Szabad részecske

Legyen Ψ 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:

$$\Delta\Psi - \frac{1}{{v_f}^2}\frac{\partial^2\Psi}{\partial t^2} = 0$$

v_f hullám terjedési sebessége (fázissebesség)

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

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

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

ω: 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: $\boldsymbol{E} = \boldsymbol{H} = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$

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

Fázissebeség és csoportsebesség

Behelyettesítve a Ψ hullámfüggvényt az általános hullámegyenletbe:

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

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

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

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

<u>Csoportsebesség:</u>

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

$$\underbrace{\omega = \frac{E}{\hbar} = \frac{p^2}{2m_0\hbar} \qquad\qquad k = \frac{p}{\hbar}}_{\omega = \frac{\hbar k^2}{2m_0}}$$

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

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

Lendület és energia operátor

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

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

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

Innen látható, hogy a lendület operátora: $\boldsymbol{p_x} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$

Hasonlóan a többi komponensre: $\boldsymbol{p_y} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial y}$ és $\boldsymbol{p_z} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial z}$

Ebből származtathatjuk a kinetikus energia operátorát:

$$\boldsymbol{T} = \frac{1}{2m_0}\left(\boldsymbol{p_x}^2 + \boldsymbol{p_y}^2 + \boldsymbol{p_z}^2\right) = -\frac{\hbar^2}{2m_0}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) = -\frac{\hbar^2}{2m_0}\Delta$$

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

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

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 Ψ hullámfüggvényéből az időfüggést az alábbi szerint:

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

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

$$\Delta\psi e^{-i\omega t}+\frac{\omega^2}{{v_f}^2}\psi e^{-i\omega t}=0 \quad\rightarrow\quad \frac{\omega^2}{{v_f}^2}=\frac{4\pi^2 f^2}{\lambda^2 f^2}=\frac{4\pi^2}{\lambda^2}=\frac{4\pi^2 p^2}{h^2}=\frac{p^2}{\hbar^2}=\frac{2m_0E}{\hbar^2}$$

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

$$\Delta\psi+\frac{2m_0E}{\hbar^2}\psi=0$$

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

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

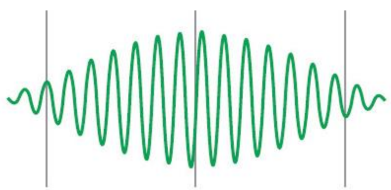
$$\Delta\psi+\frac{2m_0(E-V)}{\hbar^2}\psi=0$$

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

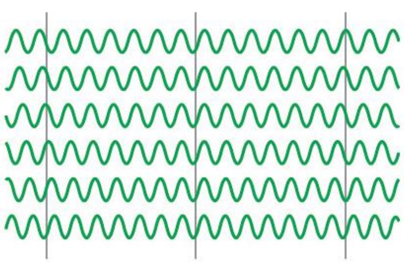
általános érvényű!

Részecske mint hullámcsomag

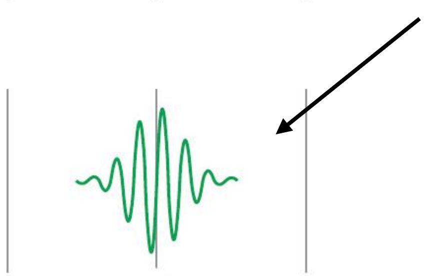
Egy adott pont környezetében valamilyen valószínűséggel megtalálható (lokalizált) részecske leírása egy hullámcsomaggal lehetséges.
A **hullámcsomag** egymáshoz közeli frekvenciájú (vagy hullámhosszú) sima síkhullámok megfelelő amplitúdójú szuperpozíciója.



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 Δk tartományon belül, hogy a hullámcsomag ne ismétlődjön.

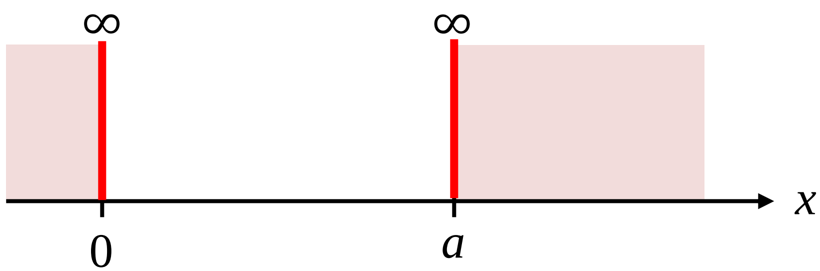


Amennyiben egy jobban lokalizált hullámcsomagot kívánunk előállítani, akkor nagyobb Δk tartományból kell vennünk hullámokat, tehát a lendület bizonytalansága nagyobb lesz.

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

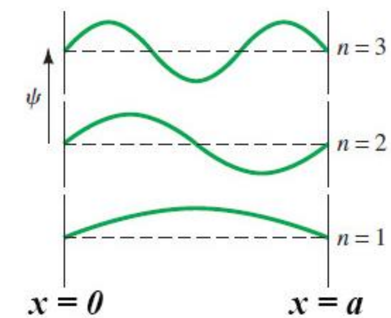
Egydimenziós dobozba zárt részecske

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



A dobozon kívül a hullámfüggvény nulla.
Tehát csomópontok vannak a határokon.
A dobozon belül: $V = 0$
Időtől független Schrödinger-egyenlet:

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

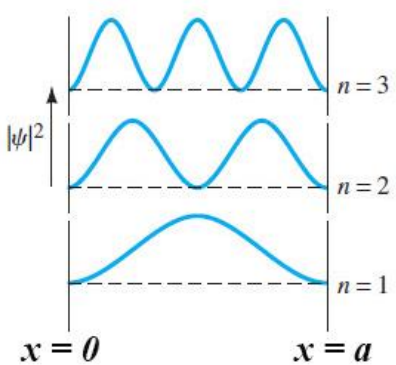


Határfeltételekből:

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

Megoldás alakja: $\psi(x) = Ce^{ikx}$

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



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

Kvantált energiaszintek: $E_n = \frac{h^2}{8m_0a^2}n^2$

zérusponti energia *n* = 1

Határfeltételből és normalizálási feltételből:

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

Áthaladás egydimenziós potenciál lépcsőn

A teljes tartományt I. és II. tartományra bontjuk:

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

II. $$-\frac{\hbar^2}{2m_0}\frac{d^2\psi}{dx^2} + V_0\psi = E\psi \qquad (V_0 < \mathrm{E})$$

Megoldások alakja:

$$\psi_I = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x} \qquad\qquad \psi_{II} = Ce^{ik_2x}$$

Ezeket behelyettesítve:

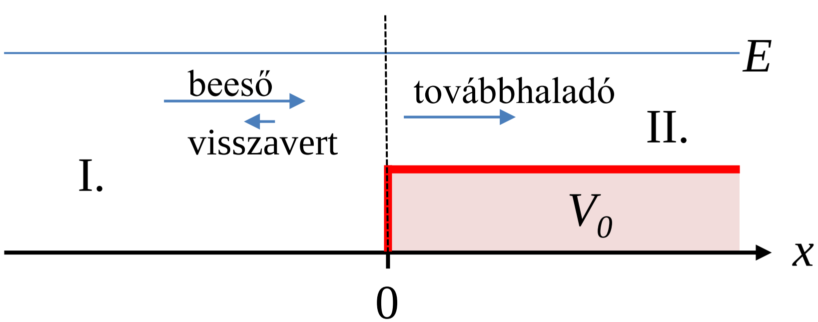
$$\frac{\hbar^2 {k_1}^2}{2m_0}\psi_I = E\psi_I \qquad {k_1}^2 = \frac{2m_0E}{\hbar^2} \qquad\qquad \frac{\hbar^2 {k_2}^2}{2m_0}\psi_{II} = (E - V_0)\psi_{II} \qquad {k_2}^2 = \frac{2m_0(E - V_0)}{\hbar^2}$$

A hullám intenzitása itt is az amplitúdó négyzetével arányos, mint az EM hullámoknál.
Tehát a visszaverődés (reflexió) valószínűsége: $R = \frac{B^*B}{A^*A} = B^*B$ ha $A = 1$

<u>jelölés</u>: $\psi' = \frac{d\psi}{dx}$

A hullámfüggvény és deriváltja folytonos a határon, vagyis az $x = 0$ helyen.

$$\psi_I(0) = \psi_{II}(0) \qquad\qquad {\psi_I}'(0) = {\psi_{II}}'(0)$$



Megoldás:

$$R = \frac{(k_1 - k_2)^2}{(k_1 + k_2)^2} = \frac{2E - V_0 - 2\sqrt{E(E - V_0)}}{2E - V_0 + 2\sqrt{E(E - V_0)}}$$

Alagúteffektus

A teljes tartományt I., II. és III. tartományra bontjuk:

I. és III. $-\dfrac{\hbar^2}{2m_0}\dfrac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi$

II. $-\dfrac{\hbar^2}{2m_0}\dfrac{d^2\psi}{dx^2} + V_0\psi = E\psi$ $(V_0 > \mathrm{E})$

Megoldások alakja:

$\psi_I = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$

$\psi_{II} = De^{-\alpha x} + Fe^{\alpha x}$

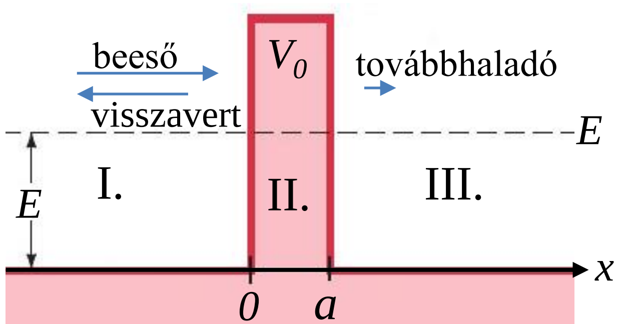
$\psi_{III} = Ce^{ikx}$

Ezeket behelyettesítve:

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m_0}\psi_{I,III} = E\psi_{I,III} \qquad k^2 = \frac{2m_0 E}{\hbar^2}$$

$$(V_0 - E)\psi_{II} = \frac{\hbar^2\alpha^2}{2m_0}\psi_{II} \qquad \alpha^2 = \frac{2m_0(V_0 - E)}{\hbar^2}$$

Az áthaladás (transzmisszió) valószínűsége: $T = \dfrac{C^*C}{A^*A} = C^*C$ ha $A = 1$



A hullámfüggvény és deriváltja folytonos a határokon, vagyis az $x = 0$ és $x = a$ helyeken.

$$\psi_I(0) = \psi_{II}(0) \qquad \psi_I{}'(0) = \psi_{II}{}'(0)$$

$$\psi_{II}(a) = \psi_{III}(a) \qquad \psi_{II}{}'(a) = \psi_{III}{}'(a)$$

Transzmisszió

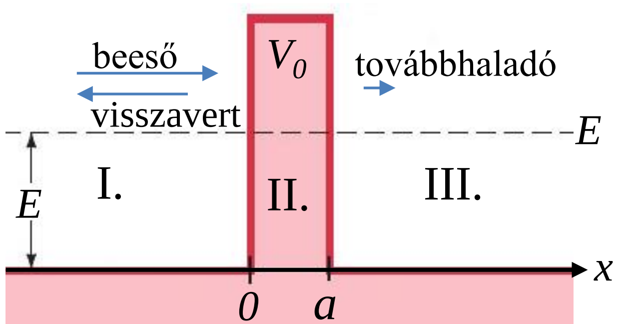
Kifejezve a B, D, F konstansokat C függvényében, és az utolsó egyenletbe írva kapjuk:

$$T = C^*C = \left[1 + \frac{1}{4}\left(\frac{k}{\alpha} + \frac{\alpha}{k}\right)^2 \sinh^2 \alpha a\right]^{-1} \qquad k^2 = \frac{2m_0 E}{\hbar^2} \qquad \alpha^2 = \frac{2m_0(V_0 - E)}{\hbar^2}$$

Amennyiben az αa értéke nagy, tehát vagy nagyon széles (a nagy) vagy nagyon magas ($V_0 \gg E$) a potenciálgát:

$$\sinh \alpha a = \frac{e^{\alpha a} - e^{-\alpha a}}{2} \approx \frac{e^{\alpha a}}{2}$$

$$T = C^*C \approx \left[\frac{1}{4}\left(\frac{k}{\alpha} + \frac{\alpha}{k}\right)^2 \frac{e^{2\alpha a}}{4}\right]^{-1} = \left[\frac{1}{16}\left(\frac{k}{\alpha} + \frac{\alpha}{k}\right)^2\right]^{-1} e^{-2\alpha a}$$

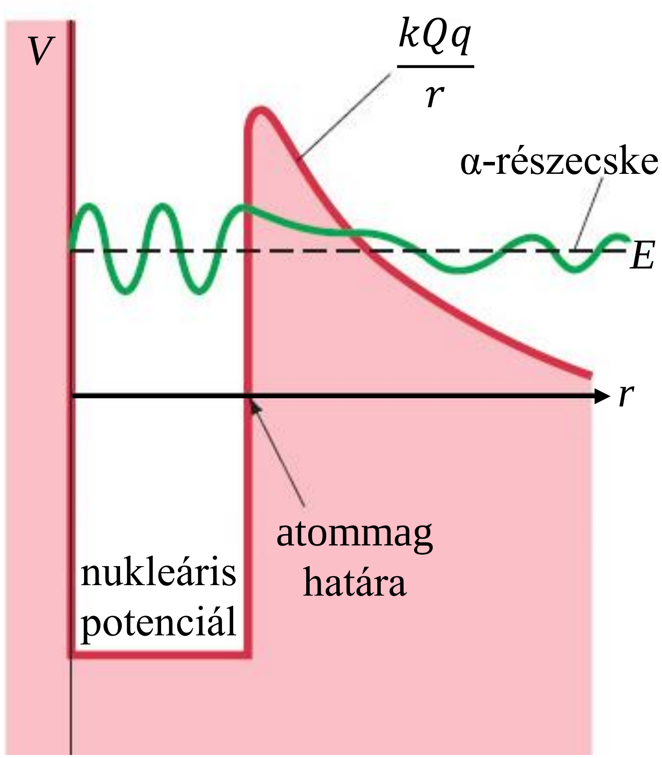


Beírva az α és k értékeit:

$$T = C^*C \approx \frac{16E(V_0 - E)}{{V_0}^2} e^{-2\alpha a}$$

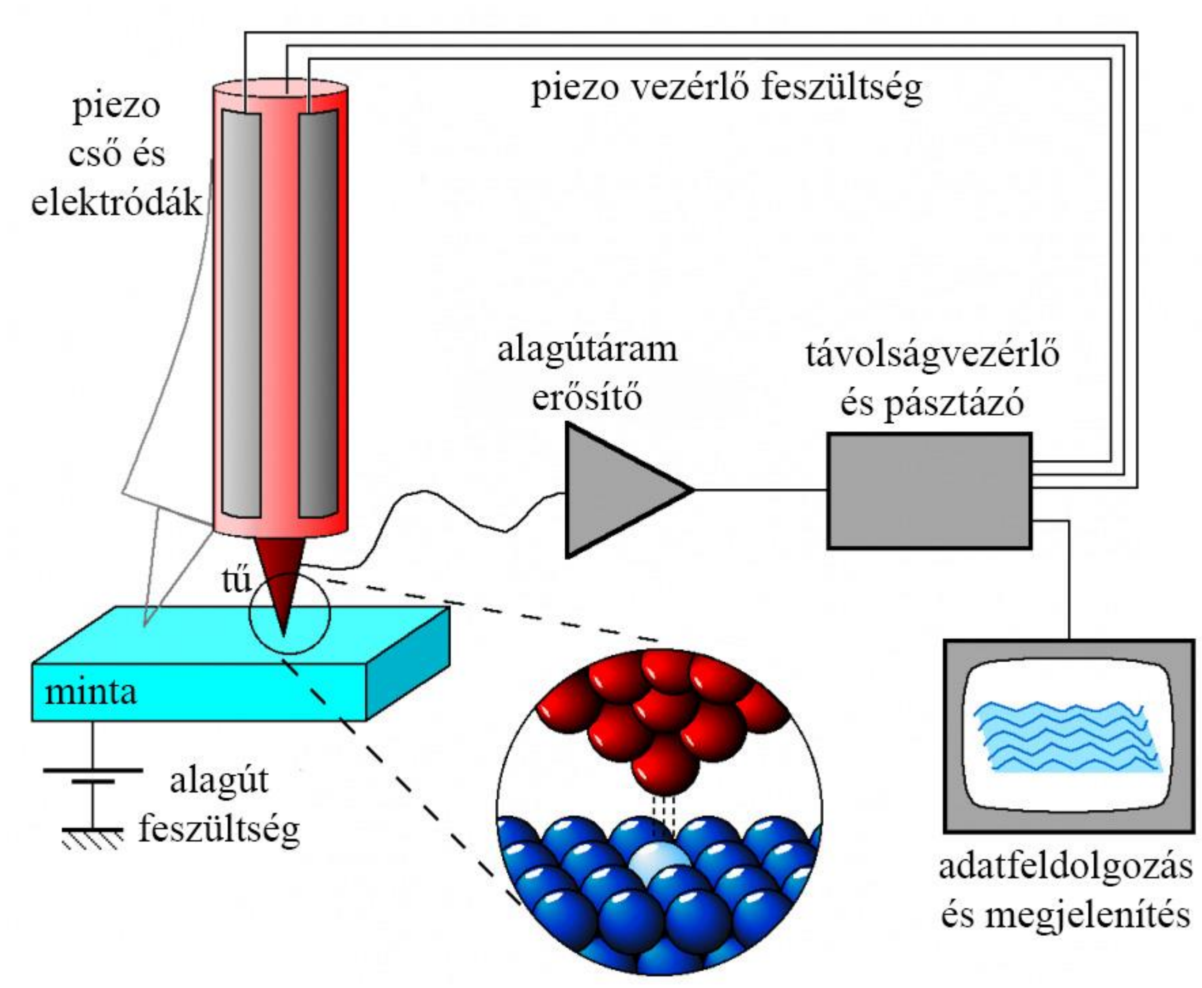
α-bomlás

Nagy atommagok esetében előfordul, hogy két proton és két neutron az atommag belsejében egy hélium atommagot alkotva elegendő energiára tesz szert, hogy átjusson a magerők és Coulomb-erő alkotta potenciálgáton.



Alagútáramos pásztázó mikroszkópia (STM)

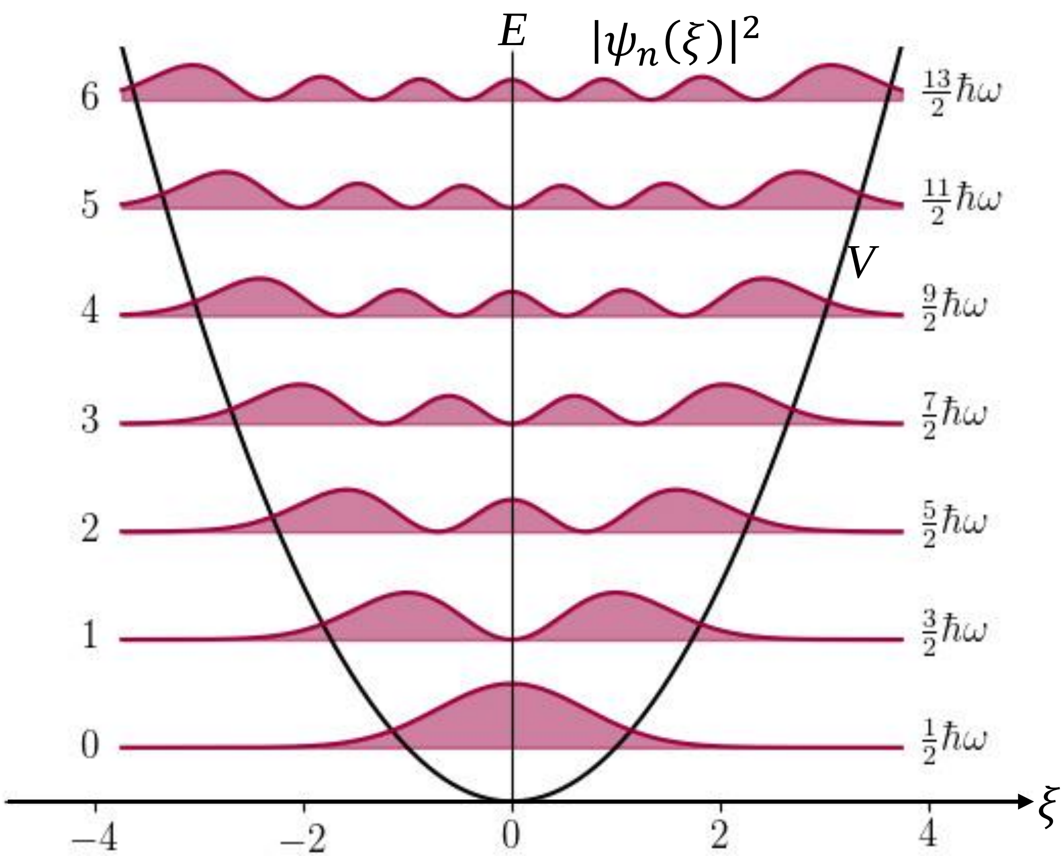
Az alagúteffektusra jellemzően a vákuumrésen az elektron áthaladása nagyon erősen függ a rés szélességétől. Emiatt az alagútáram szintén nagyon érzékeny a rés változására.
Piezo vezérlése: állandó nagyságú áramot megtartva változtatni kell a tű magasságát.
A mintán végigpásztázva ezeket a magasságokat rögzítik a minta morfológiájaként.



Lineáris harmonikus oszcillátor

Klasszikus esetben például rúgóra rögzített test: $V(x) = \frac{1}{2}Dx^2 = \frac{m_0\omega^2 x^2}{2}$ $\qquad \omega = \sqrt{\frac{D}{m_0}}$

$$-\frac{\hbar^2}{2m_0}\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{m_0\omega^2x^2}{2}\psi = E\psi \quad \rightarrow \quad \frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m_0}{\hbar^2}\left(E - \frac{m_0\omega^2}{2}x^2\right)\psi = 0$$



Változócsere: $\xi = \sqrt{\frac{m_0\omega}{\hbar}}x$

Megoldás:

$$\psi_n(\xi) = A_n e^{-\frac{\xi^2}{2}} H_n(\xi)$$

Hermite-polinomok

$$H_0(\xi) = 1 \qquad H_1(\xi) = 2\xi$$

$$H_2(\xi) = 4\xi^2 - 2$$

Energiák:

$$E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right) = hf\left(n + \frac{1}{2}\right)$$

Zérusponti energia: $E_0 = \frac{1}{2}hf$

Hullámfüggvény változási folyamatai

A rendszer Ψ állapota az időnek folytonos függvénye, időbeli fejlődését az időtől függő Schrödinger-egyenlet írja le:

$$\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\Psi}{\partial t} + \boldsymbol{H}\Psi = 0$$

A kvantumfizika klasszikus (Niels Bohr féle vagy koppenhágai értelmezés) elképzelése szerint a hullámfüggvény kétféle folyamaton mehet keresztül:

1-es folyamat: Egy $\psi_1, \psi_2, \psi_3,$ sajátállapotokkal rendelkező mérés elvégzésekor a rendszer eredeti Ψ állapota a ψ_k sajátállapotba ugrik $a_k{}^* a_k = |(\Psi, \psi_k)|^2$ valószínűséggel. Ez egy nem folytonos változás!

2-es folyamat: Az elszigetelt rendszer állapotának folytonos, determinisztikus változása az idő függvényében az időtől függő Schrödinger egyenlet szerint.

Schrödinger azt az elképzelést, hogy a fizikai rendszer állapota mindaddig bizonytalan, amíg a mérést el nem végezzük, igencsak furcsának találta: macskás gondolatkísérlet.

Hugh Everett III pedig a hullámfüggvény 1-es folyamat szerinti összeomlását találta logikailag és matematikailag nem értelmezhetőnek, ezért eltekintett attól (Everett-féle vagy oxfordi interpretáció).

Stern-Gerlach kísérlet

Felhevített ezüst atomok átvezetése inhomogén mágneses téren.
Várakozás: spin véletlenszerű orientációja miatt folytonos eltérülés két érték között.
Eredmény: csak kétféle vetület $\pm\hbar/2$ → kétféle eltérülés 50-50% eséllyel.
Második mágnes: Ha már **Z+** spin, az csak egyfelé térül el, hiszen már sajátállapotban van!

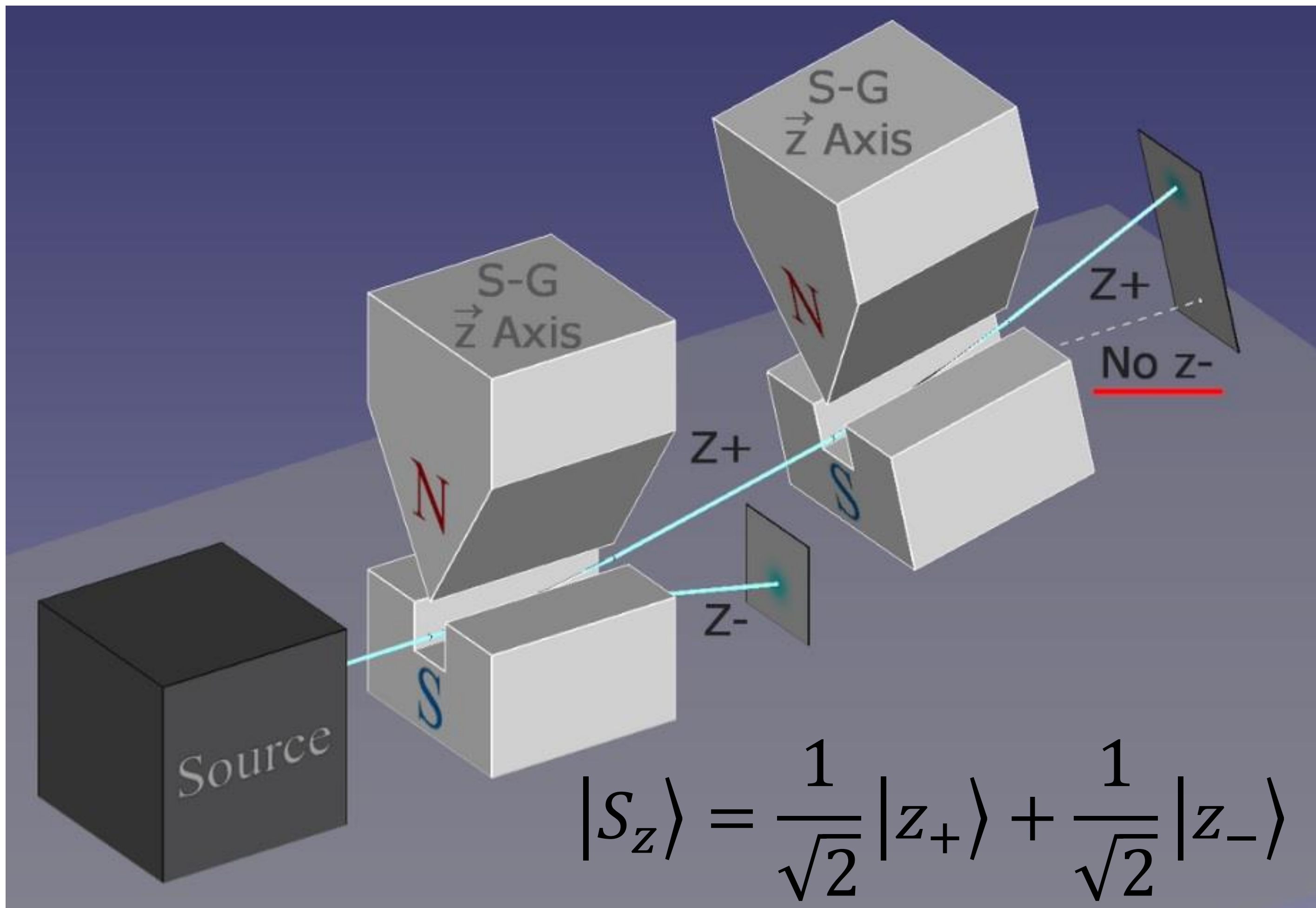
$$S = \hbar\sqrt{s(s+1)}$$

ahol: $s = \frac{n}{2}$

elektronra: $n = \frac{1}{2}$

$$S = \hbar\sqrt{\frac{1}{2}\left(\frac{1}{2}+1\right)}$$

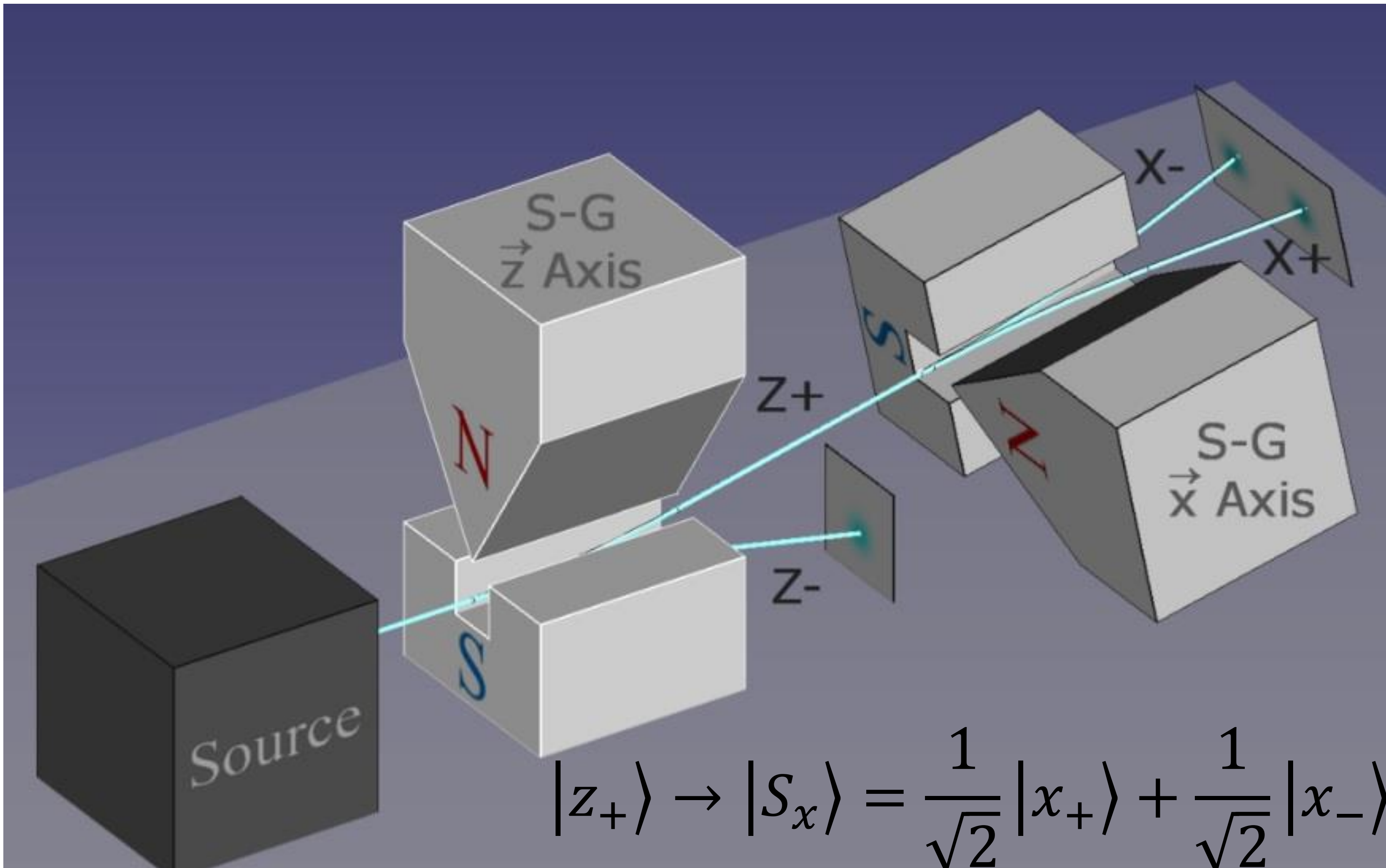
$$S = \hbar\frac{\sqrt{3}}{2} = 0{,}866\hbar$$



$$\left|S_z\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left|z_+\right\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}\left|z_-\right\rangle$$

Szimultán sajátállapotok

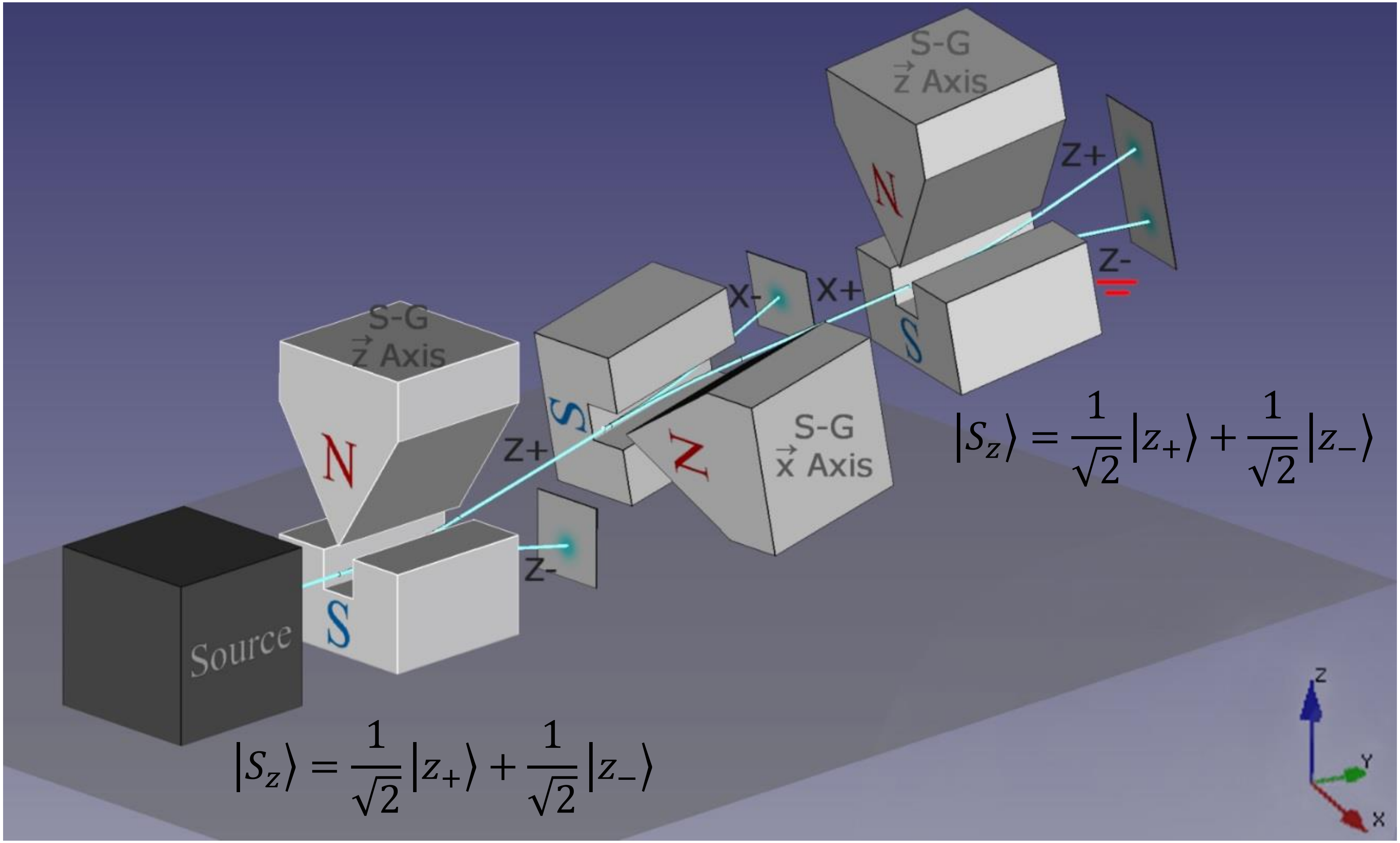
A **Z+** sajátállapot az x-irányú mérésnek nem sajátállapota!
A rendszer nem lehet olyan állapotban, amely minden mérésre nézve sajátállapot.
Ezek egyszerre nem mérhető mennyiségek.



$$|z_+\rangle \rightarrow |S_x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|x_+\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|x_-\rangle$$

Az „összeomlott” hullámfüggvény „visszaépítése”

Az *x*-irányú mérés elvégzése újra bizonytalanná teszi a z-irányú mérés eredményét.
Csak **Z+** mérési eredmény helyett ismét **Z+** és **Z-** 50-50% eséllyel!



Relatív állapotok

<u>**Hugh Everett III:**</u>
A mérőeszköz vagy a megfigyelő is ugyanolyan részecskékből álló fizikai rendszer, mint a mérendő rendszer.
A kettő együtt kezelendő egy összetett rendszerként.
Legyenek az ***R*** összetett rendszer alrendszerei az ***r*** mérendő rendszer és az ***m*** megfigyelő.

<u>Mérés:</u> kölcsönhatás, melynek során ***r*** és ***m*** korrelációba kerül egymással.

Az ***R*** hullámfüggvénye:

$$\Psi^{\boldsymbol{R}} = \sum_{k,l} a_{kl} \psi_k{}^{\boldsymbol{r}} \phi_l{}^{\boldsymbol{m}} = \sum_{k,l} a_{kl} \, |\psi_k\rangle_{\boldsymbol{r}} |\phi_l\rangle_{\boldsymbol{m}}$$

Az ***r*** minden sajátállapotához tartozik az ***m*** megfigyelőnek egy relatív állapota.
Pl. az n-edikhez tartozó:

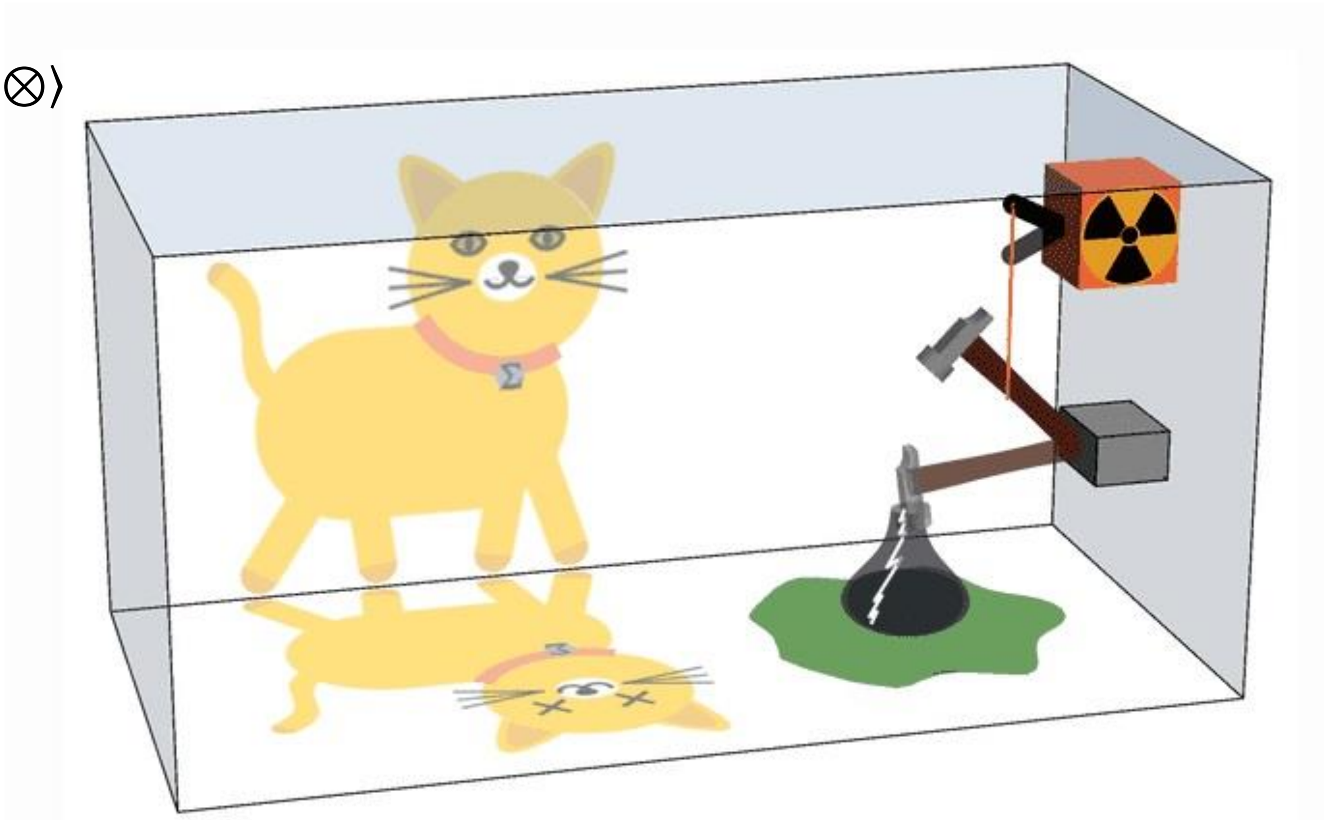
$$\Psi(\boldsymbol{m}; \mathrm{rel}\psi_n, \boldsymbol{r}) = N_n \sum_l a_{nl} \phi_l{}^{\boldsymbol{m}}$$

Schrödinger macskája

Schrödinger:

Ha az elemi részecskék tulajdonságainak pontos értéke csak a méréskor derül ki, akkor ennek igaznak kell lennie makroszkopikus testekre is.
Radioaktív atommag elbomlott-e vagy nem?
Kalapács lesújtott-e, mérget kiszabadította-e és macskát megölte-e...
A dobozból semmilyen módon nem jöhet ki információ, az tökéletesen zárt!
A doboz kinyitásakor derül ki minden, addig két lehetőség szuperpozíciója:

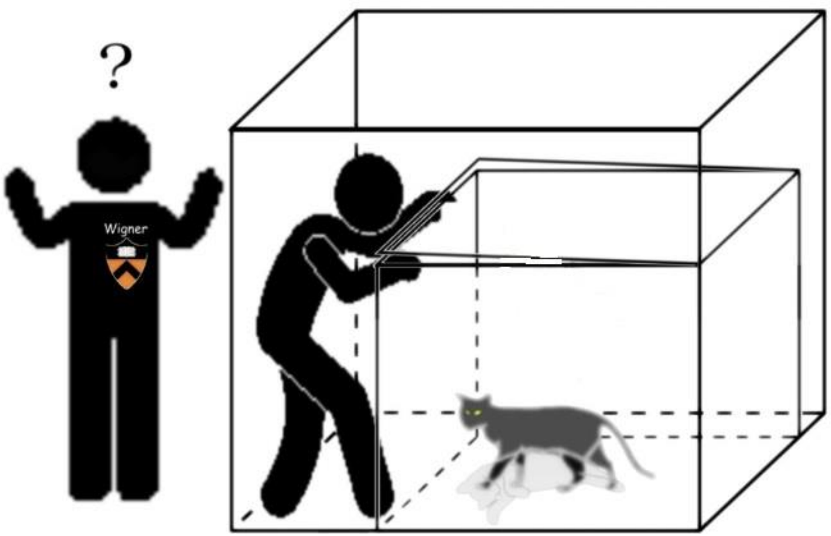
$$|\mathcal{M}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|\odot\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|\otimes\rangle$$

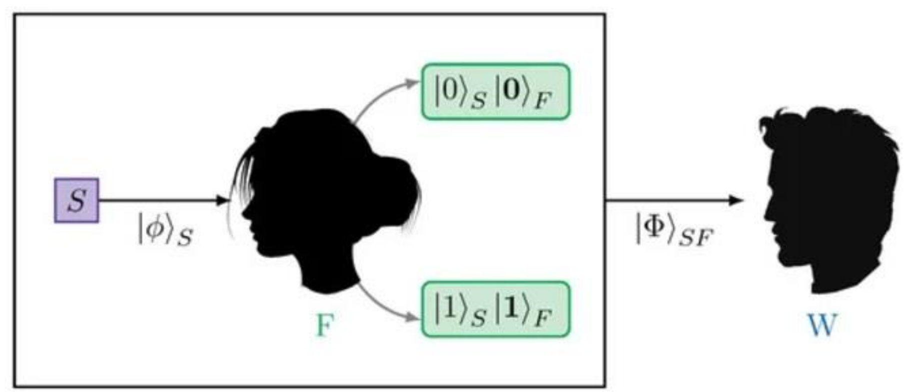


Wigner barátja

<u>Von Neumann:</u>
A hullámfüggvény összeomlása akkor következik be, amikor egy **öntudattal** rendelkező megfigyelő megfigyeli a rendszert.

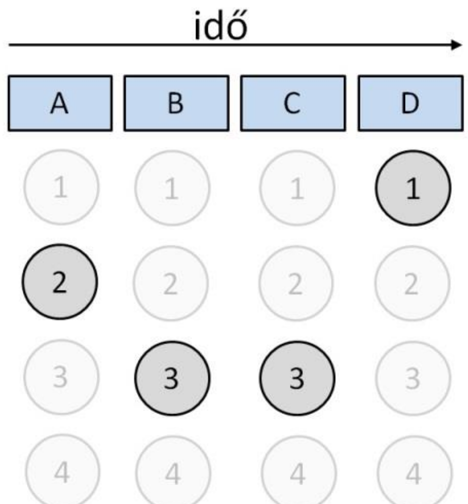
<u>Wigner:</u>
Rendben, de akkor ha egy barát egy dobozon belül kinyitja a macska dobozát, mi lesz?
Barát szerint a macska hullámfüggvénye összeomlott.
Wigner szerint még nem!
Pl. ha Wigner nagyon messziről kamerán keresztül figyeli az eseményt.
Amíg a jel oda nem ér hozzá, addig a hullámfüggvény szerinte nem omlott össze.
<u>Ellentmondás a két objektív valóság között!</u>

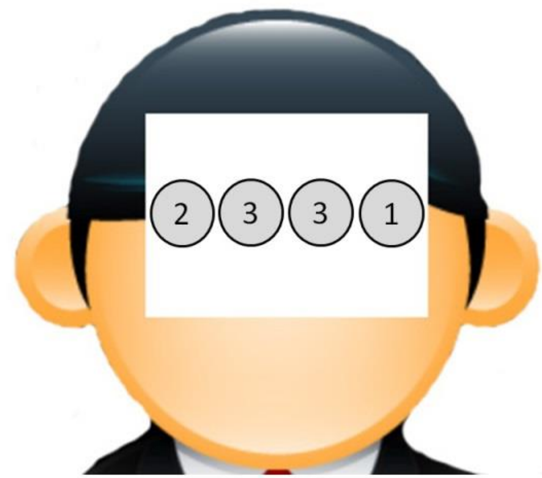




Sokvilág hipotézis

Megfigyelő egymás utáni méréseket végez a rendszeren: A, B, C, D
Lehetséges eredmények minden alkalommal: 1, 2, 3, 4.
A megfigyelő memóriája minden alkalommal 4 féle értéket rögzíthet, de egyszerre csak egynek lehet tudatában.





Koppenhágai értelmezés (**Bohr**): a megfigyelő memóriája az egyik értéket rögzíti véletlenszerűen, a többi csak lehetőség volt, de nem valósult meg.
Oxfordi értelmezés (**Everett**): minden lehetséges memóriakonfiguráció megvalósul.

Az események alternatív módon történő megvalósulása és a megfigyelő alternatív memóriakonfigurációi **alternatív világokat** jelentenek a megfigyelő számára!

Kvantum orosz rulett és kvantum halhatatlanság

<u>Öntudat:</u>
A megfigyelő saját testén végez megfigyelést, és ennek eredménye rögzül a memóriájába.
A megfigyelés eredménye <u>nulla</u> valószínűséggel lehet az, hogy a teste halott!

https://ojs.uni-miskolc.hu/index.php/multi/article/view/646/404

atom spinje
fel vagy le

mérési
eredmény:
fel

mérési
eredmény:
le

BUMMM!

KLICK

KLICK
KLICK
KLICK
KLICK
KLICK
KLICK
KLICK
KLICK
KLICK
...

Az egyik univerzumban a megfigyelő mindig életben marad, tehát halhatatlan!