Kvantummechanika

Utolsó módosítás: 2016. május 12.

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.

Dr. Márkus Ferenc
BME Fizika Tanszék

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.

Az impulzusmomentum (1)

A mechanikában az impulzusmomentumot a hely és impulzus vektoriális szorzataként definiáljuk, azaz

$$\boldsymbol{L} = \boldsymbol{r} \times \boldsymbol{p}$$

és ezt a továbbiakban is meg kívánjuk őrizni. Az impulzus-momentum vektor komponensei rendre

$$L_x = yp_z - zp_y \qquad L_y = zp_x - xp_z \qquad L_z = xp_y - yp_x$$

Az impulzusmomentum (2)

Az impulzusmomentum-komponensek operátorai:

$$L_x = \frac{\hbar}{i}\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right)$$

$$L_y = \frac{\hbar}{i}\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right)$$

$$L_z = \frac{\hbar}{i}\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right)$$

Az impulzusmomentum (3) – a *z*-komponens

Az impulzusmomentum *z*-komponensére vonatkozó sajátérték egyenlet:

$$L_z \Psi = k \Psi$$

Az impulzusmomentum operátor z komponensének behelyettesítésével

$$\frac{\hbar}{i}\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right)\Psi = k\Psi$$

Az impulzusmomentum (4) – a *z*-komponens

Célszerű áttérni gömbi polárkoordinátákra:

$$x = r\,sin\theta\,cos\varphi \qquad y = r\,sin\theta\,sin\varphi$$

$$z = r\,cos\theta$$

A hullámfüggvény azimut szög szerinti deriváltja:

$$\frac{\partial\Psi}{\partial\varphi} = \frac{\partial\Psi}{\partial x}\frac{\partial x}{\partial\varphi} + \frac{\partial\Psi}{\partial y}\frac{\partial y}{\partial\varphi} + \frac{\partial\Psi}{\partial z}\frac{\partial z}{\partial\varphi} = x\frac{\partial\Psi}{\partial y} - y\frac{\partial\Psi}{\partial x}$$

Az impulzusmomentum (5) – a *z*-komponens

Így az impulzusmomentum operátor:

$$L_z \equiv \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\varphi}$$

A sajátérték egyenletet:

$$\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\Psi}{\partial\varphi} = k\Psi$$

A megoldás:

$$\Psi = Ae^{i\frac{k}{\hbar}\varphi}$$

Dr. Márkus Ferenc
BME Fizika Tanszék

Az impulzusmomentum (6) – a *z*-komponens

A szög szerinti periodikusság az jelenti, hogy a

$$\Psi(\varphi + 2\pi) = Ae^{i\frac{k}{\hbar}(\varphi+2\pi)} = Ae^{i\frac{k}{\hbar}\varphi}e^{i\frac{k}{\hbar}2\pi}$$
$$= \Psi(\varphi)$$

összefüggés akkor teljesül (lásd első sor utolsó tényező), ha

$$m = \frac{k}{\hbar} \quad (m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots)$$

Azaz az impulzus momentum z-komponense csak a $\hbar$ egészszámú többszöröse lehet:

$$k = m\hbar$$

Dr. Márkus Ferenc
BME Fizika Tanszék

Az impulzusmomentum (7) – négyzete

Az impulzusmomentum négyzete sajátérték-problémája az

$$L^2\Psi = K\Psi$$

egyenlettel fogalmazható meg. Gömbi koordinátákra célszerű áttérni, amellyel

$$L^2 = -\hbar^2\left(\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + ctg\theta\,\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right)$$

Érdekes megállapítani, hogy *r*-től független. Hosszú számolás után:

$$K = \hbar^2 l(l+1) \quad (l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots)$$

Dr. Márkus Ferenc
BME Fizika Tanszék

Az impulzusmomentum (8) – négyzete

A megfelelő sajátfüggvény:

$$Y_l^m(\theta,\varphi) = sin^{|m|}\theta\ P_l^m(cos\theta)e^{im\varphi}$$

$$m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$$

valamint a P_l^m függvények $l - |m|$ -ed fokú polinomok.

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.

A hidrogénatom (1)

A protonból és elektronból álló rendszeren belül a Coulomb-kölcsönhatás működik :

$$V(r) = -\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{e^2}{r}$$

A Laplace-operátort gömbi koordinátákban írva a

$$\frac{\partial^2\Psi}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial\Psi}{\partial r} + \frac{1}{r^2}\left(\frac{\partial^2\Psi}{\partial\Theta^2} + ctg\Theta\frac{\partial\Psi}{\partial\Theta} + \frac{1}{sin^2\Theta}\frac{\partial^2\Psi}{\partial\varphi^2}\right) + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V(r))\Psi = 0$$

Schrödinger-egyenletet kapjuk. A sajátérték egyenlet megoldása szolgáltatja a hidrogénatom lehetséges energiaszintjeit, a sajátfüggvényeknek az elektronok megtalálási valószínűségéhez van közük.

A hidrogénatom (2)

A megoldás szétválasztható egy csak *r*-től függő és egy csak szögektől függő két függvény szorzatára, azaz

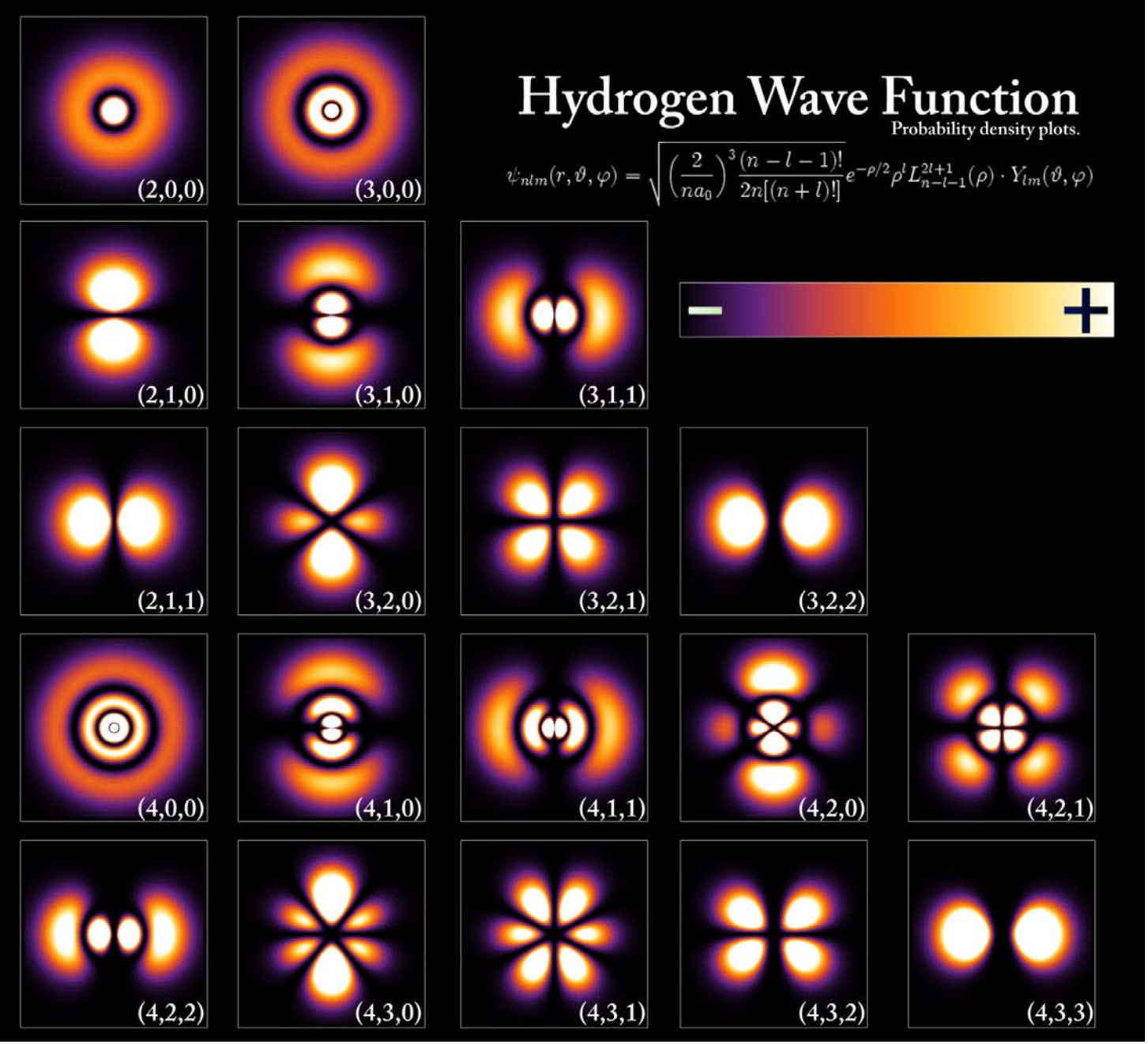
$$\Psi(r,\theta,\varphi) = F(r)Y(\theta,\varphi)$$

Bevezetve az $R(r) = r\mathrm{F}(r)$ függvényt a

$$\frac{d^2R}{dr^2} + \left[\frac{2mE}{\hbar^2} - \frac{2mV(r)}{\hbar^2} - \frac{l(l+1)}{r^2}\right]R = 0$$

differenciálegyenlet adja a radiális megoldást.

n: főkvantumszám
l: mellékkvantumszám
m: mágneses kvantumszám



Az elektron tartózkodási valószínűsége: nagyobb a (+), kisebb a (-) jelek irányában.