XII.

## Szabad tömegpont

→ A megoldandó Schrödinger-egyenlet: $-\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2\psi = E\psi$ $(V=0)$

→ Egyszerűség miatt 1-dimenziós oldjuk meg, majd ezt általánosítjuk.

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi \Longrightarrow \frac{d^2\psi}{dx^2} + k^2 = 0 \quad , \text{ahol } k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \; , \; E = \frac{k^2\hbar^2}{2m}$$

→ Áltl. mego: $\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$ ; $\psi(x,t) = \psi(x)\, e^{-\frac{iEt}{\hbar}}$

→ Ha megengedjük, hogy $k$ pozitív és negatív is lehessen:

$$\boxed{\psi(x,t) = Ae^{i\left(kx - \frac{k^2\hbar t}{2m}\right)}}$$

→ $k>0$ eset jobbra tartó
$k<0$ eset balra tartó
HULLÁM

→ Klasszikus sebesség $\lambda = \frac{2\pi}{|k|}$ , $p = \frac{h}{\lambda} = mv$ (de Broglie)

$$\frac{h}{\lambda} = \frac{\hbar k}{2\pi} = \hbar k = mv \longrightarrow \boxed{v_{class} = \frac{\hbar k}{m}} \quad , \; p = \hbar k$$

→ Kvantum seb.: $\boxed{v_{quant} = \frac{k\hbar}{2m}}$ → A részecske kétszer akkora sebességgel halad, mint az őt reprezentáló hullám! Paradoxon

De! E folytonos spektrum, nem valós fizikai állapotok a $\psi$-k, nem normálhatók. → Lineárkombinációjuk valós állapotot reprezentál

$$\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} \phi(k)\, e^{i\left(kx - \frac{k^2\hbar t}{2m}\right)}\, dk \qquad \left(c_n \to \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\phi(k)\,dk \text{ helyettesíti}\right)$$

→ csoport és fázis-sebességek
→ fázis seb: $\frac{\omega}{k}$
→ csoport: $\frac{d\omega}{dk} = \frac{k\hbar}{m} \overset{!}{=} v_{klasszikus}$

$$\rightarrow \phi(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} \psi(x,0)\, e^{-ikx}\, dk$$

Három dimenzióra:

mivel $p = \hbar|k|$ $\rightarrow$ $\boxed{\psi(\vec{r},t) = A e^{-\frac{i}{\hbar}(Et - \vec{p}\vec{r})}}$

→ Egy ilyen fv.-síkhullám - olyan állapotot ír le, amelyben a részecskének meghatározott E energiája és $\vec{p}$ impulzusa van. A hullám frekvenciája $E/\hbar$-val egyenlő, hullámvektora $\vec{k} = \frac{\vec{p}}{\hbar}$, a megfelelő $\lambda = \frac{2\pi\hbar}{p}$ a részecske de Broglie hullámhossza.

→ Egy szabad mozgást végző részecske energiaspektruma tehát folytonos, és nullától $+\infty$-ig terjed. E sajátértékek mindegyike végtelenszeresen elfajult.

→ $\phi(k)$ valójában a hullámfüggvény impulzus-térbeli reprezentációja.

Az impulzus-térbeli hullámfüggvény:

→ Első lépésként meghatározzuk az impulzus operátor sajátértékeit és sajátfüggvényeit:

↳ A sajátérték egyenlet: $\hat{P} f_p(x) = p f_p(x)$

A'H. mego: $f_p(x) = A e^{ipx/\hbar}$

→ Az eredmény nem integrálható négyzetesen fetnőleges komplex p értékre, de ha megköveteljük p - valósságát!

$$\Downarrow$$

$$\langle f_{p'}(x) | f_p(x) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} f_{p'}^*(x) f_p(x)\, dx = |A|^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ip'x/\hbar} \cdot e^{ipx/\hbar}\, dx =$$

$$= |A|^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{i(p-p')\frac{x}{\hbar}}\, dx$$

→ Tudjuk, hogy $\int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx}\, dx = 2\pi\delta(k)$, így:

$$\langle f_{p'}(x) | f_p(x) \rangle = |A|^2 2\pi\hbar\, \delta(p-p')$$

→ ha $A$-t $A = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}$-nak választjuk:

$$\langle f_{p'}(x) | f_p(x) \rangle = \delta(p-p')$$ → Nagyon hasonlít a Kronecker deltás kifejezésre.

(3 dimenzióban: $\int d^3\vec{r}\, f_{p'}(\vec{r}) f_p(\vec{r}) = \delta^3(\vec{p}-\vec{p}')$ )

→ A kapott egyenlet az ún. Dirac-ortonormalitás.

→ <u>FONTOS</u>: A sajátfüggvények teljesek! Ha helyettesítjük az összegzést egy integrállal, akkor bármely fv. felírható a köv. alakban:

$$f(x) = \int_{-\infty}^{\infty} c(p) f_p(x)\, dp = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} c(p) e^{ipx/\hbar}\, dp$$

→ A kifejtési együtthatókhoz ismét Fourier-trükkjének segítségével jutunk:

$$\langle f_{p'} | f_p \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} c(p) \langle f_{p'} | f_p \rangle\, dp = \int_{-\infty}^{\infty} c(p) \delta(p-p')\, dp = c(p')$$

→ Ha $\psi$ hullámfüggvény az impulzus-sajátfv-ek lineáriskombinációjaként álló:

$$c(p) = \langle f_p | \psi \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{-ipx}{\hbar}} \psi(x,t)\, dx = \phi(p,t)$$

→ Ezt a mennyiséget külön névvel illetjük: impulzus-térbeli hullámfv.

$$\left.\begin{aligned} \phi(p,t) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ipx/\hbar} \psi(x,t)\, dx \\ \psi(x,t) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ipx/\hbar} \phi(p,t)\, dp \end{aligned}\right\}$$ Transzformált párok!