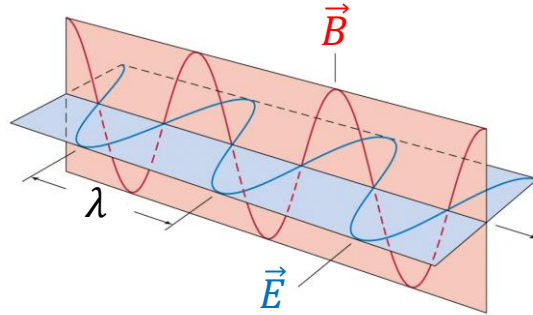


# A hullámfüggvény

Az elektromágneses hullám (fény, röntgensugárzás) esetén tudjuk, hogy az elektromos és mágneses tér mutat hullámtulajdonságot, mint a hely és idő függvénye.

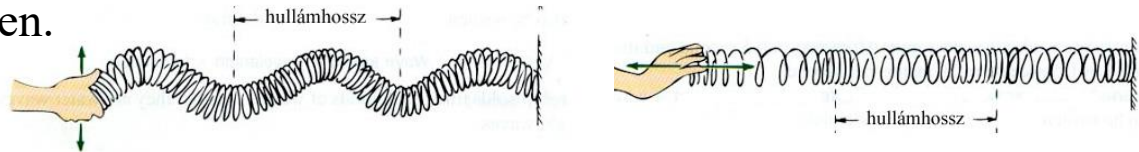


$$\Delta \vec{E} - \varepsilon \mu \frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2} = 0$$
$$\Delta \vec{H} - \varepsilon \mu \frac{\partial^2 \vec{H}}{\partial t^2} = 0$$

A hang a levegő vagy egyéb közeg nyomásának vagy a részecskék pozíciójának megváltozásaként terjed a közegben minden lehetséges irányba.



Mechanikai hullám esetében az egyensúlyi pozíciótól való kitérés nyilvánul meg zavarként a rugalmas közegben.



Anyagi részecske esetében mi lesz az a  $\Psi$  mennyiség, amelyre teljesül a hullámmegyenlet?

$$\Delta \Psi - \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial t^2} = 0 \quad \text{ahol } \Psi \text{ a hullámfüggvény (állapotfüggvény)}$$

# A hullámfüggvény fizikai jelentése

A részecske hullámtulajdonsága azt jelenti, hogy a pozícióját csak akkor tudjuk megmondani, amikor az ténylegesen kölcsönhat egy detektorral és lokalizálódik.

Ekkor a hullámtulajdonság megszűnik, és a részecske koordinátái konkrét értékeket vesznek fel. Ezt leszámítva azonban a részecske pozíciójára csak valószínűséget tudunk megadni:

Egy adott pozíció körüli  $dV$  térfogatban a részecske megtalálási valószínűsége:

$$p(dV) = |\Psi|^2 dV = \Psi^* \Psi dV \quad \text{ahol } \Psi^* \text{ a függvény komplex konjugáltja}$$

A  $\Psi$  függvény ugyanis általában komplex értékű.

Egy tetszőleges  $V$  térfogatban a részecske megtalálásának valószínűsége tehát:

$$p(V) = \int_V |\Psi|^2 dV$$

A részecske a teljes térben teljes bizonyossággal megtalálható, így a teljes térre kiintegrálva egységnyi valószínűséget kell kapnunk:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x, y, z)|^2 dx dy dz = 1 \quad \text{(például derékszögű Descartes koordinátarendszerben.)}$$

# Fizikai mennyiségek a kvantumfizikában

Planck feltevése, hogy az atomok energiája a szilárd anyagokban diszkrét értékeket vehet csak fel, igaznak bizonyult. Hasonlóan az elektronok energiája az atomokban szintén csak diszkrét értékű lehet.

Valójában az egyéb fizikai mennyiségekre pl. perdület szintén a kvantáltság jellemző.

**Fizikai mennyiségek:** folytonos függvények helyett olyan matematikai tárgyalás szükséges, amely a diszkrét értékeket természetes módon visszaadja!

Heisenberg és Dirac: a fizikai mennyiségekhez **operátorok**at kell rendelni.

Az operátorok függvényeken végrehajtható műveleteket jelentenek.  
pl.  $x$ -el való szorzás vagy  $x$  szerinti parciális deriválás.

A fizikai mennyiséghez alkalmasan választott **operátor sajátértékei** adják meg az adott mennyiség **méréssel** megállapítható **lehetséges értékeit**.

Mivel a sajátértékeknek valósaknak kell lenniük, csak **hermitikus** (önadjungált) operátorok jöhetnek szóba.

Általános esetben pedig az adott rendszer  $\Psi$  hullámfüggvénye (állapotfüggvénye) egy olyan komplex függvényt jelent, amely tartalmaz minden méréssel megállapítható információt.

# A korrespondencia elve

A fizikai elmélet helyességét a tapasztalattal való összevetés határozza meg.

Minden elméletnek van egy bizonyos érvényességi tartománya, tehát a jelenségek egy részét a tapasztalattal egyezően írja le.

Mindig lesznek ugyanis olyan újabb jelenségek, amelyek kívül esnek ezen a tartományon.

Pl. a Newton-féle mechanika kis sebességek esetén helyesen írja le a makroszkopikus testek mozgását. Viszont ellentmondásra vezet, ha megközelítjük a vákuumbeli fénysebességet.

A relativisztikus mechanika ilyen mozgásokra is helyes, és  $v \ll c$  határesetben visszaadja a Newton-féle mechanikát.

A mikrovilág törvényei eltérnek az eddigiektől, pl. kötött részecskék energiája, perdülete csak diszkrét értékeket vehet fel. Az EM sugárzás energiája kvantált. Stb.

Itt sem a klasszikus mechanika, sem az elektrodinamika nem alkalmazható!

Határesetben azonban a kvantumfizika törvényeinek is tartalmazniuk kell a klasszikus fizika törvényeit. Ez nagy kvantumszámok esetén következik be, hiszen akkor pl. az energiára:

$$\frac{hf}{n \cdot hf} \ll 1 \quad \text{elenyésző lépésköz}$$

Emellett, ha nagyszámú részecske alkotja a rendszert (makroszkopikus test), akkor a közöttük fellépő kölcsönhatás lokalizálja a kollektív pozíciókat a test egészére.

# Operátorok és sajátértékeik

Amennyiben az  $O$  operátornak a  $\psi$  függvény (a rendszer  $\psi$  állapota) sajátfüggvénye (sajátállapot),  $\lambda$  pedig az ehhez tartozó sajátérték:

$$O\psi = \lambda\psi$$

Tehát sajátfüggvényre alkalmazva, a hermitikus operátor hatása mindössze egy valós számmal való szorzás.

Fizikai jelentés: amennyiben a rendszer az adott fizikai mennyiségre nézve sajátállapotban van, akkor a mérés eredménye az adott sajátállapothoz tartozó érték:  $\lambda$ .

A sajátfüggvények legyenek regulárisak, tehát folytonosak és négyzetesen integrálhatók. Csak ekkor bírhatnak fizikai jelentéssel.

Erre a belső szorzat definíciója miatt van szükség:

$$(\phi, \psi) = \int_V \phi^* \psi dV$$

Az állapotfüggvények legyenek egyre normáltak:  $(\psi, \psi) = 1$

Amennyiben két állapot ortogonális (egymást kizáró állapotai a rendszernek):

$$(\phi, \psi) = 0$$

# Időtől független Schrödinger-egyenlet

Amennyiben az  $\mathbf{O}$  operátor az energia operátora, akkor a sajátérték egyenlet az időtől független Schrödinger-egyenletet adja:

$$\mathbf{O}\psi = E\psi$$

Egy  $V$  potenciáltérben mozgó,  $T$  kinetikus energiával rendelkező részecskére, az energia a potenciális és kinetikus energiák összege, vagyis a Hamilton-függvény:  $H = T + V$   
Tehát az energia operátora a Hamilton operátor:

$$\mathbf{H}\psi = E\psi$$

Nem relativisztikus esetben a kinetikus energia:  $T = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{p^2}{2m}$

Tehát a Schrödinger-egyenlet:

$$\left( \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V \right) \psi = E\psi$$

Derékszögű Descartes koordinátarendszerben:

$$\left( \frac{\mathbf{p}_x^2 + \mathbf{p}_y^2 + \mathbf{p}_z^2}{2m} + V(x, y, z) \right) \psi = E\psi$$

# Ortonormált bázis

A rendszerek állapotait megadó  $\psi$  függvények tulajdonságaikat tekintve **vektoroknak** tekinthetők a végtelen (vagy legalábbis nagyon nagy) dimenziójú Hilbert-térben. Ez a tér a rendszer összes lehetséges hullámfüggvényéből tevődik össze.

A rendszer  $\Psi$  hullámfüggvénye általában nem valamelyik sajátállapot.

Neumann János:

Amennyiben a hermitikus operátor sajátértékei diszkrét, akkor a sajátfüggvények teljes ortonormált függvényrendszert alkotnak (ortonormált bázis).

Ezekkel az eredeti állapot sorbafejthető:

$$\Psi = a_1\psi_1 + a_2\psi_2 + \dots + a_n\psi_n \quad \text{az } a_i\text{-k komplex számok}$$

Tehát a rendszer állapota sorbafejthető a mérés lehetséges sajátállapotainak segítségével.

A hullámfüggvények felírására Dirac bevezette a bra-ket jelölést:

$$\begin{array}{lll} \psi := |\psi\rangle & \text{illetve} & \psi^* := \langle\psi| \\ \text{ket vektor} & & \text{bra vektor} \end{array}$$

Így a belső szorzat:  $(\phi, \psi) = \langle\phi|\psi\rangle$

# Mérés várható értéke

Ha tehát a rendszer nincs a mérendő mennyiség operátorára nézve egy sajátállapotban, akkor a lehetséges mérési eredményekre csak valószínűségeket tudunk megállapítani, illetve kiszámolható a mérés várható értéke (lehetséges eredmények valószínűségekkel súlyozott átlaga):

$$\begin{aligned}\bar{O} &= (\Psi, \mathbf{O}\Psi) = \int \Psi^* \mathbf{O}\Psi dV = \sum_{k=1}^n \int a_k^* \psi_k^* \lambda_k a_k \psi_k dV \\ &= \sum_{k=1}^n \lambda_k a_k^* a_k \int \psi_k^* \psi_k dV = \sum_{k=1}^n \lambda_k a_k^* a_k\end{aligned}$$

Itt tehát az  $a_k^* a_k = |a_k|^2 = w_k$  szorzat annak a valószínűsége, hogy a mérés tényleges elvégzésekor a  $\lambda_k$  sajátértéket kapjuk eredményül.

Természetesen a valószínűségek összege egységnyi kell legyen, hiszen a mérés során a lehetséges sajátértékek valamelyikét mindenképpen megkapjuk, és más érték nem fordulhat elő!

$$\sum_{k=1}^n a_k^* a_k = 1$$



# Szabad részecske

Legyen  $\Psi$  az  $m_0$  nyugalmi tömeggel rendelkező, nem relativisztikus  $v$  sebességgel mozgó szabad részecske hullámfüggvénye (tehát most  $V = 0$ , egyszerű példa).

Ez a függvény tehát megoldása az általános hullámegyenletnek:

$$\Delta\Psi - \frac{1}{v_f^2} \frac{\partial^2\Psi}{\partial t^2} = 0 \quad \begin{array}{l} v_f \text{ hullám terjedési} \\ \text{sebessége (fázis sebesség)} \end{array}$$

A megoldást a szokásos síkhullám alakban keressük (Descartes koordinátarendszerben):

$$\Psi(x, y, z, t) = C e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r} - \omega t)} = C e^{i(k_x x + k_y y + k_z z - \omega t)}$$

$$\vec{k}: \text{ körhullámszám vektor} \quad |\vec{k}| = k = \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{|\vec{p}|}{\hbar} = \frac{p}{\hbar} = \frac{m_0 v}{\hbar}$$

$$\omega: \text{ körfrekvencia} \quad \omega = 2\pi f = \frac{2\pi E}{h} = \frac{E}{\hbar} = \frac{m_0 v^2}{2\hbar}$$

A megoldás változása időben:

$$\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -i\omega\Psi = -i\frac{E}{\hbar}\Psi$$

Tehát az **energia (Hamilton) operátorra** kapjuk:  $E = \mathbf{H} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$

És megkapjuk az időtől függő Schrödinger-egyenletet:  $i\hbar \frac{\partial\Psi}{\partial t} = \mathbf{H}\Psi$  általános érvényű!

# Fázissebeség és csoportsebesség

Behelyettesítve a  $\Psi$  hullámfüggvényt az általános hullámegyenletbe:

$$\Delta\Psi - \frac{1}{v_f^2} \frac{\partial^2\Psi}{\partial t^2} = 0 \quad \leftarrow \Psi(x, y, z, t) = C e^{i(k_x x + k_y y + k_z z - \omega t)}$$

$$\left( -k_x^2 - k_y^2 - k_z^2 + \frac{\omega^2}{v_f^2} \right) \Psi = 0$$

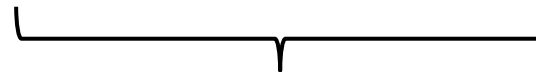
$$-k^2 + \frac{\omega^2}{v_f^2} = 0 \rightarrow v_f = \frac{\omega}{k} = \frac{E/\hbar}{p/\hbar} = \frac{E}{p} = \frac{p^2/2m_0}{p} = \frac{p}{2m_0} = \frac{v}{2}$$

A **fázissebesség** tehát **nem** a részecske sebességét adja!

Csoportsebesség:

$$v_{cs} = \frac{d\omega}{dk}$$

$$\omega = \frac{E}{\hbar} = \frac{p^2}{2m_0\hbar} \quad k = \frac{p}{\hbar}$$



$$\omega = \frac{\hbar k^2}{2m_0}$$

$$v_{cs} = \frac{d\omega}{dk} = \frac{\hbar k}{m_0} = \frac{\hbar}{m_0} \frac{p}{\hbar} = \frac{p}{m_0} = v$$

Tehát a **csoportsebesség** adja a részecske sebességét!



# Lendület és energia operátor

Vegyük a megoldásul kapott hullámfüggvényünk pl.  $x$  koordináta szerinti deriváltját:

$$\Psi(x, y, z, t) = C e^{i(k_x x + k_y y + k_z z - \omega t)}$$

$$\frac{\partial \Psi}{\partial x} = i k_x \Psi = i \frac{p_x}{\hbar} \Psi \quad \rightarrow \quad p_x \Psi = -i \hbar \frac{\partial \Psi}{\partial x}$$

Innen látható, hogy a lendület operátora:  $\mathbf{p}_x = -i \hbar \frac{\partial}{\partial x}$

Hasonlóan a többi komponensre:  $\mathbf{p}_y = -i \hbar \frac{\partial}{\partial y}$  és  $\mathbf{p}_z = -i \hbar \frac{\partial}{\partial z}$

Ebből származtathatjuk a kinetikus energia operátort:

$$\mathbf{T} = \frac{1}{2m_0} (\mathbf{p}_x^2 + \mathbf{p}_y^2 + \mathbf{p}_z^2) = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \Delta$$

Amennyiben a részecske  $V(x, y, z)$  potenciáltérben tartózkodik, a teljes energia operátora:

$$\mathbf{E} = \mathbf{H} = \mathbf{T} + \mathbf{V} = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \Delta + V(x, y, z)$$

Az  $x, y, z$  koordináták operátora egyszerűen a koordinátával való szorzás.

A többi fizikai mennyiség operátora ezekből származtatható ehhez hasonlóan.

# Időtől független Schrödinger-egyenlet

Válasszuk le a szabad részecske  $\Psi$  hullámfüggvényéből az időfüggést az alábbi szerint:

$$\Psi(x, y, z, t) = \psi(x, y, z)e^{-i\omega t}$$

Beírva az eredeti hullámegyenletbe: 
$$\Delta\Psi - \frac{1}{v_f^2} \frac{\partial^2\Psi}{\partial t^2} = 0$$

$$\Delta\psi e^{-i\omega t} + \frac{\omega^2}{v_f^2} \psi e^{-i\omega t} = 0 \rightarrow \frac{\omega^2}{v_f^2} = \frac{4\pi^2 f^2}{\lambda^2 f^2} = \frac{4\pi^2}{\lambda^2} = \frac{4\pi^2 p^2}{h^2} = \frac{p^2}{\hbar^2} = \frac{2m_0 E}{\hbar^2}$$

Az exponenciális taggal egyszerűsítve kapjuk az időtől független Schrödinger-egyenletet:

$$\Delta\psi + \frac{2m_0 E}{\hbar^2} \psi = 0$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m_0} \Delta\psi = E\psi$$

Amennyiben a részecske  $V(x, y, z)$  potenciáltérben tartózkodik: 
$$\frac{4\pi^2}{\lambda^2} = \frac{2m_0(E - V)}{\hbar^2}$$

$$\Delta\psi + \frac{2m_0(E - V)}{\hbar^2} \psi = 0$$

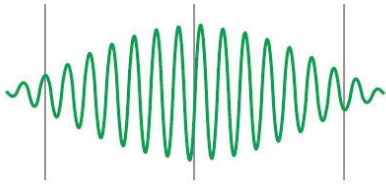
$$-\frac{\hbar^2}{2m_0} \Delta\psi + V(x, y, z)\psi = E\psi \rightarrow \mathbf{H}\psi = E\psi$$

általános  
érvényű!

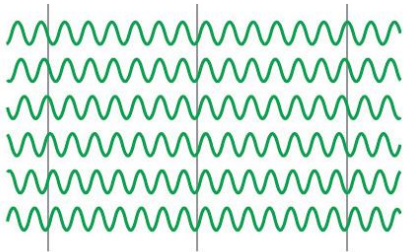
# Részecske mint hullámcsomag

Egy adott pont környezetében valamilyen valószínűséggel megtalálható (lokalizált) részecske leírása egy hullámcsomaggal lehetséges.

A **hullámcsomag** egymáshoz közeli frekvenciájú (vagy hullámhosszú) sima síkhullámok megfelelő amplitúdójú szuperpozíciója.



A hullámcsomag az alatta lévő 6 hullámból adódik, melyeknek kissé eltérő hullámhosszai (vagy körhullámszámai  $k$ ) vannak. A csoportsebesség, vagyis a részecske sebessége, valójában a burkológörbének (vagyis a hullámcsomagnak) a sebessége.



Valójában végtelen sok  $k$  értékre lenne szükség egy szűk  $\Delta k$  tartományon belül, hogy a hullámcsomag ne ismétlődjön.

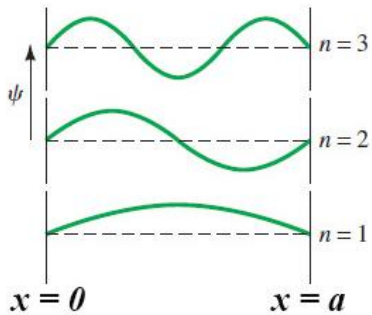
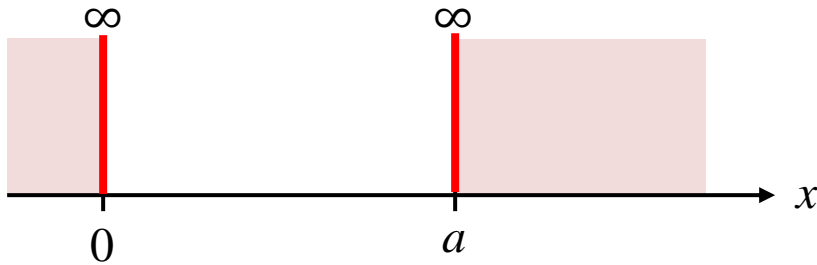
Amennyiben egy jobban lokalizált hullámcsomagot kívánunk előállítani, akkor nagyobb  $\Delta k$  tartományból kell vennünk hullámokat, tehát a lendület bizonytalansága nagyobb lesz.



**A különböző  $k$  értékek különböző sebességet jelentenek, így a kezdetben lokalizált hullámcsomag szétfolyik a diszperzió miatt!**

# Egydimenziós dobozba zárt részecske

Vegyünk egy  $a$  hosszúságú tartományt (doboz), amelyen belül a részecske szabadon mozoghat, azon kívül viszont a potenciálfal magassága végtelen.



Határfeltételekből:

$$a = n \frac{\lambda}{2}$$

A dobozon kívül a hullámfüggvény nulla.

Tehát csomópontok vannak a határokon.

A dobozon belül:  $V = 0$

Időtől független Schrödinger-egyenlet:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi$$

Megoldás alakja:  $\psi(x) = C e^{ikx}$

Behelyettesítve  $k$ -ra:  $\frac{\hbar^2}{2m_0} k^2 = E$

Trigonometrikus függvényekkel:  $\psi(x) = A \cos kx + B \sin kx$

Kvantált energiaszintek:  $E_n = \frac{h^2}{8m_0 a^2} n^2$  zérus ponti energia  $n = 1$

Határfeltételből és normalizálási feltételből:

$$A = 0 \quad B = \sqrt{\frac{2}{a}}$$

