Bevezetés a modern fizika fejezeteibe

4. (b)

Kvantummechanika

Utolsó módosítás: 2013. november 9.

Dr. Márkus Ferenc
BME Fizika Tanszék

A legkisebb hatás elve (1)

A legkisebb hatás elve (Hamilton-elv):

$$S = \int_{t_1}^{t_2} L(q_i, \dot{q}_i, t)\ dt = extremum$$

S: a hatás
L: Lagrange-függvény

Dr. Márkus Ferenc
BME Fizika Tanszék

A legkisebb hatás elve (2)

A hatás variációja:

$$\delta S = \int_{t_1}^{t_2} \left(\frac{\partial L}{\partial q_i} \delta q_i + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \delta \dot{q}_i \right) dt$$

$$= \left[\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \delta q_i \right]_{t_1}^{t_2}$$

$$+ \int_{t_1}^{t_2} \left(\frac{\partial L}{\partial q_i} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \right) \delta q_i dt$$

Dr. Márkus Ferenc
BME Fizika Tanszék

A legkisebb hatás elve (3)

A mozgásegyenlet (Euler-Lagrange-egyenlet):

$$\frac{\partial L}{\partial q_i} - \frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} = 0$$

Az általános impulzus:

$$p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}$$

A legkisebb hatás elve (4)

Az impulzust az Euler-Lagrange-egyenletbe helyettesítve:

$$\dot{p}_i = \frac{\partial L}{\partial q_i}$$

Képezzük a Lagrange-függvény teljes differenciálját:

$$dL = \frac{\partial L}{\partial t} dt + \frac{\partial L}{\partial q_i} dq_i + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} d\dot{q}_i$$
$$= \frac{\partial L}{\partial t} dt + (\dot{p}_i dq_i + p_i d\dot{q}_i)$$

A legkisebb hatás elve (5)

Az alábbi átalakítást figyelembe véve:

$$p_i d\dot{q}_i = d(p_i \dot{q}_i) - \dot{q}_i dp_i$$

Így a teljes differenciál átírható:

$$d(p_i \dot{q}_i - L) = -\frac{\partial L}{\partial t} dt - (\dot{p}_i dq_i - \dot{q}_i dp_i)$$

Az összefüggés segítségével definiálható a Hamilton-függvény $H(q_i,p_i,t)$, amely már csak a q_i általánosított hely és p_i impulzus-koordináták függvénye:

$$H = p_i \dot{q}_i - L$$

A legkisebb hatás elve (6)

Képezve a Hamilton-függvény teljes differenciáját:

$$dH = \frac{\partial H}{\partial t} dt + \frac{\partial H}{\partial q_i} dq_i + \frac{\partial H}{\partial p_i} dp_i$$

Az egyenleteket összevetve kapjuk az ún. kanonikus egyenleteket:

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i}$$

$$\dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i}$$

A legkisebb hatás elve (7)

A (p_i, q_i) változópárok a kanonikusan konjugált mennyiségek. (Ezek „feszítik ki” a fázisteret.) A Lagrange-függvény „jól bevált” alakja

$$L = T - V$$

ahol T a kinetikus energia, V a potenciális energia. A Hamilton-függvény:

$$H = T + V$$

Dr. Márkus Ferenc
BME Fizika Tanszék

Felcserélési relációk (1)

Mi kell ahhoz, hogy el lehessen térni a klasszikus pályától?
A felcserélési relációk:

$$[p_k, q_l] = p_k q_l - q_l p_k = \frac{\hbar}{i} \delta_{kl}$$

$$[p_k, p_l] = p_k p_l - p_l p_k = 0$$

$$[q_k, q_l] = q_k q_l - q_l q_k = 0$$

Dr. Márkus Ferenc
BME Fizika Tanszék

Felcserélési relációk (2)

Ha az általánosított koordinátának a

$$q = x$$

helykoordináta operátorát, az általánosított impulzusnak a

$$p_x = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}$$

$\frac{\hbar}{i}$ -vel szorzott koordináta szerinti differenciálás operátorát választjuk.

Felcserélési relációk (3)

Ezekkel a felcserélési reláció úgy értelmezhető, hogy ezek egy differenciálható függvényre hatnak. Ekkor a lépésenkénti számolás:

$$(p_x x - x p_x)\Psi = \frac{\hbar}{i}\left[\frac{\partial}{\partial x}(x\Psi) - x\frac{\partial \Psi}{\partial x}\right]$$
$$= \frac{\hbar}{i}\left[\Psi + x\frac{\partial \Psi}{\partial x} - x\frac{\partial \Psi}{\partial x}\right] = \frac{\hbar}{i}\Psi$$

De pl. $p_x = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}$ és $p_y = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial y}$ esetén:

$$[p_x, p_y] = -\hbar^2\left(\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x \partial y} - \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y \partial x}\right) = 0$$

a két impulzuskomponens felcserélhető.

A Schrödinger-egyenlet (1)

Konzervatív erőtérben mozgó tömegpontra érvényes a mechanikai energia megmaradása:

$$H(=E)=\frac{p^2}{2m}+V(x,y,z)$$

ahol az impulzus komponensek helyére a fenti differenciál-operátorokat, a potenciál helyére a hellyel való szorzás operátorát írjuk. Így az energia operátora:

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

A Schrödinger-egyenlet (2)

Az energiaoperátorral felírható energia sajátérték egyenlet:

$$H\Psi = E\Psi$$

A differenciáloperátor konkrét alakját beírva a

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

Schrödinger-egyenletet kapjuk. A sajátérték egyenlet megoldása szolgáltatja a rendszer lehetséges energiaszintjeit, a sajátfüggvényeknek a megtalálási valószínűségekhez van közük.

Dr. Márkus Ferenc
BME Fizika Tanszék

A Schrödinger-egyenlet (3)

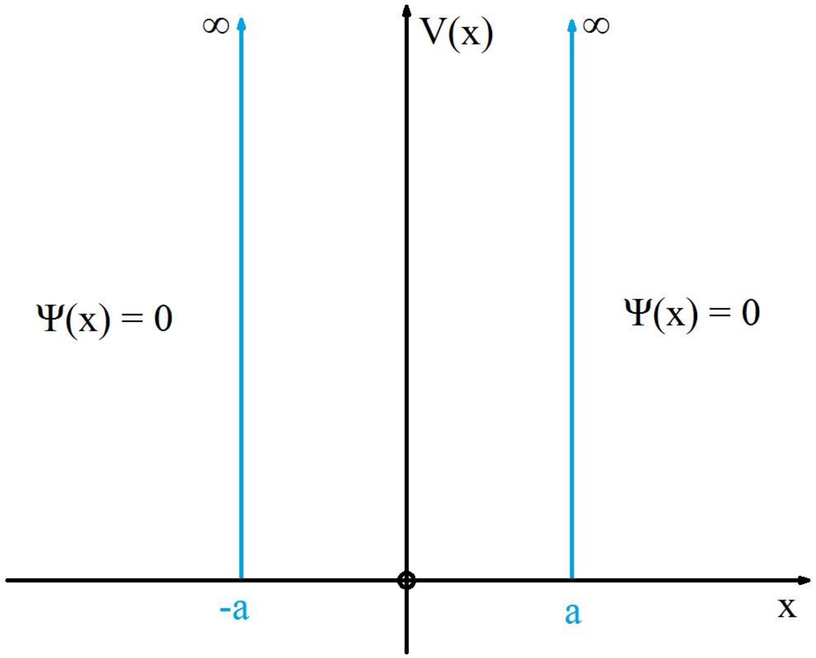
Általában, ha a fizikai mennyiséghez egy operátort rendelünk, jelöljük *O*-val, akkor az

$$O\Psi = \lambda\Psi$$

sajátérték egyenlet reguláris megoldásait keressük $\rightarrow$ sajátértékeket, sajátfüggvényeket. Ennek megfelelően lehetnek pl. impulzus, impulzusmomentum, energia, részecskeszám (!) operátorok, stb.

Végtelen egydimenziós potenciálgödör (1)

Legyen a potenciál $V(x)=0$ a $(-a < x < a)$ intervallumban, míg $V(x)=\infty$ azon kívül. A külső tartományban $\Psi(x)\equiv 0$, az $x = -a$ és $x = a$ helyen lévő potenciálugrásnál a hullám-függvény deriváltja határo-zatlan.



Végtelen egydimenziós potenciálgödör (2)

A Schrödinger-egyenlet a (–*a* < *x* < *a*) intervallumra:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\Psi}{dx^2} = E\Psi$$

A $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$ helyettesítéssel kapjuk $\frac{d^2\Psi}{dx^2} = -k^2\Psi$

Ennek az egyenletnek lehet egy *sin*(*kx*) megoldása a $k = n\frac{\pi}{a}$

a határfeltételt teljesítő megkötés mellett. Míg létezik egy *cos*(*kx*) megoldása a

$$k = \left(n + \frac{1}{2}\right)\frac{\pi}{a}$$

feltétellel.

Végtelen egydimenziós potenciálgödör (3)

A sajátérték sorozat összevonható a

$$k = n\frac{\pi}{2a}$$

kifejezéssel, de emlékezni kell, hogy vagy csak szinuszos vagy koszinuszos hullámfüggvények lehetnek a megoldások! Ezt behelyettesítve és átrendezve az energia sajátértékek

$$E_n = n^2\frac{\pi^2\hbar^2}{8ma^2}$$

lesznek. (A potenciálgödör 2*a* széles!)

Végtelen egydimenziós potenciálgödör (4)

Az eredmény egyszerűen átírható az *a* szélességű potenciálgödörre a $2a \to a$ helyettesítéssel

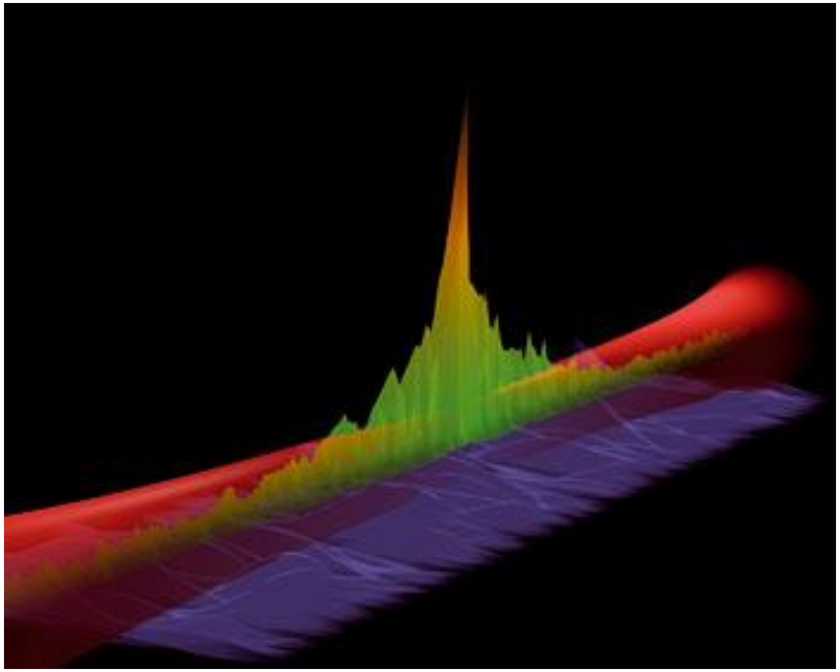
$$E_n = n^2 \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} = n^2 \frac{h^2}{8ma^2}$$

Ezek éppen azok az energiaértékek, mint amelyeket a dobozba zárt – de Broglie-féle állóhullámokként leírt – részecskékre kaptunk!

Véges potenciálgödör

Egy érdekes jelenség alakul ki 1D-ben, amelynek neve Anderson-lokalizáció: a hullámfüggvény nem a gödörben, hanem a gödörhöz lokalizálódik. Akár a legkisebb potenciálgödör esetén is létrejöhet egyetlen kötött állapot. Ennek hullámfüggvénye sokkal kilóg a gödörből.

Lézer hullám vezetőbeli rendezetlenségen kialakuló anyaghullám lokalizáció



P. Bouyer/CNRS

A harmonikus oszcillátor (1)

A rugalmas erő potenciálja a *k* direkciós erővel kifejezve

$$V(x) = \frac{1}{2}kx^2$$

amellyel a tömegpont mechanikai energiája

$$E = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}kx^2$$

A harmonikus oszcillátor (2)

A k helyett az $m \quad ^{2}$ kifejezést írva, továbbá az operátorformalizmust

$$x \to x$$

$$p \to \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}$$

alkalmazva a harmonikus oszcillátorra vonatkozó Schrödinger-egyenlet:

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

A harmonikus oszcillátor (3)

Az egyenletet célszerű átrendezni a

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}\left(E - \frac{1}{2}m\omega^2x^2\right)\Psi = 0$$

alakra. A megoldás az ún. Sommerfeld-féle polinom-módszerrel történik. Az első lépés az aszimptotikus – nagy *x* értékekre érvényes – megoldás megkeresése. A második lépésben a imént kapott aszimptotikus eredményt egy véges fokszámú polinommal szorozzuk és úgy állítjuk elő a probléma teljes megoldását. Ehhez az eljáráshoz érdemes új változókat bevezetni:

$$K = \frac{2E}{\hbar\omega} \qquad \xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x$$

A harmonikus oszcillátor (4)

Ezek behelyettesítésével a fenti egyenlet átírható a

$$\frac{d^2\Psi}{d\xi^2} + (K - \xi^2)\Psi = 0$$

Amennyiben nagy a ξ értéke (azaz nagy az x értéke is $\rightarrow$ aszimptotikus megoldás), úgy az egyenlet leegyszerűsödik a

$$\frac{d^2\Psi}{d\xi^2} - \xi^2\Psi = 0 \qquad \text{alakra.}$$

A harmonikus oszcillátor (5)

Az egyenlet megoldása nagy ξ értékekre

$$\Psi_a \sim e^{-\frac{\xi^2}{2}}$$

A teljes megoldást a

$$\Psi(\xi) = \varphi(\xi) e^{-\frac{\xi^2}{2}}$$

formában keresessük tovább. Behelyettesítve a nem-aszimptotikus egyenletbe a következő egyenlet adódik:

$$\frac{d^2\varphi}{d\xi^2} - 2\xi \frac{d\varphi}{d\xi} + (K-1)\varphi = 0$$

A harmonikus oszcillátor (6)

Az egyenlet $\varphi(\xi)$ megoldását véges fokszámú polinom alakban keressük:

$$\varphi(\xi) = \sum_{r=0}^{n} c_r \xi^r$$

ahol a c_r együtthatók konstans értékűek. Képezzük a polinom ξ-szerinti deriváltjait:

$$\frac{d\varphi(\xi)}{d\xi} = \sum_{r=0}^{n} r c_r \xi^{r-1} \qquad \frac{d^2\varphi(\xi)}{d\xi^2} = \sum_{r=0}^{n} r(r-1) c_r \xi^{r-2}$$

A harmonikus oszcillátor (7)

Ezek behelyettesítése és az „átindexelések” után kapjuk:

$$\sum_{r=0}^{n}\left[(r+2)(r+1)c_{r+2}-(2r+1-K)c_r\right]\xi^r=0$$

Ez csak akkor lehet érvényes, ha a ξ^r összes együtthatója eltűnik bármely *r* értékre. Ez viszont egy kapcsolatot jelent az együtthatók között

$$c_{r+2}=\frac{2r+1-K}{(r+2)(r+1)}c_r$$

A harmonikus oszcillátor (8)

Ha ez az $r=n$-től teljesül, akkor a $2n+1=K$ összefüggés áll fenn. Tehát az E és k közötti

$$K = \frac{2E}{\hbar\omega}$$

kapcsolat alapján a harmonikus oszcillátor energiaszintjei:

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

Az $n=0$ esetben az oszcillátor zérusponti energiájáról beszélünk:

A harmonikus oszcillátor (9)

Megjegyzés: a $\varphi_n(\xi)$ polinomot n-ed fokú $H_n(\xi)$ Hermite-polinomnak nevezzük a

$$\frac{d^2H_n}{d\xi^2} - 2\xi\frac{dH_n}{d\xi} + 2nH_n = 0$$

differenciálegyenlet alapján. Ezt követően az oszcillátor sajátfüggvényei a ξ-vel kifejezve

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

Az első néhány Hermite-polinom: $H_0(\xi) = 1$ $H_2(\xi) = 4\xi^2 - 2$

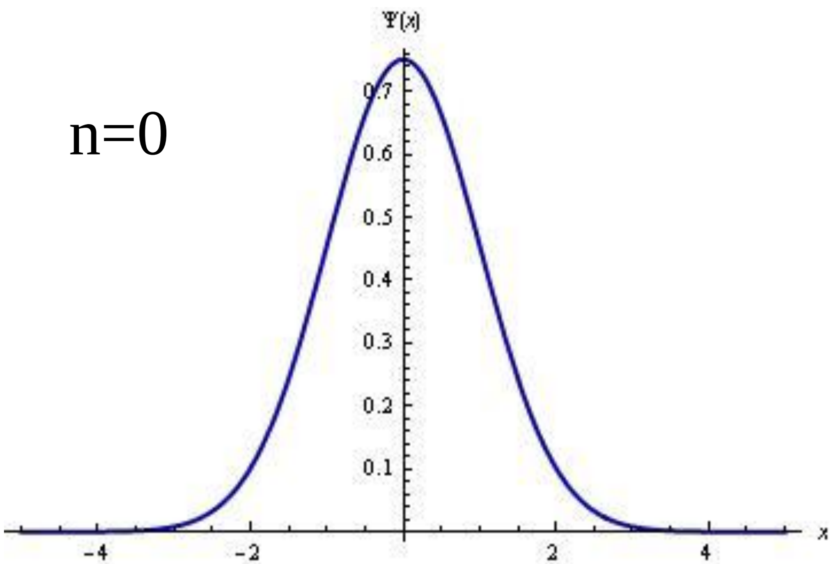
$H_1(\xi) = 2\xi$ $H_3(\xi) = 8\xi^3 - 12\xi$

De még valami hiányzik!

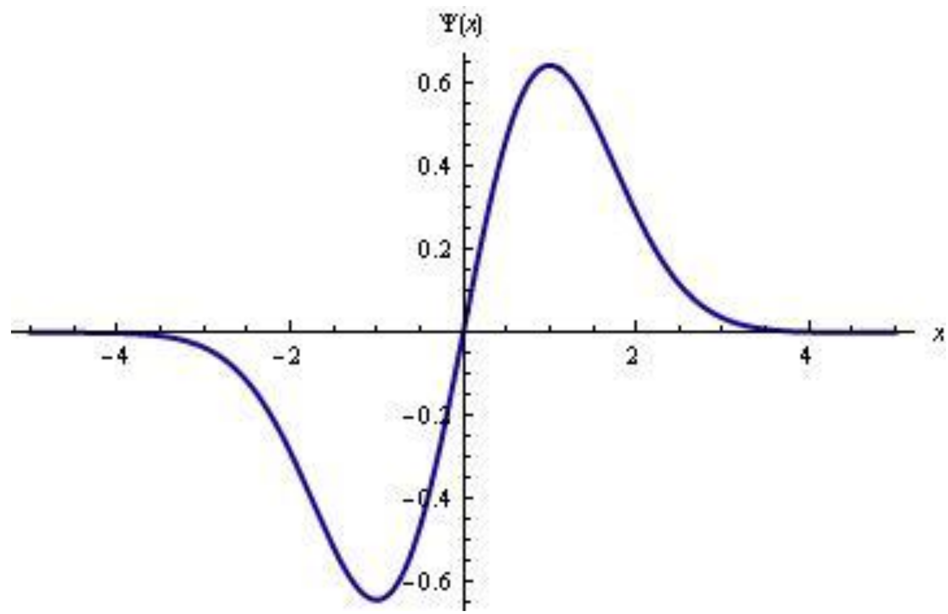
A harmonikus oszcillátor (10)

Az tömeget m=1, körfrekvenciát =1 és a $\hbar$=1 választással, valamint a normálási tényezőt (!) is figyelembe véve az oszcillátor hullámfüggvényei négy különböző n értékre:

n=0



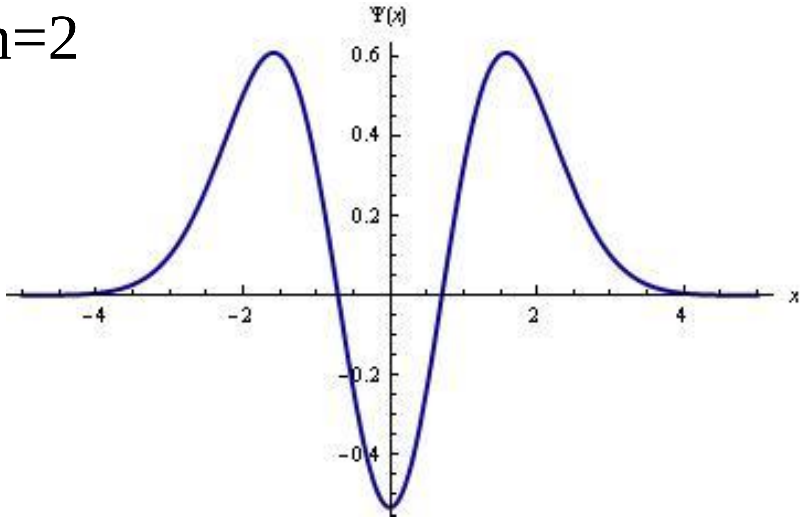
n=1



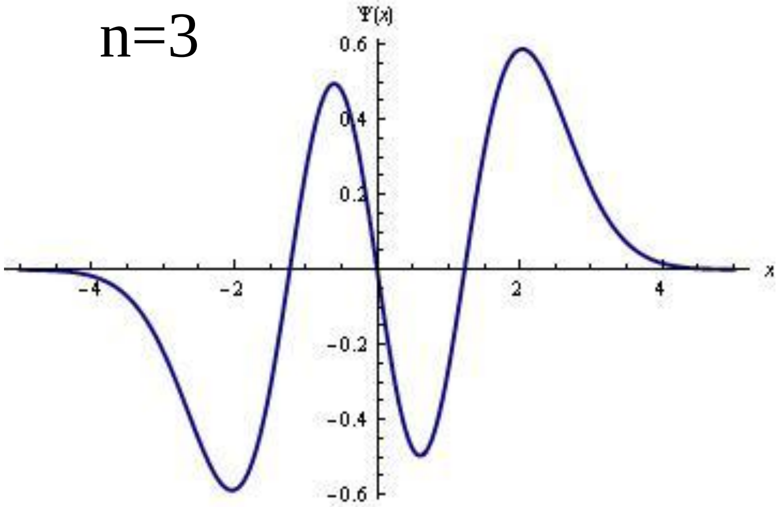
A harmonikus oszcillátor (11)

Az oszcillátor hullámfüggvényei:

n=2



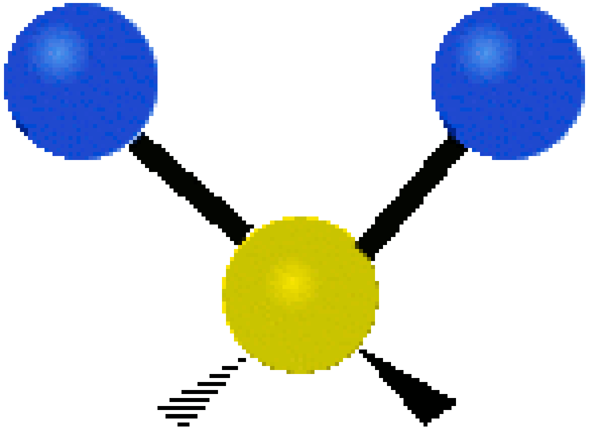
n=3



Dr. Márkus Ferenc
BME Fizika Tanszék

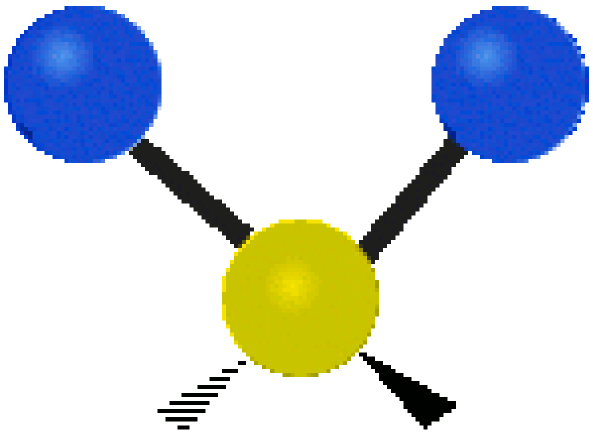
Molekula-rezgések (1)

A metilén-csoport (- CH_2 -) rezgései: szimmetrikusan nyújtó (symmetrical stretching)



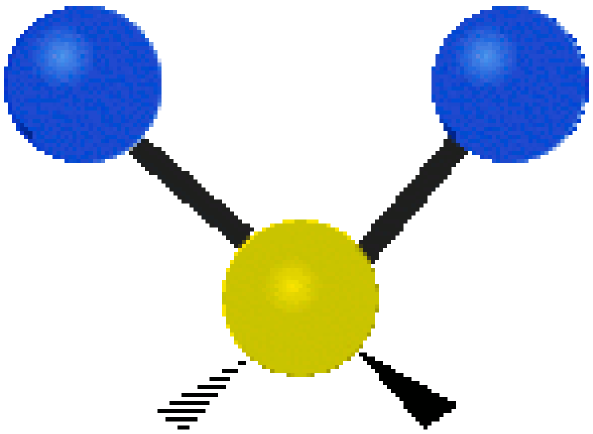
Molekula-rezgések (2)

A metilén-csoport (- CH_2 -) rezgései: antiszimmetrikusan nyújtó (antisymmetrical stretching)



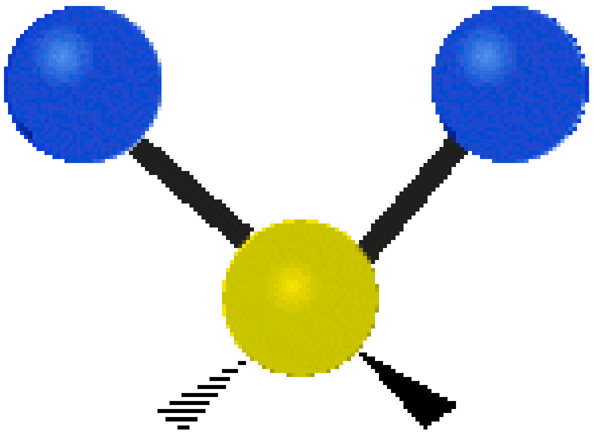
Molekula-rezgések (3)

A metilén-csoport (- CH_2 -) rezgései: ollózó (scissoring)



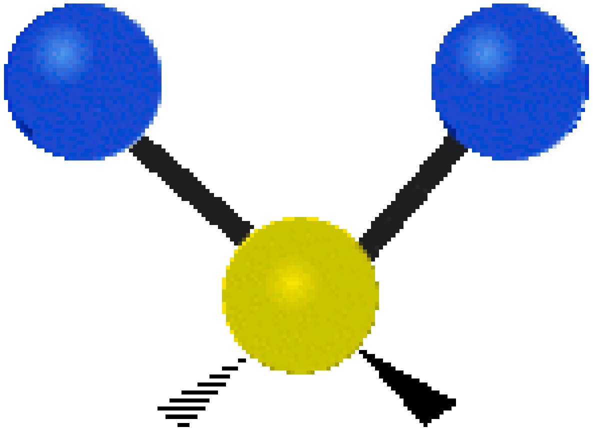
Molekula-rezgések (4)

A metilén-csoport (- CH_2 -) rezgései: rokkoló (rocking)



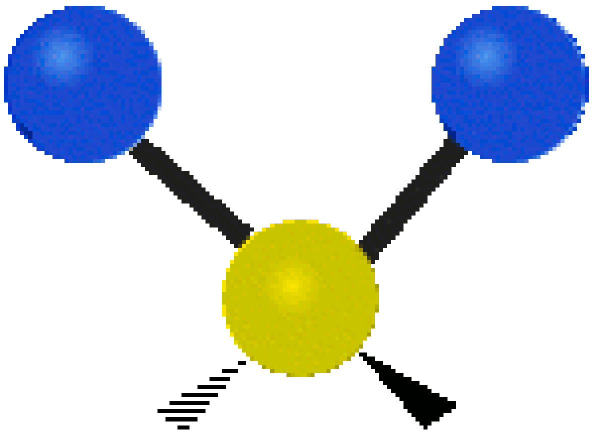
Molekula-rezgések (5)

A metilén-csoport (- CH_2 -) rezgései: csóváló (wagging)



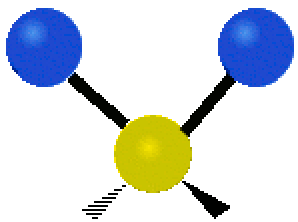
Molekula-rezgések (6)

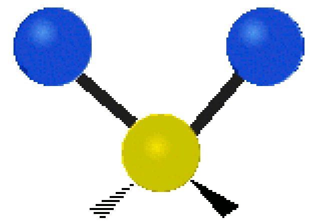
A metilén-csoport (- CH_2 -) rezgései: tvisztelő (twisting)

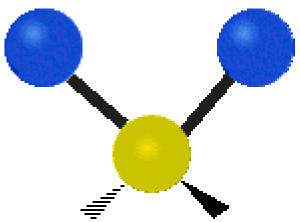


Molekula-rezgések (7)

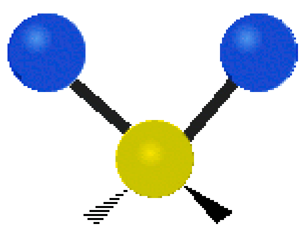
Kezdődhet a buli:

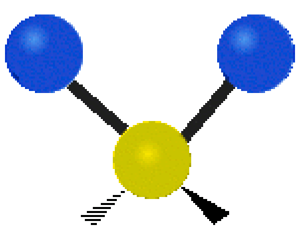


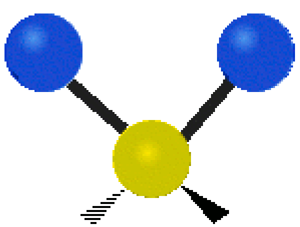




$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\Psi}{\partial y^2}+\frac{\partial^2\Psi}{\partial z^2}\right)+V(x,y,z)\Psi=E\Psi$$







Dr. Márkus Ferenc
BME Fizika Tanszék

A rácsrezgések kvantuma – a fonon (1)

Már láttuk, hogy a harmonikus oszcillátor energiája:

$$E = \frac{1}{2}m\left(\frac{dx}{dt}\right)^2 + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$$

Az is igaz, hogy ha egy fizikai rendszer energiája ilyen alakra hozható, akkor az egy harmonikus oszcillátornak tekinthető. Az azonos, egymástól *a* távolságú atomokból álló lineáris lánc n-edik atomjának mozgásegyenlete

$$m\frac{d^2x_n}{dt^2} = -k(x_n - x_{n+1}) - k(x_n - x_{n-1})$$
$$= k(x_{n-1} + x_{n+1} - 2x_n)$$

A rácsrezgések kvantuma – a fonon (2)

Az *m* tömegű pontra ható erőhöz tartozó potenciál

$$V = \frac{1}{2} k \sum_n 2(x_n^2 - x_{n-1} x_n - x_n x_{n+1})$$

Ha láncon egy *q* hullámszámú állóhullámot tekintünk

$$x_n = A\ sin(nqa) sin\,(\omega_q t)$$

Itt a körfrekvencia

$$\omega_q = 2\sqrt{\frac{k}{m}} sin \frac{qa}{2}$$

A rácsrezgések kvantuma – a fonon (3)

A potenciális energia

$$V = \frac{1}{2} m A^2 \omega_q^2 \left(\sum_n sin^2 (nqa) \right) sin^2 (\omega_q t)$$

Ez egy olyan oszcillátor potenciális energiája, amelynek kitérése

$$x = A \sqrt{\sum_n \sin^2(nqa)} \sin\left(\omega_q t\right.$$

Dr. Márkus Ferenc
BME Fizika Tanszék

A rácsrezgések kvantuma – a fonon (4)

Az ehhez tartozó kinetikus energia

$$T = \frac{1}{2} m A^2 \omega_q^2 \left(\sum_n \sin^2 (nqa) \right) \cos^2(\omega_q t)$$

A teljes energia

$$E = \frac{1}{2} m A^2 \omega_q^2 \left(\sum_n \sin^2 (nqa) \right)$$

Ha itt egy oszcillátorról beszélünk, akkor a kvantummechanika szerint a lehetséges energia értékei:

$$E_n = \hbar\omega_q (n_q + \frac{1}{2})$$ A rácsrezgések kvantuma a fonon.

Kérdések (1)

Mit állít a legkisebb hatás elve (Hamilton-elv)?
A hatás variációjakor milyen egyenletek állnak elő, és mi ezek fizikai jelentése?
Mi az általánosított impulzus, és mi a fizikai jelentése?
Mi a Hamilton-függvény alakja, milyen mennyiségektől függ, és konzervatív erőtér esetén mi a fizikai jelentése?
Mik a kanonikusan konjugált mennyiségek?
Hogyan néznek ki a felcserélési relációk?
Milyen célból és pl. hogy vezetünk be operátorokat?
Mi a sajátértékek jelentése? Milyen mennyiségek lehetnek?
Mi az energiaoperátor (Hamilton-operátor) matematikai alakja?
Hogyan néz ki az időtől független Schrödinger-egyenlet általában?
Hogyan kell megoldani az egydimenziós végtelenfalú potenciálgödörbe zárt részecske problémáját?

Kérdések (2)

Hogyan néz ki a harmonikus oszcillátorra vonatkozó Schrödinger egyenlet?
Mi a megoldás során követett eljárás alapgondolata?
Mik az oszcillátor sajátértékei?
Mi azoknak a polinomoknak az összefoglaló neve, amelyek a sajátfüggvényeket előállítják?
Nevezzen meg a fizika és kémia területéről jelenségeket, amelyek a magyarázata a kvantált harmonikus oszcillátorra vezethető vissza!

(folyt. köv.)

(Az ilyen színnel írt kérdések a mélyebben érdeklődők részére vannak.)