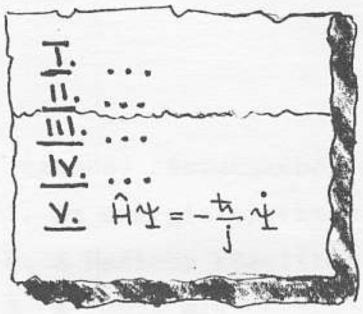
33

1.2. A kvantummechanika axiomatikus felépítése



} Matematikai modell
} Fizikai törvények

} POSZTULÁTUMOK $\downarrow$ Axiómák

1.2.1. A kvantummechanika matematikai eszközei

$$\hat{H}\Psi = -\frac{\hbar}{j}\dot{\Psi} \longrightarrow \underbrace{\Psi(\bar{r},t) = \psi(\bar{r})\, e^{-j\frac{E}{\hbar}t}}$$ (stacionárius állapot)

$\uparrow$
$V(\bar{r})$ konzervatív rendszer

$\uparrow$

$$\hat{H}\psi = E\psi$$ Az energia számítása

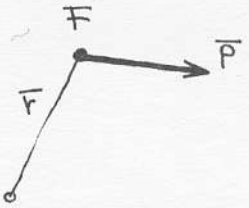
ÁLTALÁNOSÍTÁS $\downarrow$

$$\boxed{\hat{F}\varphi = F\varphi} \rightarrow \text{III. Axióma}$$

$\downarrow$ MÉRHETŐ, tehát valós kell, hogy legyen.

dinamikai változó : $\mathcal{F}$
operátor : $\hat{F}$?
mérhető érték : F

A klasszikus mechanikában



$\bar{p}\ (p_x, p_y, p_z)$
$\bar{r}\ (x, y, z)$ } alap mennyiségek

$$W_k = \frac{p^2}{2m} = \frac{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}{2m}$$
$$V = V(\bar{r}) = V(x, y, z)$$
$$F = \mathcal{F}(x, y, z, p_x, p_y, p_z) \equiv \mathcal{F}(\bar{r}, \bar{p})$$
} származtatott mennyiségek

A kvantummechanikában

$\hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{p}_z$
$\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}$ } "alapvető operátorok"

$$F \longrightarrow \hat{F} = \mathcal{F}(\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}, \hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{p}_z)$$ Legyen ez a definíciója az $\hat{F}$ operátornak

pl: $\downarrow$

Hamilton op: $$\hat{H} = \frac{1}{2m}\left(\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2\right) + V(\hat{x}, \hat{y}, \hat{z})$$

34

azaz

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\left(\hat{p}_x\hat{p}_x + \hat{p}_y\hat{p}_y + \hat{p}_z\hat{p}_z\right) + V(\hat{x},\hat{y},\hat{z}) =$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) + V(x,y,z).$$

Schrödinger:

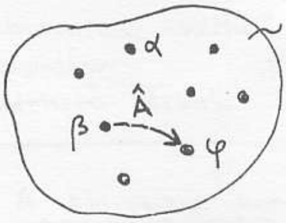
$$\boxed{\begin{array}{ll} \hat{p}_x = \frac{\hbar}{j}\frac{\partial}{\partial x} & \hat{x} = x\cdot \\ \hat{p}_y = \frac{\hbar}{j}\frac{\partial}{\partial y} & \hat{y} = y\cdot \\ \hat{p}_z = \frac{\hbar}{j}\frac{\partial}{\partial z} & \hat{z} = z\cdot \end{array}} \longrightarrow \text{ÁLTALÁNOSÍTHATÓ}$$

II. Axióma

$$\boxed{\hat{F} = F(\hat{x},\hat{y},\hat{z},\hat{p}_x,\hat{p}_y,\hat{p}_z)}$$

MATEMATIKAI ÖSSZEFOGLALÓ:

Függvénytér és operátorok:



$\mathcal{H}$ (jól definiált függvények halmaza) $\longrightarrow$ "Absztrakt tér"

operátor:

$\varphi = \hat{A}\beta$ (leképzés $\mathcal{H} \to \mathcal{H}$)

lineáris transzformáció:

$$\hat{A}(c_1\beta_1 + c_2\beta_2) = c_1\hat{A}\beta_1 + c_2\hat{A}\beta_2$$

$\uparrow$ komplex számok

Operátor algebra:

$(\hat{A}+\hat{B})\varphi = \hat{A}\varphi + \hat{B}\varphi$ (operátorok ÖSSZEADÁSA)

$(\hat{A}\cdot\hat{B})\varphi = \hat{A}\underbrace{(\hat{B}\varphi)}_{\gamma}$ (operátorok ÖSSZESZORZÁSA)

A $\mathcal{H}$ halmaz elemeinek tulajdonságai (csak az általunk használtak)

$\int_\infty |\psi|^2 dV = 1 \xrightarrow{\text{általánosítás}}$ (α,β) = komplex szám (SKALÁR szorzat)

$$\int_\infty \alpha(F)^*\beta(F)\,dV \equiv \langle\alpha|\beta\rangle \quad \text{(jelölés)}$$

$\uparrow$

$\left.\begin{array}{l}(x,y,z)\\(r,\vartheta,\varphi)\end{array}\right\}$ tetszőleges koordinátarendszer választható.

35

$$\int_{\infty} \alpha^*(\vec r)\,\alpha(\vec r)\,dV = \int_{\infty} |\alpha(\vec r)|^2\,dV \equiv \langle\alpha|\alpha\rangle = 1$$ (NORMA)

ORTOGONALITÁS : $\langle\alpha|\beta\rangle = 0$

Az ADJUNGÁLT operátor : $\hat A \longrightarrow \hat A^+$

$$\langle\beta|\hat A\gamma\rangle = \langle\hat A^+\beta|\gamma\rangle \qquad (\forall\beta,\gamma \in \mathcal{H})$$

részletesen kiírva (β,γ függvények esetén)

$$\int_{\infty} \dots$$

Az ÖNADJUNGÁLT operátor : $\hat A^+ = \hat A$

azaz $\langle\beta|\hat A\gamma\rangle = \langle\hat A\beta|\gamma\rangle \equiv \langle\beta|\hat A|\gamma\rangle$

(jelölés !)

részletesen kiírva (β,γ függvények esetén)

$$\int_{\infty} \dots$$

Az ÖNADJUNGÁLT operátorokra vonatkozó tételek:

$\boxed{\text{1. tétel : Egy önadjungált operátor sajátértéke valós}}$

Bizonyítás :

$$\hat A\alpha = A\alpha$$
$$(\hat A\alpha)^* = A^*\alpha^*$$

egyenlő, mert $\hat A^+ = \hat A$

$$\left\{\begin{aligned} \langle\alpha|\hat A\alpha\rangle &= A\,\langle\alpha|\alpha\rangle \\ \langle A\alpha|\alpha\rangle &= A^*\langle\alpha|\alpha\rangle \end{aligned}\right.$$

$$\downarrow$$

$A^* = A$ azaz valós

$\boxed{\text{2. tétel : Egy önadjungált operátor különböző sajátértékeihez tartozó sajátfüggvényei ortogonálisak egymásra}}$

Bizonyítás :

$$\hat A\alpha_i = A_i\alpha_i$$
$$\hat A\alpha_j = A_j\alpha_j \longrightarrow (\hat A\alpha_j)^* = A_j\,\alpha_j^*$$

egyenlő, mert $\hat A^+ = \hat A$

$$\left\{\begin{aligned} \langle\alpha_j|\hat A\alpha_i\rangle &= A_i\,\langle\alpha_j|\alpha_i\rangle \\ \langle\hat A\alpha_j|\alpha_i\rangle &= A_j\,\langle\alpha_j|\alpha_i\rangle \end{aligned}\right.$$

$$\underbrace{(A_i - A_j)}_{\neq 0}\ \underbrace{\langle\alpha_j|\alpha_i\rangle}_{=0} = 0$$

$(A_i \neq A_j)$ — $=0$ kell, hogy legyen

ORTONORMÁLT (függvény) rendszer

$\{\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \dots, \alpha_i, \dots\}$

$$\boxed{\langle \alpha_i | \alpha_j \rangle = \delta_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{ha } i=j \\ 0 & \text{ha } i \neq j \end{cases}}$$

lineárisan függetlenek

↓

A $\mathcal{H}$ (függvény) tér egy BÁZISÁT alkotják (TELJES tér)

$\forall \varphi \in \mathcal{H}$ $\boxed{\varphi = \sum_{i=1}^{\infty} a_i \alpha_i}$ (a_i = komplex szám)

A tér DIMENZIÓJA a bázisfüggvények száma

$$\mathcal{B} : \{\alpha_i\}_{i=1}^{\infty} \leftarrow (!)$$

A $\mathcal{H}$ egy "végtelen dimenziójú" Euklideszi tér $\equiv$ HILBERT tér

(!) VIGYÁZAT

Következmények:

$$\langle \varphi | \varphi \rangle = \left\langle \sum_i^{\infty} a_i \alpha_i \middle| \sum_j^{\infty} a_j \alpha_j \right\rangle = \sum_i^{\infty} \sum_j^{\infty} a_i^* a_j \underbrace{\langle \alpha_i | \alpha_j \rangle}_{\delta_{ij}} = \sum_i^{\infty} |a_i|^2 = 1$$

↓

$$\boxed{\sum_{i=1}^{\infty} |a_i|^2 = 1}$$

Az a_i skalár komponensek meghatározása:

$$\langle \alpha_i | \varphi \rangle = \left\langle \alpha_i \middle| \sum_j^{\infty} a_j \alpha_j \right\rangle = \sum_j^{\infty} a_j \underbrace{\langle \alpha_i | \alpha_j \rangle}_{\delta_{ij}} = a_i \rightarrow \boxed{a_i = \langle \alpha_i | \varphi \rangle}$$

A $\mathcal{H}$ (függvény) tér bázisa "bármely" $(\hat{A}, \hat{B}, \hat{C}, \dots)$ operátor sajátfüggvény rendszere lehet:

$$\hat{A} \alpha_i = A_i \alpha_i \longrightarrow \mathcal{B} : \{\alpha_i\}_1^{\infty} \longrightarrow \varphi = \sum_i^{\infty} a_i \alpha_i \rightarrow a_i = \langle \alpha_i | \varphi \rangle$$

$$\hat{B} \beta_i = B_i \beta_i \longrightarrow \mathcal{B} : \{\beta_i\}_1^{\infty} \longrightarrow \varphi = \sum_i^{\infty} b_i \beta_i \rightarrow b_i = \langle \beta_i | \varphi \rangle$$

$$\hat{C} \gamma_i = C_i \gamma_i \longrightarrow \text{stb....}$$

Bázistranszformációk ⟶ Mátrixok

FIZIKA:

$\boxed{\text{Elektron állapot} \longrightarrow \varphi \in \mathcal{H}}$ I. Axióma

↓

A "szuperpozíció elve": $\varphi = c_1 \varphi_1 + c_2 \varphi_2$

lehetséges állapotok

37

1.2.2. Operátorok felcserélési törvényei

(csererelációk)

$$\hat{x} = x\cdot$$
$$\hat{p}_x = \frac{\hbar}{j}\frac{\partial}{\partial x}$$

$$\hat{p}_x(\hat{x}\varphi) \overset{?}{=} \hat{x}(\hat{p}_x\varphi) \rightarrow \underbrace{[\hat{p}_x\hat{x} - \hat{x}\hat{p}_x]}_{[\hat{p}_x,\hat{x}]}\varphi = ?$$

$[\hat{p}_x,\hat{x}]$ jelölés

Általában:

$$\boxed{[\hat{A},\hat{B}] \equiv \hat{A}\cdot\hat{B} - \hat{B}\cdot\hat{A}}$$

(kommutátor)

$$[\hat{p}_x,\hat{x}]\varphi = \frac{\hbar}{j}\Big(\underbrace{\frac{\partial}{\partial x}x\varphi}_{\varphi + x\frac{\partial\varphi}{\partial x}} - x\frac{\partial\varphi}{\partial x}\Big) = \frac{\hbar}{j}\cdot\varphi$$

Axióma II.

$$\left.\begin{aligned}[\hat{p}_x,\hat{x}] &= \frac{\hbar}{j}\\ [\hat{p}_y,\hat{y}] &= \frac{\hbar}{j}\\ [\hat{p}_z,\hat{z}] &= \frac{\hbar}{j}\end{aligned}\right\}$$

az operátorok nem cserélhetők fel

↓

FIZIKAI TARTALMA → MÉRÉS

↑

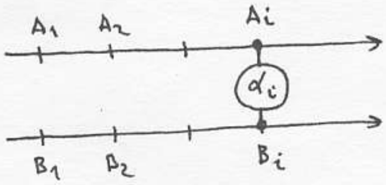
$$\left.\begin{aligned}[\hat{p}_x,\hat{p}_y] &= \emptyset\\ [\hat{p}_y,\hat{p}_z] &= \emptyset\\ [\hat{p}_z,\hat{p}_x] &= \emptyset\\ [\hat{x},\hat{y}] &= \emptyset\\ [\hat{y},\hat{z}] &= \emptyset\\ [\hat{z},\hat{x}] &= \emptyset\\ [\hat{p}_x,\hat{y}] &= \emptyset\\ &\vdots \text{ stb}\end{aligned}\right\}$$

az operátorok felcserélhetők

38

A felcserélési törvények (csererelációk) és a sajátfüggvények (nem degenerált esetben) kapcsolata

$$[\hat{A},\hat{B}]=0 \qquad \begin{aligned} \hat{A}\alpha_i &= A_i\alpha_i \\ \hat{B}\beta_i &= B_i\beta_i \end{aligned}$$



$$\hat{B}(\hat{A}\alpha_i) = A_i\,\hat{B}\alpha_i$$

$$\hat{A}\underbrace{(\hat{B}\alpha_i)}_{c\cdot\alpha_i} = A_i\cdot\underbrace{(\hat{B}\alpha_i)}_{c\cdot\alpha_i} \qquad \text{(kell, hogy legyen)}$$

$$\hat{B}\alpha_i = c\,\alpha_i \longleftrightarrow \hat{B}\beta_i = B_i\beta_i$$

Általában tehát $\boxed{\{\alpha_1,\alpha_2,\dots\alpha_i,\dots\} \equiv \{\beta_1,\beta_2,\dots\beta_i,\dots\}}$

"azonos" sajátfüggvény rendszerek

Az általában előforduló esetek:

Pl: $[\hat{p}_x,\hat{y}]=0 \xrightarrow{\text{ált.}} [\hat{A}(x),\hat{B}(y)]=0$

$$\left.\begin{aligned} \hat{A}\alpha_i(x) &= A_i\alpha_i(x) \\ \hat{B}\beta_i(y) &= B_i\beta_i(y) \end{aligned}\right\} \quad \varphi_i(x,y)\equiv\alpha_i(x)\cdot\beta_i(y)$$

$$\left.\begin{aligned} \hat{A}\varphi_i &= A_i\varphi_i \\ \hat{B}\varphi_i &= B_i\varphi_i \end{aligned}\right] \quad \text{azonos sajátfüggvények}$$

Pl: $[\hat{p}_x, \hat{W}_k(x)]=0 \xrightarrow{\text{ált.}} [\hat{A}, f(\hat{A})]=0$

$\hat{W}_k = \frac{1}{2m}\hat{p}_x^2$

$$\hat{A}\alpha_i = A_i\alpha_i \qquad |\cdot\hat{A}$$

$$\hat{A}\hat{A}\alpha_i = A_i\,\underline{\hat{A}\alpha_i}$$

$$\hat{A}^2\alpha_i = A_i^2\alpha_i \qquad |\cdot\hat{A}$$

$$\vdots$$

$$\hat{A}^n\alpha_i = A_i^n\alpha_i$$

$$\vdots$$

$$f(\hat{A})\equiv\sum_n a_n\cdot\hat{A}^n \qquad \sum_n a_n\hat{A}^n\alpha_i = \sum_n a_n\cdot A_i^n\cdot\alpha_i$$

$$\underline{f(\hat{A})\alpha_i = f(A_i)\cdot\alpha_i}$$

1.2.3. A kvantummechanikai méréselmélet alapjai.

(39)

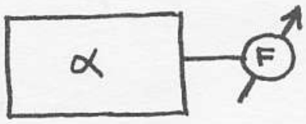
$\Psi(\vec{r},t)$ fizikai jelentése → $|\Psi|^2 \, dV$

→ $\vec{j} = \frac{\hbar}{2mj}\left(\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*\right)$

VALÓSZÍNŰSÉG

↓

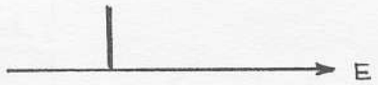
MÉRÉS → jelölés :



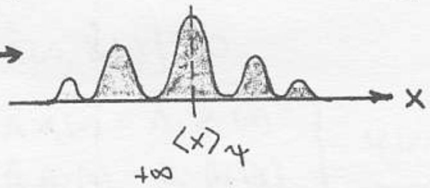
"MÉRŐMŰSZER" (adott dinamikai változó mérésére szolgáló berendezés)

"RENDSZER"
pl: egy elektron amelyik α állapotban van

III. Axióma $\quad \hat{H}\psi = E\psi \;\rightarrow$



BORN $\;|\psi|^2 dx \;\rightarrow$

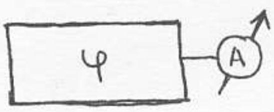


$$\begin{cases} \langle x \rangle_\psi = \int_{-\infty}^{+\infty} x\,|\psi|^2 dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \hat{x}\,\psi^*\psi\, dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* \hat{x}\,\psi\, dx \\ \langle E \rangle_\psi = E \;\longrightarrow\; \hat{H}\psi = E\psi \;\longrightarrow\; \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* \hat{H}\psi\, dx = E \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} \psi^*\psi\, dx}_{1} \end{cases}$$

↓ azaz

$$\langle E \rangle_\psi = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* \hat{H}\psi\, dx = \langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle$$

↓ ÁLTALÁNOSÍTÁS



$$\boxed{\langle A \rangle_\varphi = \langle \varphi | \hat{A} | \varphi \rangle}$$

IV. Axióma

(40) A kvantummechanika axiómái (= posztulátumai)

- I. $\{\text{állapotok}\} \rightarrow \{\alpha, \beta, \gamma, \dots, \varphi, \dots\} \equiv \mathcal{H}$

II. $\{\text{dinamikai változók}\} \rightarrow \{\hat{A}, \hat{B}, \dots, \hat{H}, \dots\}$

$$[\hat{p}_x, \hat{x}] = \frac{\hbar}{j}, \dots$$

$$\hat{F} = F(\hat{p}_x, \hat{x}, \dots)$$

III. $\hat{F}\varphi_i = F_i \varphi_i \quad (i = 1, 2, 3, \dots)$

IV. $\langle F \rangle_\gamma = \langle \gamma | \hat{F} | \gamma \rangle \quad \gamma \in \mathcal{H}$

V. $\hat{H}\Psi = -\frac{\hbar}{j}\dot{\Psi}$

Részletezve:

I. axióma: Minden lehetséges (elektron) állapothoz a $\mathcal{H}$ Hilbert tér egy elemét rendeljük.

II. axióma: Minden dinamikai változóhoz egy önadjungált operátort rendelünk. Az alapváltozókhoz (hely és impulzus komponensek,...) rendelt operátorok ki kell, hogy elégítsék az u.n. Heisenberg-féle csererelációkat.

III. axióma: Bármely dinamikai változóhoz rendelt operátor sajátértékei a dinamikai változó MÉRHETŐ értékeit adják, azaz

$$\hat{F}\varphi_i = F_i \varphi_i \quad \rightarrow \{F_1, F_2, F_3, \dots, F_i, \dots\}$$

IV. axióma: Egy dinamikai változó mérésekor a mérés VÁRHATÓ ÉRTÉKE [tetszőleges (elektron) állapotban történő mérés esetén] az alábbi skalár szorzattal határozható meg:

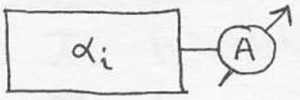
$$\langle \hat{F} \rangle_\gamma = \langle \gamma | \hat{F} \gamma \rangle$$

V. axióma: Az időtől függő (nem stacionárius) állapotokat az időtől függő SCHRÖDINGER egyenlet határozza meg:

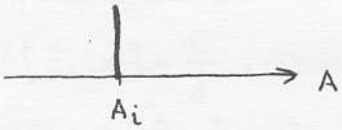
$$\hat{H}\Psi = -\frac{\hbar}{j}\dot{\Psi}$$

41 MÉRÉS a kvantummechanikában :

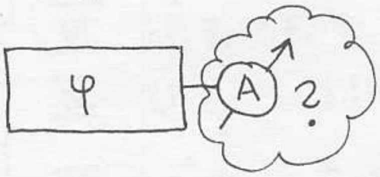
— mérés "SAJÁT ÁLLAPOTBAN":



$\hat{A}\alpha_i = A_i\alpha_i$ (III. Axióma)



— mérés (nem saját állapotban)



(III. ~~Axióma~~)

IV. Axióma : $\langle A\rangle_\varphi = \langle\varphi|\hat{A}|\varphi\rangle$

III. Axióma : $\hat{A}\alpha_i = A_i\alpha_i \quad (i=1,2,3,\dots) \qquad \varphi \notin \alpha_i$

$\mathcal{B} : \{\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \dots, \alpha_i, \dots\}$

I. Axióma : $\varphi = \sum_i^\infty a_i\alpha_i \longrightarrow \langle\varphi|\varphi\rangle = \sum_i^\infty |a_i|^2 = 1$

IV. Axióma :

$$\langle A\rangle_\varphi = \langle\varphi|\hat{A}|\varphi\rangle = \left\langle \sum_i^\infty a_i\alpha_i \middle| \hat{A} \middle| \sum_j^\infty a_j\alpha_j \right\rangle =$$

$$= \sum_i^\infty \sum_j^\infty a_i^* a_j \underbrace{\langle\alpha_i|\hat{A}|\alpha_j\rangle}_{A_j\alpha_j} =$$

$$= \sum_i^\infty \sum_j^\infty a_i^* a_j A_j \underbrace{\langle\alpha_i|\alpha_j\rangle}_{\delta_{ij}} = \sum_{i=1}^\infty |a_i|^2 \cdot A_i$$

azaz

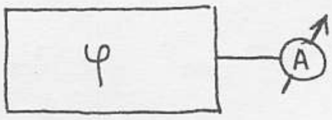
$$\boxed{\begin{gathered}\langle A\rangle_\varphi = \sum_{i=1}^\infty |a_i|^2 \cdot A_i \\ \sum_{i=1}^\infty |a_i|^2 = 1\end{gathered}}$$

↓

ÉRTELMEZÉS ← VALÓSZÍNŰSÉG-SZÁMÍTÁS

Fogalmak:
- elemi mérés
- mérés

(42)

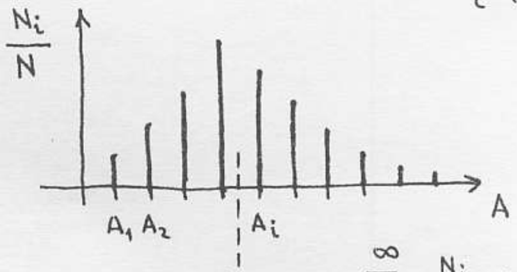


MÉRÉS ≡ N db elemi mérés

↓

$\{A_1, A_2, A_3, \ldots, A_i, \ldots\}$

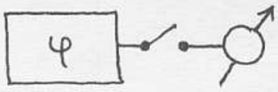
(III. Axióma)

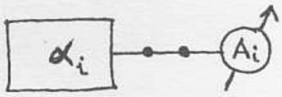


$$\langle A\rangle_\varphi = \sum_{i=1}^{\infty} \frac{N_i}{N} A_i \rightarrow \sum_{i=1}^{\infty} |a_i|^2 A_i$$

$$\lim_{N\to\infty} \frac{N_i}{N} = |a_i|^2 = P(A_i)$$

egy elemi mérés elött → egy elemi mérés után





(III. Axióma)

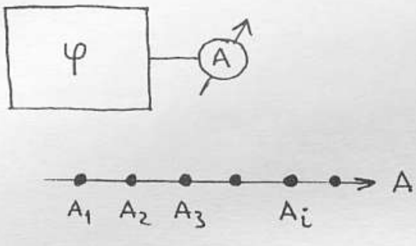
Tehát

$$|a_i|^2 = |\langle\varphi|\alpha_i\rangle|^2 \rightarrow \boxed{P(\varphi\rightarrow\alpha_i) = |\langle\varphi|\alpha_i\rangle|^2}$$

1.2.4. A koordináta és az impulzus kvantummechanikai tárgyalása

Kérdés:

IV. Axióma : $\langle x\rangle_\varphi = \langle\varphi|\hat{x}|\varphi\rangle \xrightarrow{?} |\varphi|^2 dx$ BORN



diszkrét spektrum

$$\langle A\rangle_\varphi = \langle\varphi|\hat{A}|\varphi\rangle$$

A $\mathcal{B}$ bázis meghatározása:

$$\hat{A}\alpha_i = A_i \cdot \alpha_i$$

részletesen kiírva:

$$\hat{A}\,\alpha_i(x) = A_i \cdot \alpha_i(x)$$

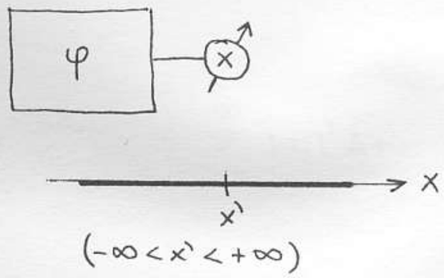
azonosító   változó

$$\mathcal{B} : \{\alpha_i(x)\}_{i=1}^{\infty}$$

$$\varphi(x) = \sum_{i=1}^{\infty} a_i\,\alpha_i(x)$$

$$\langle A\rangle_\varphi = \sum_{i=1}^{\infty} |a_i|^2 A_i =$$

$$= \sum_{i=1}^{\infty} \underbrace{|\langle\alpha_i|\varphi\rangle|^2}_{P(A_i)} A_i$$



$(-\infty < x' < +\infty)$

folytonos spektrum

$$\langle x\rangle_\varphi = \langle\varphi|\hat{x}|\varphi\rangle$$

$$\hat{x}\,\chi = x' \cdot \chi$$

$$\hat{x}\,\chi(x) = x' \cdot \chi(x) \qquad \hat{x} = x \cdot$$

$$x \cdot \chi(x, x') = x' \cdot \chi(x, x')$$

változó   azonosító

$$\mathcal{B} : \{\chi(x,x')\}_{x' \to -\infty}^{\infty}$$

$$\varphi(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} a(x')\,\chi(x,x')\,dx'$$

$$\langle x\rangle_\varphi = \int_{-\infty}^{+\infty} |a(x')|^2 x'\,dx' =$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} \underbrace{|\langle\chi(x,x')|\varphi(x)\rangle|^2}_{P(x')} x'\,dx'$$

$\chi(x, x') = ?$

(44) Meg kell oldani $\hat{x}$ sajátérték feladatot :

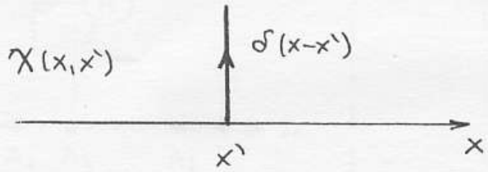
$$\hat{x}\,\chi(x,x') = x' \cdot \chi(x,x')$$

$$x \cdot \chi(x,x') = x' \cdot \chi(x,x')$$

$$\left.\begin{aligned} &(x-x') \cdot \chi(x,x') = 0 \\ &\int_{-\infty}^{+\infty} |\chi(x,x')|^2\, dx = 1 \end{aligned}\right\}$$

norma:

Nem precíz, de "Jó" (DIRAC)

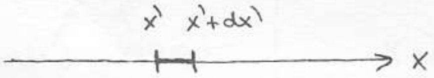


azaz

$$\underbrace{\langle \chi(x,x') \,|\, \varphi(x) \rangle} = \int_{-\infty}^{+\infty} \chi^*(x,x')\,\varphi(x)\,dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x-x')\,\varphi(x)\,dx = \underbrace{\varphi(x')}$$

Tehát

$$P(x') = \left| \langle \chi(x,x') \,|\, \varphi(x) \rangle \right|^2 = |\varphi(x')|^2$$



$$\underbrace{P(x')\,dx'} = |\varphi(x')|^2\, dx' \qquad \text{(BORN)}$$

Annak a valószínűsége, hogy
a részecske x helykoordinátájának
a mérési eredménye $(x', x'+dx')$
tartományba esik.

$$\downarrow$$

azaz : a részecske $(x', x'+dx')$ tartományban van

Az impulzus

$$\hat{p}_x \varphi = p_x \cdot \varphi$$

$$\frac{\hbar}{j}\frac{\partial \varphi}{\partial x} = p_x \cdot \varphi$$

$$\frac{\partial \varphi}{\partial x} = j \underbrace{\frac{p_x}{\hbar}}_{\equiv k_x} \varphi \longrightarrow \underbrace{\varphi(x) = A \cdot e^{j k_x \cdot x}}_{\text{sajátfüggvény}} \qquad \underbrace{p_x = \hbar k_x}_{\text{sajátérték}}$$

(Ugyanígy történik a számítás $\hat{p}_y$ és $\hat{p}_z$ esetén is.)

$$[\hat{p}_x, \hat{p}_y] = 0$$

$$[\hat{p}_y, \hat{p}_z] = 0$$

$$[\hat{p}_z, \hat{p}_x] = 0$$

A szimultán sajátfüggvények (1.2.2.-ben tanultak alapján)

$$\boxed{\begin{array}{c} \Phi(\bar{r}) = A \cdot e^{j \bar{k}\bar{r}} \\ \bar{p} = \hbar \bar{k} \end{array}} \longrightarrow A e^{j(k_x \cdot x + k_y y + k_z z)}$$

(de BROGLIE) a síkhullám az impulzus operátor sajátfüggvénye (≡ sajátállapota)

azaz:

$$\left.\begin{array}{l} \hat{p}_x \Phi = p_x \Phi \\ \hat{p}_y \Phi = p_y \Phi \\ \hat{p}_z \Phi = p_z \Phi \end{array}\right\}$$

Feladat:

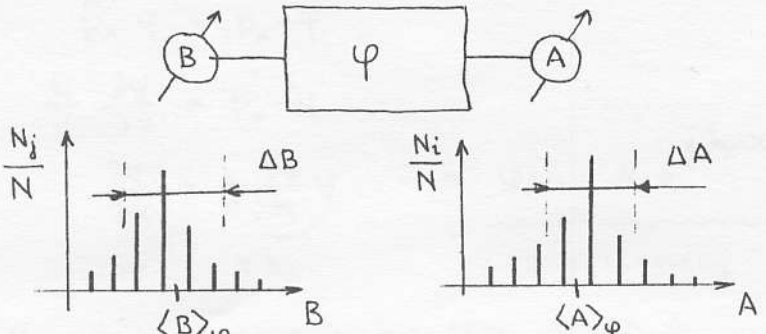
Tekintsük $\hat{p}_x$ operátor két különböző sajátértékéhez tartozó sajátfüggvényét

$$\hat{p}_x \varphi_1 = p_1 \varphi_1$$

$$\hat{p}_x \varphi_2 = p_2 \varphi_2$$

Számítsa ki : $\langle \varphi_1 | \varphi_2 \rangle$ skalár szorzatot !

(46) 1.2.5. A határozatlansági reláció



$$\hat{B}\beta_j = B_j\beta_j \qquad \hat{A}\alpha_i = A_i\alpha_i$$

$$\varphi \neq \{\beta_j\} \qquad \varphi \neq \{\alpha_i\}$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \Delta\hat{A} \equiv \hat{A} - \langle A\rangle \rightarrow \Delta\hat{A}^+ = \Delta\hat{A} \rightarrow \Delta A^2 \equiv \langle\varphi|\Delta\hat{A}^2|\varphi\rangle \rightarrow \Delta A \\ \Delta\hat{B} \equiv \hat{B} - \langle B\rangle \rightarrow \Delta\hat{B}^+ = \Delta\hat{B} \rightarrow \Delta B^2 \equiv \langle\varphi|\Delta\hat{B}^2|\varphi\rangle \rightarrow \Delta B \end{array} \right.$$

$$\left\{ \begin{array}{ll} [\hat{A},\hat{B}] = \hat{C} \equiv j\hat{D} \qquad \hat{D}^+ = \hat{D} & \text{(Feladat)} \\ [\Delta\hat{A},\Delta\hat{B}] = [\hat{A},\hat{B}] & \text{(Feladat)} \end{array} \right.$$

Matematika:

$$\left\{ \begin{array}{ll} \hat{G} \equiv g\cdot\Delta\hat{A} + j\,\Delta\hat{B} & (g \text{ valós szám}) \\ \hat{G}^+ = g\,\Delta\hat{A} - j\,\Delta\hat{B} & (\text{feladat}) \end{array} \right.$$

$$\langle\hat{G}\varphi|\hat{G}\varphi\rangle \equiv J(g) \geq 0 \qquad (\text{a norma definíciója miatt})$$

$$J(g) = \langle\varphi|\underbrace{\hat{G}^+\hat{G}}\varphi\rangle$$

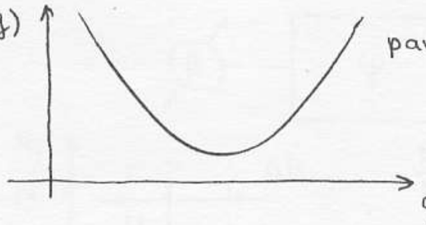
$$\hat{G}^+\hat{G} = (g\,\Delta\hat{A} - j\,\Delta\hat{B})(g\,\Delta\hat{A} + j\,\Delta\hat{B}) =$$

$$= g^2\Delta\hat{A}^2 + jg\underbrace{(\Delta\hat{A}\Delta\hat{B} - \Delta\hat{B}\Delta\hat{A})}_{[\Delta\hat{A},\Delta\hat{B}] = j\hat{D}} + \Delta\hat{B}^2$$

$$J(g) = g^2\underbrace{\langle\varphi|\Delta\hat{A}^2|\varphi\rangle}_{\equiv\Delta A^2} + \underbrace{\langle\varphi|\Delta\hat{B}^2|\varphi\rangle}_{\equiv\Delta B^2} - g\underbrace{\langle\varphi|\hat{D}|\varphi\rangle}_{\langle D\rangle}$$

(47)

$$J(g) = g^2 \Delta A^2 - g \langle D \rangle + \Delta B^2 \geq 0$$



parabola → Diszkrimináns ≤ 0

$$\langle D \rangle^2 - 4 \Delta A^2 \Delta B^2 \leq 0$$

$$\Delta A^2 \Delta B^2 \geq \frac{1}{4} \langle D \rangle^2$$

$$\Delta A \cdot \Delta B \geq \frac{1}{2} \left| \langle D \rangle \right|$$

$$\boxed{\Delta A \cdot \Delta B \geq \frac{1}{2} \left| \langle \varphi | [\hat{A}, \hat{B}] \varphi \rangle \right|}$$

Heisenberg féle határozatlansági reláció

Példa:

$$\left.\begin{aligned} \hat{A} &\equiv \hat{p}_x \\ \hat{B} &\equiv \hat{x} \end{aligned}\right\} \quad [\hat{A}, \hat{B}] \equiv [\hat{p}_x, \hat{x}] = \frac{\hbar}{j}$$

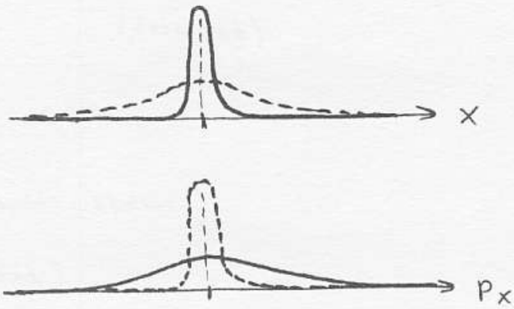
$$\boxed{\Delta p_x \cdot \Delta x \geq \frac{\hbar}{2}}$$

$$\boxed{\Delta p_x \cdot \Delta p_y \geq 0}$$

$\vdots$

$$\boxed{\Delta x \cdot \Delta y \geq 0}$$

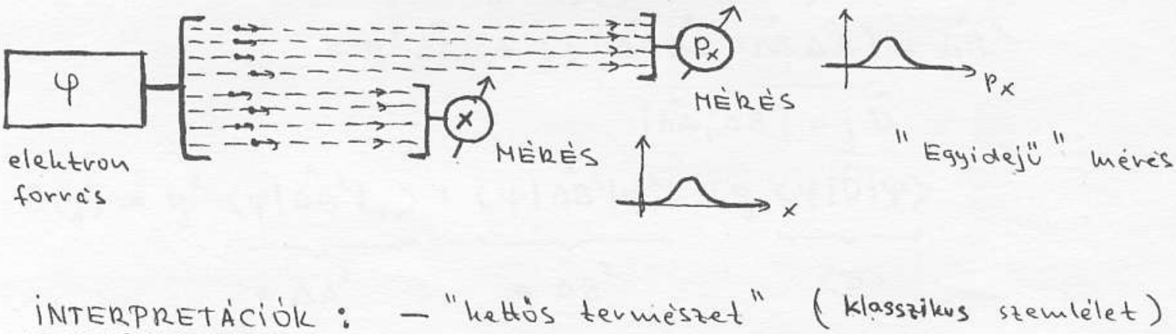
$\vdots$



Nem létezik olyan állapot amely esetén : $\Delta p_x \cdot \Delta x < \frac{\hbar}{2}$

(!)

Értelmezés a MÉRÉS alapján :



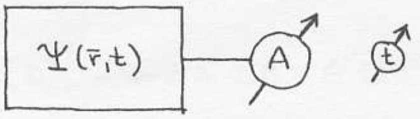
INTERPRETÁCIÓK : — "kettős természet" (klasszikus szemlélet)
— a mérés mint beavatkozás
— merőműszer egy makroszkópikus eszköz
— rejtett paraméterek (BELL 1968)

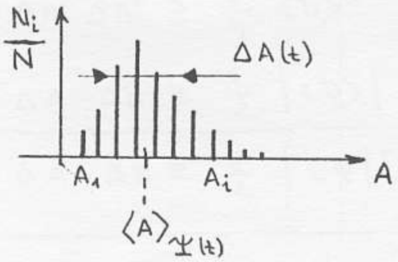
1.2.6. A klasszikus mechanika és a kvantummechanika kapcsolata

1.2.6.1. Az EHRENFEST tétel

Mérés nem stacionárius $\underbrace{(\text{időfüggő})}_{\downarrow}$ állapotban

$$|\Psi(\bar{r},t)|^2$$





$\hat{A}$ nem tartalmazza a t idő (paramétert) ≡ "időfüggetlen"

$$\frac{d}{dt}\langle A\rangle_{\Psi(t)} = \frac{d}{dt}\underbrace{\langle\Psi|\hat{A}|\Psi\rangle}_{} = \underbrace{\langle\dot{\Psi}|\hat{A}\Psi\rangle}_{} + \underbrace{\langle\Psi|\hat{A}\dot{\Psi}\rangle}_{}$$

$$(\text{pl}:)\ \int_{\infty}\Psi^*\hat{A}\Psi\,dV \rightarrow$$

$$\left[\begin{array}{lll} \hat{H}\Psi = -\frac{\hbar}{j}\dot{\Psi} & \longrightarrow & \dot{\Psi} = -\frac{j}{\hbar}\hat{H}\Psi \\ \hat{H}\Psi^* = +\frac{\hbar}{j}\dot{\Psi}^* & \longrightarrow & \dot{\Psi}^* = +\frac{j}{\hbar}\hat{H}\Psi^* \end{array}\right.$$

(beírva)

Adódik, hogy:

$$\frac{d}{dt}\langle A\rangle_{\Psi(t)} = +\frac{j}{\hbar}\langle\hat{H}\Psi|\hat{A}\Psi\rangle - \frac{j}{\hbar}\langle\Psi|\hat{A}\hat{H}\Psi\rangle =$$

$$= \frac{j}{\hbar}\langle\Psi|\hat{H}\hat{A}\Psi\rangle - \frac{j}{\hbar}\langle\Psi|\hat{A}\hat{H}\Psi\rangle =$$

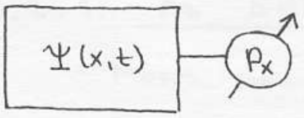
$$= \frac{j}{\hbar}\langle\Psi|\underbrace{(\hat{H}\hat{A}-\hat{A}\hat{H})}_{[\hat{H},\hat{A}]\ (\text{kommutátor})}\Psi\rangle$$

$$\boxed{\frac{d}{dt}\langle A\rangle_{\Psi(t)} = \frac{j}{\hbar}\langle\Psi|[\hat{H},\hat{A}]\Psi\rangle}$$ EHRENFEST tétel

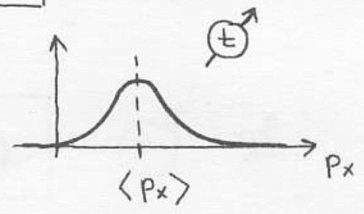
1.2.6.2. A klasszikus mechanika mozgásegyenlete

(Newton II. axióma)

(1 dim)



$$\hat H \Psi = -\frac{\hbar}{j}\dot\Psi \,, \qquad \hat H \equiv \frac{\hat p_x^2}{2m} + \hat V(x)$$



EHRENFEST tétele:

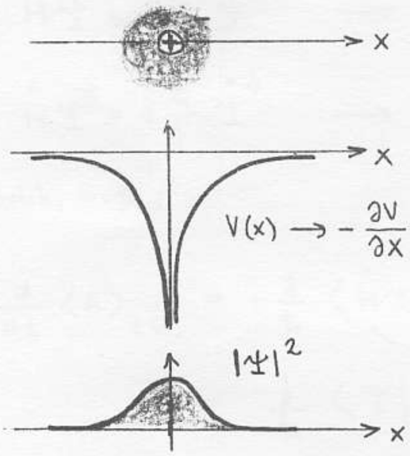
$$\frac{d}{dt}\langle p_x\rangle = \frac{j}{\hbar}\langle \Psi | [\hat H, \hat p_x]\Psi\rangle$$

$$[\hat H, \hat p_x]\Psi = \underbrace{\left[\frac{\hat p_x^2}{2m}, \hat p_x\right]}_{\emptyset}\Psi + [\hat V, \hat p_x]\Psi = \frac{\hbar}{j}\Big(V\cdot\frac{\partial \Psi}{\partial x} - \underbrace{\frac{\partial}{\partial x}V\cdot\Psi}_{-V\frac{\partial\Psi}{\partial x} - \Psi\frac{\partial V}{\partial x}}\Big)$$

azaz

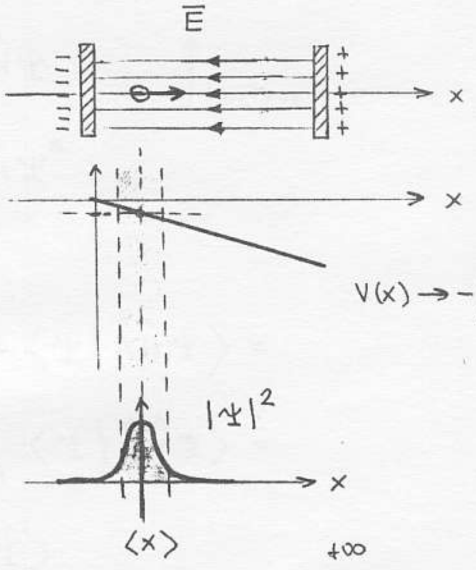
$$\boxed{\frac{d}{dt}\langle p_x\rangle = \left\langle \Psi \left| \left(-\frac{\partial V}{\partial x}\right)\right| \Psi\right\rangle}$$

kétféle lehetőség van:



$$\frac{d}{dt}\langle p_x\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty}\left(-\frac{\partial V}{\partial x}\right)\underbrace{|\Psi(x)|^2}\, dx$$

↑
SCHRÖDINGER egyenletből
↓
A KVANTUMMECHANIKÁT **KELL** használni

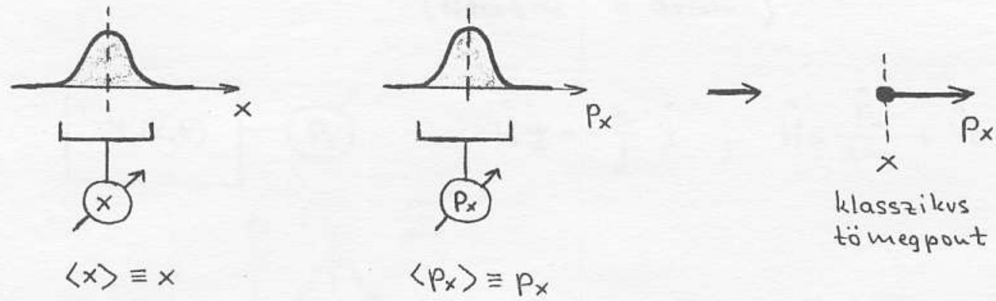


$$\frac{d}{dt}\langle p_x\rangle \cong \left[-\frac{\partial V}{\partial x}\right]_{\langle x\rangle}\cdot \underbrace{\int_{-\infty}^{+\infty}|\Psi|^2 dx}_{1}$$

$$\boxed{\frac{d}{dt}\langle p_x\rangle \cong \left[-\frac{\partial V}{\partial x}\right]_{\langle x\rangle}} \quad \text{(Newton 2.)}$$

A KLASSZIKUS MECHANIKÁT **LEHET** alkalmazni

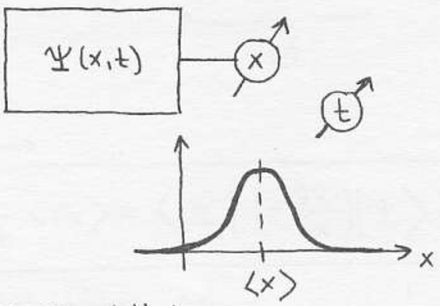
(50) A "tömegpont" fogalom kialakulásának magyarázata:



Egy klasszikus (makroszkópikus) mérés mindig nagyon nagy számú kvantummechanikai elemi mérés sokasága ($N \sim 10^{23}$).
A klasszikus mérőműszer ezen elemi mérések <u>átlagát</u> jeleníti meg a <u>mért</u> adatként

<u>A sebesség</u>

(1 dim)



$$\hat{H}\Psi = -\frac{\hbar}{j}\dot{\Psi}\ , \qquad \hat{H} \equiv \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + V(x)$$

EHRENFEST tétel:

$$\frac{d}{dt}\langle x\rangle = \frac{j}{\hbar}\langle \Psi | [\hat{H},\hat{x}]\Psi\rangle$$

$$[\hat{H},\hat{x}]\Psi = \left[\frac{\hat{p}_x^2}{2m},\hat{x}\right]\Psi + \underbrace{\left[\hat{V}(x),\hat{x}\right]}_{\emptyset}\Psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{\partial^2}{\partial x^2}, x\cdot\right]\Psi =$$

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

azaz

$$\frac{d}{dt}\langle x\rangle = \frac{j}{\hbar}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\right)\cdot 2\langle\Psi|\Psi'\rangle = \frac{1}{m}\cdot\frac{\hbar}{j}\left\langle\Psi\left|\frac{\partial\Psi}{\partial x}\right.\right\rangle = \frac{1}{m}\langle\Psi|\hat{p}_x\Psi\rangle$$

$$\boxed{\frac{d}{dt}\langle x\rangle = \frac{1}{m}\langle p_x\rangle}$$

A <u>munka tétel</u> (→ klasszikus mechanika)

$$\frac{d}{dt}\langle W_k\rangle = \frac{j}{\hbar}\langle\Psi|[\hat{H},\hat{W}_k]\Psi\rangle = \cdots \qquad \boxed{\left[-\frac{\partial V}{\partial x}\right]_{\langle x\rangle}\cdot\frac{1}{m}\langle p_x\rangle = \frac{d}{dt}\langle W_k\rangle}$$

(Feladat)

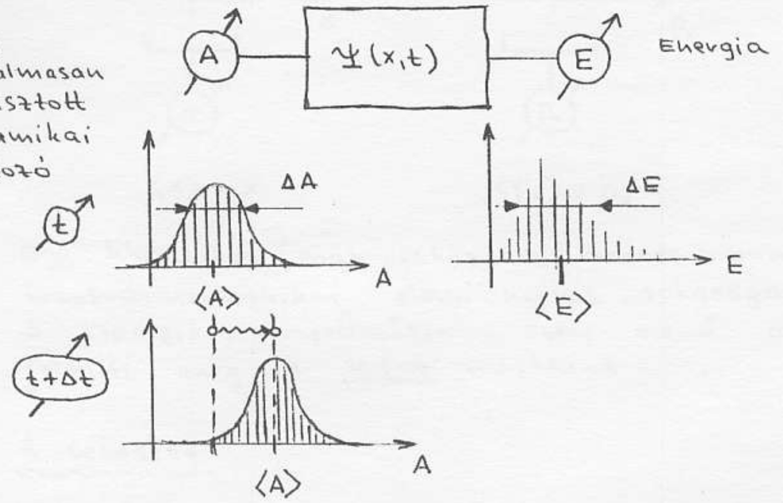
↓ $\frac{dW_k}{dt} = \overline{F}\cdot\overline{v}$

↓ (szilárdtestfizika)

51

1.2.6.3. Az energia és az idő közötti határozatlansági reláció

Egy alkalmasan választott dinamikai változó



Energia

EHRENFEST tételek:

$$\frac{d}{dt}\langle E\rangle = \frac{j}{\hbar}\langle \Psi|[\hat H,\hat H]\Psi\rangle = 0 \longrightarrow \langle E\rangle = \text{állandó}$$

$$\frac{d}{dt}\langle A\rangle = \frac{j}{\hbar}\langle \Psi|[\hat H,\hat A]\Psi\rangle$$

HEISENBERG határozatlansági reláció:

$$\Delta A\cdot\Delta E \ge \frac{1}{2}\left|\langle \Psi|[\hat H,\hat A]\Psi\rangle\right|$$

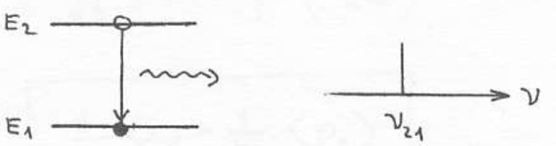
$$\longrightarrow \Delta A\cdot\Delta E \ge \underbrace{\frac{1}{2}\left|\frac{\hbar}{j}\frac{d}{dt}\langle A\rangle\right|}_{\frac{\hbar}{2}\cdot\left|\frac{d}{dt}\langle A\rangle\right|}$$

Tehát:

$$\underbrace{\frac{\Delta A}{\left|\frac{d}{dt}\langle A\rangle\right|}}_{\equiv \Delta t}\cdot\Delta E \ge \frac{\hbar}{2} \longrightarrow \boxed{\Delta E\cdot\Delta t \ge \frac{\hbar}{2}}$$

$\equiv \Delta t$ MÉRHETŐ mennyiség (ÓRA): A rendszerben lezajló változásokat jellemzi (karakterisztikus időtartam)

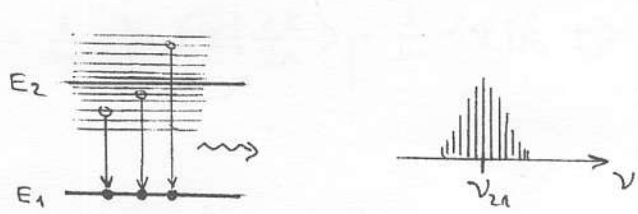
Példa: (BOHR atom)



(statikus modell)

$\Delta t \to \infty$

$\Delta E_2 = 0 \longrightarrow$ éles spektrum vonal.



(A valóság dinamikus)

Δt = véges

ΔE_2 = véges $\longrightarrow$ a spektrum vonal "kiszélesedik"

$\Downarrow$

DINAMIKUS MODELL

Δt miért véges?

KVANTUMELEKTRODINAMIKA