

Előadó • Orsz. Adatok

1900. dec. után pl. kvantummechanika...

modern fizika
előtte klasszikus fizika

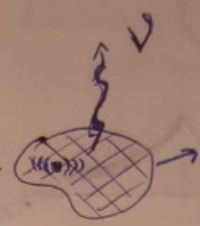
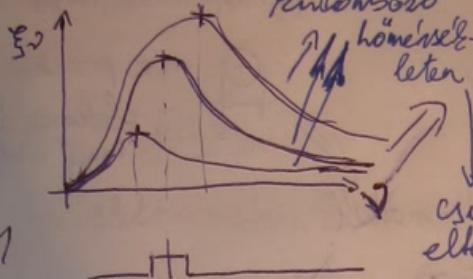
Követelmény:

- Órákon vérszór!
 - 2 ZH \rightarrow 2×20 pont (vizsgáiban beszámít)
 - \rightarrow 10 pontból van aláírás (ZH-élet)
 - Vizsga: 60 pont (írásbeli, szóbelivel lehet szerkeszteni)
 - Jegy: $\sum V + ZH1 + ZH2 \Rightarrow 100$ pont
- | | | |
|-------|----------------|---|
| 1. ZH | 1-6. hét anyag | } lezáró pont ellenőrzés
Leírókészet a neten |
| 2. ZH | többi anyag | |

Ability and motivation

1900

Planck:



Reszeg beeme az atom, és sugároz

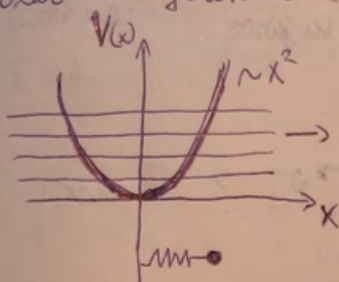
$h \equiv$ Planck-állandó

$h = 6,6 \cdot 10^{-34} \text{ Js}$

csúcs eltolódik \Rightarrow minél magasabb a hőmérséklet, annál inkább eltolódik a csúcs magasabb frekvenciák felé

Hőmérsékletmérés spektrum alapján \leftarrow
 \downarrow
 sugárzási spektrum

Megnyarítás: rezgőatom (mint egy zis antenna sugároz)



$\nu \equiv$ frekvencia

$V(x) \equiv$ potenciális energia

$x \equiv$ kitérés

$E_n = n \cdot h \cdot \nu$

$n \in \mathbb{Z}$

Energia szintek vannak, de köztes állapot nincs

\downarrow
 Energia kvantumok vannak

H atom (hidrogén)



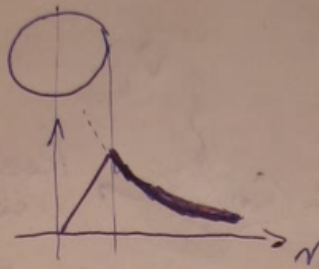
Elektron felfedezése \rightarrow Thomson (1897*)



Feltételezte, hogy az atomban valahol van e^- , amit ki-kapított

Rutherford \Rightarrow

Rutherford (1907-10)



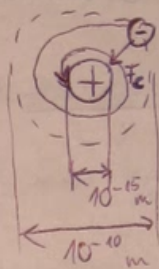
bröndsi Eiselet

Megállapította, hogy

\oplus = a pozitív töltés
 10^{-15} m elektrón térfogat-
 ban összpontosul

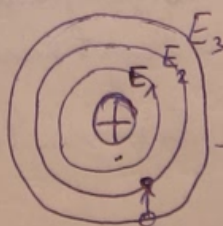
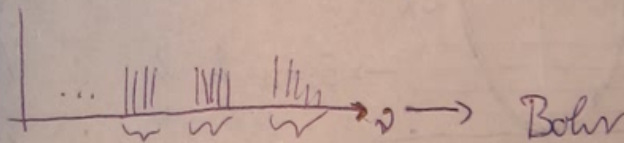
Bolygó-modell

F_c : Coulomb-erő



modell nem jó, mert
 van gyorsulás, s így
 az elektronok be-
 kellene esnie az atom-
 magba, mégsem teszi

Atom csak bizonyos γ -kron sugároz



→ diszkrét szintet, amelyeken
 az elektron nem sugároz

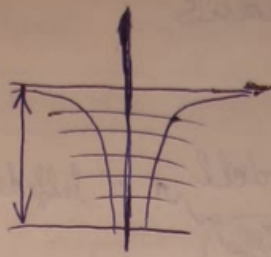
→ ha egyik pályáról a másikra
 kerül az elektron, akkor
 sugárzási jelenség van

1, E_1, E_2, E_3

2, $h \cdot \nu_{nm} = E_n - E_m$

3, $L_n = n \cdot h$; $h = \frac{h}{2\pi}$; $n = 1, 2, 3, 4, \dots$

$\Rightarrow E_n = -\frac{13,6 \text{ eV}}{n^2}$



Az energia hirtelen
 hőmérséklet az u^2 -es
 kifejezés miatt

Foton \leftrightarrow Einstein

↳ elektromágneses hullám energiája \propto frekvencián

$$E_f = h \cdot \nu$$

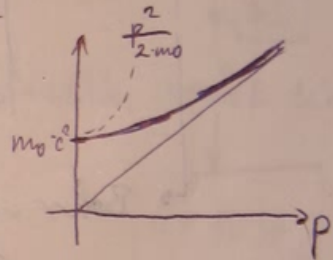
↳ Csak energiát egységnyi idő alatt veheti fel, vagy sugározhat ki az atom

$$E = \sqrt{m_0^2 \cdot c^4 + c^2 \cdot p^2}$$

$$E = m \cdot c^2$$

$$m = \frac{m_0}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}$$

← tömeg ↑ impulzus



Foton esetén az energia és az

impulzus kapcsolata: $E = c \cdot p$
 ($m_0 = 0$)

$$E = h \cdot \nu$$

$$c \cdot p = h \cdot \nu$$

de Broglie \Rightarrow $p = h \cdot \frac{\nu}{c} = \frac{h}{\lambda}$

Elektromágneses hullám { hullám tulajdonság: ν, λ (hullám tulajdonság)
 Foton tulajdonság: E, p (relatívista tulajdonság)

↓
 A leíró modell ~~z~~ettős

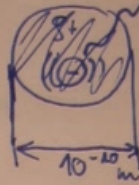


2009.
02.10.

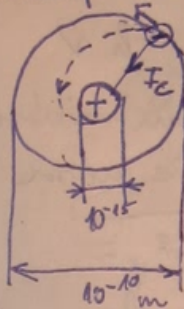
2. Előadás

Előző nap áttekintése

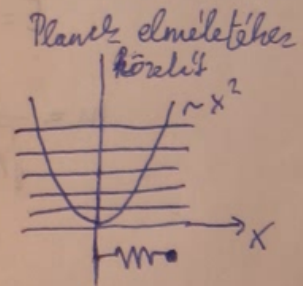
H atom → Thomson-modell → e^- felfedezése



Rutherford (1911)



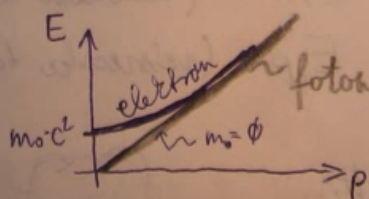
Bohr-modell (1913)



① E_1, E_2, E_3, \dots

② $h \cdot \nu_{nm} = E_n - E_m$

③ $L_n = n \cdot h \rightarrow$ peridület
 $n = 1, 2, 3, \dots$



$$E = \sqrt{m_0^2 c^4 + p^2 c^2}$$

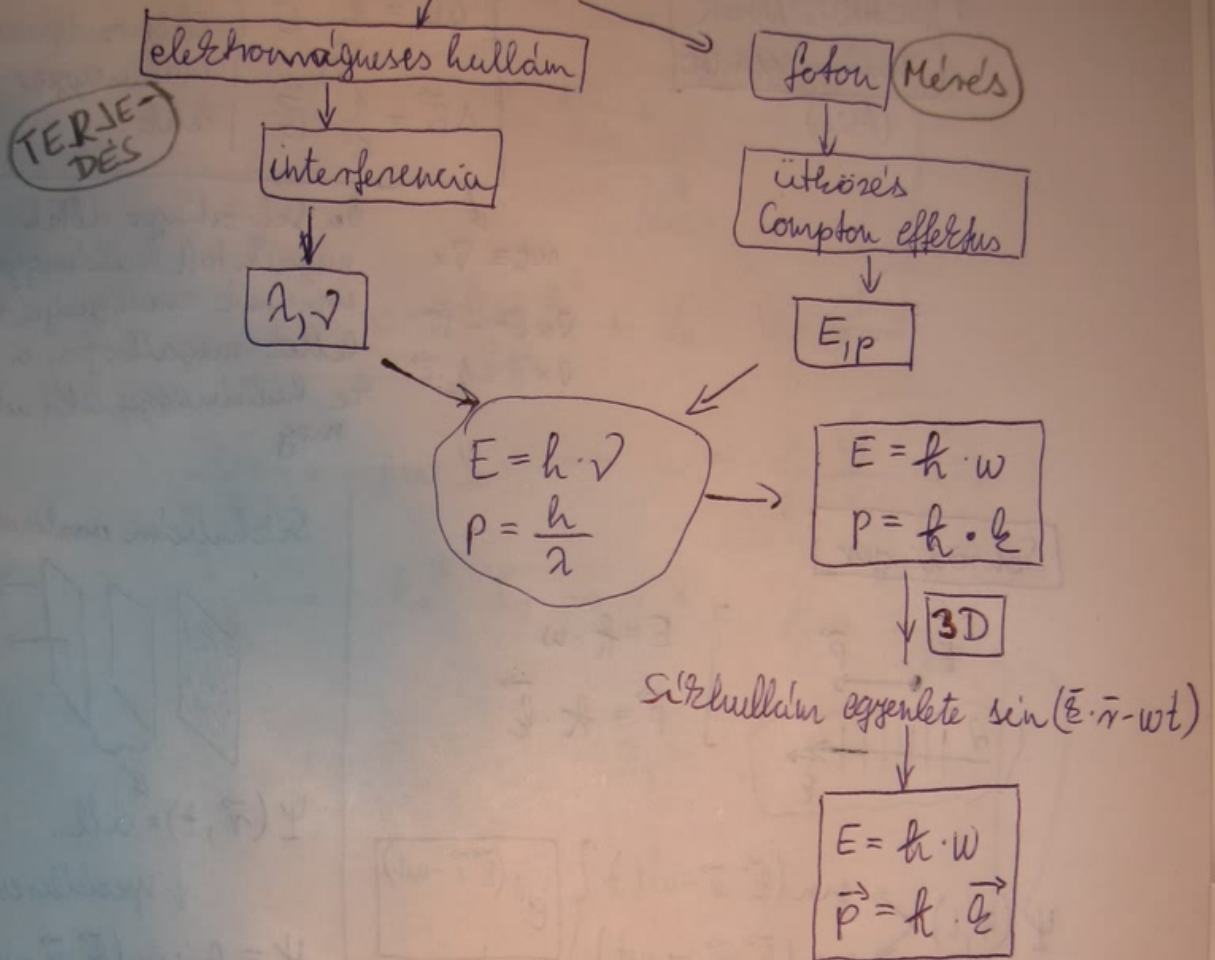
$m_0 = 0 \Rightarrow E = c \cdot p \rightarrow E = h \cdot \nu$

$$m = \frac{m_0}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} \rightarrow E = m \cdot c^2$$

$$\downarrow$$

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

Elektromágneses kölcsönhatás



~~Kettős természet~~ csak a modellünk kettős

- ha terjed hullámmodellt használunk
- ha mérünk akkor foton modellt alkalmazunk

de Broglie

Ha foton így viselkedik, az elektron is így viselkedik részecskeként is jellemző, hogy kettős modellel tudjuk leírni.

$$E = h \cdot \omega$$

$$\vec{p} = h \cdot \vec{k}$$

Davisszon-Gerner kísérletai

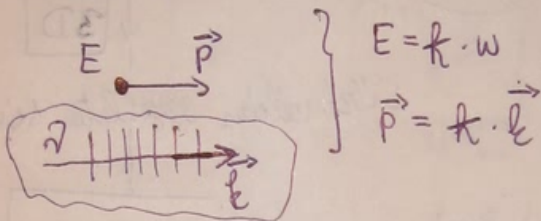
elektronok interferencia képe hasonló lett, mint a röntgensugárzásé

SCHRÖDINGER
hullámegyenlet
(1926)

$$\left. \begin{aligned} \Delta \vec{E} &= \frac{1}{c^2} \ddot{\vec{E}} \\ \Delta \vec{B} &= \frac{1}{c^2} \ddot{\vec{B}} \end{aligned} \right\} \text{Elektromágneses hullámegyenletek}$$

↓
 $\text{rot} \equiv \nabla \times$
 $\nabla \times \vec{E} = -\dot{\vec{B}}$
 $\nabla \times \vec{B} = \frac{1}{c^2} \dot{\vec{E}}$
 ↓
 Ha Schrödinger által megalkotott hullámegyenletek is ennek analógiájára lettek megalkotva, a rekurrens hullámegyenletet adjuk meg

Schrödinger



$$\Psi(\vec{r}, t) \begin{cases} \sin(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t) \\ \cos(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t) \end{cases} \left\{ \begin{aligned} & e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)} \\ & \Psi_0 = \end{aligned} \right.$$

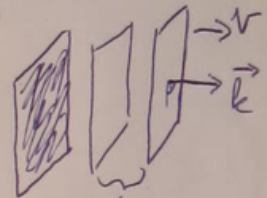
A Maxwell egyenleteknél adott volt a hullámegyenlet és annak volt a megoldása a síkhullám ~~egyenlet~~, itt adott a megoldás és az $E = k \cdot \omega, \vec{p} = \hbar \cdot \vec{k}$ feltétel, ehhez adjuk meg a hullámegyenleteket

$$\vec{k} \cdot \vec{r} = k_x \cdot x + k_y \cdot y + k_z \cdot z$$

$$\vec{k} \equiv (k_x, k_y, k_z)$$

$$\vec{r} \equiv (x, y, z)$$

Síkhullám analógiája



$$\Psi(\vec{r}, t) = \text{áll.}$$

↓ specialis eset

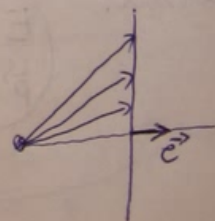
$$\Psi = A \cdot \sin(\underbrace{\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t}_{= \text{áll.}})$$

$$\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t = \text{áll.} + 2\pi n$$

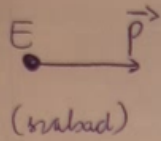
$$\left(\frac{\vec{k}}{k} \right) \cdot \vec{r} = \text{áll.} + \left(\frac{2\pi}{k} \right) \cdot n + \frac{\omega}{k} \cdot t$$

↓
 λ

$$\vec{e} \cdot \vec{r} = \text{áll.}$$



$$\Psi_0 = A_0 \cdot e^{j(\vec{k}_x \cdot x + \vec{k}_y \cdot y + \vec{k}_z \cdot z - \omega t)}$$



$$E = \frac{p^2}{2 \cdot m} + V_0$$

↓
(áll)

$$E = \hbar \cdot \omega$$

$$\vec{p} = \hbar \cdot \vec{k}$$

$$\hbar \cdot \omega = \frac{\hbar^2 \cdot k^2}{2m} + V_0 \quad (1)$$

$$\frac{\partial \Psi_0}{\partial t} = -j \omega \Psi_0 \rightarrow \omega = -\frac{1}{j} \frac{\dot{\Psi}_0}{\Psi_0} \quad (2)$$

$$\frac{\partial^2 \Psi_0}{\partial x^2} = -k_x^2 \cdot \Psi_0 \rightarrow k_x^2 = -\frac{1}{\Psi_0} \cdot \frac{\partial^2 \Psi_0}{\partial x^2}$$

$$k_y^2 = \dots$$

$$k_z^2 = \dots$$

$$k^2 = k_x^2 + k_y^2 + k_z^2 =$$

$$= -\frac{1}{\Psi_0} \left[\frac{\partial^2 \Psi_0}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi_0}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Psi_0}{\partial z^2} \right] = -\frac{\Delta \Psi_0}{\Psi_0} \quad (3)$$

$\Delta \Psi_0$
↑ Laplace operator

$$-\frac{\hbar^2}{2 \cdot m} \cdot \Delta \Psi_0 + V_0 \cdot \Psi_0 = -\frac{\hbar^2}{j} \frac{\dot{\Psi}_0}{\Psi_0} \Leftrightarrow (1), (2) \text{ és } (3) \text{ egyen-}$$

letről behelyettesíté-
ssel kapjuk

↓ általánosítás

$$V_0 \rightarrow V(\vec{r}, t)$$

$$\Psi_0 \rightarrow \Psi(\vec{r}, t)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \Delta \Psi + V(\vec{r}, t) \cdot \Psi = -\frac{\hbar}{i} \dot{\Psi}$$

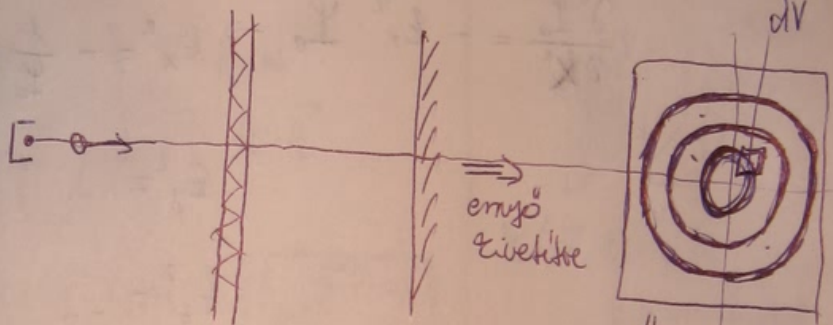
$$-\frac{e^2}{4 \cdot \pi \cdot \epsilon_0} \cdot \frac{1}{r}$$

$$E_n = -\frac{13,6 \text{ eV}}{n^2} \quad n=1,2,3, \dots$$

Spektroszkóp

1926

Max Bohr



Ahol ~~sz~~ van ~~magas~~ Ψ valóságsűrűség, ott Ψ magas
 ahol nem ott Ψ alacsony
 sűrűségfüggvény

elektromágneses hullám esetén

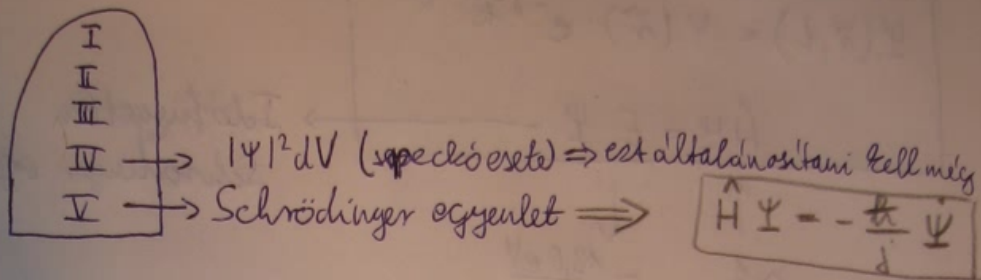
$$\vec{E} = \vec{E}_1 + \vec{E}_2$$

$$\vec{E}^2 = |\vec{E}_1 + \vec{E}_2|^2 \quad \Psi$$

$$|\Psi|^2 \cdot dV$$

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

↑
 valóságsűrűség sűrűségfüggvény
 értelmezése



$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi + V(\vec{r}, t) \cdot \Psi = -\frac{\hbar}{j} \dot{\Psi}$$

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

$\hat{H} \equiv$ egy operátor.

Időfüggetlen Schrödinger egyenlet

Szeparálás \rightarrow

$$\Psi(\vec{r}, t) = \Psi(\vec{r}) \cdot \Theta(t) \quad (\text{egyértelműség})$$

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

\downarrow
 $V(\vec{r})$

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

$\frac{1}{\Psi \cdot \Theta}$

csak \vec{r} -tól függ $\left(\frac{\hat{H}\Psi}{\Psi} = -\frac{\hbar}{j} \cdot \frac{\dot{\Theta}}{\Theta} \right) \rightarrow$ t-től függ

$$-\frac{\hbar}{j} \dot{\Theta} = E \cdot \Theta$$

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

$$\Theta = \text{áll.} \cdot e^{-j \frac{E}{\hbar} \cdot t}$$

$$\Psi(\vec{r}, t) = \Psi(\vec{r}) \cdot e^{-j \frac{E}{\hbar} \cdot t}$$
$$\hat{H}\Psi = E \cdot \Psi$$

Idöfuggetken
Schrodinger ogyenlet

$$\uparrow \sim \frac{1}{n}$$
$$\downarrow - \frac{13,6 \text{ eV}}{n^2}$$

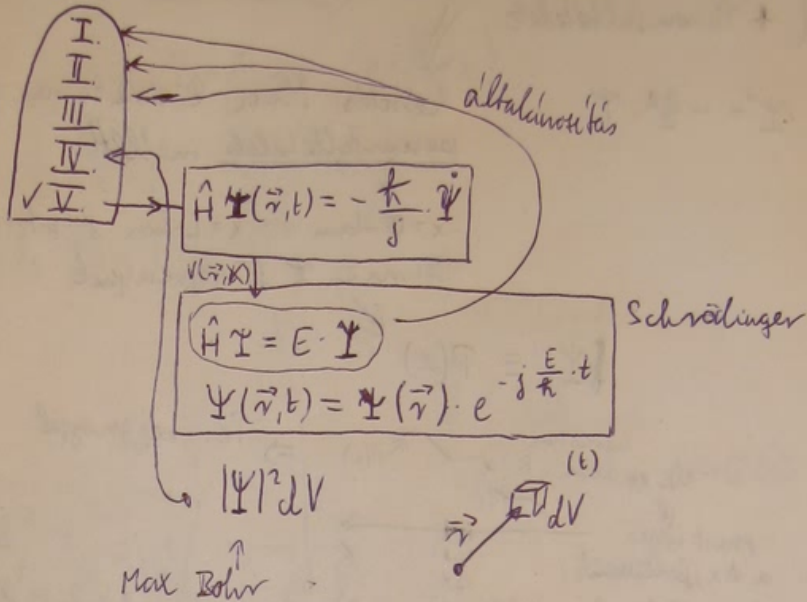
$$\hat{H}\Psi = \frac{\hbar^2 \Delta}{2m} \Psi + V(\vec{r})\Psi = E\Psi$$

rotatorp ryo = \hat{H}

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

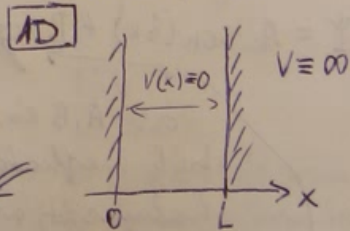
3. Előadás

2005. 02. 16.



$\hat{H}\Psi = E \cdot \Psi \rightarrow ?$ Meglehető lecsökkent
 $\equiv \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi + V(\vec{r}) \cdot \Psi \right]$
 $\frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \Psi + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \Psi$

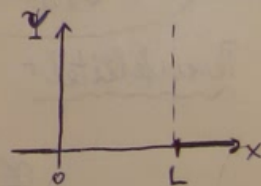
Harmonia pelda B.Sc.-n



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

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

$0 \leq x \leq L$ $V(x) \equiv 0$ $V \rightarrow \infty \Rightarrow \Psi \equiv 0$
 $-\frac{\hbar^2}{2m} \Psi'' = E \cdot \Psi$



$\Psi'' = -\frac{2 \cdot m \cdot E}{\hbar^2} \Psi \equiv k^2$

$$\Psi = A \cdot \sin(\xi x) + B \cdot \cos(\xi x) \rightarrow \xi^2 = \frac{2 \cdot m \cdot E}{\hbar^2} \Rightarrow E = \frac{\hbar^2 \cdot \xi^2}{2 \cdot m}$$

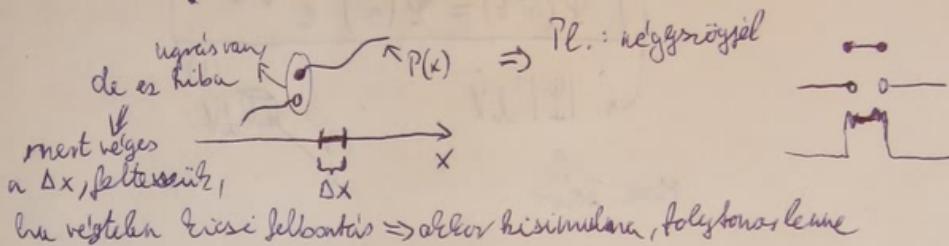
+ Peremfeltételek

$$\Psi'' = -\xi^2 \cdot \Psi$$

kérdés: Milyen ξ értéke az adott peremfeltételek mellett

$x=0$ -ban és $x=L$ -ben folytonosnak kell lennie Ψ függvénynek

$$|\Psi|^2 \equiv P(x)$$



$P(x) \rightarrow$ folytonos

\rightarrow véges

\rightarrow egyértelmű \Rightarrow egy adott pillanatban nem lehet 2 különböző érték

\Downarrow
Ez legyen igaz $\Psi(x)$ -re is

D. \hookrightarrow reguláris függvény

- egyértelmű
 - véges
 - folytonos
- } függvény

$$\Psi = A \cdot \sin(\xi x) + B \cdot \cos(\xi x) \rightarrow \text{matematikai megoldás}$$

\Downarrow
az A, B és ξ meghatározásával a peremfeltételekből meghatározul a reguláris megoldások halmaza, amely a matematikai megoldások egy részhalmaza

Peremfeltétel: $\Psi(0) = 0 \Rightarrow B = 0$ (mert $\cos 0 = 1$)

$$\Psi(L) = 0 = A \cdot \sin(\xi L) + 0$$

$$\xi = \frac{\pi}{L} \cdot n \ll n \cdot \pi$$

Fizikai megoldás
(regularis megoldások halmaza)

$$\Psi = A \cdot \sin\left(n \cdot \frac{\pi}{L} \cdot x\right)$$

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

$$\hat{H}(c \cdot \Psi) = E \cdot (c \cdot \Psi)$$

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

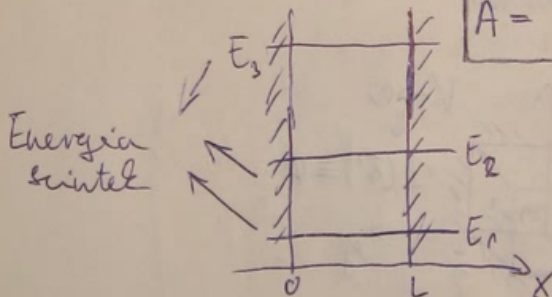
Bohr értékesítés
↓
meghatározom c értékét

$$E = \frac{\hbar^2 \cdot \pi^2}{2 \cdot m \cdot L^2} \cdot n^2$$

$$n = 1, 2, 3, 4, \dots$$

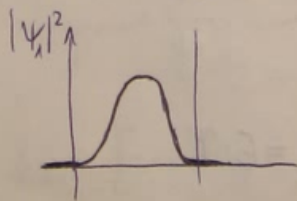
$$\int_0^L A^2 \cdot \sin^2\left(n \frac{\pi}{L} \cdot x\right) \cdot dx = 1$$

$$A = \sqrt{\frac{2}{L}}$$



$$\Rightarrow E_n = \frac{\hbar^2 \cdot \pi^2}{2 \cdot m \cdot L^2} \cdot n^2$$

↓
≡ E₀



$$E_{kin}$$

A részecskét minél kisebb térbe szorítom be, annál nagyobb az ő kinetikus energiája

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

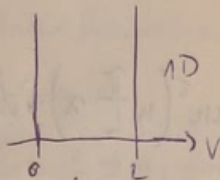
Matematikai megoldás \rightarrow

3D
Regularitási feltétele

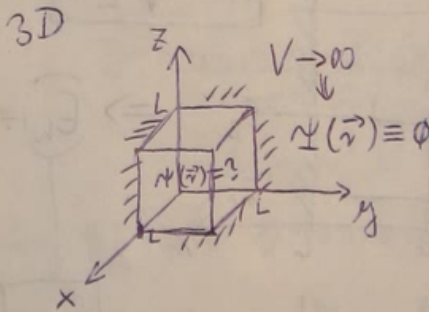
$$|\Psi(\vec{r})|^2 \equiv P(\vec{r})$$

Az axióma szintjén megjelenik a valószínűség fogalma,
 (eddig a klasszikus fizika axiómái kauszálisak voltak)
 Nem tudunk semmit sem megállapítani, csak a valószínűséget
 jósoljuk meg

Az axiómáink mérésekkel igazolhatóak
 \downarrow
 tényleg alátámasztott



\downarrow általánosítás



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

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \Delta\Psi + \phi = E\Psi$$

$$\Psi(\vec{r}) \equiv 0 \quad \vec{r} \in L^3$$

$$\Delta \Psi = - \underbrace{\frac{2 \cdot m \cdot E}{\hbar^2}}_{\equiv k^2} \cdot \Psi \quad \Rightarrow \quad E = \frac{\hbar^2 \cdot k^2}{2 \cdot m}$$

$$\downarrow$$

$$\Delta \Psi = -k^2 \cdot \Psi$$

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} = -k^2 \cdot \Psi \quad \leftarrow \quad \Psi(x, y, z) = X(x) \cdot Y(y) \cdot Z(z)$$

$$X'' \cdot Y \cdot Z + X \cdot Y'' \cdot Z + X \cdot Y \cdot Z'' = -k^2 \cdot X \cdot Y \cdot Z$$

$$\underbrace{\frac{X''}{X}}_{-k_x^2} + \underbrace{\frac{Y''}{Y}}_{-k_y^2} + \underbrace{\frac{Z''}{Z}}_{-k_z^2} = -k^2$$

$$\downarrow$$

$$X'' = -k_x^2 \cdot X$$

$$Y'' = -k_y^2 \cdot Y$$

$$Z'' = -k_z^2 \cdot Z$$

$$\int_{L^3} |\Psi(\vec{r})|^2 dV = 1$$

$$\int_0^L X^2 dx \cdot \int_0^L Y^2 dy \cdot \int_0^L Z^2 dz = 1$$

$$\Rightarrow A = \sqrt{\frac{2}{L}} \quad \rightarrow \text{it'a 3 strona}$$

$$\text{3D } A = \left(\sqrt{\frac{2}{L}}\right)^3 = \sqrt{\frac{8}{L^3}}$$

$$k_x = \frac{\pi}{L} \cdot n_x \quad ; \quad k_y = \frac{\pi}{L} \cdot n_y \quad ; \quad k_z = \frac{\pi}{L} \cdot n_z$$

$$\Psi(x, y, z) = \left(\sqrt{\frac{8}{L^3}}\right) \sin\left(n_x \cdot \frac{\pi}{L}\right) \cdot \sin\left(n_y \cdot \frac{\pi}{L}\right) \cdot \sin\left(n_z \cdot \frac{\pi}{L}\right)$$

$$n_x, n_y, n_z = 1, 2, 3, \dots$$

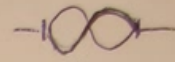
$$E = \frac{\hbar^2 \cdot \pi^2}{2 \cdot m \cdot L^2} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2)$$

$$\rightarrow \equiv E_0$$

degenerált állapot

	n_x	n_y	n_z	
Ψ_{111}	1	1	1	$E_1 = 3 \cdot E_0$
Ψ_{211}	2	1	1	$6 \cdot E_0$
Ψ_{121}	1	2	1	$6 \cdot E_0$
Ψ_{112}	1	1	2	$6 \cdot E_0$

$E_2 = 6 \cdot E_0 \Rightarrow$ pl.: 1D-ben

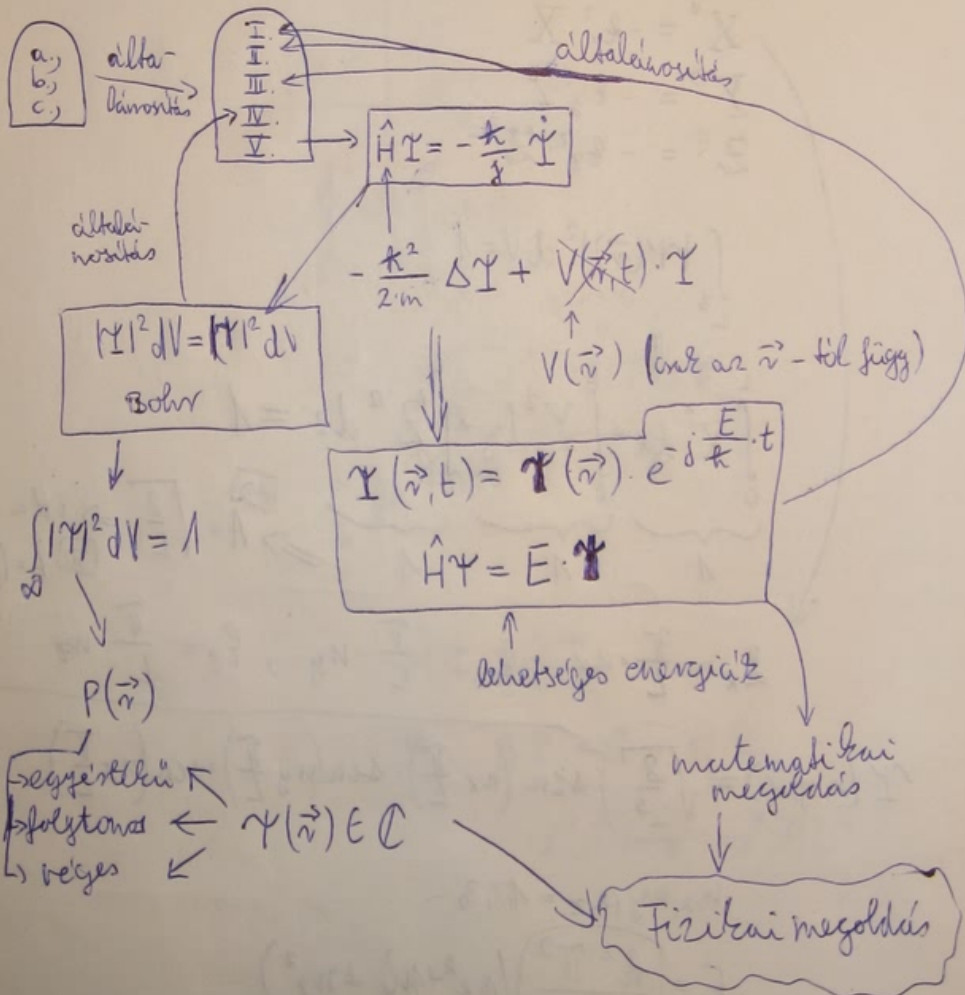


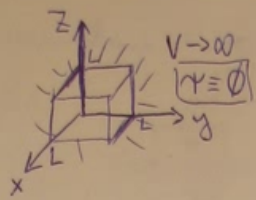
\Downarrow
a 2 energiájú arányos, DE 2 független hullámfüggvények

4. Előadás

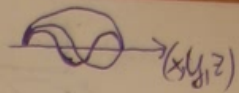
B.Sc.

M.Sc.





$$\begin{cases} X(x) \\ Y(y) \\ Z(z) \end{cases} \circlearrowleft \rightarrow \Psi$$



$$\Psi = \sqrt{\frac{8}{L^3}} \cdot \sin\left(\frac{n_x \pi}{L} \cdot x\right) \cdot \sin\left(\frac{n_y \pi}{L} \cdot y\right) \cdot \sin\left(\frac{n_z \pi}{L} \cdot z\right)$$

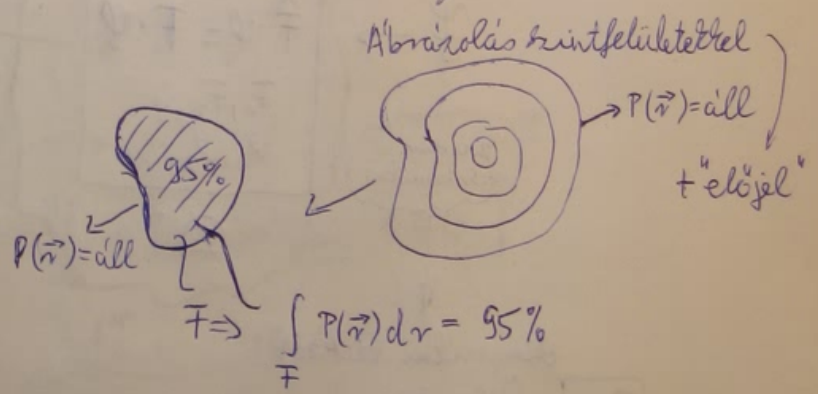
$$E = \frac{\hbar^2 \cdot \pi^2}{2 \cdot m \cdot L^2} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2) \rightarrow \equiv E_0 \quad n_x, n_y, n_z = 1, 2, 3, \dots$$

Ψ	n_x	n_y	n_z	
Ψ_{111}	1	1	1	$E_1 = 3 \cdot E_0$
Ψ_{211}	2	1	1	$E_2 = 6 \cdot E_0$
Ψ_{121}	1	2	1	
Ψ_{112}	1	1	2	
Ψ_{221}	2	2	1	$E_3 = 9 \cdot E_0$
Ψ_{212}	2	1	2	
Ψ_{122}	1	2	2	
Ψ_{311}	3	1	1	$E_4 = 11 \cdot E_0$
Ψ_{131}	1	3	1	
Ψ_{113}	1	1	3	
Ψ_{222}	2	2	2	$E_5 = 12 \cdot E_0$

$$\Psi(\vec{r}) \in \mathbb{C} \rightarrow |\Psi|^2 \in \mathbb{R}$$

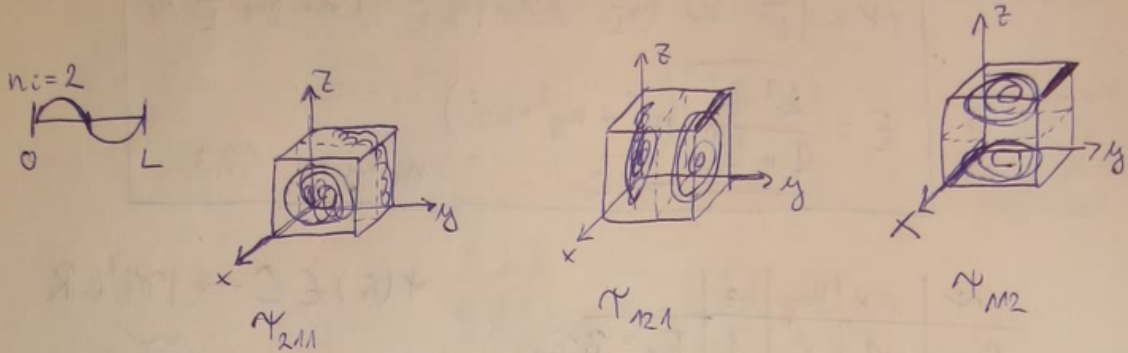
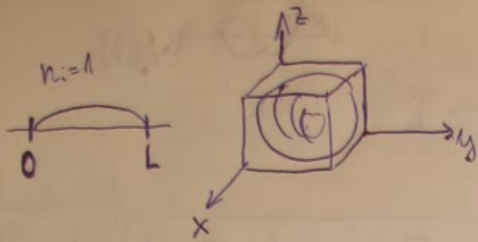
$\underbrace{\hspace{2cm}}_{P(\vec{r})}$

\Rightarrow szimmetria



A mi esetekben (a potenciáldoboz esetében) $\Psi(\vec{r})$ valós függvény

$$\Psi(\vec{r}) \in \mathbb{R}$$

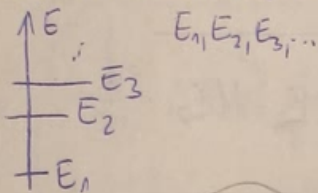


$$\hat{H} \Psi = E \cdot \Psi \rightarrow \text{sajátérték (feladat) egyenlet}$$

↑
valós
mérhető

↓
a részecske energia szintje es. bar

általánosítás



Ψ

$$\hat{F} \psi_i = F_i \cdot \psi_i$$

F_1, F_2, \dots
 ψ_1, ψ_2, \dots

saját érték egyenlet megoldása

kvantum mechanika

dinamikai változók

$$\vec{r}, \vec{p}$$

Newton II.

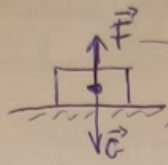
$$\begin{cases} x, y, z \\ p_x, p_y, p_z \end{cases}$$

$$\left. \begin{matrix} \frac{p^2}{2m} \\ V(\vec{r}) \end{matrix} \right\} H = \frac{p^2}{2m} + V$$

$$L_x, L_y, L_z \quad \vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$$

A dinamikai változóhoz operátorokat hogyan rendelni

pl.:



E_2 nem alkalmas, csak reprezentatív segítség (matematikai modell felállításához)

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

F eset függvénye, mert eset függvénye, hogy egy adott állapotot le tudjunk írni

specialisan
$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2}{2 \cdot m} + V(\hat{x}, \hat{y}, \hat{z})$$

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

$$\hat{p}_x = \frac{\hbar}{j} \frac{\partial}{\partial x} ; \hat{p}_y = \frac{\hbar}{j} \frac{\partial}{\partial y} ; \hat{p}_z = \frac{\hbar}{j} \frac{\partial}{\partial z}$$

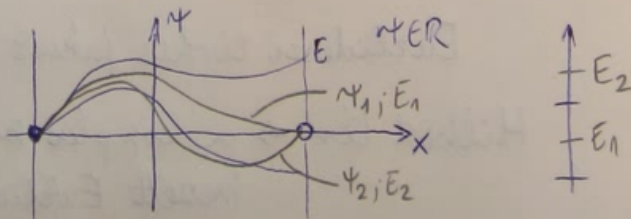
$$\begin{cases} \hat{x} = x_0 \\ \hat{y} = y_0 \\ \hat{z} = z_0 \end{cases}$$

II. axioma

B.Sc.

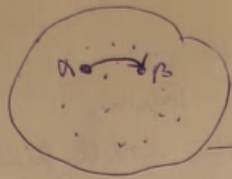
$$\hat{H} \cdot \Psi = E \cdot \Psi \rightarrow -\frac{\hbar^2}{2 \cdot m} \Psi'' + V(x) \cdot \Psi = E \cdot \Psi$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi|^2 dx = 1 \leftarrow \lim_{x \rightarrow \pm\infty} \Psi = 0$$



Meg kell adni, hogy mely függvény állapothalmaz reprezentál fizikai állapotot.

OPERATOR \rightarrow függvényhez függvényt rendel



$$\neq \alpha = \beta$$

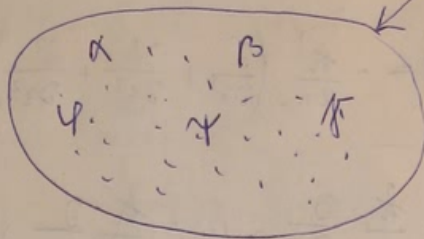
lineáris operátor

$$\hat{A} (a_1 \alpha_1 + a_2 \alpha_2) = a_1 \hat{A} \alpha_1 + a_2 \hat{A} \alpha_2$$

$$\hat{C} = \hat{A} + \hat{B}$$

$$\hat{C} \alpha = (\hat{A} + \hat{B}) \alpha = \hat{A} \alpha + \hat{B} \alpha$$

$$\hat{C} \alpha = (\hat{A} \hat{B}) \alpha = \hat{A} (\hat{B} \alpha)$$



$$(\alpha, \beta) \equiv \langle \alpha | \beta \rangle \in \mathbb{C}$$

jelölés a skalár szorzatra

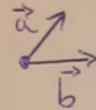
$$\langle \alpha | \beta \rangle = \int_{\infty} \alpha^* \beta dV$$

$$\text{norma} \leftarrow \langle \alpha | \alpha \rangle = \int_{\infty} \alpha^* \alpha dV = 1$$

Euklideszi térhez jutunk

Hilbert tér \Rightarrow a komplex számitást felett értelmezett Euklideszi tér

Megjegyzés:



$$\vec{a}, \vec{b} \in \mathbb{R}$$

skalár szorzat



$$\sqrt{\vec{a} \cdot \vec{a}} = |\vec{a}|$$

vektorhoz, vektor-
okhoz skalárt
rendelet, mihe-
tőve tesszük a
távolságot

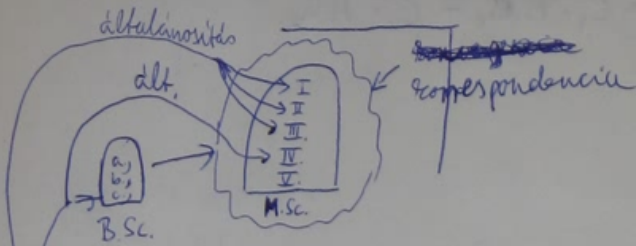
I

Minden fizikai állapothoz hozzá tudunk rendelni egy Hilbert tér-beli elemet

állapot $\rightarrow \psi \in \mathcal{H}$

2003.
02.23.

5. Előadás



Induktív módszer \Rightarrow egyedi ~~mit~~ eseteket vizsgálunk, s azokból vonunk le általános következtetéseket \Rightarrow posztulátum

\downarrow
Amíg nincs ellentmondó esemény, addig ezeket az axiómákat érvényesnek tekintjük, nem vizsgáljuk meg igazukat

$$\hat{H}\psi = -\frac{\hbar}{i} \dot{\psi}$$

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

Lehetséges energia szintek

$$|\psi|^2 \Rightarrow \int_{\infty} |\psi|^2 dV = 1$$

Hilbert-tér \equiv komplex számsík feletti értelmezett euklideszi tér



$$\langle \alpha | \beta \rangle = \int_{\infty} \alpha^*(\vec{r}) \cdot \beta(\vec{r}) dV \in \mathbb{C}$$

$$\langle \alpha | \alpha \rangle = \int_{\infty} \alpha^*(\vec{r}) \cdot \alpha(\vec{r}) dV = \int_{\infty} |\alpha|^2 dV = 1 \in \mathbb{R}$$

Operátorok bevezetése.

$$\hat{A}, \hat{B} \Rightarrow \hat{A} + \hat{B}; \hat{A}\hat{B}$$

$$\hat{F} \equiv F(\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}, \hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{p}_z) \rightarrow \hat{F}\psi = \overset{\text{mérték}}{\downarrow} F \cdot \psi$$

Lineáris operátor.

$$\hat{A}(c_1 \cdot \alpha_1 + c_2 \cdot \alpha_2) = c_1 \cdot \hat{A}\alpha_1 + c_2 \cdot \hat{A}\alpha_2$$

Adjungált operátor.

összehendelési jelölés

$$\hat{A} \rightarrow \hat{A}^+$$

$$\langle \gamma | \hat{A} \beta \rangle = \langle \hat{A}^+ \gamma | \beta \rangle$$

$$\int_{\infty} (\hat{A}^+ \gamma)^* \cdot \beta \, dV = \int_{\infty} \gamma^* \cdot \hat{A} \beta \, dV$$

speciális eset

Önadjungált operátor: \rightarrow tételekkel együtt kimondandó (T1-T3)

$$\hat{A} = \hat{A}^+$$

$$\langle \hat{A} \gamma | \beta \rangle = \langle \gamma | \hat{A} \beta \rangle \equiv \langle \gamma | \hat{A} | \beta \rangle$$

jelölés

T1. Önadjungált operátor sajátértéke valós

T2. Önadjungált op. sajátfüggvényei ortogonálisak egymáshoz

T3. Felcserélési tétel \rightarrow és következményei $\Rightarrow [\hat{A}, \hat{B}] = 0$

Az önadjungált operátorokhoz mátrix szimmetrikus mátrix.

B1. $\hat{A} = \hat{A}^+$

$\alpha_i^* | \hat{A} \alpha_i = A_i \cdot \alpha_i \quad i=1,2,3,\dots \quad | \alpha_i \text{ balról skalár szorzat}$

$(\hat{A} \alpha_i)^* = A_i^* \cdot \alpha_i^* \quad | \alpha_i \text{ jobbról skalár szorzat}$

$\left. \begin{aligned} \langle \alpha_i | \hat{A} \alpha_i \rangle &= A_i \langle \alpha_i | \alpha_i \rangle \\ \langle \hat{A} \alpha_i | \alpha_i \rangle &= A_i^* \langle \alpha_i | \alpha_i \rangle \end{aligned} \right\} A_i = A_i^* \Rightarrow A_i \text{ valós vagy} \\ \text{mert } \hat{A} \text{ önadjungált}$

B2. $\hat{A} = \hat{A}^+$

$\alpha_j^* | \hat{A} \alpha_i = A_i \cdot \alpha_i$

$\hat{A} \alpha_j^* = A_j^* \cdot \alpha_j^* \quad | \cdot \alpha_j^*$

$\left. \begin{aligned} \langle \alpha_j | \hat{A} \alpha_i \rangle &= A_i \langle \alpha_j | \alpha_i \rangle \\ \langle \hat{A} \alpha_j | \alpha_i \rangle &= A_j^* \langle \alpha_j | \alpha_i \rangle \end{aligned} \right\} \\ \text{mert } \hat{A} \text{ önadjungált} \quad A_j^* \text{ az 1. tétel alapján}$

A két egyenlet kikötése

$\langle \alpha_j | \alpha_i \rangle (A_i - A_j^*) = 0$
 $= 0 \quad \neq 0$

α_j és α_i egymással ortogonálisak

D. "Kommutátor"

$\rightarrow \underbrace{(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})}_{[\hat{A}, \hat{B}]} \psi = 0$

T3. Ha 2 operátor kommutátora 0, akkor ugyanazzal a sajátértékűvel rendelkezik.

$[\hat{A}, \hat{B}] = 0$

B3. $\hat{B} | \hat{A} \alpha_i = A_i \cdot \alpha_i$
 $\hat{A} | \hat{B} \alpha_j = B_j \cdot \alpha_j$

$$(\hat{B}\hat{A})d_i = A_i \cdot \hat{B}d_i$$

$$(\hat{A}\hat{B})d_j = B_j \cdot \hat{A}d_j$$

\hookrightarrow Mivel $\hat{B}\hat{A} - \hat{A}\hat{B} = 0 \Rightarrow \hat{A}\hat{B}$ írható $\hat{B}\hat{A}$ helyére

$$(\hat{A}\hat{B})d_i = A_i \hat{B}d_i$$

$$\hat{A}(\hat{B}d_i) = A_i (\hat{B}d_i) \Rightarrow \text{ez } \hat{A} \text{-nak egy sajátérték egyenlete}$$

$\underbrace{\quad}_{c \cdot d_i} \quad \quad \quad \underbrace{\quad}_{c \cdot d_i}$

$$\hat{B}d_i = c \cdot d_i \Rightarrow \hat{B} \text{-nek sajátérték egyenlete}$$

$\downarrow \quad \quad \quad \downarrow$
 $\sim \beta_j$

$$\{\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \dots\} \equiv \{\beta_1, \beta_2, \beta_3, \dots\}$$

\uparrow
 "azonos" sajátérték rendszer

Példa:

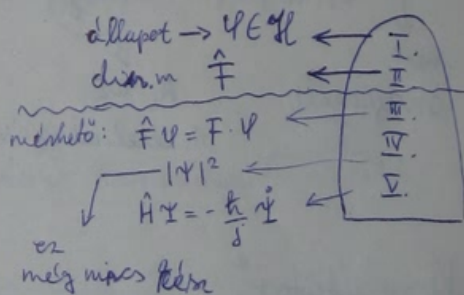
$$\hat{x} = x \cdot$$

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

$$\langle \alpha | \hat{x} \beta \rangle = \langle \hat{x} \alpha | \beta \rangle$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \alpha^* x \cdot \beta dx = \int_{-\infty}^{\infty} \underbrace{x \cdot \alpha^*}_{(x \cdot \alpha)^*} \cdot \beta dx = \langle \hat{x} \alpha | \beta \rangle$$

$\underbrace{\quad}_{(x \cdot \alpha)^*}$
 $\underbrace{\quad}_{(\hat{x} \alpha)^*}$



$$\langle \alpha | \hat{p}_x | \beta \rangle = \langle \hat{p}_x \alpha | \beta \rangle$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \alpha^* \frac{\hbar}{j} \beta' dx = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\hbar}{j} \underbrace{\alpha^* \cdot \beta'}_{u \cdot v'} dx = \frac{\hbar}{j} \left[\alpha^* \cdot \beta \right]_{-\infty}^{+\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\hbar}{j} \frac{d}{dx} \alpha^* \cdot \beta dx = \textcircled{*}$$

$u = \alpha^*$
 $v = \beta$
 $u' = \frac{d}{dx} \alpha^*$

$$+ \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{\hbar}{j} \frac{d}{dx} \alpha \right)^* \cdot \beta dx = \langle \hat{p}_x \alpha | \beta \rangle$$

$$\langle \alpha | \alpha \rangle = 1$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\alpha|^2 dV = 1 \Rightarrow \lim_{x \rightarrow \pm\infty} \alpha = 0$$

$$\frac{\hbar}{j} \left[\alpha^* \cdot \beta \right]_{-\infty}^{+\infty} = 0$$

$$\textcircled{*} = \langle \hat{p}_x \alpha | \beta \rangle \checkmark$$

Pelldo 2.

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

$$[\hat{A}, \hat{B}]^+ = \hat{C}^+ = ?$$

$$[\hat{A}, \hat{B}] \psi = \hat{C} \psi$$

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

$$[\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}]^+ \psi = ? \rightarrow \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* [\hat{A}, \hat{B}] \psi dV \equiv \int_{-\infty}^{\infty} ([\hat{A}, \hat{B}]^+ \psi)^* \psi dV$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi^* [\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}] \psi dV = \langle \psi | \hat{A}\hat{B} \psi \rangle - \langle \psi | \hat{B}\hat{A} \psi \rangle$$

$$\langle \hat{A} \psi | \hat{B} \psi \rangle$$

$$\langle \hat{B}^* \hat{A} \psi | \psi \rangle$$

$$\langle \hat{B}^* \psi | \hat{A} \psi \rangle$$

$$\langle \hat{A} \psi | \psi \rangle$$

\Rightarrow

$$\langle \hat{B}^+ \hat{A}^+ \psi | \psi \rangle - \langle \hat{A}^+ \hat{B}^+ \psi | \psi \rangle$$

↓

$$\langle [\hat{B}^+ \hat{A}^+ - \hat{A}^+ \hat{B}^+] \psi | \psi \rangle = [\hat{B}^+, \hat{A}^+] \psi$$

↓

$$[\hat{A}, \hat{B}]^+ = [\hat{B}^+, \hat{A}^+]$$

speckó eset

$$\hat{A}^+ = \hat{A}$$

$$\hat{B}^+ = \hat{B}$$

3 példák:

$$\hat{X} = x$$

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

$$[\hat{P}_x, \hat{X}] \psi = \frac{\hbar}{j} \frac{\partial}{\partial x} (x \psi) - x \cdot \frac{\hbar}{j} \frac{\partial \psi}{\partial x} = \frac{\hbar}{j} \left[\frac{\partial}{\partial x} (x \psi) - x \frac{\partial \psi}{\partial x} \right] =$$

$$(\hat{P}_x \hat{X}) \psi - (\hat{X} \hat{P}_x) \psi$$

$$= \frac{\hbar}{j} \psi$$

$$\boxed{[\hat{P}_x, \hat{X}] = \frac{\hbar}{j}}$$

$$[\hat{P}_x, \hat{X}]^+ = -\frac{\hbar}{j}$$

↓

$$[\hat{P}_y, \hat{Y}] = \frac{\hbar}{j}$$

→ kanonikus párosok

$$[\hat{X}, \hat{Y}] = 0$$

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

$$[\hat{X}, \hat{P}_y] = 0$$

$$[\hat{Y}, \hat{P}_x] = 0$$

stb.

$$[\hat{A}, \hat{B}] = 0 \rightarrow \left. \begin{aligned} \hat{A} \psi_i &= A_i \cdot \psi_i \\ \hat{B} \psi_j &= B_j \cdot \psi_j \end{aligned} \right\} \{ \psi_1, \psi_2, \dots, \psi_i, \dots, \psi_j, \dots \}$$

① ~~$\hat{A}(x)$~~

$$\hat{p}_x = \frac{\hbar}{j} \frac{\partial}{\partial x} \equiv \hat{p}(x)$$

$$\hat{x} = x \cdot \equiv \hat{x}(x)$$

$$\hat{p}_y = \frac{\hbar}{j} \frac{\partial}{\partial y} \equiv \hat{p}(y)$$

$$\boxed{[\hat{p}, \hat{x}] = \frac{\hbar}{j}} \leftarrow \begin{cases} \hat{p}_x = \frac{\hbar}{j} \frac{\partial}{\partial x} \\ \hat{x} = x \cdot \end{cases}$$

↑
Csak ez valósítja meg a $[\hat{p}, \hat{x}] = \frac{\hbar}{j} - t?$

$$\boxed{\begin{aligned} \hat{p}_x &= p_x \cdot \\ \hat{x} &= -\frac{\hbar}{j} \frac{\partial}{\partial p_x} \end{aligned}} \rightarrow \begin{cases} \hat{p}_x(p_x) \\ \hat{x}(p_x) \end{cases}$$

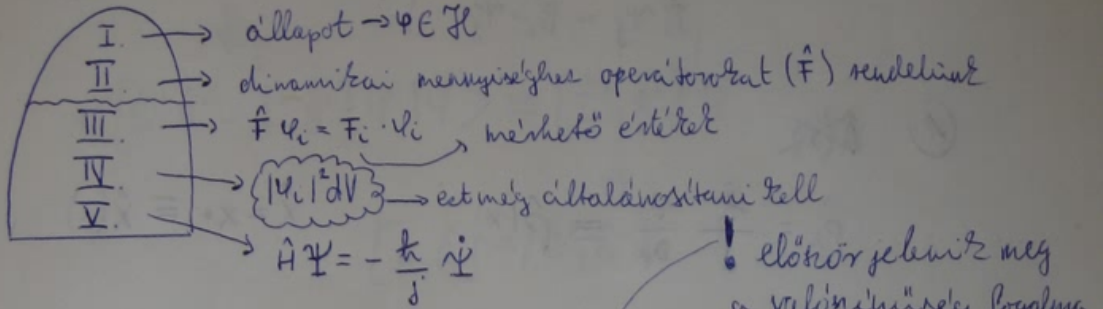
Ilyen fajta operátor kivétel is lehetséges a kvantummechanikában

A mérés és a tapasztalat fogja eldönteni, hogy melyik operátori kivétel jobb, ami megvalósítja

$$[\hat{p}, \hat{x}] = \frac{\hbar}{j} \text{ kifejezést}$$

↓
Kvantummechanikai méréselmélet

6. Előadás



! először jelezte meg a valószínűség fogalma axióma szinten

REJTETT PARAMÉTEREK

↓
Valószínűség magyarázata: azért nem tudom, hogy mi lesz adott idő múlva, mert van egy paraméter amelyet még nem ismerünk

→ "EPR" paradoxon

J.S. BELL (1965.)

↓
Kisebít 2 esetre

↓
Kvantummechanika

↓
~~rejtett paraméteres modell~~
ez nem működött

Nincsenek rejtett paraméterek

!!!

Kvantuminformatika
Kvantumszámítógépek
(Imre Sándor
Kvantuminformatika tárgy
hallgatóiért ajánlja)

A kvantummechanikai méréselmélet alapjai

$\psi \in \mathcal{H} \subset \mathbb{C}^2 \rightarrow \psi(\vec{r})$
 $l_2 \rightarrow$ egyértelmű

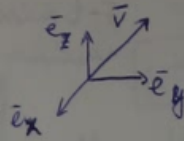
$B = \{x_1, x_2, \dots, x_N\} \quad (N=2, 3, 4, 5, \dots, \infty) \rightarrow \langle x_i | x_j \rangle = \delta_{ij}$

$\psi = \sum_i a_i \cdot x_i \rightarrow \langle \psi | \psi \rangle = 1 \rightarrow \langle \sum_j a_j x_j | \sum_i a_i x_i \rangle = \sum_j \sum_i a_j^* a_i \langle x_j | x_i \rangle$

Segítség
 $\langle x | y \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x^* \cdot y \cdot dV$

$$\langle \Psi | \Psi \rangle \rightarrow \langle \sum_j a_j \psi_j | \sum_i a_i \psi_i \rangle = \sum_i a_i^* \cdot a_i = \sum_i |a_i|^2 = 1$$

$$a_i \rightarrow \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_N \end{bmatrix}$$

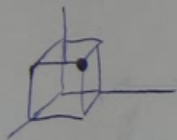


$$\Psi = \sum_j a_j \psi_j$$

$$\langle \psi_i | \Psi \rangle = \sum_j a_j \underbrace{\langle \psi_i | \psi_j \rangle}_{\delta_{ij}} = a_i$$

↓

$$a_i = \langle \psi_i | \Psi \rangle$$



$$\left(\overset{1}{1}, \overset{1}{1}, \overset{1}{1}, \dots, \overset{1}{1} \right) \cdot \frac{1}{\sqrt{N}} \Rightarrow N \rightarrow \infty$$

↓
Σ divergens lehet

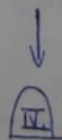
↓
DE konstruálható olyan eset amikor $N = \infty$ is lehetséges, de vizsgálni kell ezzel

$$\begin{array}{l} \hat{A} \psi_i = A_i \cdot \psi_i \\ \hat{B} \psi_j = B_j \cdot \psi_j \\ \vdots \end{array} \quad \left. \begin{array}{l} B_A: \{ \psi_i \}_i^N \\ B_B: \{ \psi_j \}_j^N \end{array} \right\}$$

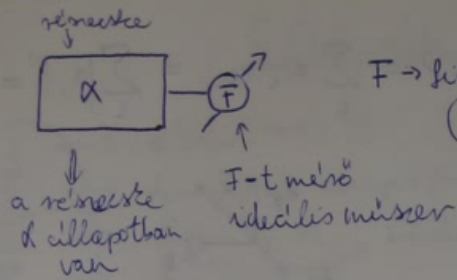
Bázis (B)

(Egyenlősen ortogonális)

MÉRÉSELMÉLET

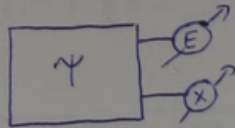


↓
elvért ad a mérésre
↓
ideális műszert feltételek (elvi)



$F \rightarrow$ fizikai mennyiség
(energia, impulzus, stb.)

konkrét példa: Induktív mérő

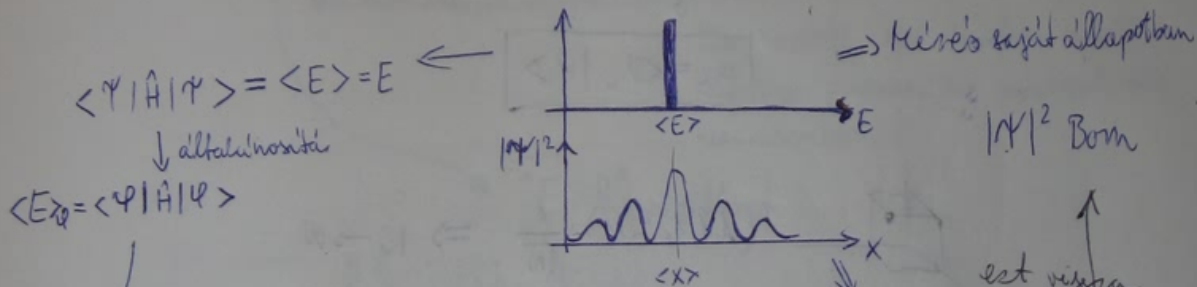


reprezentáció ψ állapothoz van; mérjék meg a helyzetét és az energiáját.

Tfh. ψ állapot kielégíti a

3. axiómát, azaz

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



$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} x |\psi|^2 dx$$

$$\psi^* | \hat{H} \psi = E \psi$$

$$\langle \psi | \hat{H} \psi \rangle = E \cdot \underbrace{\langle \psi | \psi \rangle}_1$$

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} x \cdot |\psi|^2 dx = \int_{-\infty}^{+\infty} x \cdot \psi^* \cdot \psi dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* \cdot \underbrace{x \cdot \psi}_{\hat{x} \psi} dx = \langle \psi | \hat{x} | \psi \rangle$$

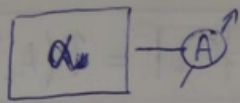
↓ általánosítás

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

Axióma

\Rightarrow kiegészítjük a Born-élelményest, mert azt használjuk fel

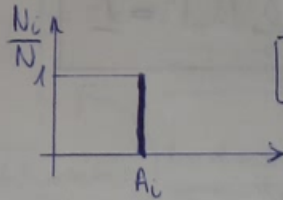
a, "Mérés saját állapotban"



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

(elemi = egyedi mérés)

↓
egyszer ~~kapcsolom~~
mért valammint
kikapcsolom

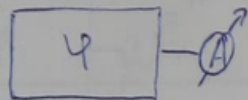


MÉRÉS

⇓
N db elemi mérés
összege

b, "Mérés ~~NEM~~ SAJÁT állapotban"

↓
szuperponált



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

$$\psi \notin \{\alpha_i\}$$

$$\psi \in \mathcal{H} \Leftrightarrow \mathbb{I}$$

$$\psi = \sum_i a_i \alpha_i$$

IV

$$\langle A \rangle_\psi \stackrel{\text{IV}}{\Downarrow} \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle = \langle \sum_i a_i \alpha_i | \hat{A} | \sum_j a_j \alpha_j \rangle = \textcircled{*}$$

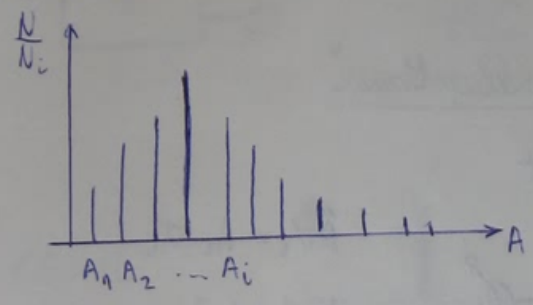
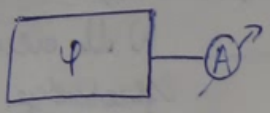
$$= \sum_i \sum_j a_i^* a_j \underbrace{\langle \alpha_i | \hat{A} | \alpha_j \rangle}_{A_j \cdot \delta_{ij}}$$

$$\langle \alpha_i | A_j \cdot \alpha_j \rangle$$

$$A_j \cdot \underbrace{\langle \alpha_i | \alpha_j \rangle}_{\delta_{ij}}$$

$$\textcircled{*} = \sum_i \sum_j a_i^* a_j A_j \delta_{ij} = \sum_i |a_i|^2 \cdot A_i$$

$$\begin{aligned} \langle A \rangle_\psi &= \sum_i |a_i|^2 \cdot A_i \\ \langle \psi | \psi \rangle &= \sum_i |a_i|^2 = 1 \end{aligned} \Rightarrow |a_i|^2 = P(A_i)$$



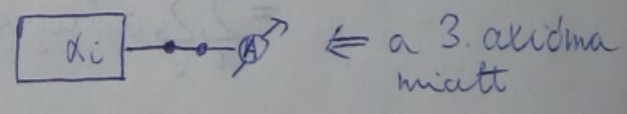
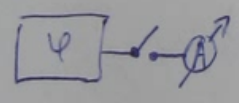
$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{N_i}{N} = P(A_i) = |a_i|^2 = |\langle a_i | \psi \rangle|^2$$

A meggyőzés arányát így is lehet mondani

$$P(A_i) = |\langle a_i | \psi \rangle|^2 \quad \text{Ⓜ}$$

Elemi mérés előtt

Elemi mérés után



$$P(A_i) = P(\psi \rightarrow a_i) \equiv |\langle a_i | \psi \rangle|^2 \quad \text{Ⓜ}$$

Nem tudok olyan mérést megvalósítani úgy, hogy ne avatkozzak be az elektron életébe.

(Trükkökkel megoldható)

7. Előadás

2003.
03.02.

$$\hat{X} = x$$

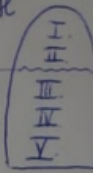
$$\hat{P}_x = \frac{\hbar}{j} \frac{\partial}{\partial x}$$

$$\vdots$$

$$\hat{F} = F(\hat{X}_1, \hat{P}_1, \dots)$$

$$P(F_i) = |\langle \psi_i | \psi \rangle|^2$$

állapot $\rightarrow \psi \in \mathcal{H}$
 dis. vält. $\rightarrow \hat{F}$
 $\hat{F} \psi_i = F_i \psi_i$
 $\langle \hat{F} \rangle_\psi = \langle \psi | \hat{F} | \psi \rangle$
 $\hat{H} \psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi$

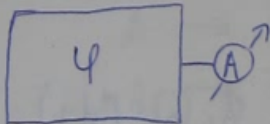


↓ alkalinositás
 Koordináta reprezentáció

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

$$\vdots$$

Példák



$$\hat{A} \psi_i = A_i \psi_i \quad \text{III.}$$

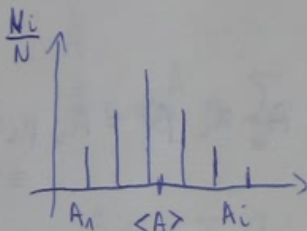
$$\psi \in \{\psi_i\} \quad \psi = \sum_i a_i \psi_i \quad \text{I.}$$

$$\langle \psi | \psi \rangle = \sum_i |a_i|^2 = 1$$

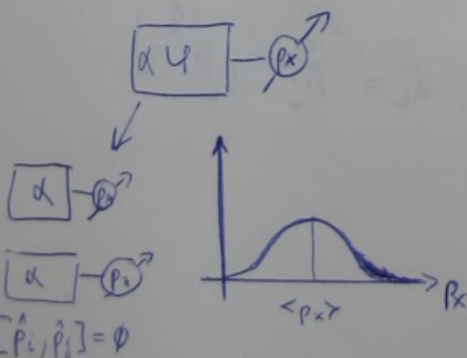
$$\langle \psi | A | \psi \rangle = \sum_i |a_i|^2 \cdot A_i$$

$$P(A_i) = |a_i|^2 \equiv |\langle \psi_i | \psi \rangle|^2$$

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{N_i}{N} = P(A_i)$$



↓ rel



$$\langle p_x \rangle = \langle \alpha | \hat{p}_x | \alpha \rangle$$

$$P(p_x) = |\langle \psi | \alpha \rangle|^2 = \left| \int_{-\infty}^{\infty} e^{-j k_x x} \psi(x) dx \right|^2$$

$$\hat{p}_x \psi = p_x \psi$$

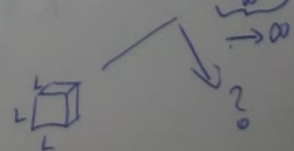
$p_x = \hbar k_x$
 \uparrow
 $\equiv \hbar k_x$
 \uparrow
 $\equiv \hbar k_x$

$$\frac{\hbar}{j} \frac{\partial \psi}{\partial x} = p_x \psi \rightarrow \psi' = j \left(\frac{p_x}{\hbar} \right) \psi$$

de Broglie hullám B.Sc.
 helyettes

$$\psi(x) = C_0 \cdot e^{j k_x x}$$

$$\langle \psi | \psi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} |\psi|^2 dx = |C_0|^2 \cdot \int_{-\infty}^{\infty} dx$$



Körös sajátfüggvényrendszer.

$$\Psi = c_0 \cdot e^{i(k_x x + k_y y + k_z z)} = c_0 \cdot e^{i \vec{k} \cdot \vec{r}}$$

$$\begin{aligned} \hat{p}_x \Psi &= \hbar \cdot k_x \cdot \Psi \\ \hat{p}_y \Psi &= \hbar \cdot k_y \cdot \Psi \\ \hat{p}_z \Psi &= \hbar \cdot k_z \cdot \Psi \end{aligned} \quad \left. \vphantom{\begin{aligned} \hat{p}_x \Psi &= \hbar \cdot k_x \cdot \Psi \\ \hat{p}_y \Psi &= \hbar \cdot k_y \cdot \Psi \\ \hat{p}_z \Psi &= \hbar \cdot k_z \cdot \Psi \end{aligned}} \right\}$$

$$\boxed{\vec{p} = \hbar \cdot \vec{k}}$$

vissza kaptuk a de Broglie-féle hullámokat

Impulzus sajátérték függvényei

$$[\hat{A}, \hat{B}] = 0$$

$$a) \quad \left. \begin{aligned} \hat{A} \alpha_i(x) &= A_i \cdot \alpha_i(x) \\ \hat{B} \beta_j(y) &= B_j \cdot \beta_j(y) \end{aligned} \right\} \Psi(x, y) = \alpha_i(x) \cdot \beta_j(y)$$

$$\hat{A} \Psi = \hat{A}(\alpha_i \cdot \beta_j) = \beta_j \cdot (\hat{A} \alpha_i) = \beta_j \cdot \underbrace{A_i \cdot \alpha_i}_{A_i \cdot \alpha_i} = A_i \cdot \alpha_i \cdot \beta_j = A_i (\alpha_i \beta_j) \equiv \Psi$$

$$\boxed{\begin{aligned} \hat{A} \Psi &= A_i \cdot \Psi \\ \hat{B} \Psi &= B_j \cdot \Psi \end{aligned}}$$

b)

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

$$\hat{A}(\hat{A} \alpha_i) = A_i \cdot (\hat{A} \alpha_i) = A_i \cdot A_i \cdot \alpha_i = A_i^2 \cdot \alpha_i$$
$$\hat{A}^2 \alpha_i$$

$$(\hat{A} \hat{A}) \alpha_i = A_i^2 \cdot \hat{A} \alpha_i = A_i^3 \cdot \alpha_i$$

$$\hat{A}^3 \alpha_i = A_i^3 \cdot \alpha_i$$

$$\hookrightarrow \boxed{\hat{A}^n \alpha_i = A_i^n \cdot \alpha_i}$$

$$c_n | \hat{A}^n \alpha_i = A_i^n \cdot \alpha_i$$

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

~~$$\left(\sum_n c_n \hat{A}^n \right) \alpha_i$$~~

$$\left(\sum_n c_n \hat{A}^n \right) \alpha_i = \left(\sum_n c_n A_i^n \right) \cdot \alpha_i$$

$$\equiv \hat{F}$$

$$\equiv F_i$$

$$\boxed{\hat{F} \alpha_i = F_i \cdot \alpha_i}$$

$$\hat{A} \rightarrow \hat{F}$$

$$A_i \rightarrow F_i$$

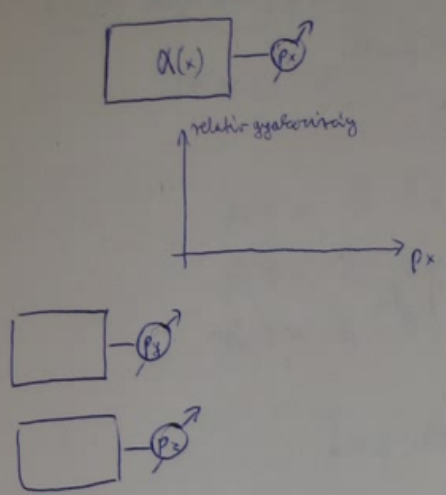
$$\hat{F} = e^{\hat{A}} = \sum_n \frac{1}{n!} \hat{A}^n$$

$$\hat{F} \alpha_i = F_i \cdot \alpha_i$$

$$(e^{\hat{A}}) \alpha_i = \left(\sum_n \frac{1}{n!} (\hat{A}^n) \alpha_i \right) = \sum_n \frac{1}{n!} \cdot A_i^n \cdot \alpha_i = \alpha_i \cdot \underbrace{\left(\sum_n \frac{1}{n!} A_i^n \right)}_{e^{A_i}}$$

$$\hat{A}^n \alpha_i = (\hat{A} \hat{A} \dots \hat{A} \hat{A}) \alpha_i = A_i^n \alpha_i$$

$$(e^{\hat{A}}) \alpha_i = e^{A_i} \cdot \alpha_i$$



$$\hat{p}_x \psi = p_x \psi$$

$$\frac{\hbar}{j} \frac{\partial \psi}{\partial x} = p_x \psi \Rightarrow \psi' = j \frac{p_x}{\hbar} \psi$$

$$\psi(x) = c \cdot e^{j k_x \cdot x}$$

de Broglie-féle
nullaim 1D-ben

$$p_x = \hbar \cdot k_x$$

$$\langle \psi | \psi \rangle = 1$$

$$\langle \psi | \psi \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} |c|^2 \cdot \underbrace{e^{-j k_x x} \cdot e^{j k_x x}}_{=1} dx = |c|^2 \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} dx \rightarrow \infty$$

?

$$\alpha(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} c(k_x) \cdot e^{j k_x \cdot x} dk_x$$

$$\downarrow$$

$$|\langle \psi | \alpha \rangle|^2 = |c(k_x)|^2$$

↓
Nem
elem
a Hilbert-
térben

$$[\hat{p}_i, \hat{p}_j] = 0$$

$$\hat{p}_y \psi = p_y \psi$$

$$\psi = c \cdot e^{j k_y \cdot y} \quad p_y = \hbar \cdot k_y$$

$$\hat{p}_z \psi = p_z \psi$$

$$\psi = c \cdot e^{j k_z \cdot z} \quad p_z = \hbar \cdot k_z$$

$$\psi = c \cdot e^{j(\vec{k} \cdot \vec{r})}$$

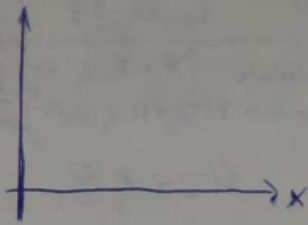
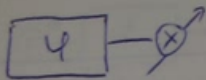
$$\hat{p}_x e^{j(\vec{k} \cdot \vec{r})} = \hbar \cdot k_x \cdot e^{j(\vec{k} \cdot \vec{r})}$$

$$\hat{p}_y e^{j(\vec{k} \cdot \vec{r})} = \hbar \cdot k_y \cdot e^{j(\vec{k} \cdot \vec{r})}$$

$$\hat{p}_z e^{j(\vec{k} \cdot \vec{r})} = \hbar \cdot k_z \cdot e^{j(\vec{k} \cdot \vec{r})}$$

$$\vec{p} = \hbar \cdot \vec{k}$$

valóban mozgó részecse
nullaimessége



$$\hat{x} \chi_x = x' \cdot \chi_x \rightarrow \text{szűk}$$

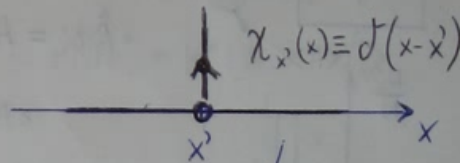
$$\varphi \notin \{\chi\} \quad \chi_x(x)$$

$$\hat{x} = x.$$

$$x \cdot \chi_x(x) = x' \cdot \chi_x(x)$$

$$(x - x') \cdot \chi_{x'}(x) = 0 \quad \forall x\text{-re}$$

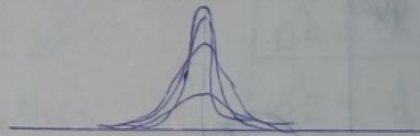
↑ változó ↑ sajátérték



- 1. eset
 $x \neq x'$
↓
 $\chi_{x'}(x) = 0$
- 2. eset
 $x = x'$
 $\chi_{x'}(x) \neq 0$

Nem eleme
a Hilbert-térnek

hely
szájtól függvény



↓
a $\delta(x-x')$ előállítható regulárisan.

⇓
Megoldás, hogy a Hilbert-térhez hozzávesszük az előző megoldást és ezt is, és így zárttá tesszük a Hilbert-térrel

8. Előadás

$$\hat{x} = x$$

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

$$\vdots$$

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

$$\vdots$$

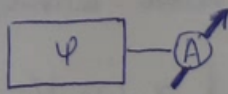
$$\hat{F} = F(\hat{x}, \hat{p}_x, \dots)$$

állapot $\psi \in \mathcal{H}$
 diszkrét $\rightarrow \hat{F}$

méret $\hat{F}\psi = F_i \cdot \psi_i$

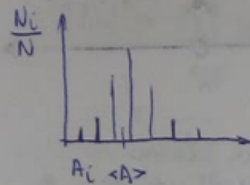
$\langle F \rangle_\psi = \langle \psi | \hat{F} | \psi \rangle \leftrightarrow P(F_i) = K |\psi_i|^2$

$\hat{H}\psi = -\frac{\hbar^2}{j} \psi''$

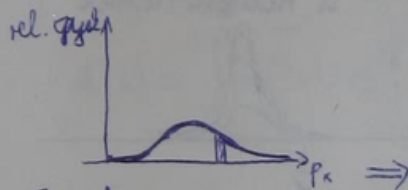


$\psi \in \{d_i\}$

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

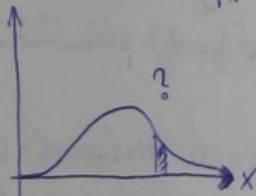
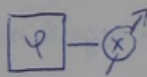


$\langle A \rangle = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle$



III. $\hat{x}\chi = x \cdot \chi$

$\{\chi_{x'}(x)\} \rightarrow \chi_{x'} \equiv \delta(x-x')$



IV. $P(x' | \psi) = \langle \chi_{x'}(x) | \psi(x) \rangle^2$

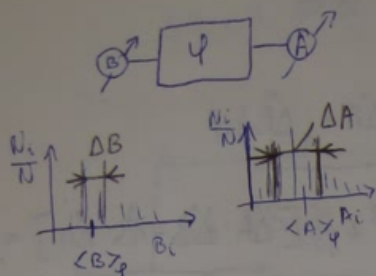
$= \left| \int_{-\infty}^{+\infty} \chi_{x'}^*(x) \cdot \psi(x) \cdot dx \right|^2 =$

$= \left| \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x-x') \cdot \psi(x) \cdot dx \right|^2 = |\psi(x')|^2$

$\psi(x')$

$P(x) dx = |\psi(x')|^2 \cdot dx$ BORN

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{C} \neq 0$$



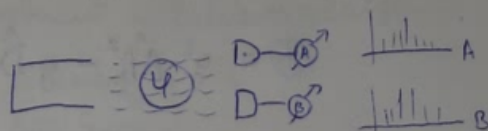
$\Delta B, \Delta A \Rightarrow$ szórás

$$\hat{A}^+ = \hat{A} \quad \left. \begin{array}{l} \hat{B}^+ = \hat{B} \end{array} \right\} \text{önadjungált}$$

$$\hat{C}^+ \neq \hat{C} \rightarrow \text{nem önadjungált}$$

$$\hat{C} \equiv j \cdot \hat{D} \quad \boxed{\hat{D}^+ = \hat{D}} \text{, DE } \hat{D} \text{ önadjungált}$$

HF. ↓



$$\Delta A = \sqrt{\langle (A - \langle A \rangle)^2 \rangle} \rightarrow \Delta A^2 = \langle (A - \langle A \rangle)^2 \rangle$$

↓ kv.

$$\langle \Psi | (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle)^2 | \Psi \rangle$$



$$\Delta A^2 = \langle \Psi | \hat{\Delta A}^2 | \Psi \rangle$$

$\hat{\Delta A} \equiv \hat{A} - \langle A \rangle$	→ ER
$\hat{\Delta B} \equiv \hat{B} - \langle B \rangle$	

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

$$[\hat{\Delta A}, \hat{\Delta B}] = [\hat{A}, \hat{B}] \equiv j \cdot \hat{D}$$

Matematikai levezetés:

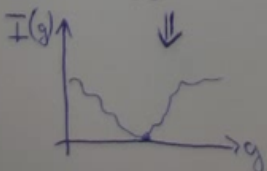
$$\underline{D.} \quad \boxed{\hat{G} = g \cdot \hat{\Delta A} + j \cdot \hat{\Delta B}} \quad \text{g} \in \mathbb{R}$$

$$\hat{\Delta A}^+ = \hat{\Delta A}$$

$$\hat{\Delta B}^+ = \hat{\Delta B}$$

$$\hat{G}^+ = g \cdot \hat{\Delta A} - j \cdot \hat{\Delta B} \neq \hat{G} \Rightarrow \text{nem lehet dinamikai változóhoz rendelni, DE számolhatunk vele}$$

$$I(g) \equiv \langle \hat{G} \Psi | \hat{G} \Psi \rangle \geq 0$$



$$I(g) = \langle \hat{G}\psi | \hat{G}\psi \rangle = \langle \psi | \hat{G}^\dagger \hat{G} \psi \rangle = \textcircled{*} \textcircled{*}$$

$$\langle (g \hat{\Delta} A - j \hat{\Delta} B)(g \hat{\Delta} A + j \hat{\Delta} B) \psi \rangle$$

$$g^2 \cdot \hat{\Delta} A^2 + \hat{\Delta} B^2 + jg \cdot [\hat{\Delta} A \cdot \hat{\Delta} B - \hat{\Delta} B \cdot \hat{\Delta} A] = \textcircled{*}$$

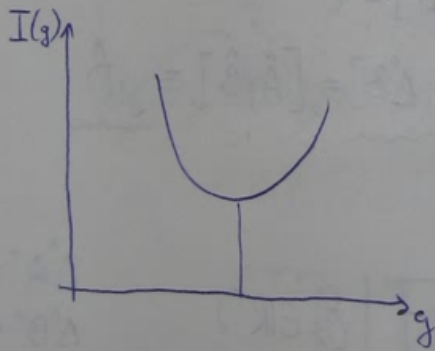
$$\equiv [\hat{\Delta} A, \hat{\Delta} B] \equiv j \cdot \hat{D}$$

$$\textcircled{*} = g^2 \cdot \hat{\Delta} A^2 - g \cdot \hat{D} + \hat{\Delta} B^2$$

$$\textcircled{*} \textcircled{*} = \langle \psi | (g^2 \hat{\Delta} A^2 - g \cdot \hat{D} + \hat{\Delta} B^2) \cdot \psi \rangle =$$

$$= g^2 \cdot \underbrace{\langle \psi | \hat{\Delta} A^2 | \psi \rangle}_{\Delta A^2 \in \mathbb{R}^+} - g \cdot \underbrace{\langle \psi | \hat{D} | \psi \rangle}_{\langle \hat{D} \rangle_\psi \in \mathbb{R}} + \underbrace{\langle \psi | \hat{\Delta} B^2 | \psi \rangle}_{\Delta B^2 \in \mathbb{R}^+}$$

$$I(g) = g^2 \cdot \Delta A^2 - g \cdot \langle \hat{D} \rangle_\psi + \Delta B^2 \in \mathbb{R}$$



Diskriminans:

$$D = \langle \hat{D} \rangle_\psi^2 - 4 \cdot \Delta A^2 \cdot \Delta B^2 \leq 0$$

$$\downarrow$$

$$\Delta A^2 \cdot \Delta B^2 \geq \frac{1}{4} \cdot \langle \hat{D} \rangle_\psi$$

$$\Delta A \cdot \Delta B \geq \frac{1}{2} |\langle \psi | \hat{O} | \psi \rangle|$$

$$-j \cdot \langle \psi | [\hat{A}, \hat{B}] \psi \rangle$$

$$\Delta A \cdot \Delta B \geq \frac{1}{2} |\langle \psi | [\hat{A}, \hat{B}] \psi \rangle| \neq 0, \text{ Ha } [\hat{A}, \hat{B}] \neq 0$$

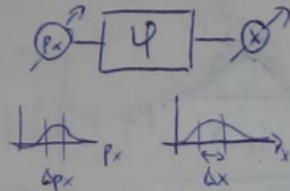


Határozatlansági-relációk általános alakja

Ha ΔA kicsi $\Rightarrow \Delta B$ nagy

Ha ΔA nagy $\Rightarrow \Delta B$ kicsi

Példa:



$$\hat{A} \equiv \hat{x}$$

$$\hat{B} \equiv \hat{p}_x$$

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

Heisenberg-féle
határozatlansági
relációt adja meg

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \frac{1}{2} |\langle \psi | [\hat{p}_x, \hat{x}] \psi \rangle|$$

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \frac{1}{2} |\langle \psi | [\hat{p}_x, \hat{x}] \psi \rangle|$$

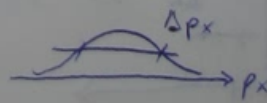
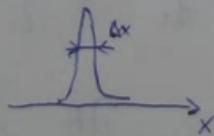
$$\frac{\hbar}{j}$$

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \frac{1}{2} \cdot \hbar \cdot |\langle \psi | \psi \rangle|$$

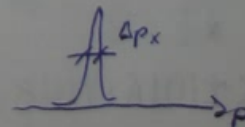
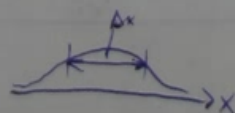
$$\equiv 1$$

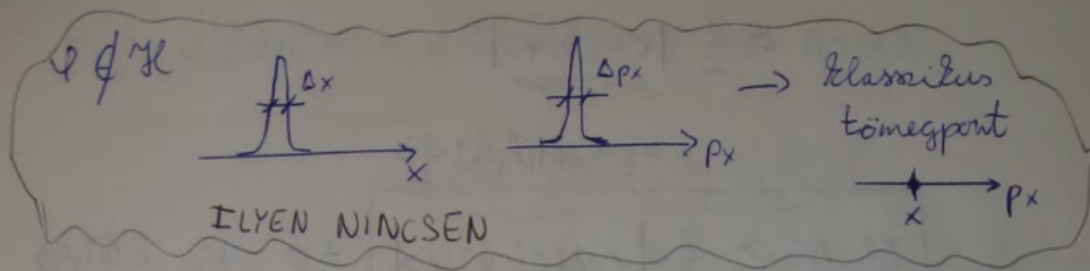
$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}$$

ψ_A :



ψ_B :



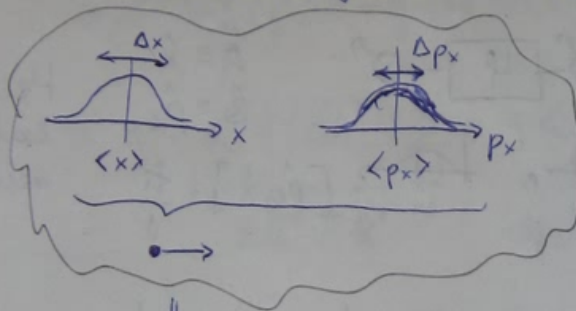


↓ modell

Macroscopikus skálán

Δx olyan kicsi, hogy Φ -nak vehető

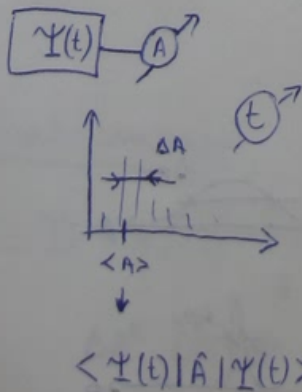
↓
Ezt követően a klasszikus fizika



↓
Korrespondencia-elv bizonyítása

↳ A kvantummechanika macroscopikus méretében vissza adja a klasszikus fizika eredményeit

⇓
EHRENFEST - tétel



$$\left. \begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle A \rangle &= \frac{d}{dt} \langle \Psi | \hat{A} | \Psi \rangle \\ \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} &= 0 \end{aligned} \right\}$$

$$\frac{d}{dt} \langle A \rangle = \langle \dot{\Psi} | \hat{A} | \Psi \rangle + \langle \Psi | \hat{A} | \dot{\Psi} \rangle = \textcircled{*}$$

$$\hat{H} \Psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi \rightarrow \dot{\Psi} = -\frac{i}{\hbar} \hat{H} \Psi$$

$$(\hat{H} \Psi)^* = +\frac{\hbar^2}{2m} (\dot{\Psi})^*$$

$$\hat{H} \Psi^* = +\frac{\hbar^2}{2m} \dot{\Psi}^* \rightarrow \dot{\Psi}^* = \frac{i}{\hbar} \hat{H} \Psi^*$$

$$\textcircled{*} = \frac{i}{\hbar} \left[\langle \hat{H} \Psi | \hat{A} \Psi \rangle - \langle \Psi | \hat{A} \hat{H} \Psi \rangle \right]$$

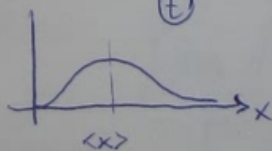
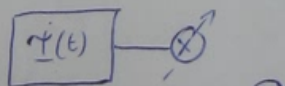
$$\langle \Psi | \hat{H} \hat{A} \Psi \rangle$$

$$\langle \Psi | (\hat{H} \hat{A} - \hat{A} \hat{H}) \Psi \rangle$$

$[\hat{H}, \hat{A}]$

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

Pl. $\hat{A} \equiv \hat{x}$



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

$$\hat{x} = x$$

$$\frac{d}{dt} \langle x \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle \Psi | [\hat{H}, \hat{x}] \Psi \rangle = -\frac{i}{\hbar} \cdot \frac{\hbar^2}{2m} \langle \Psi | \left[\frac{d^2}{dx^2}, x \right] \Psi \rangle = \textcircled{*}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{d^2}{dx^2}, x \right] \Psi = \frac{d^2}{dx^2} (x \cdot \Psi) - x \cdot \frac{d^2}{dx^2} \Psi$$

$$\frac{d^2}{dx^2}(x \cdot \Psi) = x'' \cdot \Psi + 2 \cdot x' \cdot \Psi' + x \cdot \Psi''$$

↓

$$\frac{d^2}{dx^2}(x \cdot \Psi) - x \cdot \frac{d^2}{dx^2} \Psi = 2x' \cdot \Psi'$$

$$(*) = -\frac{\hbar \cdot t_i}{2 \cdot m} \cdot 2 \langle \Psi | \Psi' \rangle =$$

$$= \frac{1}{m} \langle \Psi | \underbrace{\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}}_{\hat{p}_x} \Psi \rangle = \frac{1}{m} \langle \Psi | \hat{p}_x | \Psi \rangle$$

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

$$\langle \Psi | \hat{p}_x | \Psi \rangle = \frac{\hbar}{i} \langle \Psi | \frac{d}{dx} | \Psi \rangle = \frac{\hbar}{i} \int \Psi^* \frac{d\Psi}{dx} dx$$