

Kvantummechanika II.



KVANTUMMECHANIKA

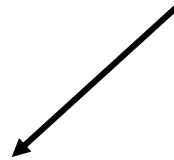


„NINCS KIRÁLYI ÚT!”

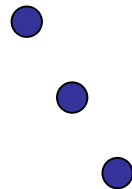
8. előadás

Axiómák

- A. A Schrödinger-egyenlet
- B. $|\Psi(\vec{r}, t)|^2 dV$ annak a valószínűségét adja, hogy a pontszerű elektron az helyvektor dV környezetében megtalálható.
- C. Az állapotok szuperpozíciójának az elve.



Hullámokra "működik"...



...és részecskékre?...

Állapotok szuperpozíciója I.

EMH-ra láttuk:

$$E = E_1 + E_2$$

Inkoherens hullámokra:

$$I_{12} = I_1 + I_2$$

Koherens hullámokra:

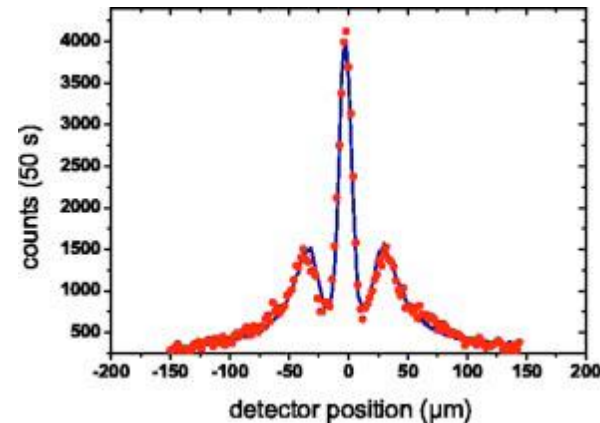
$$I_{12} = I_1 + I_2 + 2\sqrt{I_1 I_2} \cos \varphi$$

$$\Psi = c_1 \cdot \Psi_1 + c_2 \cdot \Psi_2$$



C60 molekula

átalgssebesség 200 m/s
rés szélessége 50nm



A **C60** molekulával végzett
kétréses kísérlet interferencia képe.

Állapotok szuperpozíciója II.

$$\Psi = c_1 \cdot \Psi_1 + c_2 \cdot \Psi_2$$

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

$$P = |\Psi|^2 = (c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2)^*(c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2)$$

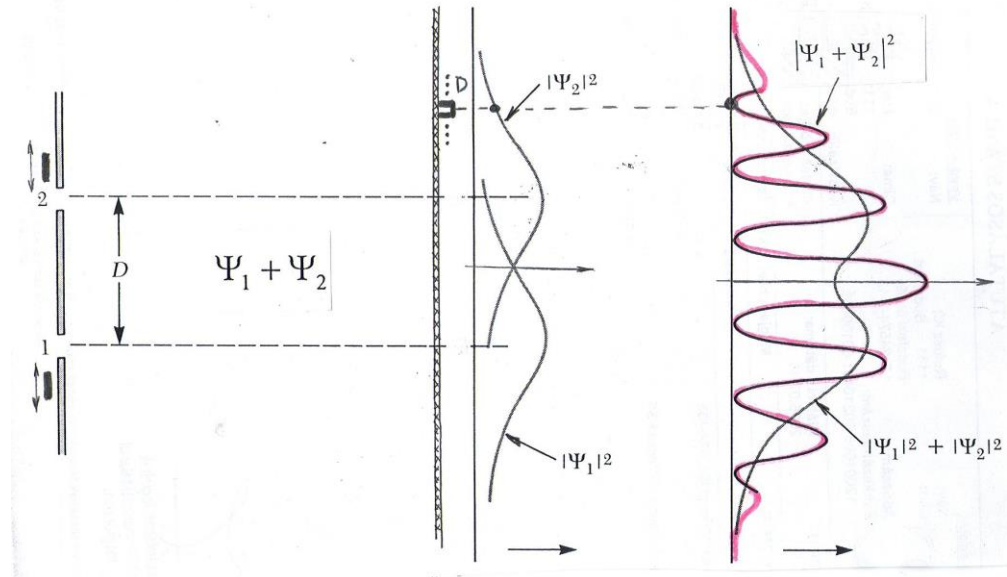
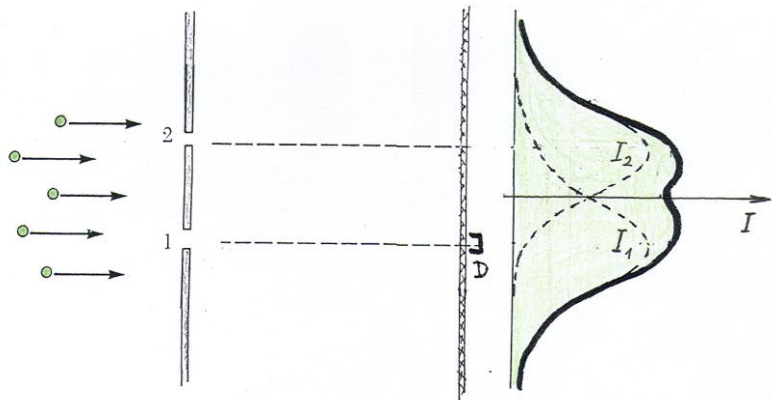
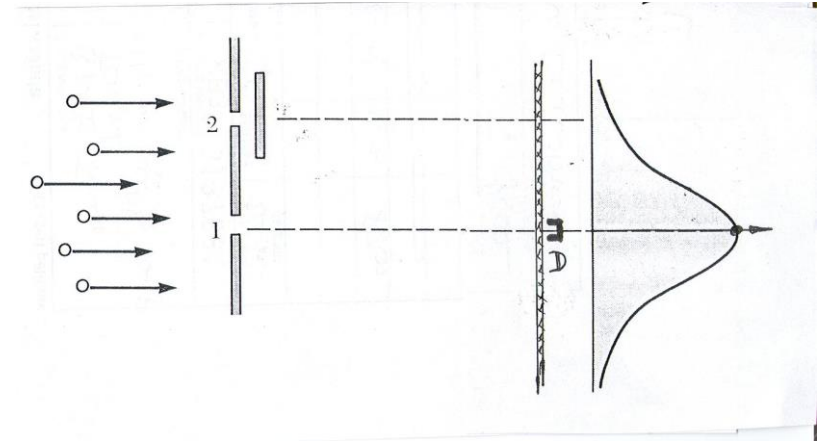
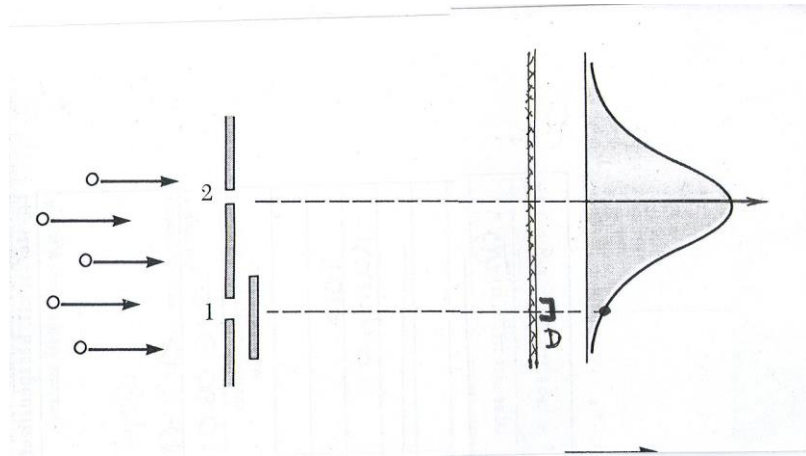
$$P = |c_1|^2|\Psi_1|^2 + |c_2|^2|\Psi_2|^2 + \text{Re}\{c_1^*c_2\Psi_1^*\Psi_2\}$$

$$P = |c_1|^2 P_1 + |c_2|^2 P_2 + \text{Re}\{c_1^*c_2\Psi_1^*\Psi_2\}$$

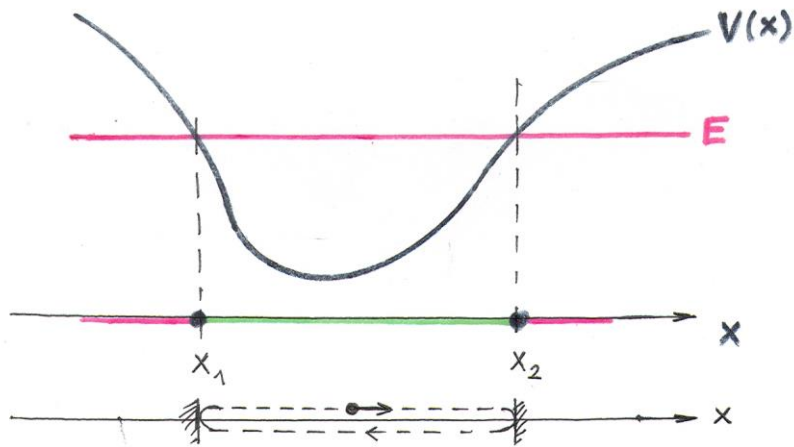


Interferencia

Állapotok szuperpozíciója III.

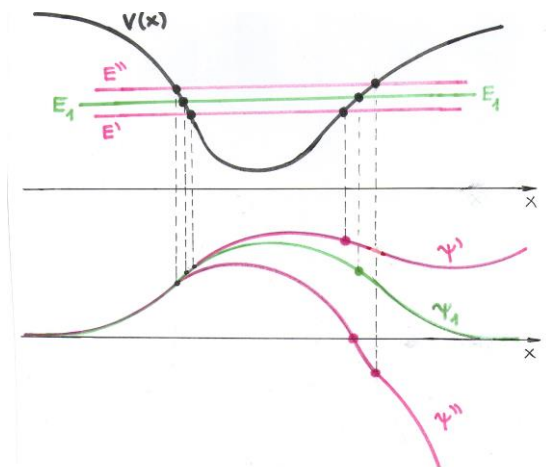
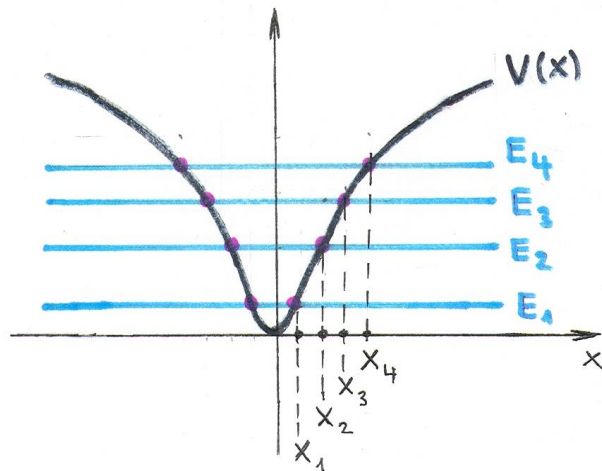
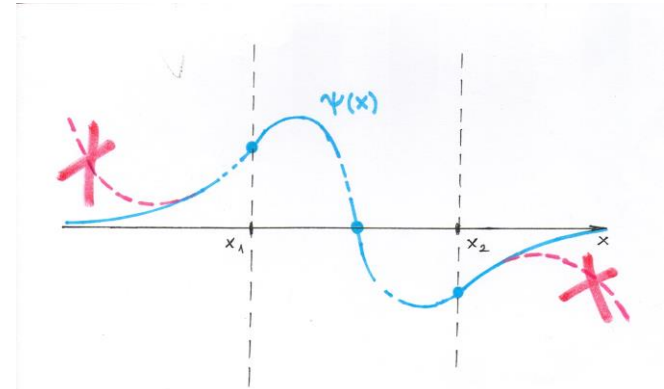
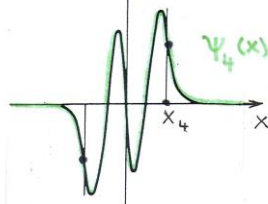
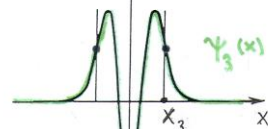
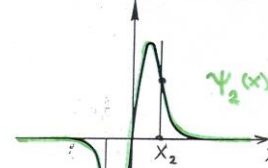
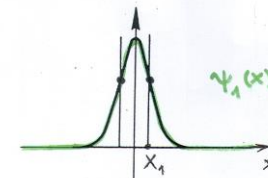


A hullámfüggvény matematikai tulajdonságai



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

$$\psi'' = \frac{2m}{\hbar^2}\cdot[V(x) - E]\cdot\psi$$

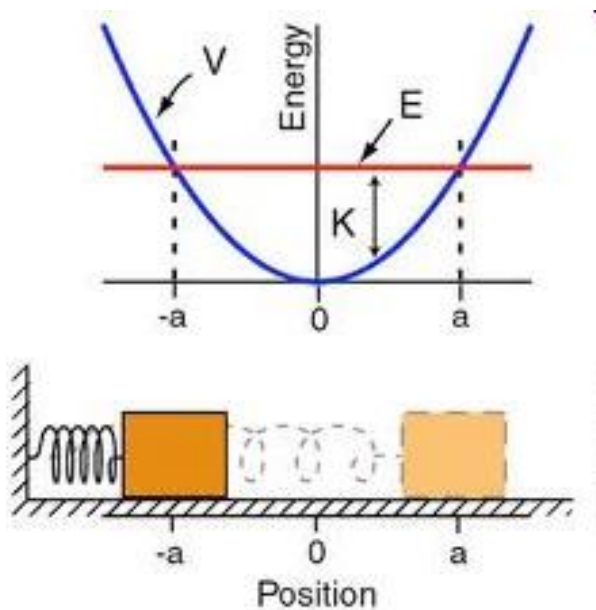


A harmonikus oszcillátor I.

A "kvantummechanika" **Max Planck** – al kezdődött (1900)

$$\Delta E = h\nu$$

Klasszikus harmonikus oszcillátor:



$$E = \frac{1}{2} m \dot{x}^2 + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2$$

$$x(t) = a \cdot \sin(\omega t + \alpha)$$

$$\dot{x}(t) = a \omega \cdot \cos(\omega t + \alpha)$$

$$E = \frac{1}{2} m \omega^2 a^2$$

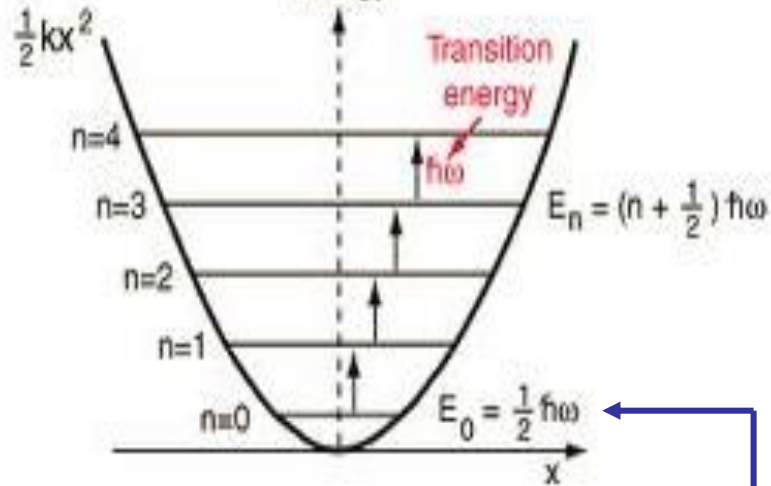
A klasszikus oszcillátor energiája folytonosan változhat!!!

A harmonikus oszcillátor II.

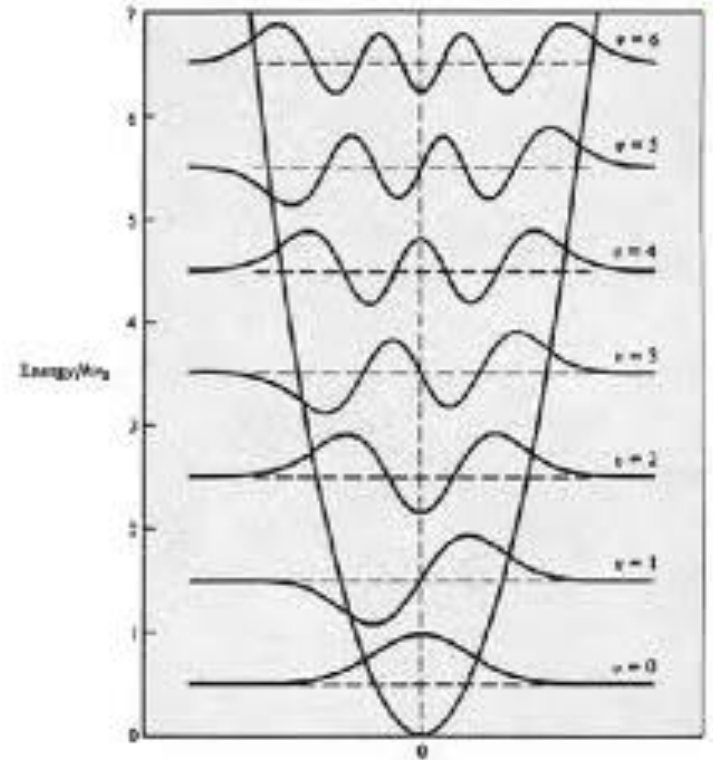
$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \psi = E \cdot \psi$$

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

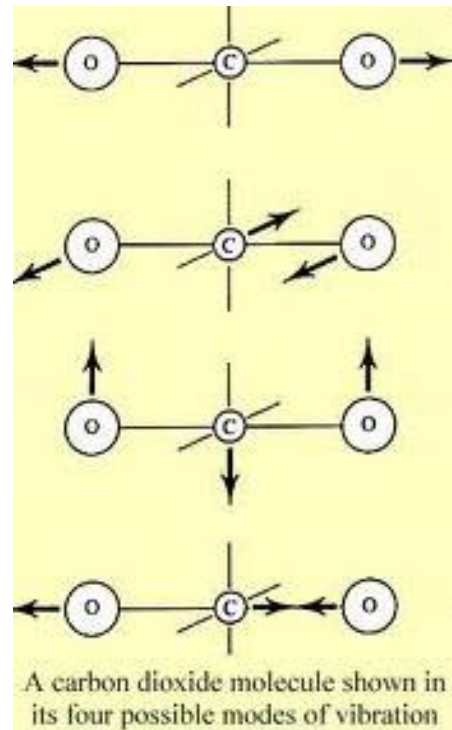
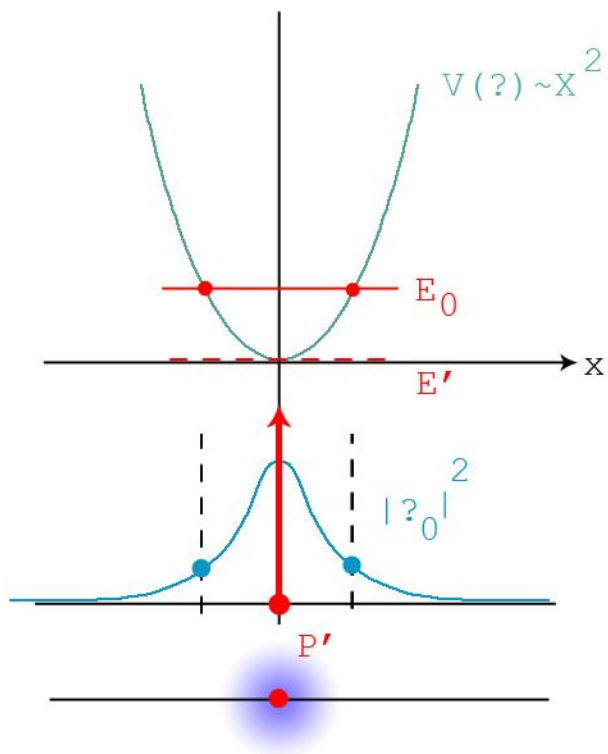
Potential energy
of form



nullponti energia=alapállapot energiája



A harmonikus oszcillátor III.

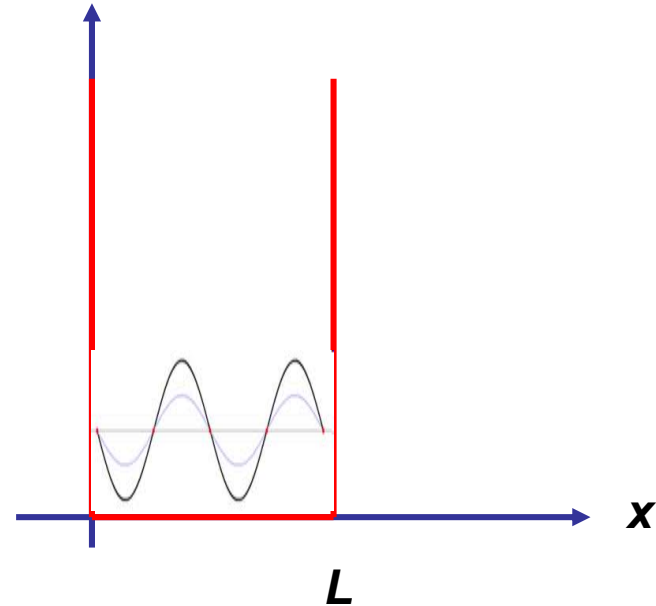


Alkalmazás: molekula rezgés, kristályrács rezgései, stb.

Az egydimenziós potenciáldoboz

$$V(x) = \begin{cases} V_0 \rightarrow \infty & \text{ha } x < 0 \text{ és } x > L \\ 0 & \text{ha } 0 \leq x \leq L \end{cases}$$

$$\psi(x) \equiv 0 \quad \text{ha } x < 0 \text{ vagy } x > L$$



$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi'' + 0 \cdot \psi = E\psi$$

$$\psi'' = -k^2\psi$$

$$\psi_0(x) = A \sin\left(\frac{2\pi}{\lambda} x\right) = A \sin(kx)$$

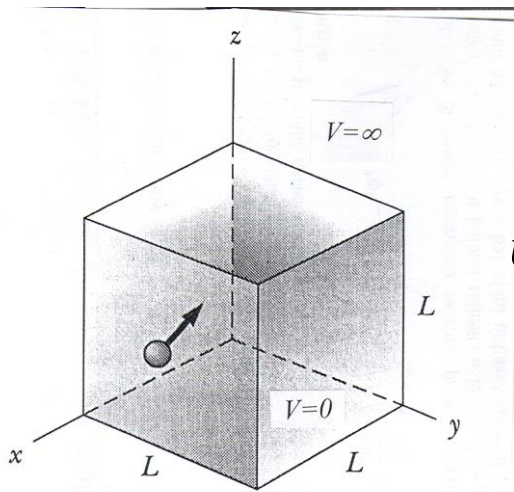
$$E = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} n^2$$

$$E = E_0 n^2$$

Megtalálási valószínűség: $P_{\Delta x}(x) = |\psi_n(x)|^2 \Delta x = \frac{2}{L} \sin^2\left(n \frac{\pi}{L} x\right) \Delta x$

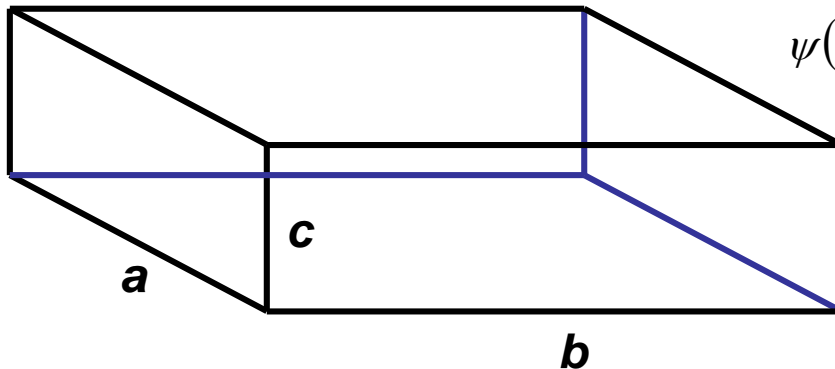
3D potenciáldoboz és az állapotok grafikus ábrázolása I.

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



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

$$E = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2) \quad n_x, n_y, n_z = 1, 2, 3, \dots$$

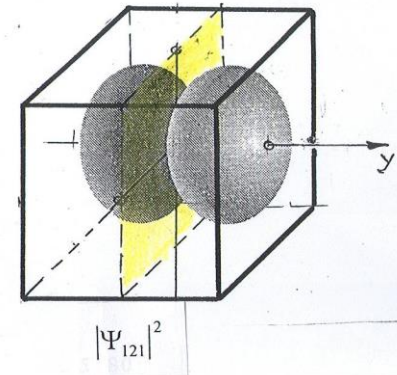
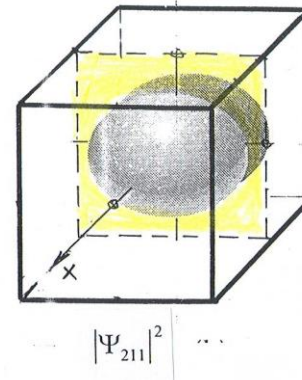
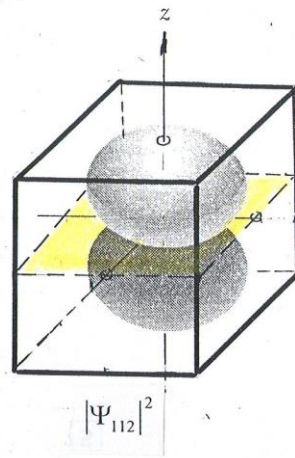
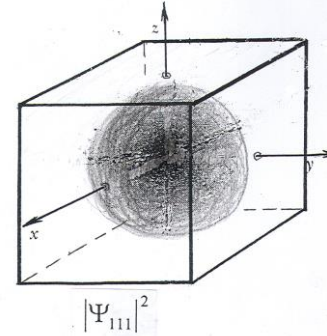


$$\psi(x, y, z) = \sqrt{\frac{8}{abc}} \cdot \sin\left(\frac{n_x \pi}{a} x\right) \cdot \sin\left(\frac{n_y \pi}{b} y\right) \cdot \sin\left(\frac{n_z \pi}{c} z\right)$$

$$E = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m} \left(\frac{n_x^2}{a^2} + \frac{n_y^2}{b^2} + \frac{n_z^2}{c^2} \right)$$

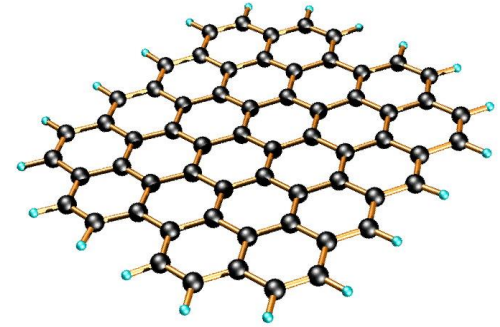
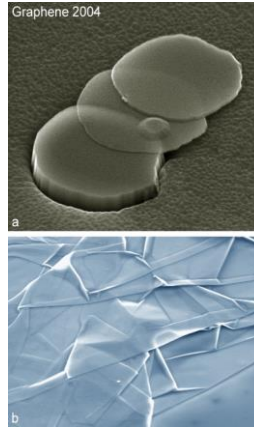
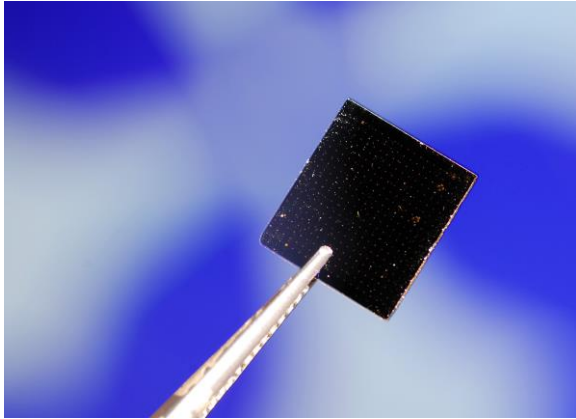
3D potenciáldoboz és az állapotok grafikus ábrázolása II.

ψ	n_x	n_y	n_z	E
ψ_{111}	1	1	1	$3E_0$
ψ_{211}	2	1	1	$6E_0$
ψ_{121}	1	2	1	$6E_0$
ψ_{112}	1	1	2	$6E_0$
ψ_{122}	1	2	2	$9E_0$
ψ_{212}	2	1	2	$9E_0$
ψ_{221}	2	2	1	$9E_0$
ψ_{311}	3	1	1	$11E_0$
ψ_{131}	1	3	1	$11E_0$
ψ_{113}	1	1	3	$11E_0$
ψ_{222}	2	2	2	$12E_0$



$$E = E_0 \left(n_x^2 + n_y^2 + n_z^2 \right)$$

A kétdimenziós elektrongáz



$$E = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m} \left(\frac{n_x^2}{a^2} + \frac{n_y^2}{b^2} + \frac{n_z^2}{c^2} \right)$$

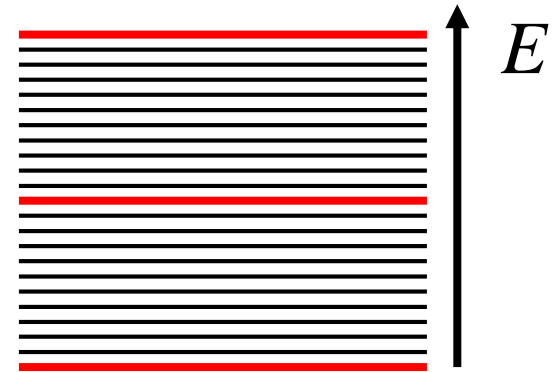


Andre Geim
1958



Konstantin Novoselov
1974

$$c \ll a, b$$



Fizikai Nobel Díj 2010

„ ... a kétdimenziós „grafénnel”
kapcsolatos úttörő kísérleti
munkásságukért.”

A szabadon mozgó elektron hullámfüggvénye

Dobozba zárt részecske: $\psi(x) = A \sin\left(\frac{2\pi}{\lambda} x\right) = A \sin(kx)$

Szabad részecske: $L \rightarrow \infty$

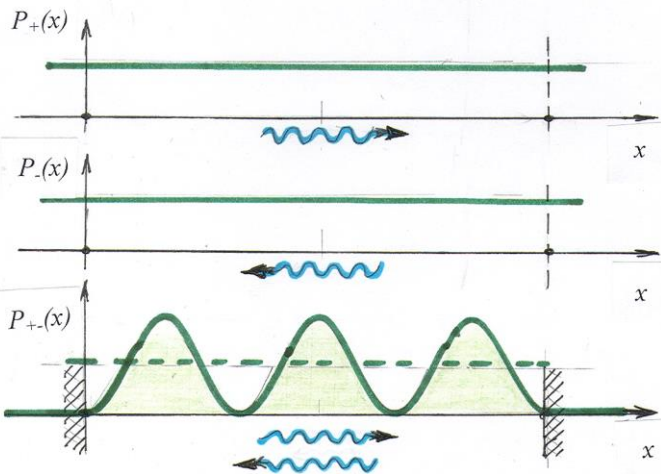
$\tilde{\psi}(x, t) = \varphi(x)e^{-i\omega t} \rightarrow |\tilde{\psi}(x, t)|^2 = |\varphi(x)|^2$

$\tilde{\psi}(x) = Ae^{ikx}$

$\tilde{\psi}_1(x, t) = Ae^{-ikx} e^{i\omega t} = Ae^{i(-kx + \omega t)}$

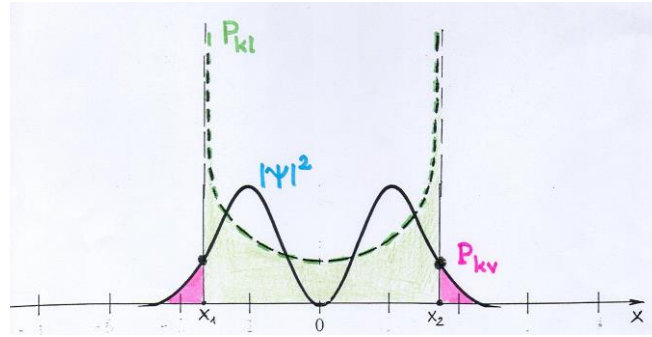
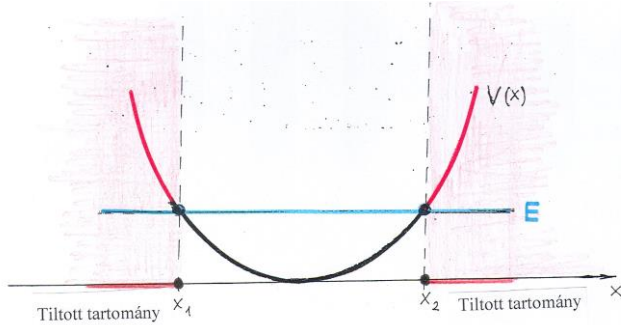
$\tilde{\psi}_2(x, t) = Ae^{ikx} e^{i\omega t} = Ae^{i(kx + \omega t)}$

$\tilde{\psi}(x, t) = \tilde{\psi}_1(x, t) + \tilde{\psi}_2(x, t) = Ae^{i\omega t} (e^{ikx} - e^{-ikx})$



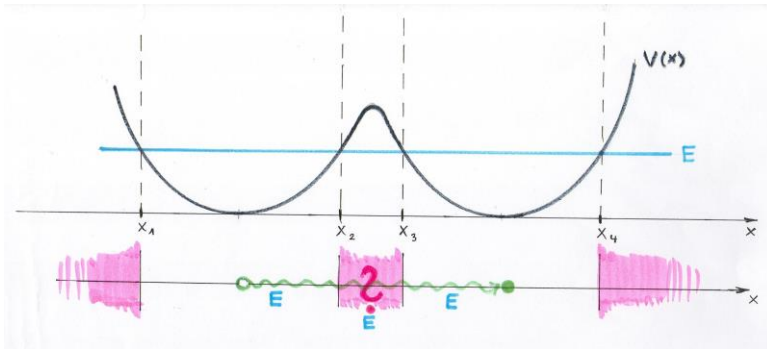
$P_{-+} = |\psi|^2 = A^2 \sin^2(kx) \xrightarrow{L \rightarrow \infty} \text{Értelmezés???$

Az alagúteffektus I.

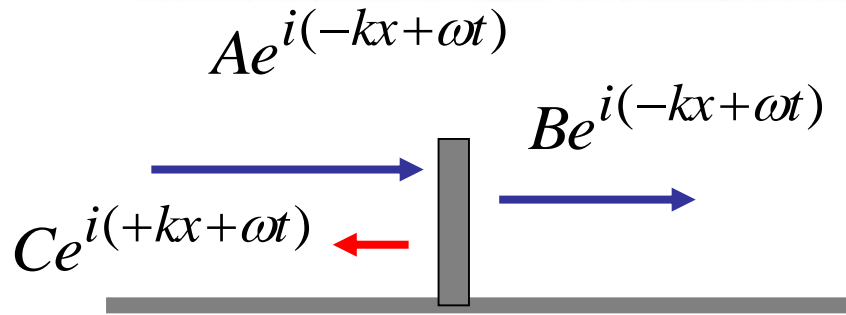
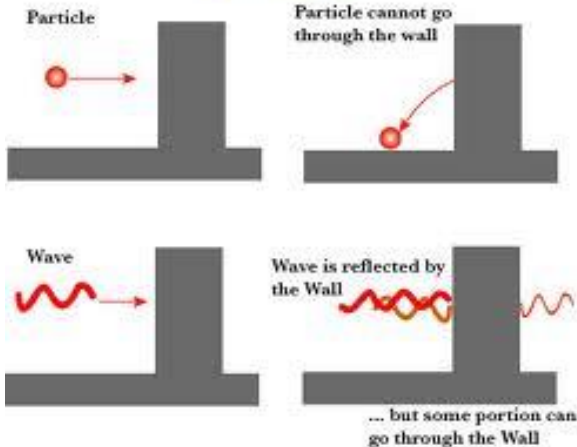
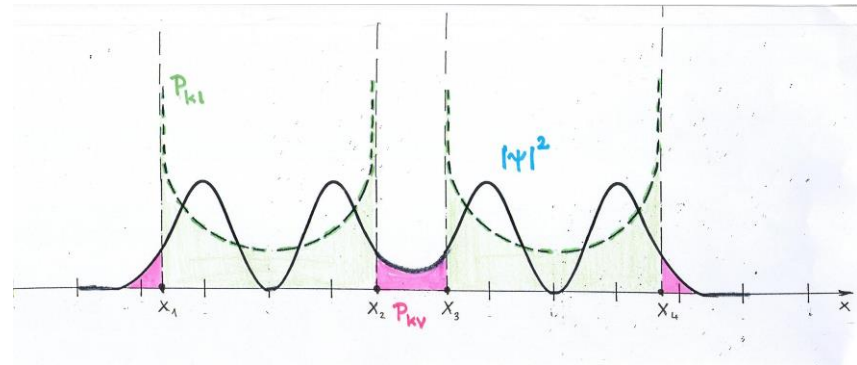


$$\int_{-\infty}^{x_1} |\psi(x)|^2 dx > 0$$

$$\int_{x_2}^{+\infty} |\psi(x)|^2 dx > 0$$



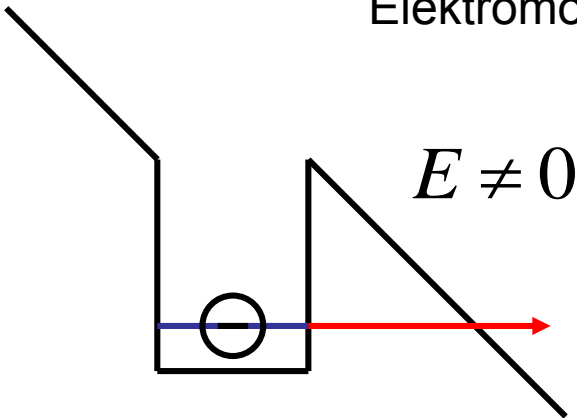
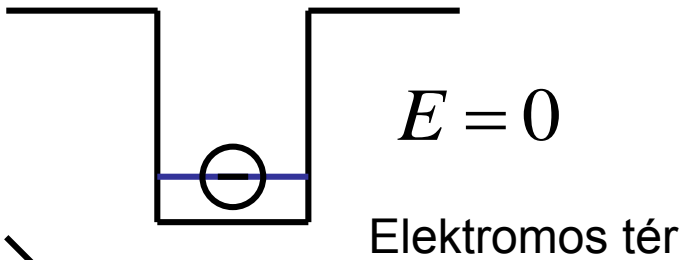
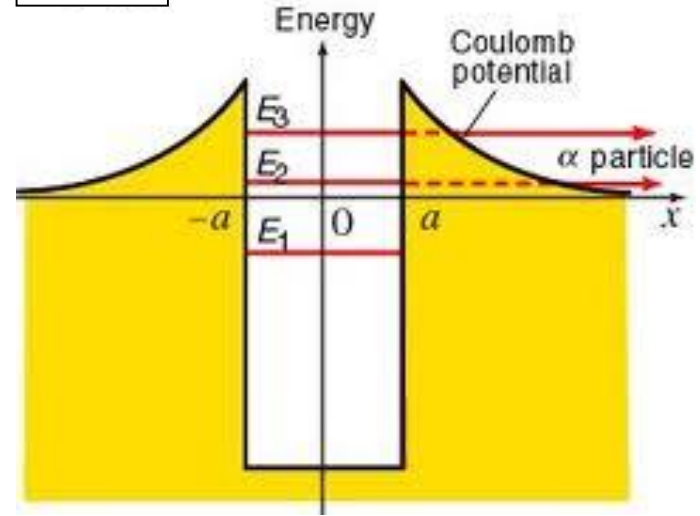
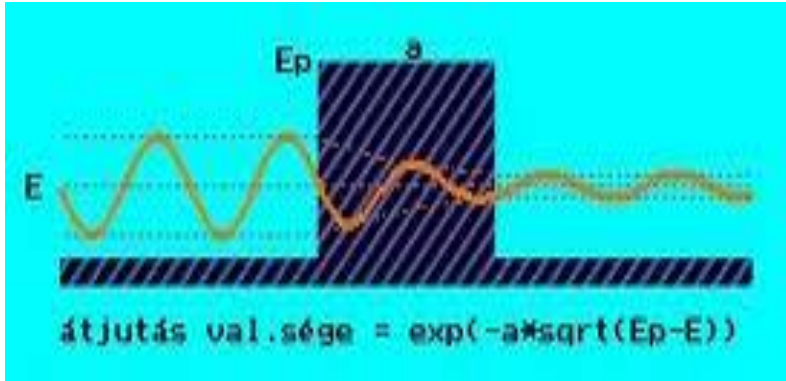
TUNNEL EFFECT



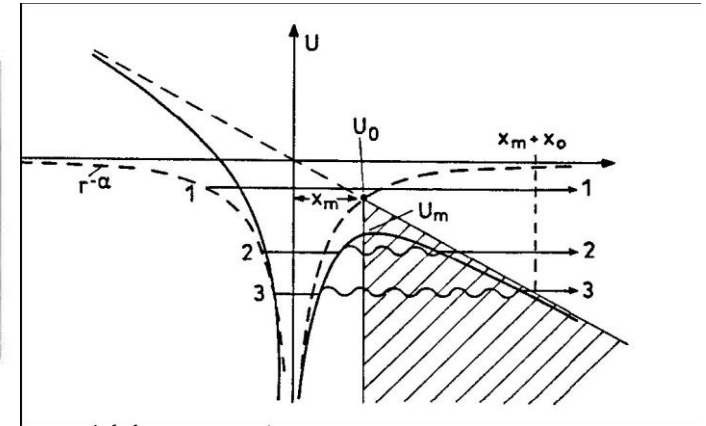
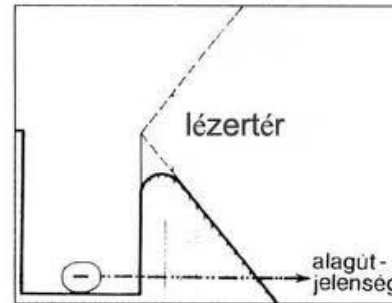
$$R = \left| \frac{C}{A} \right|^2$$

$$T = \left| \frac{B}{A} \right|^2$$

Az alagúteffektus II.

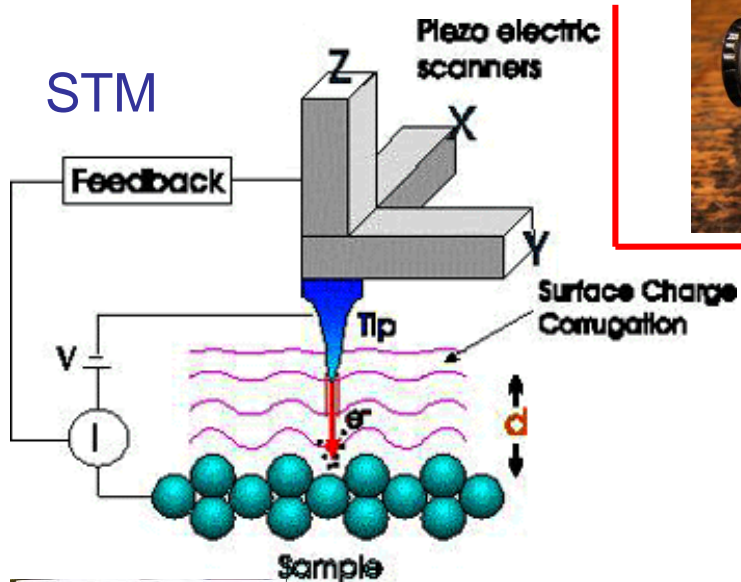


Hidegemisszió



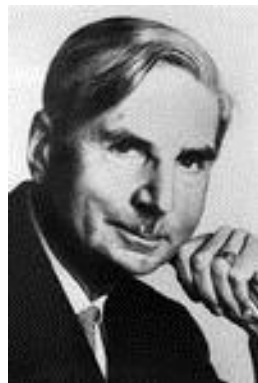
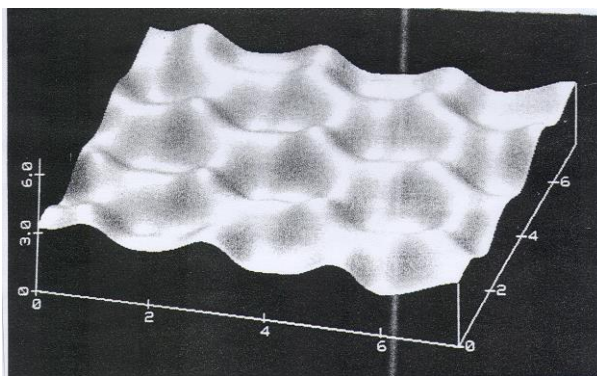
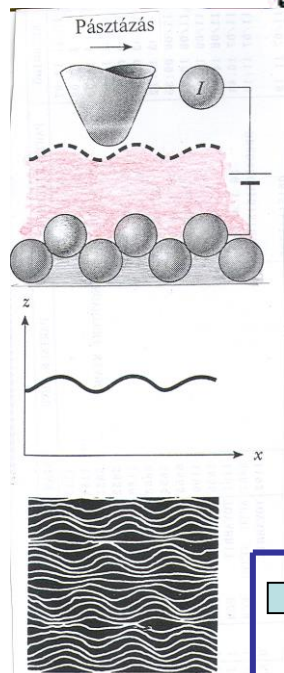
Lézer-indukált ionizáció

Az alagúteffektus III.



Fém-félvezető dióda
1938

Walter Hermann Schottky
Német kutató fizikus
(1886-1976)



Leo Esaki (1925-)
Nobel-díj:1973

Egyetemi Tanulmányit Tokióban végezte. Doktori dolgozata a Sony cégnél, 1957-ben folytatott kísérleti munkájának a feldolgozása és értékelése volt. Ez az erősen adalékolt germánium p-n átmenetében létrehozott alagúteffektusról szólt. Ezek az eredmények alapozták meg az „alagútdióda” létrejöttét.

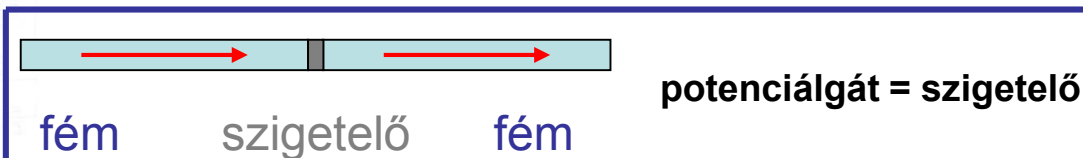
A megosztott Nobel díjat:

„a félvezetőkben lévő alagút-jelenségekkel kapcsolatos kísérleti felfedezésekért”

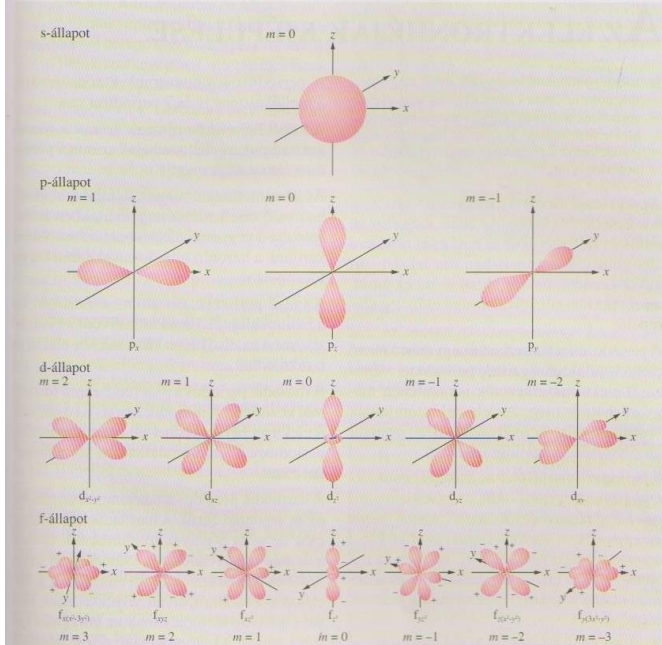
kapta 1973-ban.

Partnerei (I.Giaever és B.D.Josephson)

a szupravezetőkben zajló alagúteffektusokkal kapcsolatos kísérleti és elméleti munkát végezték.



A H-atom I.



27.1. Az s, p, d és az f atomi elektronpályák alakja és ezek térbeli iránya (amelyet a mágneses kvantumszámok fejeznek ki)

Kémia 9. oszt.

A főkvantumszám és a héjak közötti kapcsolat:

főkvantumszám: 1 2 3 4 5
a héj jelölése: K L M N O

A *mellékvantumszám* az atompálya térbeli alakját jellemzi. Az elektron energiája az atompálya térbeli alakjától is függ. Jele: l . Értéke: 0, 1, 2, ..., $n-1$ közötti egész szám lehet. A mellékvantumszámok értékeit általában betűkkel jelöljük. A számok és a betűk közötti kapcsolat a következő:

$l = 0, 1, 2, 3$ számokkal
s, p, d, f betűkkel jelölve.

Egy adott héjon belül az azonos mellékvantumszámú pályák alhéjakat képeznek.

A *mágneses kvantumszám* a mellékvantumszám által meghatározott alakú atompálya térbeli irányát adja meg. Jele: m . Értéke: $-l$ -től $+l$ -ig minden egész szám. Minél bonyolultabb a pálya, annál többféleképpen helyezkedhet el a mágneses térben (26.1. ábra). Így egy adott főkvantumszám esetén az s pályából csak egy ($m = 0$), p-pályából ($m = -1, 0, +1$) három, d-pályából ($m = -2, -1, 0, +1, +2$) öt, az f-pályából ($m = -3, -2, -1, 0, +1, +2, +3$) hét létezik.

A *spinkvantumszám* az elektron mágneses saját-ságaira (amelyet az atomból kiszakítva is megőríz) ad felvilágosítást. Jele: m_s . Kétféle értéket vehet fel. Értéke: $+\frac{1}{2}$, vagy $-\frac{1}{2}$.

Az atomban az atompályák egy számhármassal jellemezhetők (a fő-, a mellék- és a mágneses kvantumszám). Az azonos főkvantumszámú pályák elektronhéjat alkotnak.

Egy elektronhéjon belül az azonos alakú pályákon levő elektronok **alhéjak** alkotnak. Az egy alhéjhoz tartozó atompályák energiája megegyezik.

A kvantumszámok összefüggései:

- K héjnak 1 alhéja van: az 1s
- L héjnak 2 alhéja van: a 2s és a 2p
- M héjnak 3 alhéja van: a 3s, a 3p és a 3d
- N héjnak 4 alhéja van: a 4s, a 4p, a 4d és a 4f

Minden héjhoz tartozik egy gömbszimmetrikus (s) atompálya. Az atommaghoz legközelebb van a legkisebb energiájú, $1s_0$ atompálya, ami az első héjat (K) alkotja. A következő ilyen alakú a $2s_0$, majd a $3s_0, 4s_0, 5s_0, \dots$ pályák, amelyek átmérőjükben különböznek egymástól.

A 2. héjon (L) tengelyszimmetrikus p-pályák is vannak. Ezek elrendezése térbeli nyolcas-ként képzelhető el. A térben három egymásra merőleges forgástengely van, ezért egy héjon maximum három p-pálya lehet. A második héjat tehát 1 db s és 3 db p-pálya alkotja ($2s_0, 2p_{-1}, 2p_0, 2p_{+1}$).

Főkvantumszám	Mellékvantumszám	Mágneses kvantumszám	Alhéj jelölés	Spin-kvantumszám	Elektronok max. száma
1	0	0	1s	$-\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}$	2
2	0	0	2s	$-\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}$	8
	1	-1, 0, +1	2p	$-\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}$	
3	0	0	3s	$-\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}$	18
	1	-1, 0, +1	3p	$-\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}$	
	2	-2, -1, 0, +1, +2	3d	$-\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}$	
4	0	0	4s	$-\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}$	32
	1	-1, 0, +1	4p	$-\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}$	
	2	-2, -1, 0, +1, +2	4d	$-\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}$	
	3	-3, -2, -1, 0, +1, +2, +3	4f	$-\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}$	

27.1. A kvantumszámok lehetséges értékei

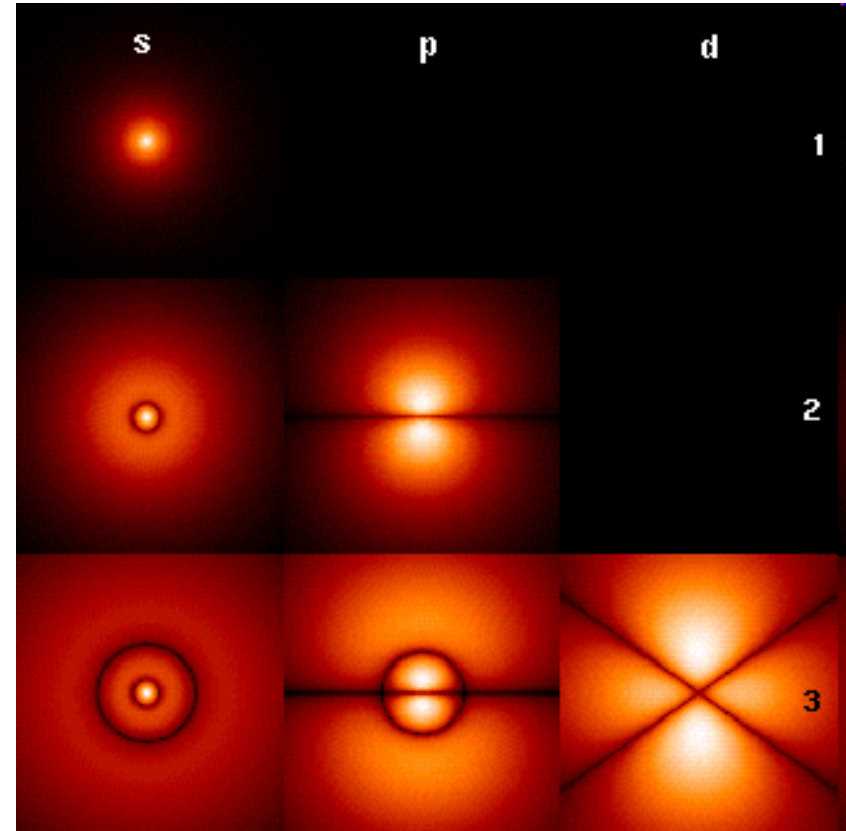
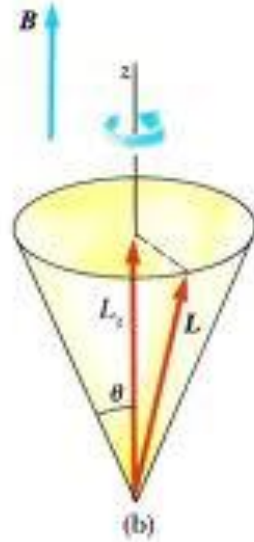
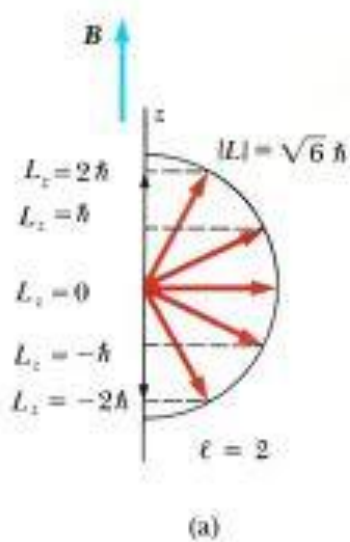
A H-atom II.

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi + \left(-\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{1}{r} \right) \cdot \psi = E \cdot \psi$$

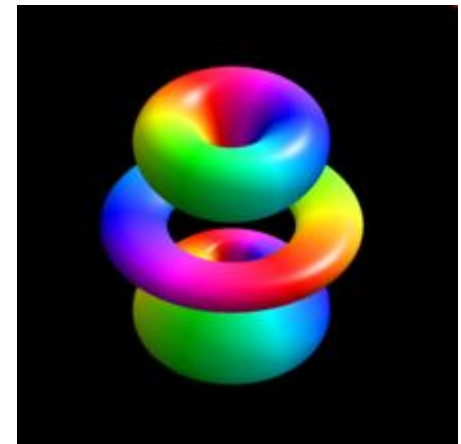
$$\psi_{n,l,m} \rightarrow E_n = -\frac{13.6\text{eV}}{n^2}$$

$$L = \hbar \sqrt{l(l+1)} \quad l = 0, 1, 2, \dots, (n-1)$$

$$L_z = \hbar m_l \quad m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$$

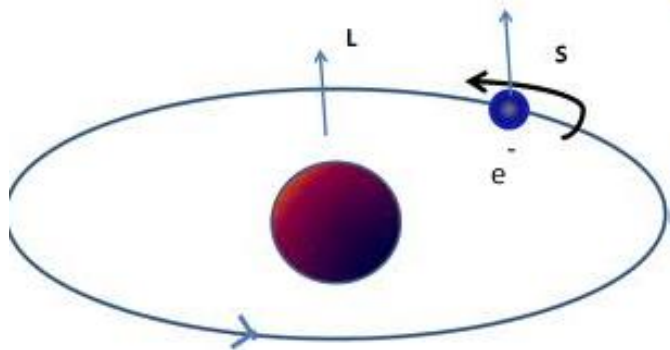
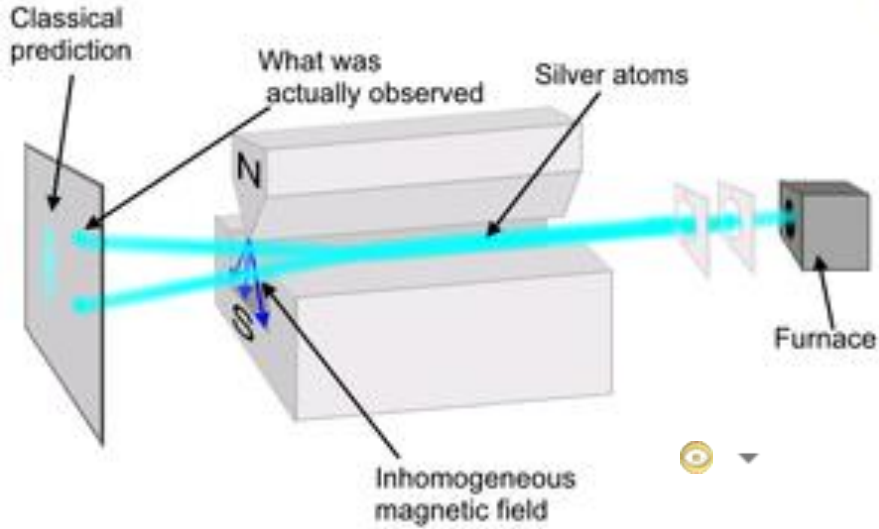


$$P(\vec{r}) = |\psi_{4,3,1}|^2$$

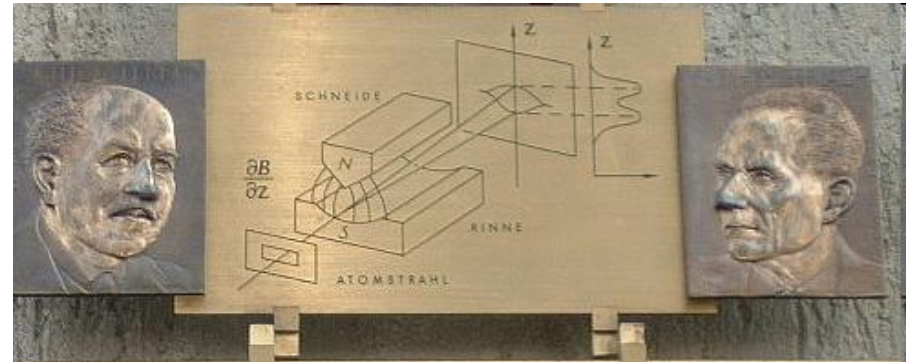
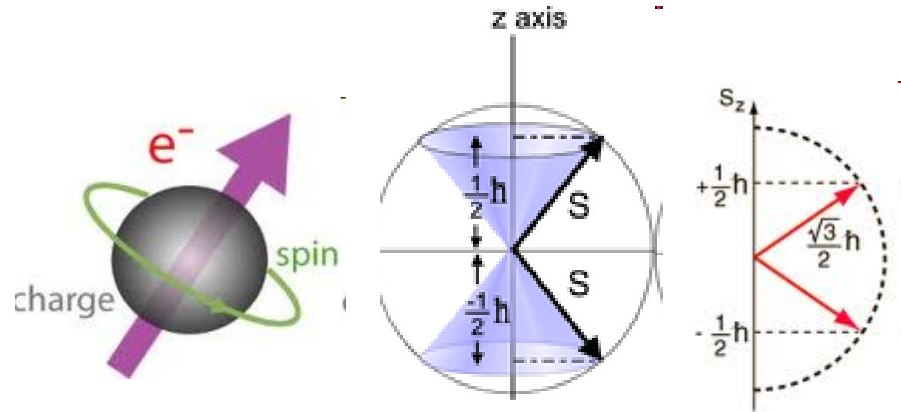


Az elektronspin

Stern–Gerlach-kísérlet



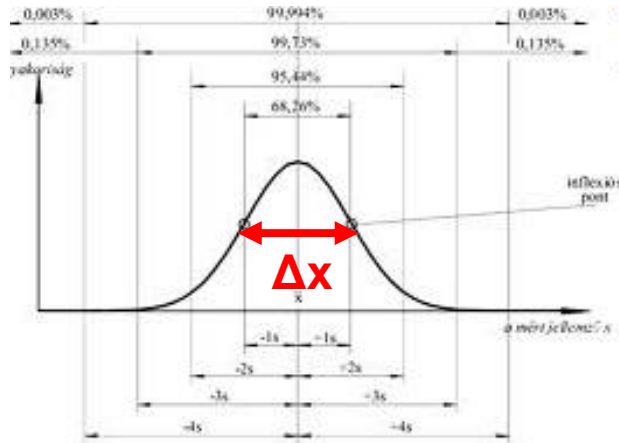
$$\Psi_{n,l,m} \rightarrow \Psi_{n,l,m,s}$$



IM FEBRUAR 1922 WURDE IN DIESEM GEBÄUDE DES PHYSIKALISCHEN VEREINS, FRANKFURT AM MAIN, VON OTTO STERN UND WALTHER GERLACH DIE FUNDAMENTALE ENTDECKUNG DER RAUMQUANTISIERUNG DER MAGNETISCHEN MOMENTE IN ATOMEN GEMACHT. AUF DEM STERN-GERLACH-EXPERIMENT BERUHEN WICHTIGE PHYSIKALISCH-TECHNISCHE ENTWICKLUNGEN DES 20. JHDTS., WIE KERNSPINRESONANZMETHODE, ATOMUHR ODER LASER. OTTO STERN WURDE 1943 FÜR DIESE ENTDECKUNG DER NOBELPREIS VERLIEHEN.

A Heisenberg-féle határozatlansági reláció

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$$

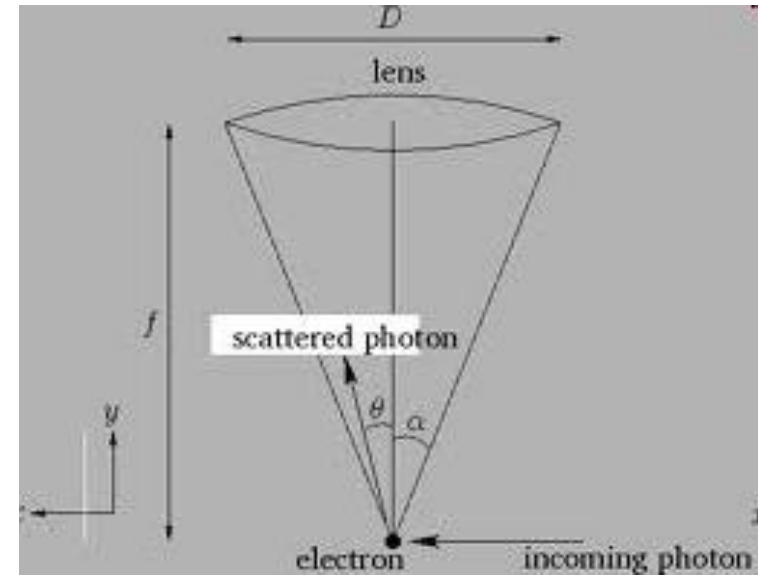


$$\Delta E \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}$$

Gerjesztés élettartama → nívó kiszélesedése

Isten nem kockázik...

De igen...!!!



Mikroszkóp felbontása:

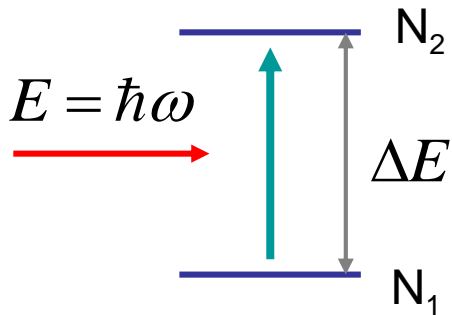
$$\Delta x = \frac{0.61\lambda}{\sin \alpha}$$

A foton által meglökött elektron impulzusbizonytalansága:

$$\Delta p = p \sin \alpha = \frac{h}{\lambda} \sin \alpha$$

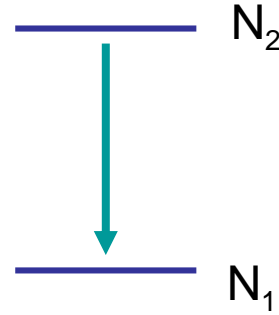
Csak szemléltetés, nem bizonyítás!!!

A lézer I.



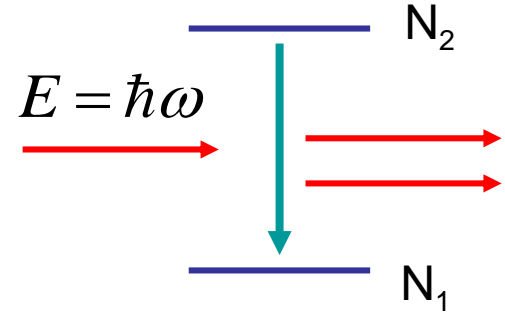
abszorpció

$$dN_{12} = B_{12}g_\nu N_1 dt$$



spontán emisszió

$$dN'_{21} = A_{12}N_2 dt$$



indukált emisszió

$$dN''_{21} = B_{21}g_\nu N_2 dt$$

Termikus egyensúly:

$$dN_{12} = dN'_{21} + dN''_{21}$$

$$B_{12} = B_{21}$$

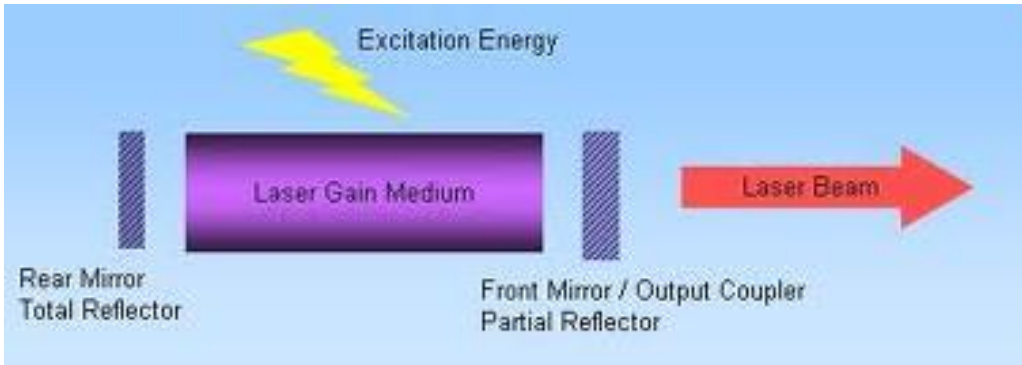
$$\frac{A_{21}}{B_{12}} = \frac{h\nu^3 \pi}{c^3}$$

$$g_\nu = A \cdot \frac{h\nu^3}{\exp\left\{\frac{h\nu}{k_B T}\right\} - 1}$$

Nagy energiájú fotonok esetén a spontán emisszió dominál!

A lézer II.

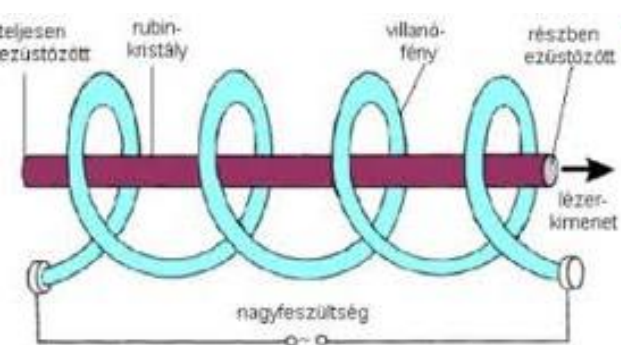
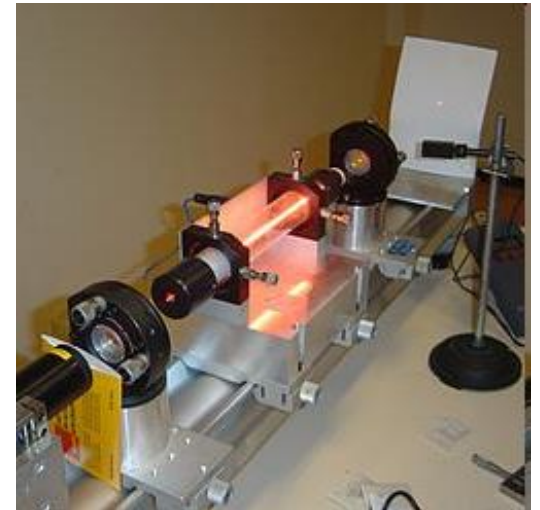
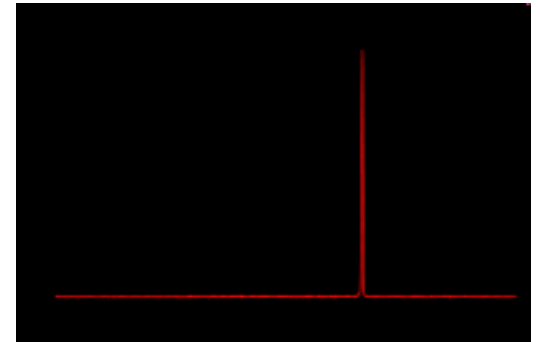
Első lézer: 1960



félvezető-lézer

szilárdtest-lézer

gáz-lézer



Legrövidebb
impulzus: $\approx 5\text{fs}$
attoszekundumos imp.

Lézerintenzitás:

1960: 10^{10} W/cm^2

1980: 10^{15} W/cm^2

2000: 10^{20} W/cm^2

2015: ELI 10^{25} W/cm^2

A kvantumradír

