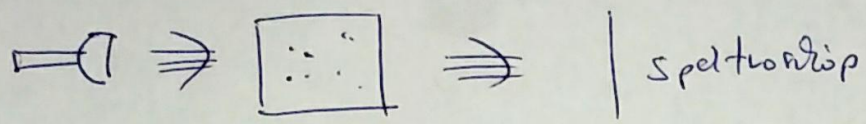
Fizika M1, 1. ea, 2018/09/03

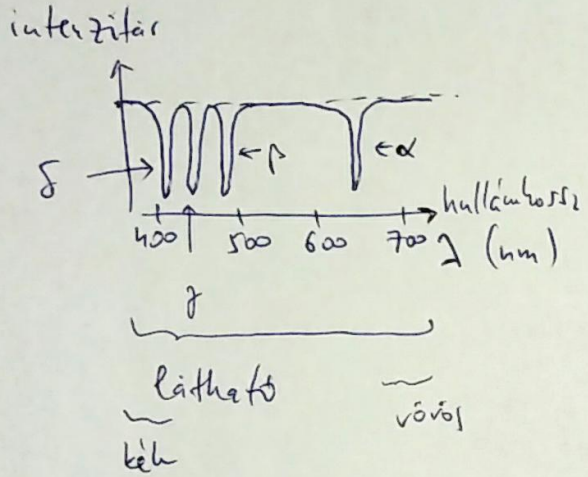
I. Elektronok atomokban

I. A) Atomok abszorpciós színképe vonalas szerkezetet mutat

- elrendezés:



fehér fényforrás — átlátszó tartály, H-atomok gőze



név	λ (nm)	ν (THz)	E (eV)	n → n'
α	656	457	1,9	2 → 3
β	486	617	2,55	2 → 4
γ	434	691	2,85	2 → 5
δ	410	731	3,05	2 → 6

- emlékeztető ① $E = h\nu$ ← frekvencia
  - E: energia-kvantum (foton)
  - h: Planck-állandó $\approx 6{,}6 \times 10^{-34}\ \frac{m^2 kg}{s}$

② $c = \lambda \cdot \nu$
- c: fénysebesség $\approx 3 \times 10^8\ \frac{m}{s}$
- λ: hullámhossz

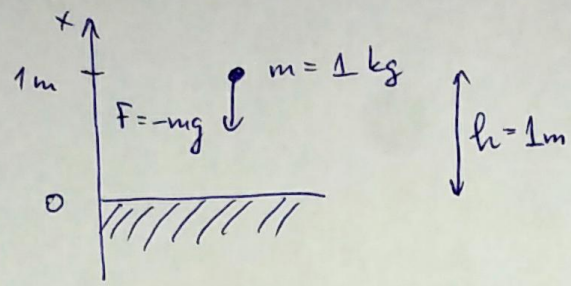
③ $1\ eV \equiv 1$ elektronvolt $\cong 1{,}6 \times 10^{-19}\ J$

④ SI alapegységek:
m, kg, s, A (amper)

- H abszorpciós színképvonal
- "Balmer"-sorozat"
- további vonalak láthatók más λ-tartományokban

I/B Klassikus mechanika: állapotjelzők, fizikai mennyiségek, mozgásegyenlet

1 példa: szabadesés



2 állapotjelzők

$$\begin{cases} \text{pozíció}: x(t) \\ \text{sebesség}: v(t) = \dot{x}(t) = \dfrac{dx(t)}{dt} \end{cases}$$

mindkettő $\mathbb{R} \to \mathbb{R}$ fv

3 fizikai mennyiségek: pozíció, sebesség, gyorsulás, ...

paraméterek: m, g

4 mozgásegyenlet: Newton II, $F = ma$

$$-mg = m\dot{v}(t) \rightarrow \boxed{\dot{v}(t) = -g, \ \dot{x}(t) = v(t)}$$

5 kezdeti feltételek: $x(t=0) = 1\,m$, $v(t=0) = 0\,\frac{m}{s}$

kérdés: $x(t) = ?$, $v(t) = ?$

6 megoldás: $x(t) = -\frac{g}{2}t^2$, $v(t) = -gt$

7 szabadesés: <u>időfüggetlen</u> probléma

gerjesztett harmonikus oszcillátor: időfüggő probléma

$$\hookrightarrow \dot{x}(t) = v(t), \quad \dot{v}(t) = \frac{F_0}{m}\sin(2\pi f t) - \frac{k}{m}x(t)$$

8 numerikus megoldás: $\dot{x}(t) = \lim_{\Delta t \to 0} \dfrac{x(t+\Delta t) - x(t)}{\Delta t}$ segítségével:

$$\dot{x}(t) = v(t) \rightarrow x(t+\Delta t) \approx x(t) + v(t)\cdot\Delta t$$

$$\dot{v}(t) = \frac{F(t)}{m} \rightarrow v(t+\Delta t) \approx v(t) + \frac{F(t)}{m}\cdot\Delta t$$

mo. egyre pontosabb ha $\Delta t \to 0$.

(9) mozgási és helyzeti energia: pl: szabadesés

$$E = E_{mozg} + E_{helyz} = \frac{1}{2} m v^2 + m \cdot g \cdot x$$

"mozgási" = "kinetikus", E_{mozg}, K

"helyzeti" = "potenciális", E_{helyz}, V

erő vs. potenciális energia: $F_{(x)} = -\frac{dV(x)}{dx} \overset{\text{szabadesés}}{=} -mg$

(10) impulzus: $p = mv$

$$E = \frac{p^2}{2m} + mgx.$$

(I/c) Kvantummechanika: állapotjelzők, fizikai mennyiségek, mozgásegyenlet.

(1) példa: (a) szabad mozgás; (b) szabadesés; (c) harmonikus oszcillátor (1D)
1 db elektron

(2) állapotjelző: "hullámfüggvény" (hfv): $\psi(x,t)$ $\quad \psi: \mathbb{R} \times \mathbb{R} \to \mathbb{C}$

hely (x koord.) — idő — komplex számok halmaza

(3) hfv valószínűségi sűrűségfüggvényként értelmezhető

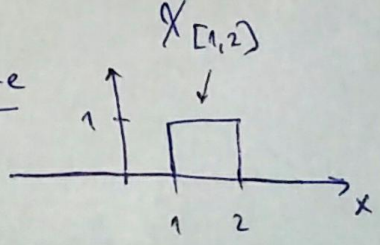
ha ψ <u>normált</u>, azaz $\int_{-\infty}^{\infty} dx\, |\psi(x)|^2 = 1$

pl: az elektron megtalálási valószínűsége az $[a,b]$ szakaszon

$$P([a,b]) = \int_a^b dx\, |\psi(x)|^2$$

(4) def: az $[a,b]$ intervallum <u>karakteristikus fv-e</u>

$$\chi_{[a,b]}: x \longmapsto \begin{cases} 1, \text{ ha } x \in [a,b] \\ 0, \text{ ha } x \notin [a,b] \end{cases}$$



5 kérdés: mi ψ dimenziója (mértékegysége)?

válasz: (1D-ben) $[\psi] = \frac{1}{\sqrt{m}}$, hiszen $1 = \int_{-\infty}^{\infty} \underbrace{dx}_{[\cdot]=m} \underbrace{|\psi(x)|^2}_{[\cdot]=\frac{1}{m}}$

6 kérdés: $\psi(x) = N \cdot \chi_{[0,a]}$. $N = ?$ hogy ψ normált legyen?

$$1 = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, |\psi(x)|^2 = |N|^2 \int_0^a dx\, 1 = |N|^2 a \rightarrow |N| = \frac{1}{\sqrt{a}}$$; pl. $N = \frac{1}{\sqrt{a}}$ jó választ

7 def: hfv-ek skalárszorzata.

$$\langle \psi | \varphi \rangle := \int_{-\infty}^{\infty} dx\, \psi^*(x)\, \varphi(x)$$

komplex konjugálás

8 kérdés: $\psi(x) := \frac{1}{\sqrt{a}} \chi_{[0,a]}$ $\quad \varphi(x) := \frac{i}{\sqrt{2a}} \chi_{[0,2a]}$

$\langle \psi | \psi \rangle = ?$

megoldás: $\underline{\underline{\langle \psi | \psi \rangle}} = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, \varphi^*(x)\, \psi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, \frac{-i}{\sqrt{2a}} \chi_{[0,2a]}(x) \cdot \chi_{[0,a]}(x) \frac{1}{\sqrt{a}} =$

$$= -\frac{i}{\sqrt{2}a} \underbrace{\int_0^a dx \cdot 1}_{a} = \underline{\underline{-\frac{i}{\sqrt{2}}}}.$$

9 állítás: ψ normált $\Longleftrightarrow \langle \psi | \psi \rangle = 1$

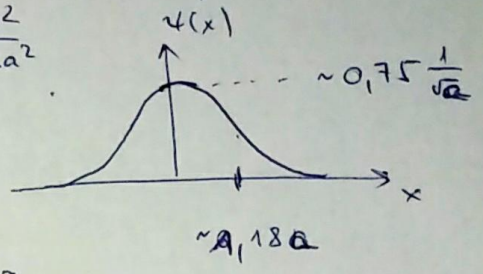
13 fizikai mennyiségek: hely (= pozíció, koordináta)
impulzus

A kvantummechanikában a fizikai mennyiségeket (hely, impulzus) "lineáris leképezések" v. "lineáris operátorok" ábrázolják, amelyek hfv-t hfv-be képeznek.

hely: $\hat{x} : \psi \mapsto \left(\hat{x}\psi : \underset{\substack{\uparrow \\ \text{tér}}}{\mathbb{R}} \to \mathbb{C},\ x \mapsto x\psi(x)\right)$

impulzus: $\hat{p} : \psi \mapsto \left(\hat{p}\psi : \mathbb{R} \to \mathbb{C},\ x \mapsto \frac{\hbar}{i}\frac{d\psi(x)}{dx}\right)$

(11) kérdés: legyen $\psi(x) = \frac{1}{\pi^{1/4}\sqrt{a}} \cdot e^{-\frac{x^2}{2a^2}}$.



a) ψ normált?

b) $(\hat{x}\psi)_{(x)} = ?$ c) $(\hat{p}\psi)_{(x)} = ?$

mo: b) $(\hat{x}\psi)(x) = x\psi(x) = x\frac{1}{\pi^{1/4}\sqrt{a}} e^{-\frac{x^2}{2a^2}}$

c) $(\hat{p}\psi)(x) = \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}\frac{1}{\pi^{1/4}\sqrt{a}} e^{-\frac{x^2}{2a^2}} = \frac{\hbar}{i}\frac{1}{\pi^{1/4}\sqrt{a}} e^{-\frac{x^2}{2a^2}} \cdot (-2x)\frac{1}{2a^2} =$

$= -\frac{\hbar}{i\,\pi^{1/4}\,a^{5/2}} x e^{-\frac{x^2}{2a^2}}$

(12) fizikai mennyiségek várhatóértéke a ψ állapotban:

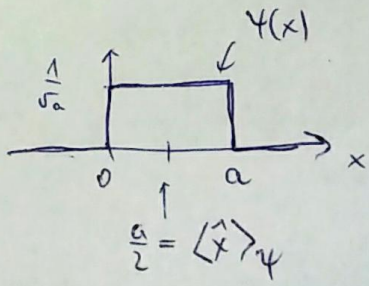
$\langle\hat{x}\rangle_\psi = \langle\psi|\hat{x}\psi\rangle$ $\qquad$ $\langle\hat{p}\rangle_\psi = \langle\psi|\hat{p}\psi\rangle$

$\uparrow$ hely várhatóértéke $\qquad$ $\uparrow$ impulzus várhatóértéke

(13) pl: $\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{a}}\chi_{[0,a]}$, $\langle\hat{x}\rangle_\psi = ?$

mo: $\langle\hat{x}\rangle_\psi = \langle\psi|\hat{x}\psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, \psi^*(x)\, x\, \psi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, x \frac{1}{a}\chi_{[0,a]} =$

$= \int_0^a dx\, x \frac{1}{a} = \frac{1}{a}\left[\frac{x^2}{2}\right]_{x=0}^{a} = \frac{a}{2}$



(14) mozgásegyenlet (időfüggő Schrödinger-egyenlet)

pl: szabadesés, ld. fent

1. klasszikus energia $E = \frac{p^2}{2m} + mgx$

2. $x, p \rightarrow$ operátorokkal helyettesítjük $\rightarrow \hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + mg\hat{x}$

"Hamilton-operátor"

3. időfüggő Schrödinger-egyenlet:

$$\frac{\hbar}{i}\dot{\psi}(t) + \hat{H}\psi(t) = 0$$

itt: $\frac{\hbar}{i}\dot{\psi}(t) + \left(\frac{\hat{p}^2}{2m}\psi\right)(x,t) + mg\left(\hat{x}\psi\right)(x,t) = 0$

$$\frac{\hbar}{i}\dot{\psi}(x,t) + \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x,t)\right) + mgx\psi(x,t) = 0$$

időben elsőrendű, térben másodrendű, lineáris parciális differenciálegyenlet.

(15) kezdeti feltétel; pl: $\psi(x,t=0) = \frac{1}{\sqrt{a}}\chi_{[0,a]}(x)$

kérdés: $\psi(x,t) = ?$

(16) áll: az időfüggő Sch-egyenlet normatartó, azaz ha $\psi(x,0)$ normált, akkor $\psi(x,t)$ is normált bármely t-re