



Modern fizika vegyészmérnököknek

3. óra: A kvantummechanika gyökereitől az “igazi” kvantummechanikáig: Elektronhullámok és Schrödinger-egyenlet

Budapest, 2023. szeptember 20. / október 4.

Összegzés és további tervek

A) Elektromágnesség, optika

1. Elektromágneses hullámok

- a) Elektromos és mágneses terek
- b) Elektromágneses indukció,
Maxwell-egyenletek
- c) EM hullámok

2. Fénymikroszkóp működése

- a) Kétréskísérlet
- b) Fénymikroszkóp modellje
- c) Felbontóképesség határai

B) Bevezetés a kvantummechanikába

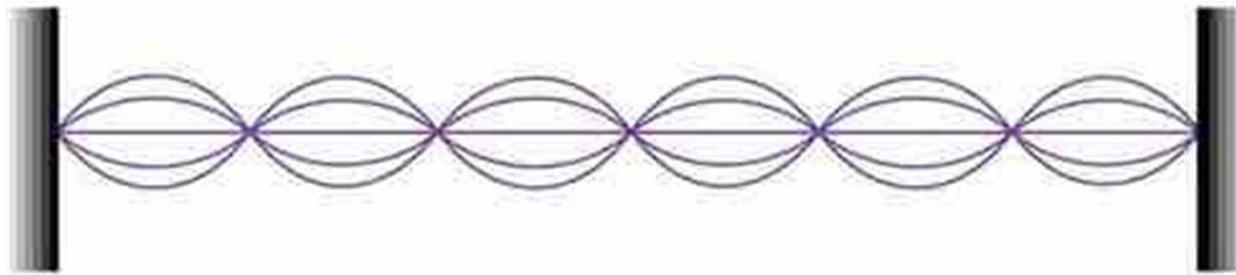
3. A kvantum gyökerei

- a) Fotonok
- b) Elektronhullámok
- c) Komplex számok

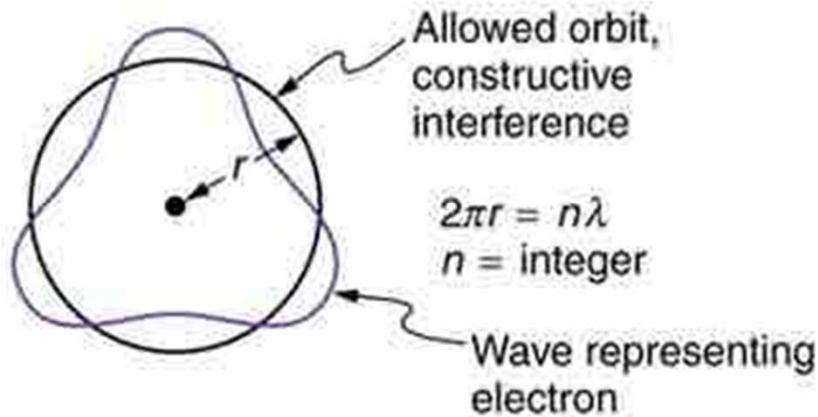
4. A kvantum matematikája

- a) Hullámfüggvény
- b) Schrödinger-egyenlet
- c) Spin, mérés

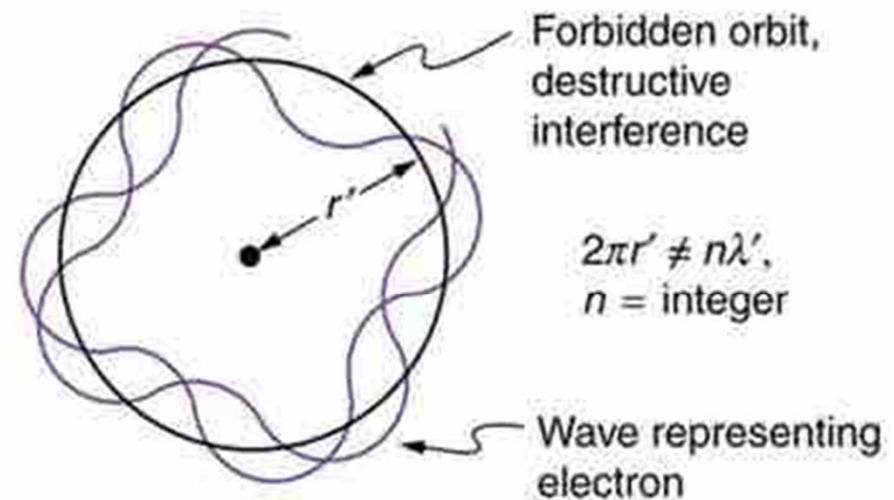
Kvantum gyökerei 2. - az atomok színeképe



(a)

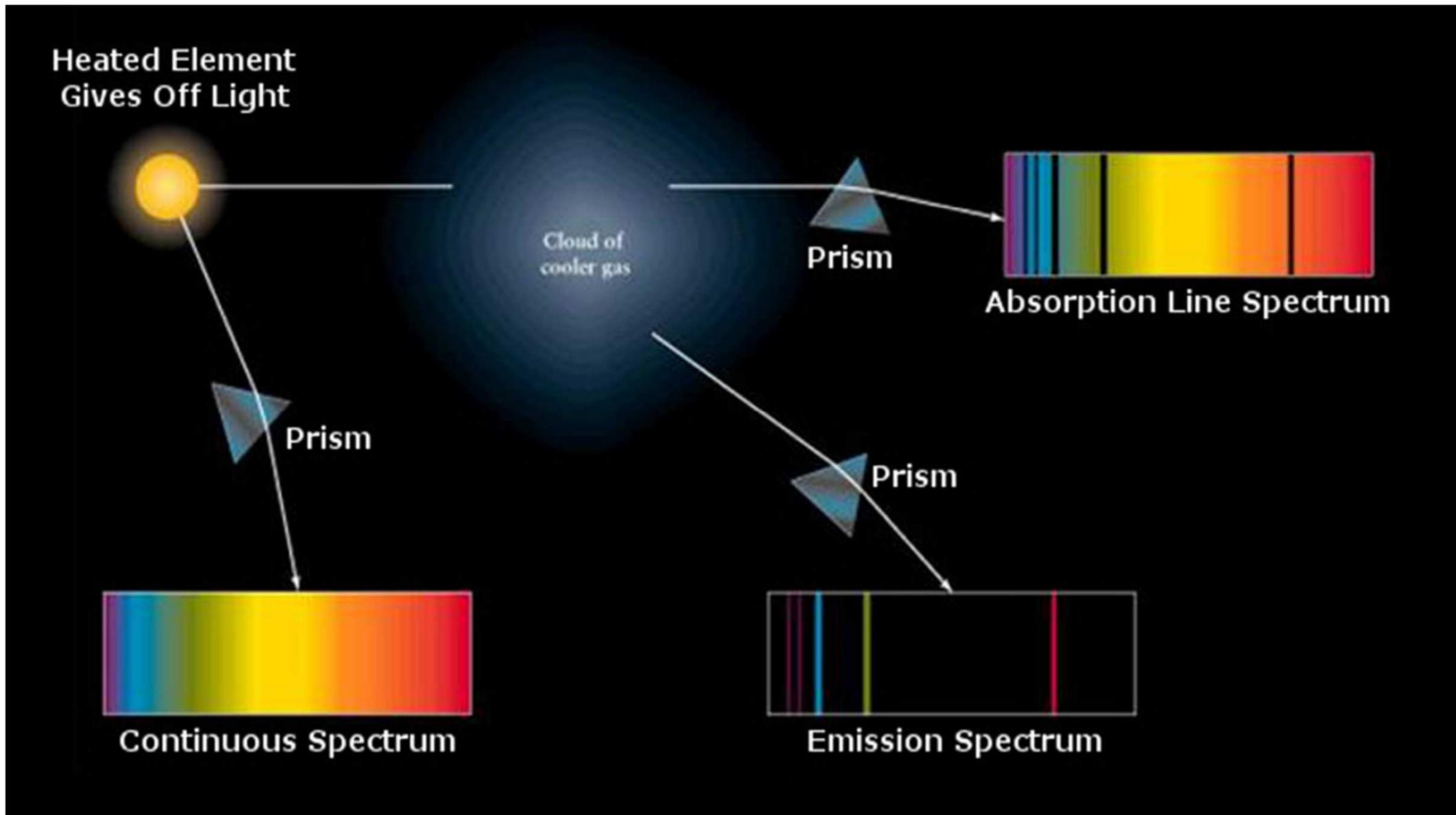


(b)



(c)

Gázok emissziós és abszorpciós spektrumában vonalak vannak. Miért?



A spektrális vonalakat energiaszintek közötti ugrásokkal magyarázhatjuk

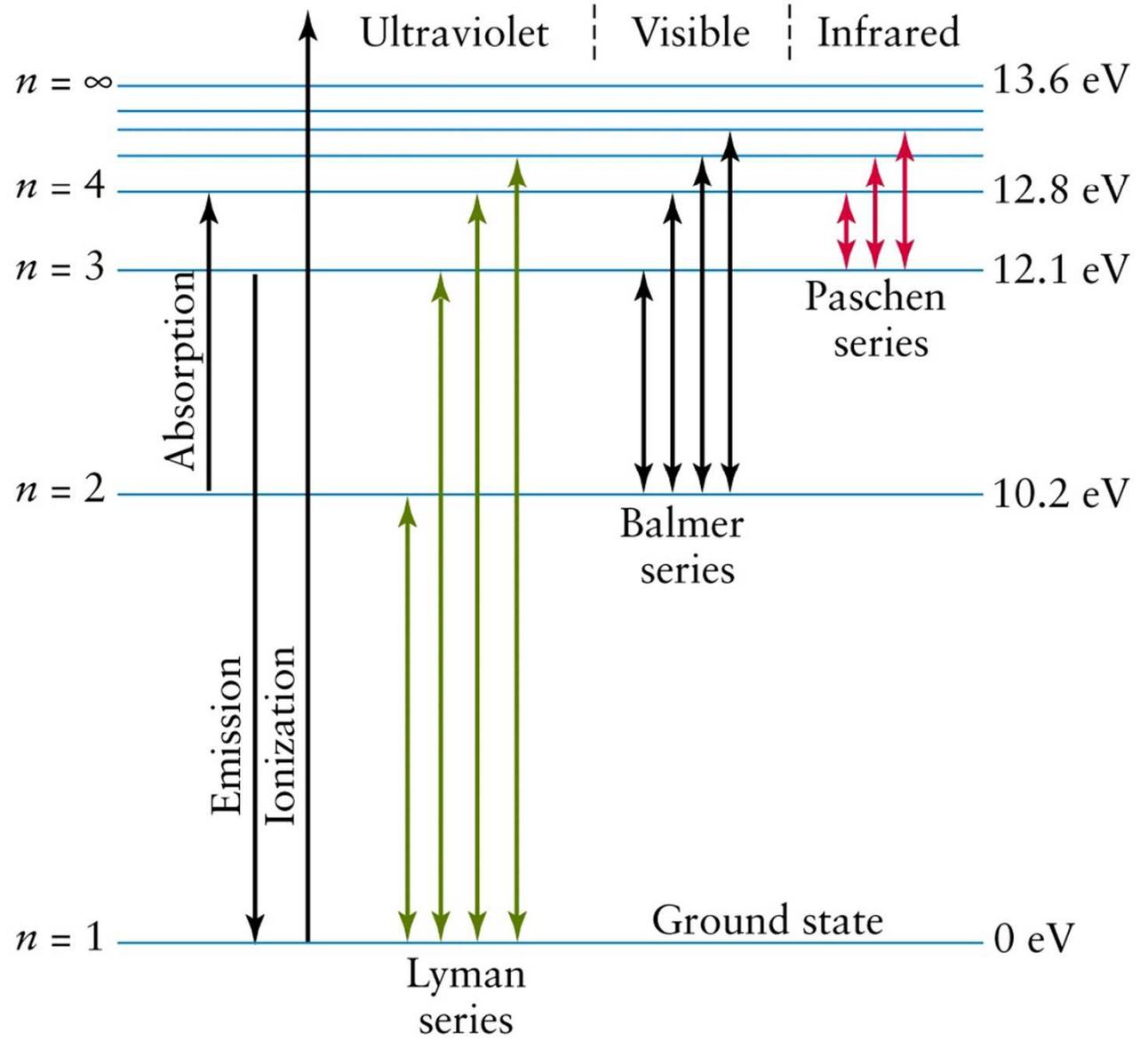


$$h\nu = E_{\text{from}} - E_{\text{to}}$$

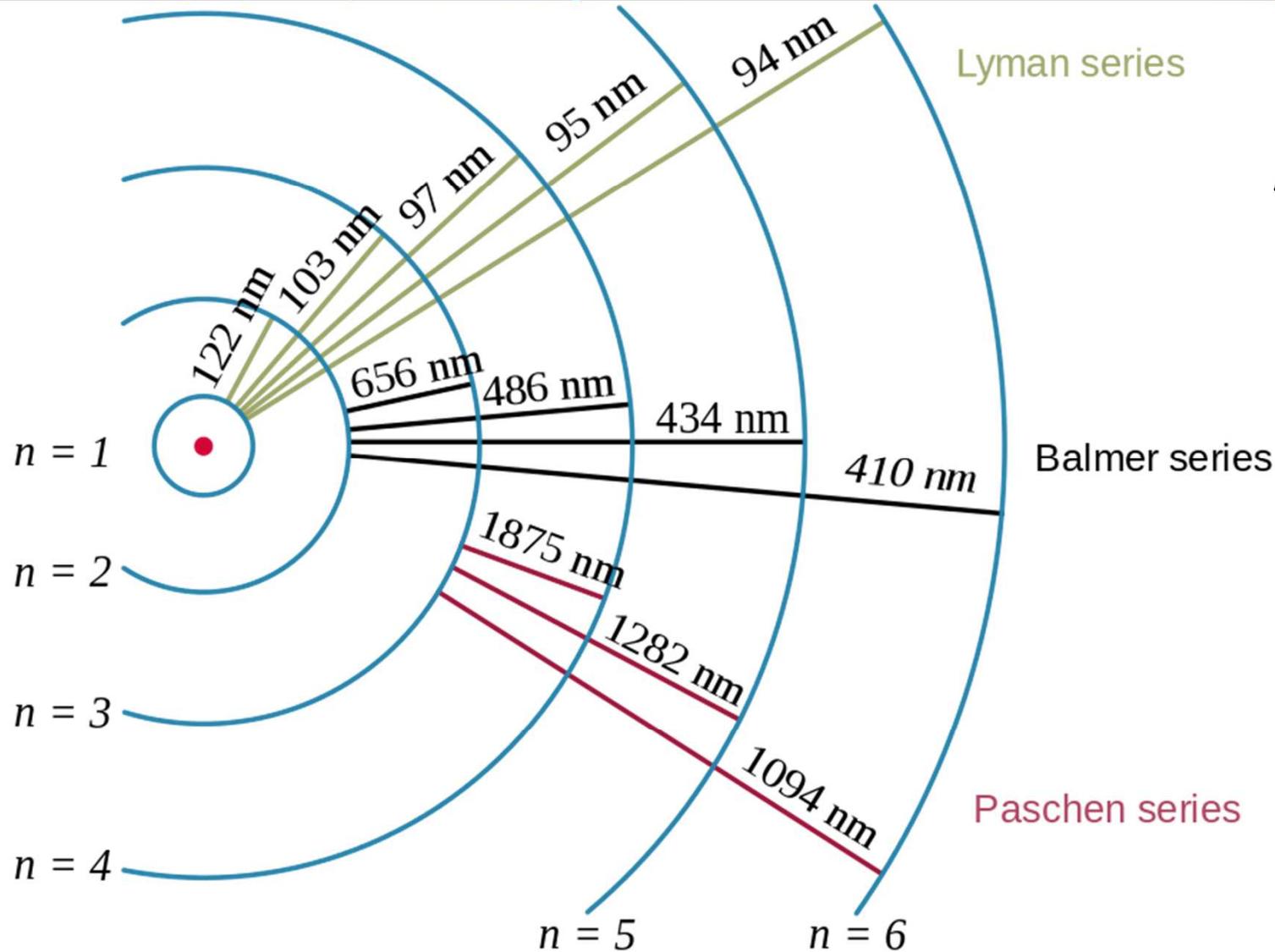
$$\lambda = \frac{c}{\nu}$$

Adatokra illesztésből:

$$E_n = -\frac{13.6\text{eV}}{n^2}$$



Az energiaszintek a Bohr-féle atommodellben az elektronok pályái



Lyman series

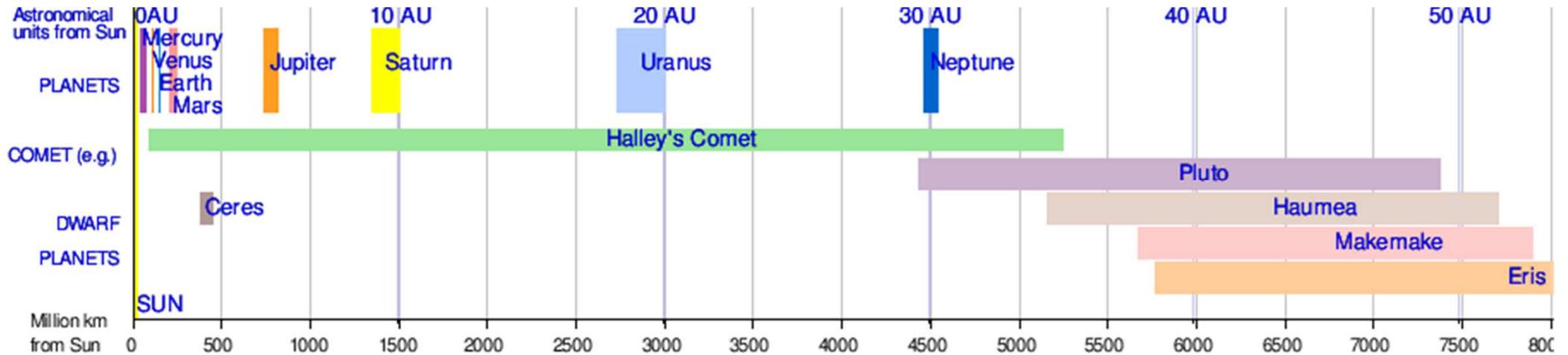
$$h\nu = E_{\text{from}} - E_{\text{to}}$$

$$\lambda = \frac{c}{\nu}$$

Balmer series

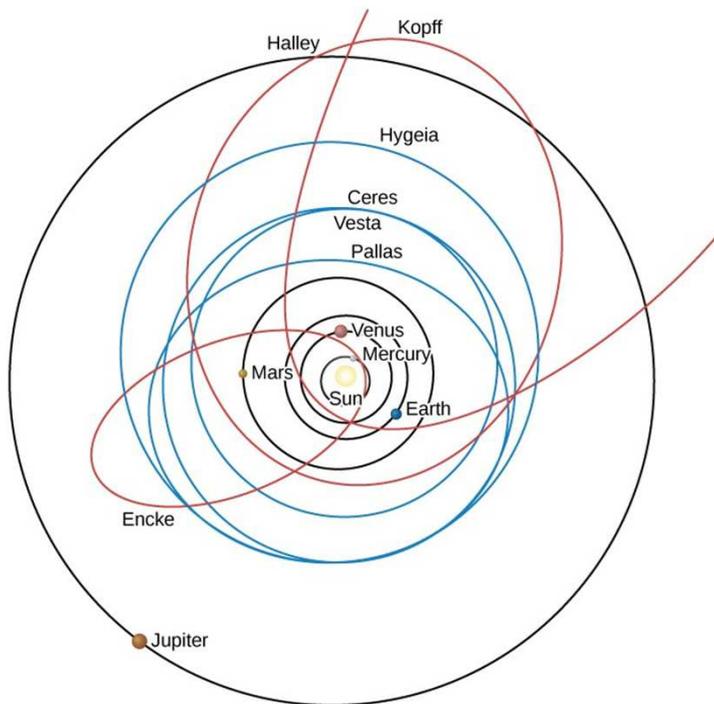
Paschen series

Kitérő: a pályák energiaszintjei folytonosan is változhatnak, mint a bolygók pályáiéi?



Naprendszer: a bolygópályák sugarai nem ilyen jól meghatározottak

(lábjegyzet: Titius-Bode-szabály, pályarezonanciák miatt egymáshoz képest kb.

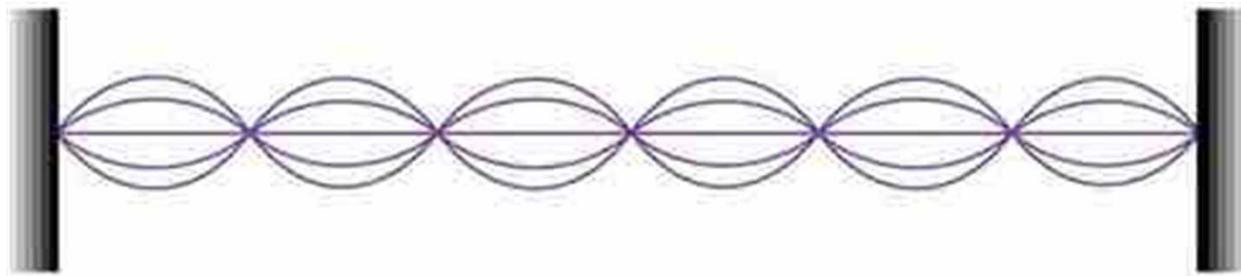


$$R_n = \frac{4 + 3 \cdot 2^n}{10}$$



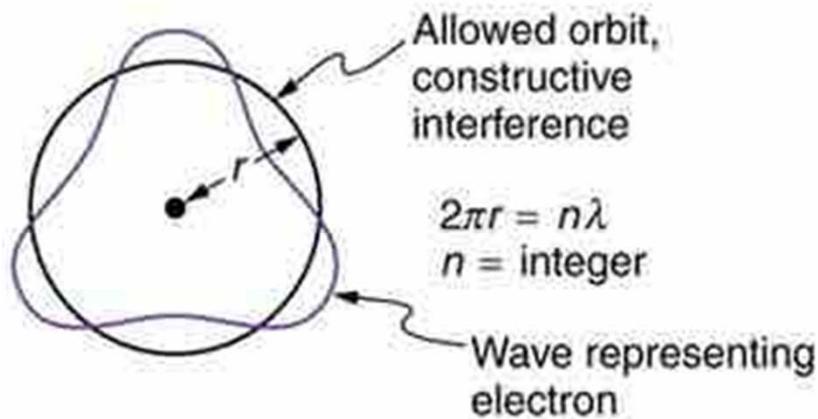
Az atommag körüli elektronok olyanok, mint a rezgő húrok

$$\nu_n = n \frac{v}{2L}$$

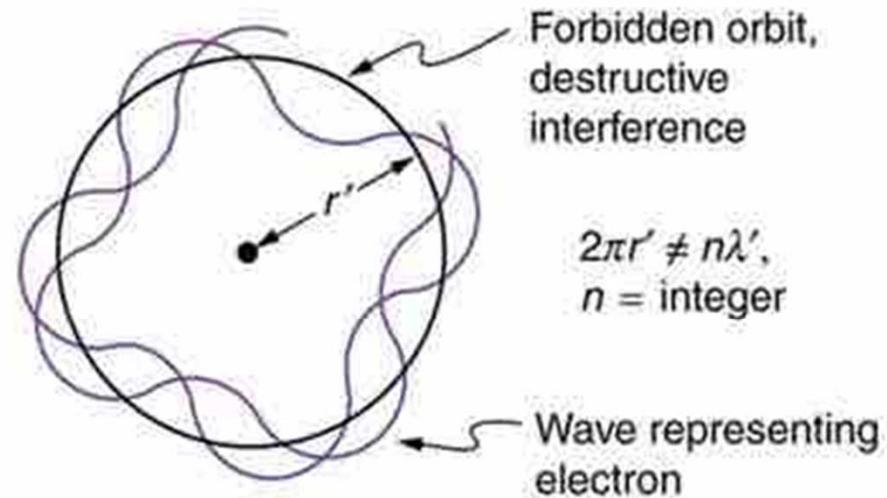


$$E_n = \frac{-13.6\text{eV}}{n^2}$$

(a)



(b)



(c)

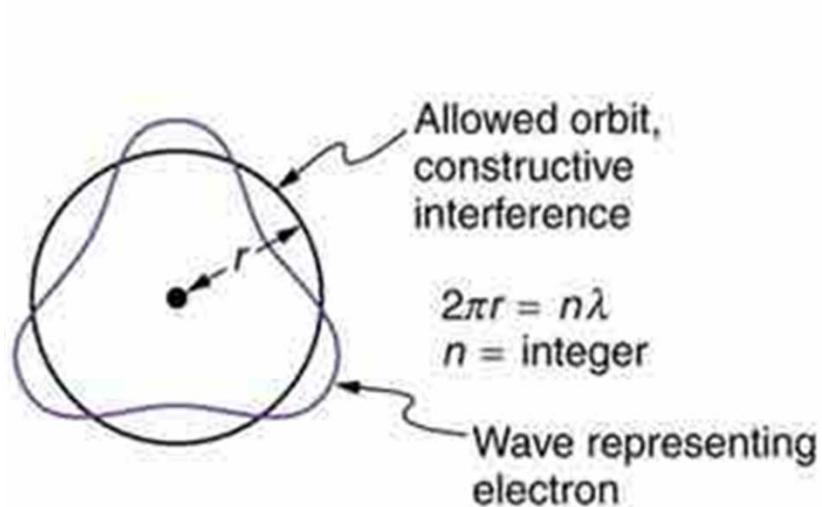
1924, de Broglie herceg doktorija: az elektronok hullámok!

foton impulzusa:
(ismert)

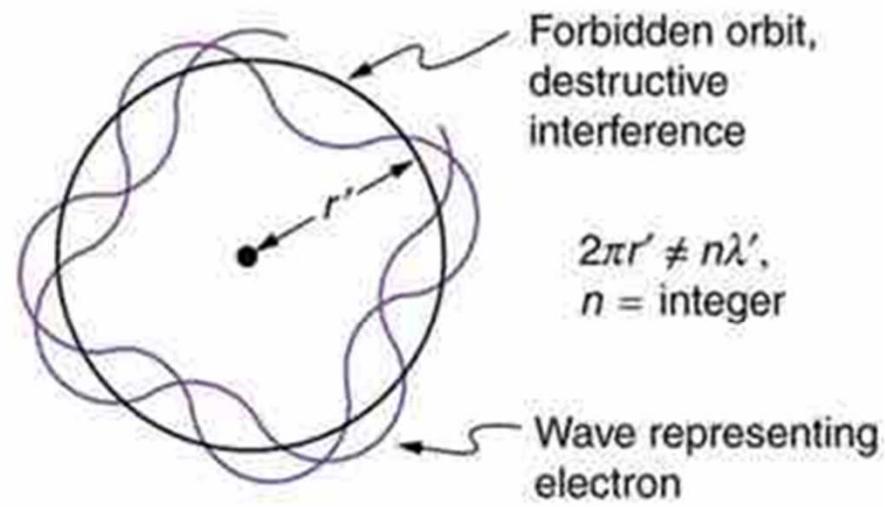
$$p = \frac{h}{\lambda}$$

elektron hullámhossza:
(posztulált)

$$\lambda = \frac{h}{p}$$



(b)



(c)

A de Broglie hipotézist beírva a Coulomb-erőbe, kijönnek a H-atom energiaszintjei!

$$F_{cp} = F_{el} \quad \text{azaz} \quad \frac{mv^2}{r} = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r^2} \rightarrow mv^2 = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r}$$

$$\text{de Broglie: } \lambda = \frac{h}{mv} = \frac{2\pi r}{n} \rightarrow \frac{nh}{2\pi r} = mv \rightarrow \frac{n^2 h^2}{4m\pi^2 r^2} = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r} \rightarrow \frac{1}{r} = Z \frac{m\pi e^2}{\epsilon_0 h^2} \frac{1}{n^2}$$

$$\text{Bohr-sugár: } a_0 = \frac{\epsilon_0 h^2}{\pi m e^2} = 5,2917721067(12) \times 10^{-11} \text{ m} \quad r_n = a_0 \frac{n^2}{Z}$$

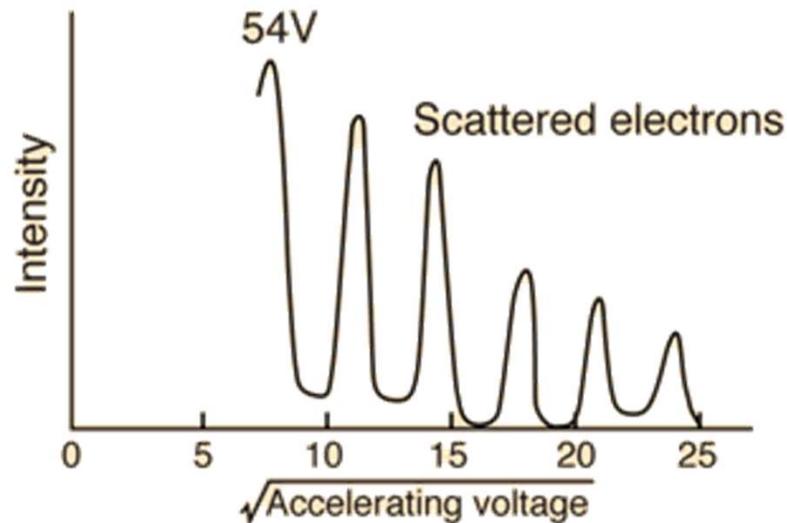
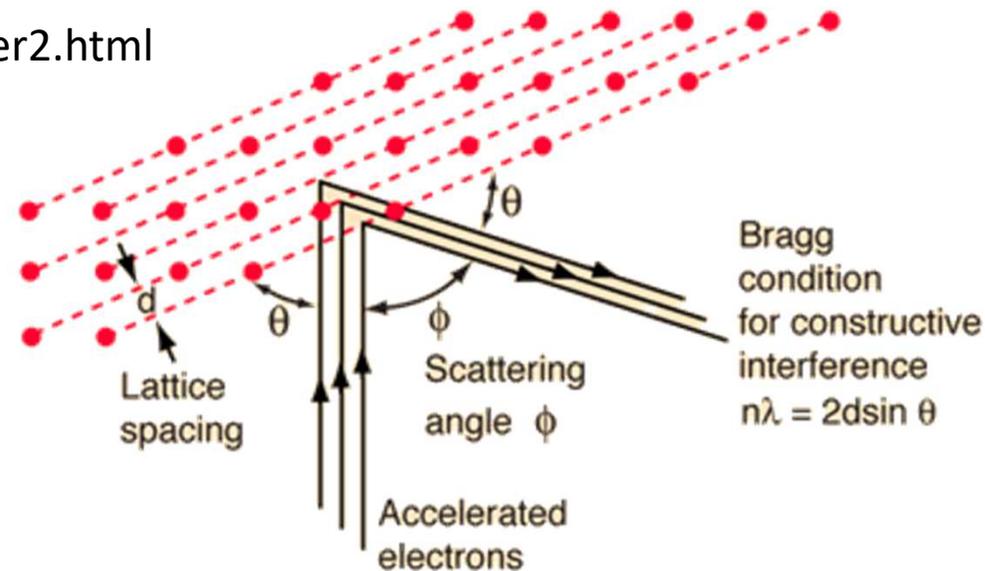
$$\text{Energia: } E = \frac{mv^2}{2} - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r} = \frac{Ze^2}{8\pi\epsilon_0} \frac{1}{r} - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r} = -\frac{Ze^2}{8\pi\epsilon_0} \frac{1}{r}$$

Behelyettesítve a kvantált sugarat:

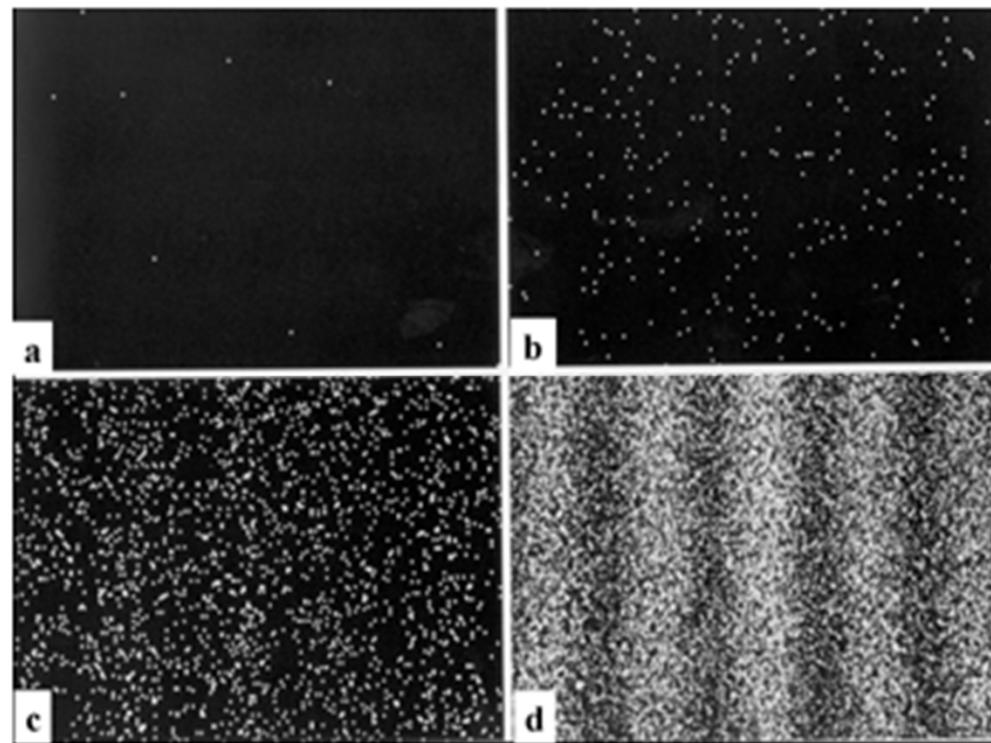
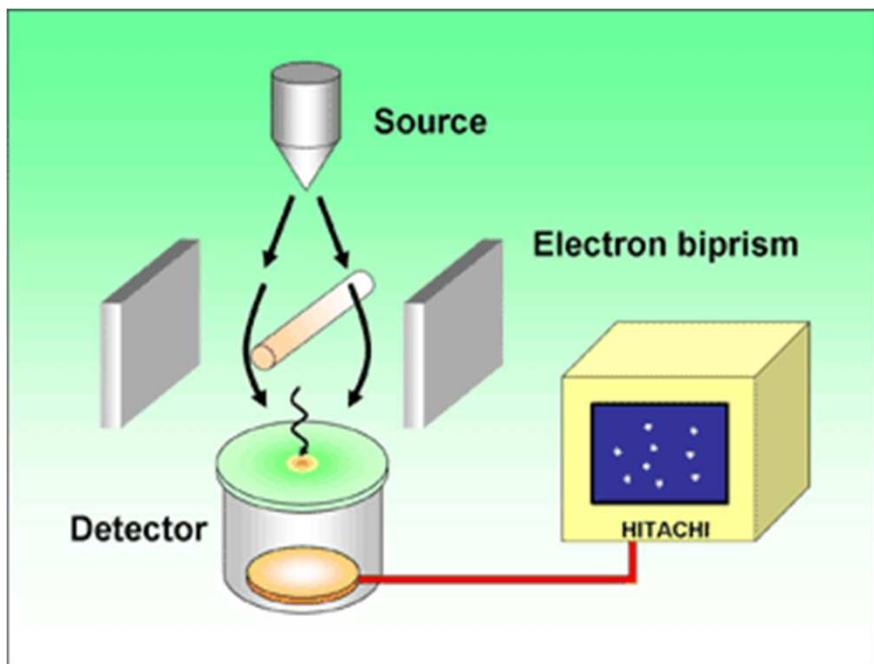
$$E_n = -\frac{Z^2 e^2}{8\pi\epsilon_0 a_0} \frac{1}{n^2} = -Z^2 \underbrace{\frac{me^4}{8h^2\epsilon_0^2}}_{=13.6 \text{ eV}} \frac{1}{n^2}$$

Elektron is hullámzik: akkor ő is tud interferenciaképet adni – Davisson-Germer, 1923-27

<http://hyperphysics.phy-astr.gsu.edu/hbase/quantum/DavGer2.html>



Egyes elektronokkal végzett kétréskísérletre 1989-ig kellett várni. Az elektronok is “egyszerre mennek át a két résen”



Tonomura, Hitachi, 1989

Az “igazi” kvantummechanika

A fotonhipotézis és a de Broglie-hipotézis is a hagyományos fizika barkácsolgatása = a kvantummechanika gyökerei.

Ennél egységesebb elmélet kell: ez az “új” vagy “igazi” kvantummechanika.

A kvantummechanika alapjai: részecskék hullámtulajdonságokkal

fotonok:

EM tér hullámozása kis adagokban terjed

Fotonok részecskék, de szuperpozícióban lehetnek

A dinamikát a Maxwell-egyenlet adja meg

elektronok:

Elemi részecskék

Interferencia → szuperpozícióban lehetnek

Mi határozza meg a dinamikát?
(*Schrödinger-egyenlet*)

Az elektront leíró hullámfüggvény a valószínűségi sűrűséggel van kapcsolatban

Elektron képes konstruktív/destruktív interferenciára:
mindig nemnegatív valószínűségi sűrűség mögött valami “alapvetőbb” van

r hely körüli kis dV térfogatban megtalálás valószínűsége: $P = |\Psi(\vec{r})|^2 dV$

hullámfüggvényt érdemes komplex értékűnek definiálni $\Psi(\vec{r}, t) \in \mathbb{C}$

Pl. síkhullám, V térfogatban: $\Psi_{\vec{k}}(\vec{r}, t) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\vec{k}\vec{r} - i\omega t}$

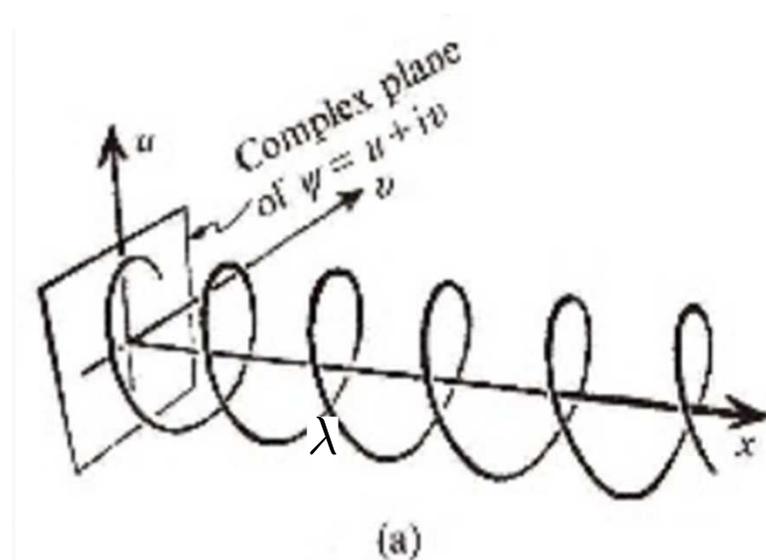
$$k = \frac{2\pi}{\lambda}$$

hullámszám

$$\omega = \frac{2\pi}{T}$$

körfrekvencia

További példa: hidrogénatom elektronja



Az impulzust a hullámfüggvényből deriválással kapjuk meg (de Broglie)

síkhullám:

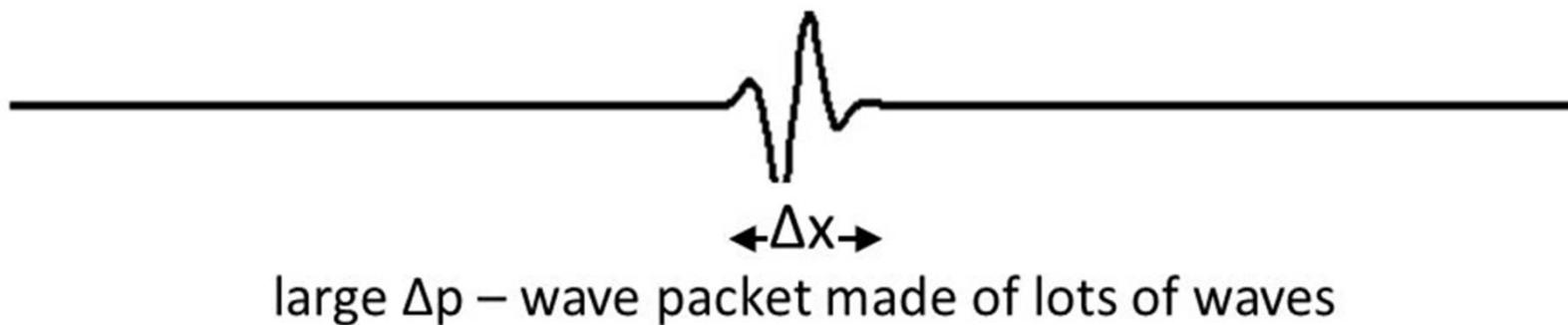
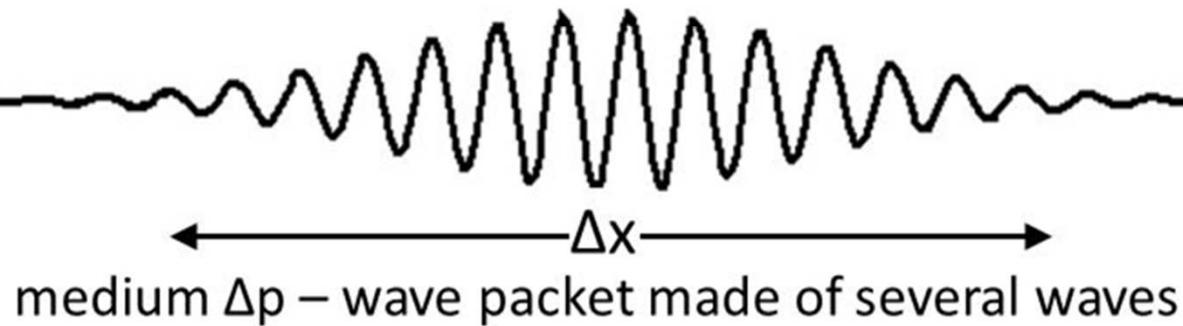
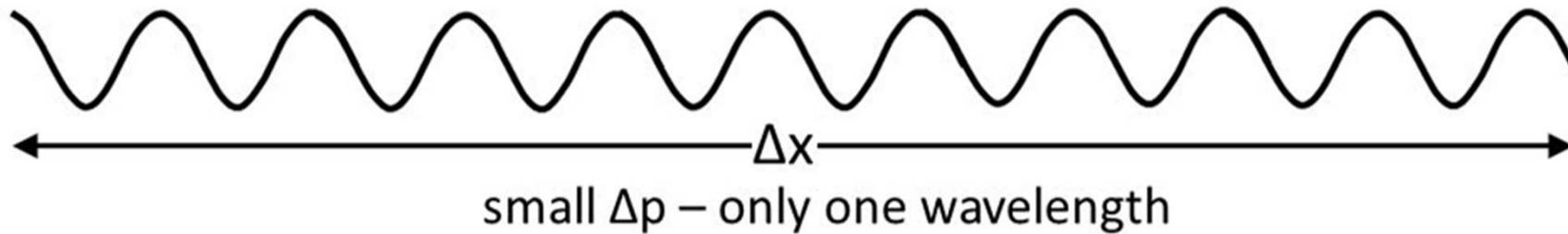
$$\Psi(r, t) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\vec{k}\vec{r} - i\omega t}$$

de Broglie: $p = \frac{h}{\lambda} = \hbar k$

síkhullámra: $\hat{p}_x = -i\hbar\partial_x$ $\hat{p}_y = -i\hbar\partial_y$ $\hat{p}_z = -i\hbar\partial_z$

Az impulzusnak egy **differenciáloperátort** feleltetünk meg.

Tipikus hullámfüggvényeknek a hullámhossza és a helye is bizonytalan



Határozatlansági reláció következménye a szabad részecske hullámfüggvényének szétfolyása

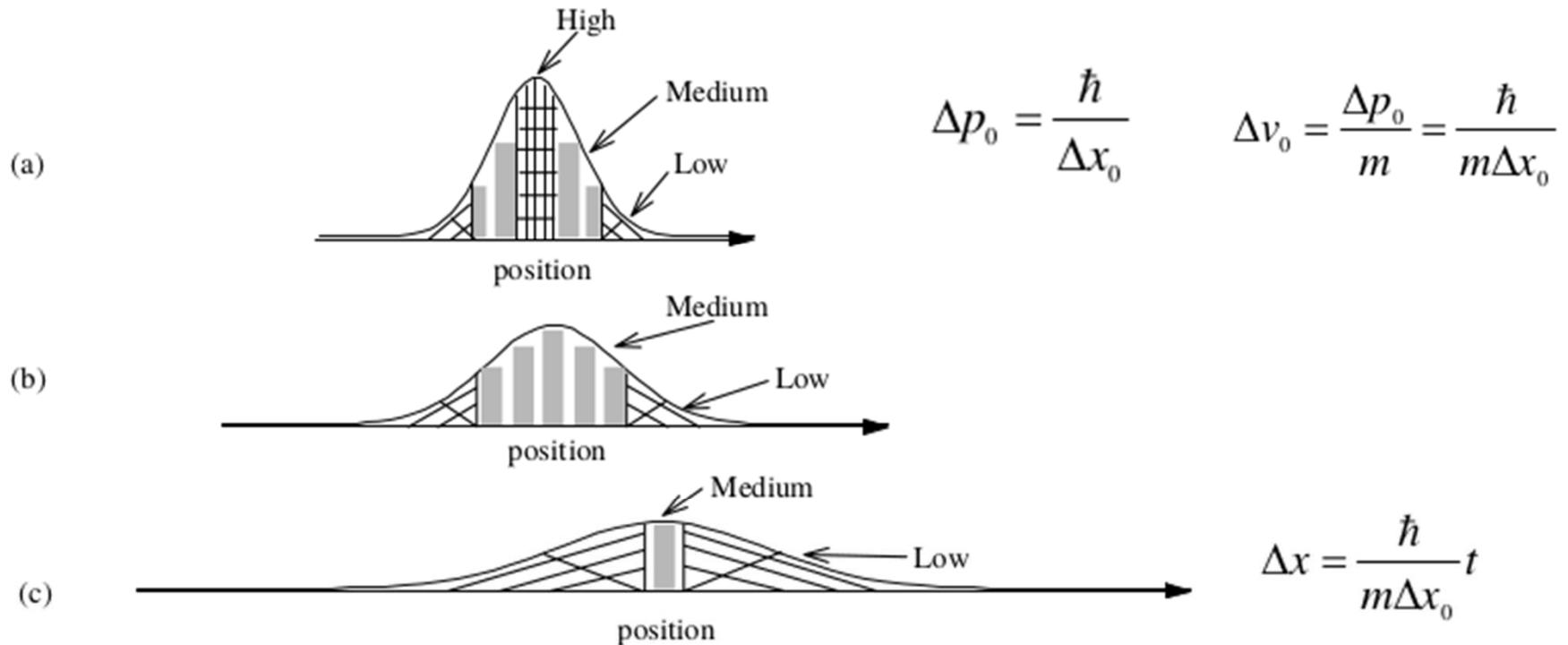


Figure 2: The wave function spreads out of time. Thus, the range of probability locations increases.

Thus, we see that the uncertainty in position at any later time is inversely proportional to the initial position. The better we know it now, the worse we will know it later. Hopefully this principle does not apply to your knowledge of quantum mechanics.

A határozatlansági reláció a hullámfüggvények tulajdonsága

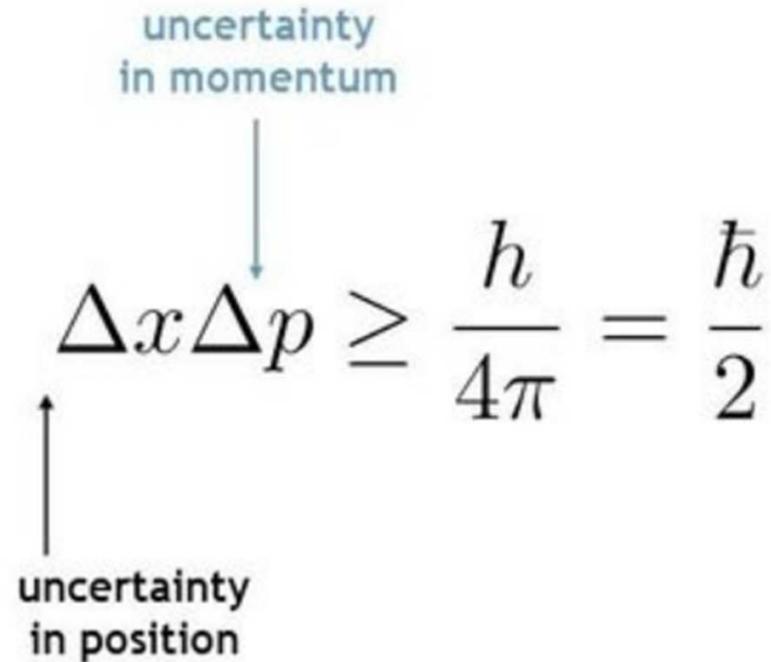
uncertainty
in momentum

↓

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{h}{4\pi} = \frac{\hbar}{2}$$

↑

uncertainty
in position



The more accurately you know the position (i.e., the smaller Δx is), the less accurately you know the momentum (i.e., the larger Δp is); and vice versa

A Schrödinger-egyenlet "levezethető" a Planck- és de Broglie-hipotézisekből, síkhullámból

síkhullám, ha nincsen potenciál: $\Psi(r, t) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\vec{k}\vec{r} - i\omega t}$

keresünk lineáris differenciálegyenletet, ami síkhullámra jól működik

$$\partial_t \Psi(r, t) = \text{const} \cdot (\partial_x^2 + \partial_y^2 + \partial_z^2) \Psi(\vec{r}, t)$$

Planck: $E = h\nu = \hbar\omega$

de Broglie: $p = \frac{h}{\lambda} = \hbar k$

$$\text{const} = -\frac{i\omega}{k^2} = -i\hbar \frac{E}{p^2} = -i\hbar \frac{p^2/2m}{p^2} = -i \frac{\hbar}{2m}$$

visszahelyettesítve:

$$i\hbar \partial_t \Psi(\vec{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m} (\partial_x^2 + \partial_y^2 + \partial_z^2) \Psi(\vec{r}, t)$$

A hullámfüggvény időfejlődését a Schrödinger-egyenlet írja le

$$\hbar = \frac{h}{2\pi}$$

$$i\hbar\partial_t\Psi(\vec{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m}(\partial_x^2 + \partial_y^2 + \partial_z^2)\Psi(\vec{r}, t) + V(\vec{r})\Psi(\vec{r}, t)$$

hasonlóan a Maxwell-egyenletekhez, parciális differenciálegyenlet
Jelen ismeretében megadja a jövőt

- értelmezése
- megoldása
- tömören, H differenciáloperátorral (Hamilton-operátor):

$$i\hbar\partial_t\Psi(\vec{r}, t) = \hat{H}\Psi(\vec{r}, t)$$

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \underbrace{(\partial_x^2 + \partial_y^2 + \partial_z^2)}_{\Delta} + V(\vec{r})$$

Laplace-operátor

A Hamilton-operátor a teljes energia operátora $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(x)$

A kvantummechanika eszköztára: hullámfüggvény, operátorok

elektron állapota:

komplex értékű hullámfüggvény

$$\Psi(\vec{r}, t)$$

helyének valószínűségeloszlása:

$$|\Psi(\vec{r}, t)|^2$$

hely komponensének várhatóértéke:

$$\langle x \rangle = \int d^3r |\Psi(\vec{r})|^2 x = \int d^3r \Psi(\vec{r})^* x \Psi(\vec{r})$$

impulzus:

$$\hat{p}_x = -i\hbar\partial_x$$

impulzus várhatóértéke:

$$\langle \hat{p}_x \rangle = \int d^3r \Psi(\vec{r})^* \hat{p}_x \Psi(\vec{r})$$

teljes energia:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V$$

időfejlődés a Schrödinger-egyenlet

$$i\hbar\partial_t\Psi = \hat{H}\Psi$$

A hullámfüggvény mértékegysége

A kvantummechanikai hullámfüggvény a helyhez komplex értékű mennyiséget rendel. Ennek mértékegysége is van, ami...

A) m^{-1}

B) m^{-3}

C) $m^{-3/2}$

D) $m^{3/2}$

Schrödinger-egyenlet helyesen

$$i\partial_t\Psi(\vec{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m}(\partial_x^2 + \partial_y^2 + \partial_z^2)\Psi(\vec{r},t) + V(\vec{r})\Psi(\vec{r},t)$$

A Schrödinger-egyenlet így nem helyes. Ahhoz, hogy kijavítsuk (gondold meg a mértékegységeket)...

- A)** A baloldalt szorozzuk meg \hbar -sal
- B)** A baloldalt osszuk el \hbar -sal
- C)** A jobboldalt szorozzuk el \hbar -sal
- D)** A potenciális energiát osszuk \hbar -sal

Elektron hullámhossza

Az elektron tömege $m_e = 9.11 \cdot 10^{-31} \text{kg}$, a Planck-állandó $h = 6.62 \cdot 10^{-34} \text{Js}$.

A fénysebesség 1%-ával haladó elektron hullámhossza...

A) 242 fm

B) 242 pm

C) 242 nm

D) 242 μm

Elektron hullámhossza

Az elektron tömege $m_e = 9.11 \cdot 10^{-31} \text{kg}$, a Planck-állandó $h = 6.62 \cdot 10^{-34} \text{ Js}$.

A fénysebesség 1%-ával haladó elektron hullámhossza...

$$p = mv = \frac{h}{\lambda} \rightarrow \lambda = \frac{h}{mv}$$

$$h = 6.62 \times 10^{-34} \text{ Js} \quad v = 3 \times 10^6 \frac{\text{m}}{\text{s}} \quad m = 9.11 \times 10^{-31} \text{ kg}$$

$$\lambda = \frac{6.62 \times 10^{-34}}{9.11 \times 10^{-31} \times 3 \times 10^6} \text{m} = 2.422 \times 10^{-10} \text{m} = 242 \times 10^{-12} \text{m} = 242 \text{ pm}$$

A Schrödinger-egyenlet energiasajátállapotokra is vonatkozik. Ez az ún. időfüggetlen Schrödinger-egyenlet

$$i\hbar\partial_t\Psi(\vec{r}, t) = \hat{H}\Psi(\vec{r}, t)$$

keressük energiasajátállapotokat, $E=\hbar\omega$ energiával

$$\Psi(\vec{r}, t) = e^{-i\omega t}\psi(\vec{r})$$

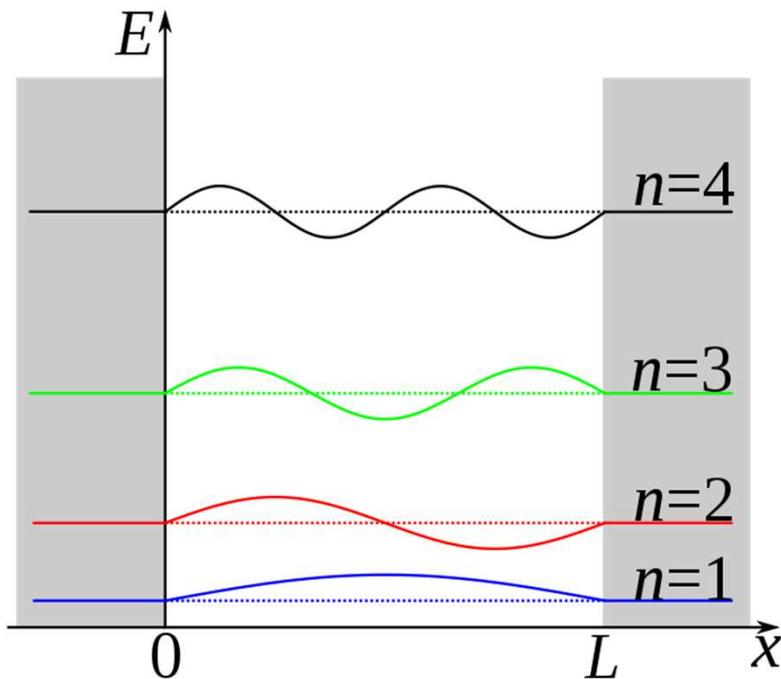
működik, ha ψ sajátfüggvénye H operátornak (helyettesítsd be!)

$$\hat{H}\psi(\vec{r}) = \hbar\omega\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r})$$

1D dobozba zárt elektron

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2\psi(x) + V(x)\psi(x) = E\psi(x) \quad \psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right)$$

$V(x) = 0$, ha $0 < x < L$; $V(x) = \infty$ egyebkent



Mint a két végén befogott húr rezgései

A véges térfogatba zárás kvantálja a spektrumot: nem változhat folytonosan az energia, bizonyos megengedett hullámszámértékek \rightarrow energiák:

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

- Felfelé ritkuló spektrum
- Gerjesztések: ugrások szintek között
- Kisebb doboz \rightarrow "Drágább" gerjeszteni

1D→3D dobozba zárt elektron

$$-\frac{\hbar^2}{2m}(\partial_x^2 + \partial_y^2 + \partial_z^2)\psi(\vec{r}) + V(\vec{r})\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r})$$

Szorzat-trükk: Kereshetjük szorzatalakban a megoldást (potenciál összeg)

$$\psi_{\vec{n}}(\vec{r}) = \sqrt{\frac{8}{V}} \sin\left(\frac{n_x\pi}{L_x}x\right) \sin\left(\frac{n_y\pi}{L_y}y\right) \sin\left(\frac{n_z\pi}{L_z}z\right)$$

3 kvantumszám

$$E_{\vec{n}} = \frac{\hbar^2\pi^2}{2m} \left(\frac{n_x^2}{L_x^2} + \frac{n_y^2}{L_y^2} + \frac{n_z^2}{L_z^2} \right)$$

-Kisebb doboz → “Drágább” gerjeszteni

- Ha $L_x, L_y \ll L_z$: alacsony energián x, y irányú mozgás “kifagy”, 1D

- Ha $L_x \ll L_y, L_z$: alacsony energián x irányú mozgás “kifagy”, 2D

- megengedett hullámszámvektor-értékek rácspontok

Dobozba zárt elektron

A doboz minden oldalát $1/10$ részére zsugorítom.
Az alapállapotú energia hányszorosára változik?

- A) 10
- B) 100
- C) 1 000 000
- D) $1/10$

Számolós feladat

Egy 200 pm élhosszúságú kockában egy elektron van a legalacsonyabb energiás állapotában. Legalább hány eV-os foton kell, hogy felgerjesszük?

(Az elektron tömege $m_e = 9.11 \cdot 10^{-31}$ kg, a Planck-állandó $h = 6.62 \cdot 10^{-34}$ Js.

1 eV = $1.602 \cdot 10^{-19}$ J)

$$E_{n_x, n_y, n_z} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m} \left(\frac{n_x^2}{L_x^2} + \frac{n_y^2}{L_y^2} + \frac{n_z^2}{L_z^2} \right) \quad n_x, n_y, n_z = 1, 2, 3, \dots$$

$$L_x = L_y = L_z = L \quad E_{n_x, n_y, n_z} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2)$$

$$E_{1,1,1} = \frac{3\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} \quad E_{2,1,1} = E_{1,2,1} = E_{1,1,2} = \frac{3\hbar^2 \pi^2}{mL^2}$$

$$E_{\text{ph}} = E_{2,1,1} - E_{1,1,1} = \frac{3\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} = \frac{3h^2}{8mL^2}$$

$$E_{\text{ph}} = \frac{3 \times (6.62 \times 10^{-34})^2}{8 \times 9.11 \times 10^{-31} \times (200 \times 10^{-12})^2} \frac{\text{J}^2 \text{s}^2}{\text{kg m}^2} = 4.51 \times 10^{-18} \text{ J}$$

$$E_{\text{ph}} = \frac{4.51 \times 10^{-18}}{1.6 \times 10^{-19}} \text{ eV} = 28.15 \text{ eV}$$

Számolós feladat

Egy 200 pm élhosszúságú kockában egy elektron 8. energiasajátállapota hányszorosan degenerált?

	n_x	n_y	n_z	\vec{n}^2	deg.
1.	1	1	1	3	1
2.	2	1	1	6	3
3.	2	2	1	9	3
4.	3	1	1	11	3
5.	2	2	2	12	1
6.	3	2	1	14	6
7.	3	2	2	17	3
8.	4	1	1	18	3

A 8. energiasajátállapot tehát háromszorosan degenerált.

Számolós feladat

Egy nanodrótot közelítsünk 3x3x200 nm élhosszúságú négyzetes hasákkal.

- Hány eV a minimális gerjesztési energia?

$$E_{n_x, n_y, n_z} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m} \left(\frac{n_x^2}{L_x^2} + \frac{n_y^2}{L_y^2} + \frac{n_z^2}{L_z^2} \right) \quad n_x, n_y, n_z = 1, 2, 3, \dots$$

$$L_x = L_y = 3 \text{ nm} \quad L_z = 200 \text{ nm}$$

$$\begin{aligned} E_{n_x, n_y, n_z} &= \frac{h^2}{8m} \left(\frac{n_x^2 + n_y^2}{L_x^2} + \frac{n_z^2}{L_z^2} \right) = \frac{h^2}{8mL_z^2} \left((n_x^2 + n_y^2) \left(\frac{200}{3} \right)^2 + n_z^2 \right) \\ &= \frac{h^2}{8mL_z^2} (4444 (n_x^2 + n_y^2) + n_z^2) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} E_{1,1,2} - E_{1,1,1} &= \frac{h^2}{8mL_z^2} (4 - 1) = \frac{3 \times (6.62 \times 10^{-34})^2}{8 \times 9.11 \times 10^{-31} \times (200 \times 10^{-9})^2} J = 4.51 \times 10^{-24} J \\ &= \frac{4.51 \times 10^{-24}}{1.6 \times 10^{-19}} \text{ eV} = 0.28 \mu\text{eV} \end{aligned}$$

Számolós feladat

Egy nanodrótot közelítsünk $3 \times 3 \times 200$ nm élhosszúságú négyzetes hasákkal.

Az első néhány energiasajátállapotig még egydimenziósnek tűnik a drót.

Hányadik energiasajátállapotnál jelennek meg az x és y irányú gerjesztések?

$$E_{1,1,n_z} = \frac{h^2}{8mL_z^2} (8888 + n_z^2)$$

$$E_{2,1,1} = \frac{h^2}{8mL_z^2} (5 \times 4444 + 1) = \frac{h^2}{8mL_z^2} 22221$$

$$8888 + n_z^2 \geq 22221 \rightarrow n_z \geq 116$$

Számolós kérdés (ZH)

Vegyünk egy 1nm élhosszúságú kocka alakú dobozba zárt elektront.

A legalacsonyabb energiás állapotban (alapállapot) hány eV a kinetikus energiája?

Az elektron energiája csak kinetikus energia, mivel a doboz belsejében a potenciális energia zérus.

$$E_{n_x, n_y, n_z} = \frac{h^2}{8mL^2} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2) \quad n_x, n_y, n_z = 1, 2, 3, \dots$$
$$L = 1 \text{ nm}$$

$$E_{111} = \frac{3h^2}{8mL^2} = \frac{3 \times (6.62 \times 10^{-34})^2}{8 \times 9.11 \times 10^{-31} \times (10^{-9})^2} \text{ J} = 1.8 \times 10^{-19} \text{ J}$$
$$= \frac{1.8 \times 10^{-19}}{1.6 \times 10^{-19}} \text{ eV} = 1.125 \text{ eV}$$

Számolós kérdés (ZH)

Vegyünk egy 1 nm élhosszúságú kocka alakú dobozba zárt elektront.

Mekkora a kinetikus energiája az első gerjesztett (második legalacsonyabb energiájú) állapotban?

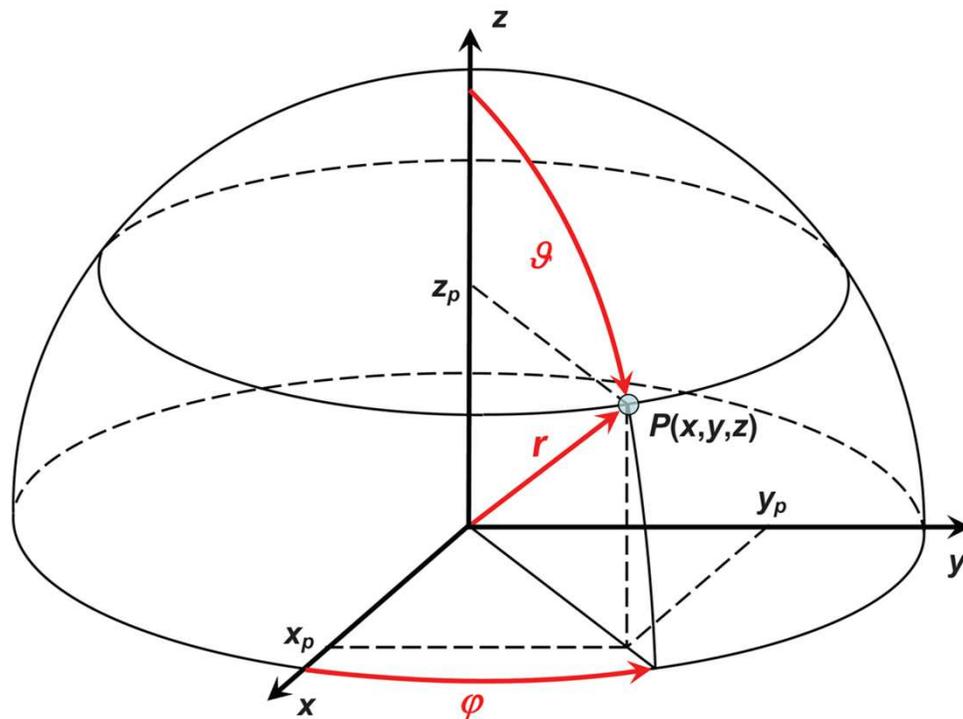
$$E_{n_x, n_y, n_z} = \frac{h^2}{8mL^2} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2) \quad n_x, n_y, n_z = 1, 2, 3, \dots$$
$$L = 1 \text{ nm}$$

$$E_{211} = \frac{6h^2}{8mL^2} = \frac{6 \times (6.62 \times 10^{-34})^2}{8 \times 9.11 \times 10^{-31} \times (10^{-9})^2} \text{ J} = 3.6 \times 10^{-19} \text{ J}$$
$$= \frac{3.6 \times 10^{-19}}{1.6 \times 10^{-19}} \text{ eV} = 2.25 \text{ eV}$$

Az elektron energiája csak kinetikus energia, mivel a doboz belsejében a potenciális energia zérus.

Hidrogénatom Schrödinger-egyenlete: a potenciál nem összeg, nehezebb

$$-\frac{\hbar^2}{2m}(\partial_x^2 + \partial_y^2 + \partial_z^2)\psi(\vec{r}) - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{|\vec{r}|}\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r})$$



gömbi koordinátákra érdemes áttérni,
ott szorzatalakkal próbálkozni

jellemző hosszskála:

$$a = \frac{\hbar^2 4\pi\epsilon_0}{me^2} = 53\text{pm}$$

redukált távolság a magtól: $\rho = \frac{r}{a}$

Hidrogénatom Schrödinger-egyenlete: megoldások 3 kvantumszám alapján, energia csak n-től függ

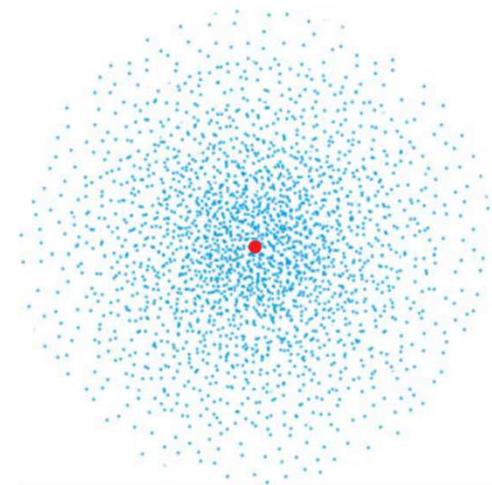
$$-\frac{\hbar^2}{2m}(\partial_x^2 + \partial_y^2 + \partial_z^2)\psi(\vec{r}) - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{|\vec{r}|}\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r})$$

3 kvantumszám: n főkvantumszám, l mellék-, m_l = mágneses-

$$n = 1, 2, \dots; \quad l = 0, 1, \dots, (n - 1); \quad m_l = -l, -(l - 1), \dots, l - 1, l$$

Energia csak az n főkvantumszámtól függ

$$E_n = -Z^2 \underbrace{\frac{me^4}{8\epsilon_0^2 h^2}}_{13.6\text{eV}} \frac{1}{n^2}$$



alapállapot:

$$\psi(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi a^{3/2}}} e^{-r/a}$$

H-atom: Néhány energiasajátállapot

$$n = 1 \quad \ell = 0 \quad m = 0$$

$$n = 2 \quad \ell = 0 \quad m = 0$$

$$\ell = 1 \quad m = 0$$

$$\ell = 1 \quad m = \pm 1$$

$$n = 3 \quad \ell = 0 \quad m = 0$$

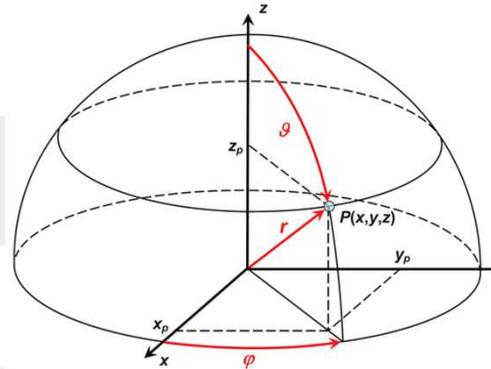
$$\ell = 1 \quad m = 0$$

$$\ell = 1 \quad m = \pm 1$$

$$\ell = 2 \quad m = 0$$

$$\ell = 2 \quad m = \pm 1$$

$$\ell = 2 \quad m = \pm 2$$



$$\psi_{100} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{\frac{3}{2}} e^{-\rho}$$

$$\psi_{200} = \frac{1}{\sqrt{32\pi}} \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{\frac{3}{2}} (2 - \rho) e^{-\frac{\rho}{2}}$$

$$\psi_{210} = \frac{1}{\sqrt{32\pi}} \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{\frac{3}{2}} \rho e^{-\rho/2} \cos(\theta)$$

$$\psi_{21\pm 1} = \frac{1}{\sqrt{64\pi}} \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{\frac{3}{2}} \rho e^{-\rho/2} \sin(\theta) e^{\pm i\phi}$$

$$\psi_{300} = \frac{1}{81\sqrt{3\pi}} \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{\frac{3}{2}} (27 - 18\rho + 2\rho^2) e^{-\rho/3}$$

$$\psi_{310} = \frac{1}{81} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{\frac{3}{2}} (6r - \rho^2) e^{-\rho/3} \cos(\theta)$$

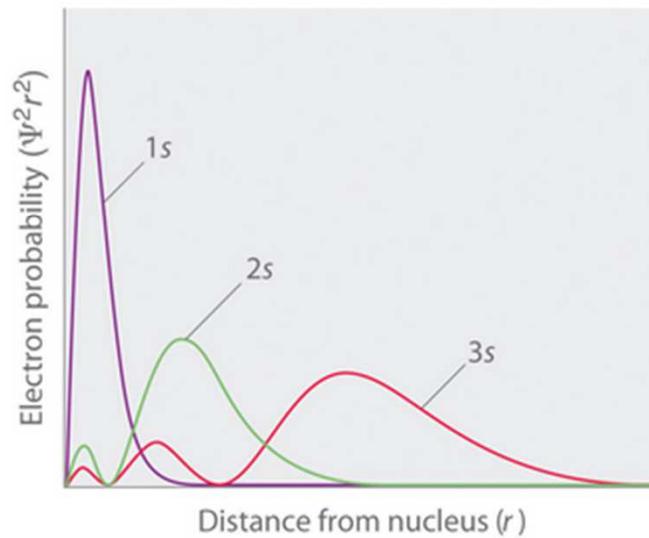
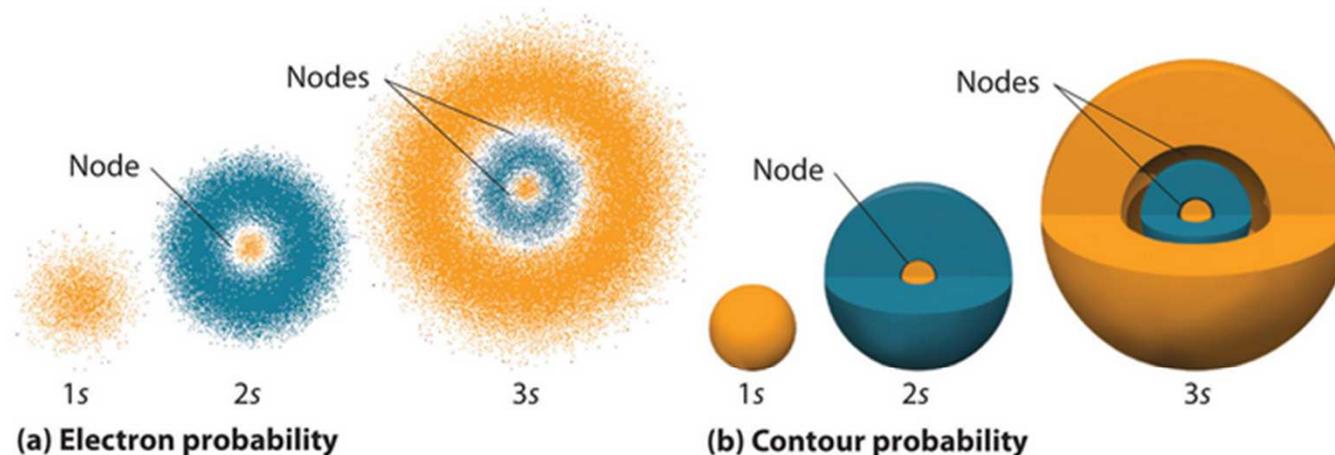
$$\psi_{31\pm 1} = \frac{1}{81\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{\frac{3}{2}} (6\rho - \rho^2) e^{-\rho/3} \sin(\theta) e^{\pm i\phi}$$

$$\psi_{320} = \frac{1}{81\sqrt{6\pi}} \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{\frac{3}{2}} \rho^2 e^{-\rho/3} (3\cos^2(\theta) - 1)$$

$$\psi_{32\pm 1} = \frac{1}{81\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{\frac{3}{2}} \rho^2 e^{-\rho/3} \sin(\theta) \cos(\theta) e^{\pm i\phi}$$

$$\psi_{32\pm 2} = \frac{1}{162\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{\frac{3}{2}} \rho^2 e^{-\rho/3} \sin^2(\theta) e^{\pm 2i\phi}$$

A hullámfüggvényeket nehéz vizualizálni



(c) Radial probability

Azonos energiájú megoldások szuperpozíciója is megoldás



1s₀

“Fizikus” hullámfüggvények:
színek = komplex fázis

“Vegyész” hullámfüggvények:
valós értékű lineárkombinációk szín = +/-



2s₀



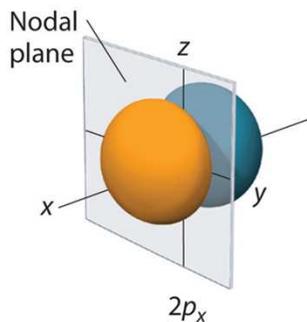
2p₋₁



2p₀

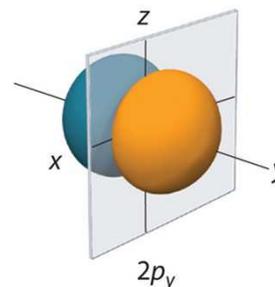


2p₁



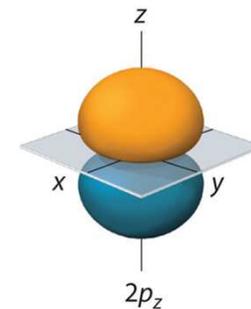
2p_x

$$e^{i\phi} - e^{-i\phi} = 2i \sin \phi$$



2p_y

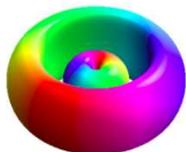
$$e^{i\phi} + e^{-i\phi} = 2 \cos \phi$$



2p_z



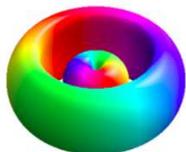
3s₀



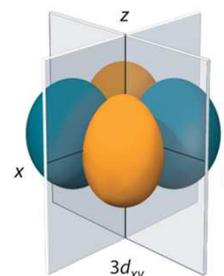
3p₋₁



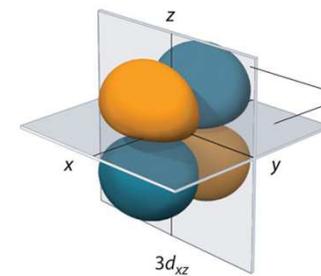
3p₀



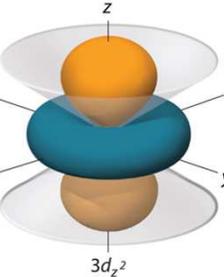
3p₁



3d_{xy}



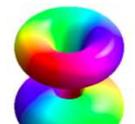
3d_{xz}



3d_{z²}



3d₋₂



3d₋₁



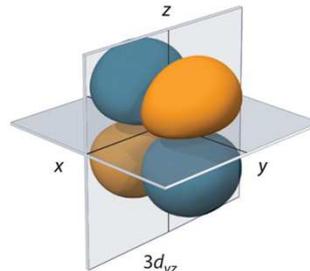
3d₀



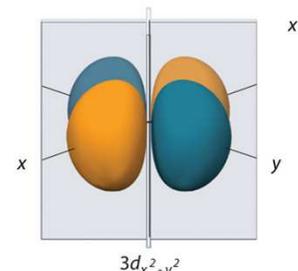
3d₁



3d₂



3d_{yz}



3d_{x²-y²}

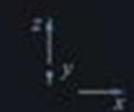
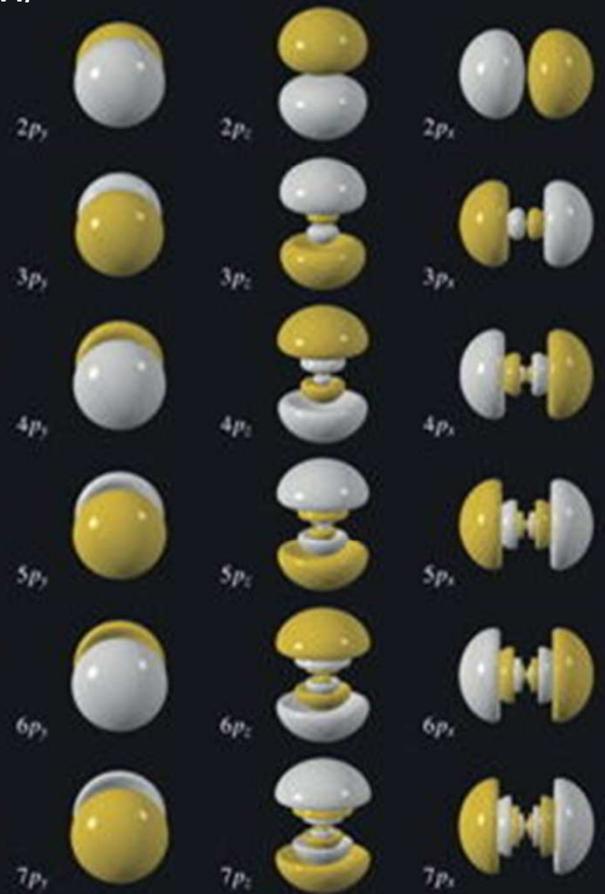
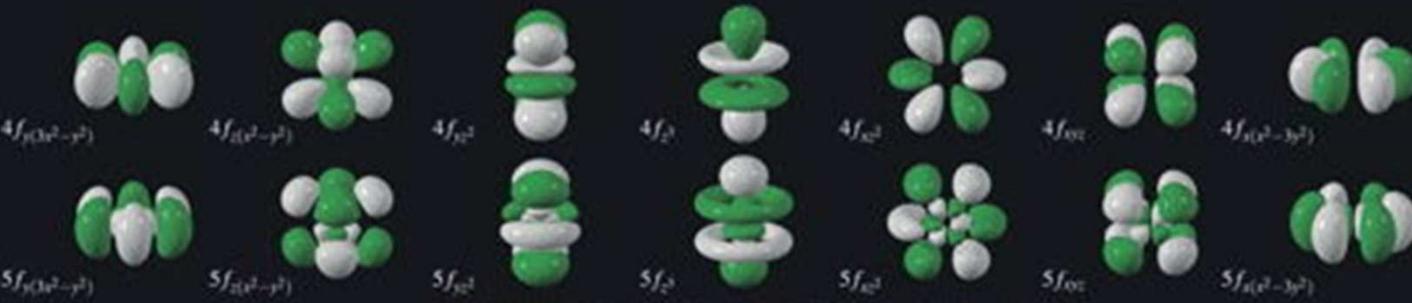
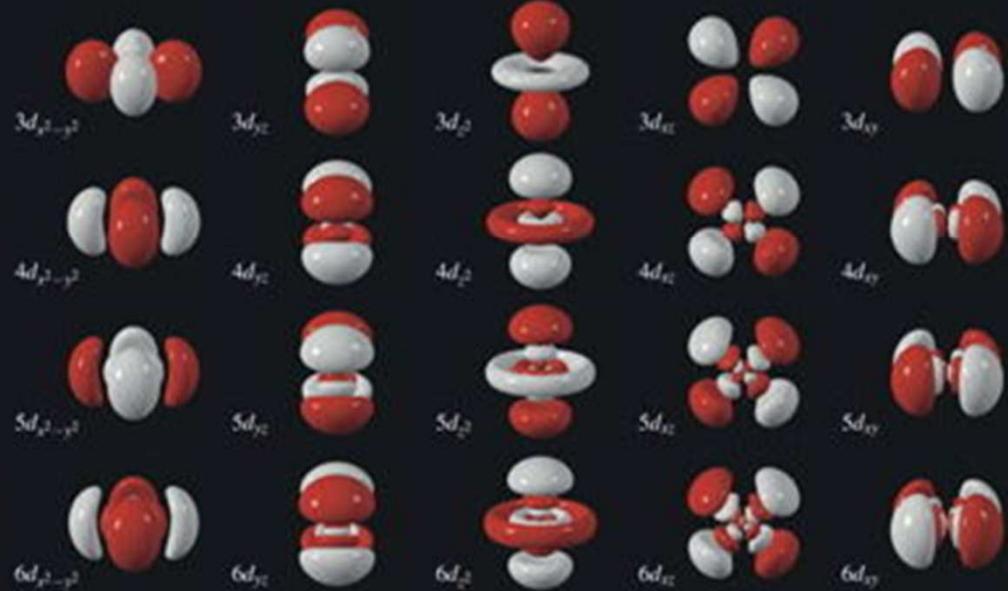
The Orbitron gallery of atomic orbitals



Forrás: <https://winter.group.shef.ac.uk/orbitron/>



1s
2s
3s
4s
5s
6s
7s



H-atom

Ha a vákuum dielektromos állandója 10-szeresére nő, hányszorosára változik a H-atombeli elektron hullámfüggvényének lineáris mérete?

A) 10

B) 100

C) 1/10

D) 1/100

$$r_n = a_0 \frac{n^2}{Z}$$

$$a_0 = \frac{\varepsilon_0 h^2}{\pi m e^2} = 5,2917721067(12) \times 10^{-11} \text{ m}$$

H-atom

Ha az elektron tömegét gondolatban 10-edrésére csökkentem, hányszorosára változik a H-atombeli elektron alapállapotú energiája?

- A) 10
- B) 100
- C) 1/10
- D) 1/100

$$E_n = -Z^2 \underbrace{\frac{me^4}{8\epsilon_0^2 h^2}}_{13.6\text{eV}} \frac{1}{n^2}$$

H-atom

Hányszorosan degenerált a H-atom 4. energiasajátállapota?

A) 4

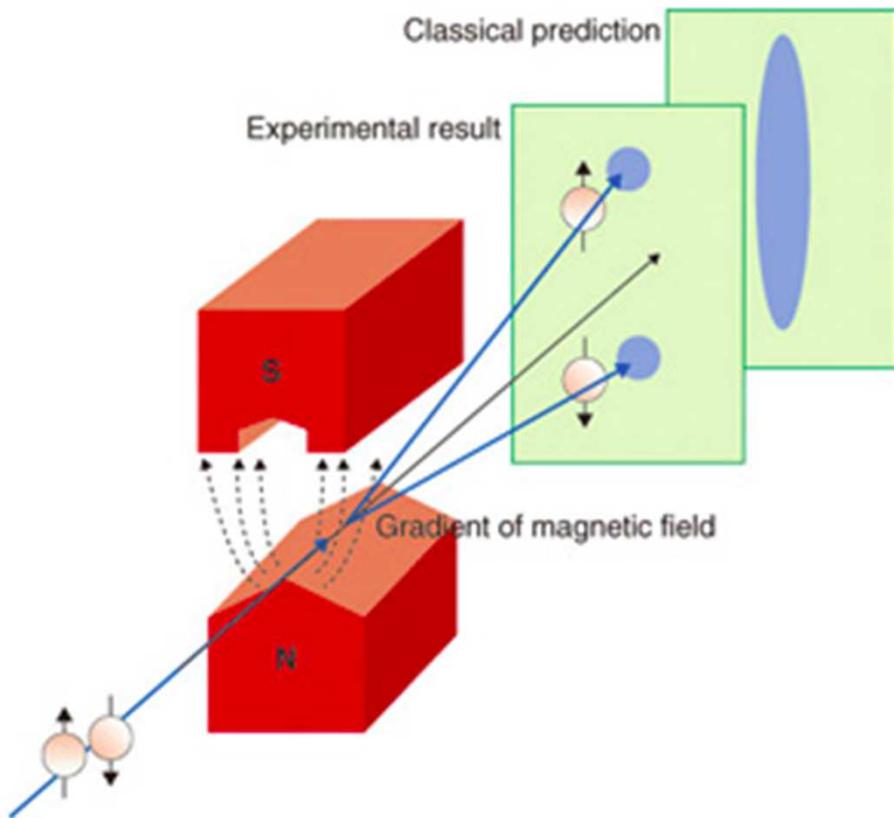
B) 7

C) 16

D) 32

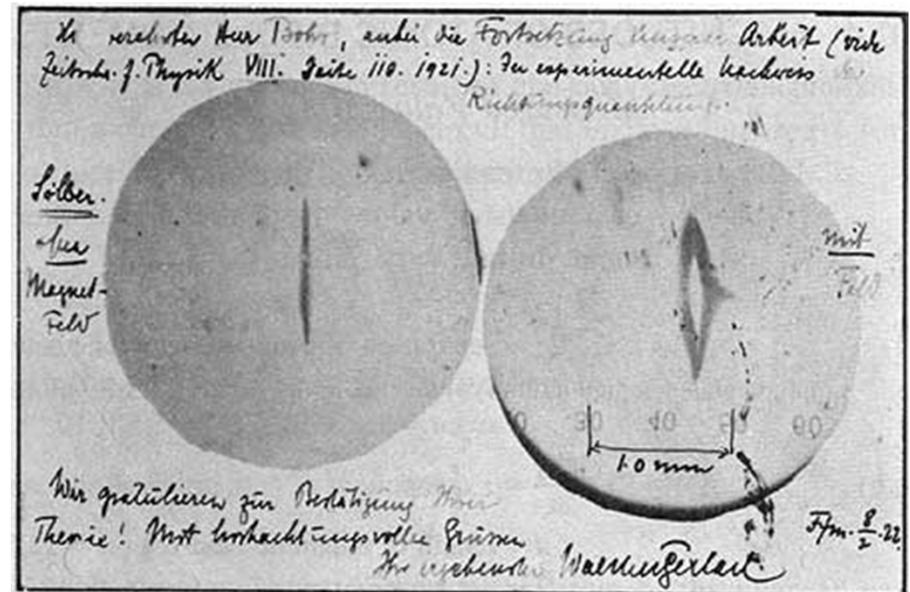
$$\sum_{\ell=0}^{n-1} \sum_{m=-\ell}^{\ell} 1 = \sum_{\ell=0}^{n-1} (2\ell + 1) = 2 \sum_{\ell=1}^{n-1} \ell + n = 2 \frac{n(n-1)}{2} + n = n^2$$

1922: Stern-Gerlach kísérlet: Mérjük ki, merre állnak az atomi pályák!

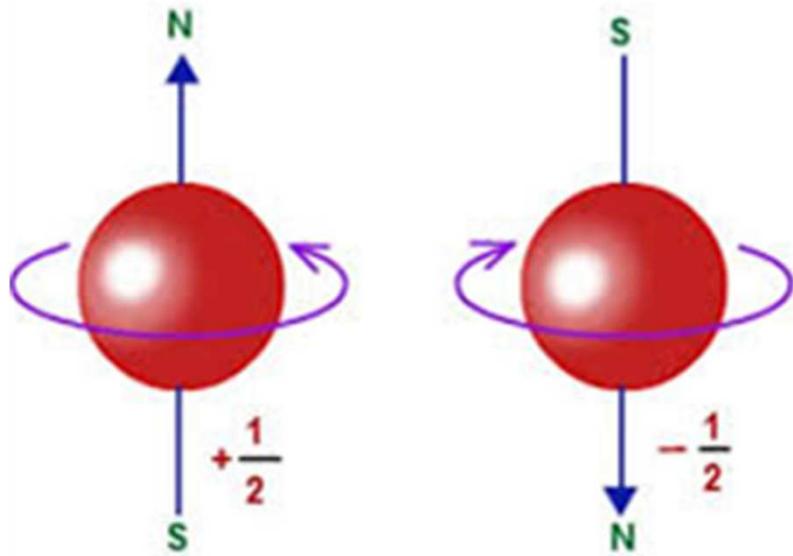


Anyagi támogatás:
Henry Goldman (Goldman-Sachs egyik alapítója)

Levelezőlap, Gerlachtól Bohrnak



Valójában a Stern-Gerlach kísérletben az elektron spinje okozza az effektust: kiszűri a le- és felfelé álló spinű részecskéket



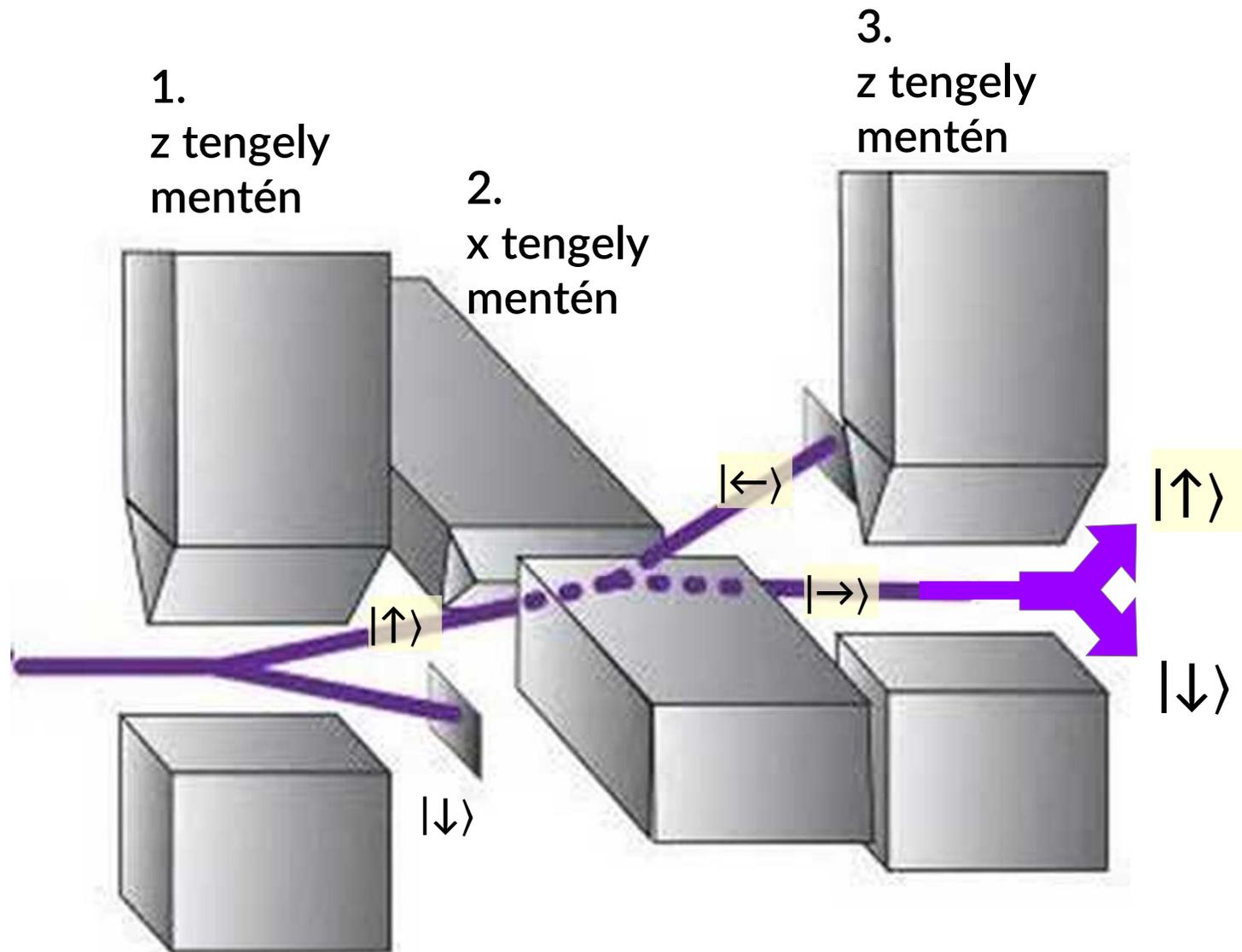
Egyszerűsített jelölés:

$|\uparrow\rangle$
 $|\downarrow\rangle$
 $|\leftarrow\rangle$
 $|\rightarrow\rangle$

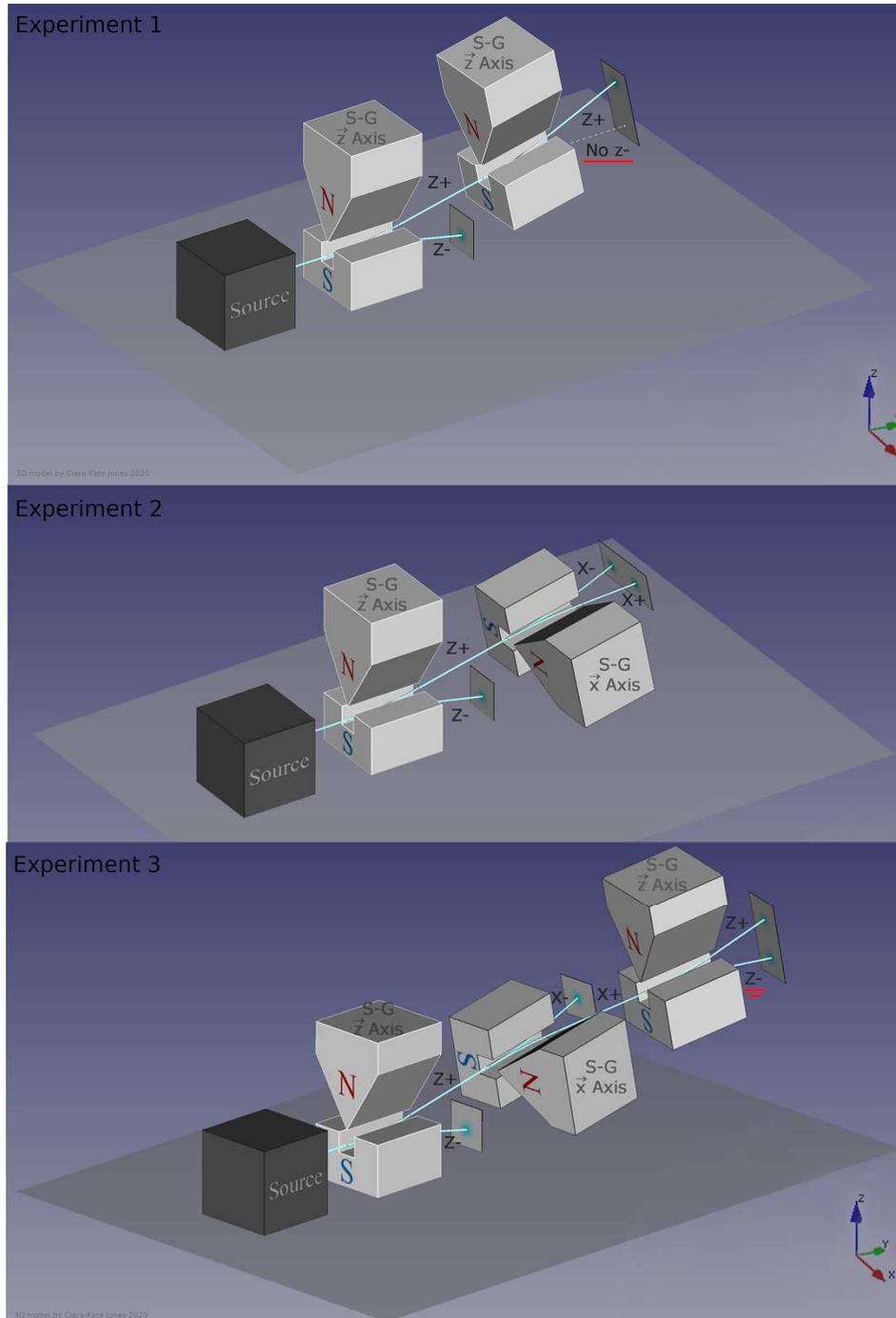


1944: Nobel-díj Sternnek, Gerlach kimarad
(nemzetiszocialista rezsimmel
való együttműködés)

1922: Stern-Gerlach kísérlet: Döntésre kényszeríti a spineket!

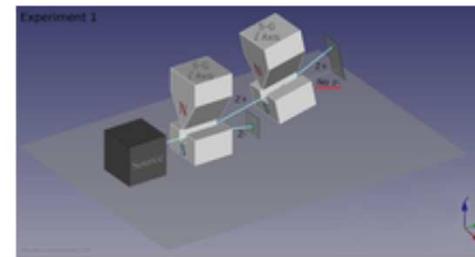


https://en.wikipedia.org/wiki/Stern%E2%80%93Gerlach_experiment



Experiment 1

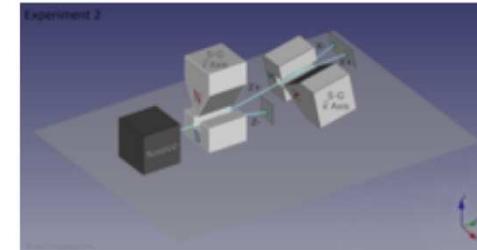
The top illustration shows that when a second, identical, S-G apparatus is placed at the exit of the first apparatus, **only $z+$ is seen** in the output of the second apparatus. This result is expected since all neutrons at this point are expected to have $z+$ spin, as only the $z+$ beam from the first apparatus entered the second apparatus.^[10]



Exp. 1 - Notice that no $z-$ neutrons are detected at the second S-G analyzer

Experiment 2

The middle system shows what happens when a different S-G apparatus is placed at the exit of the $z+$ beam resulting of the first apparatus, the second apparatus measuring the deflection of the beams on the x axis instead of the z axis. The second apparatus produces $x+$ and $x-$ outputs. Now classically we would expect to

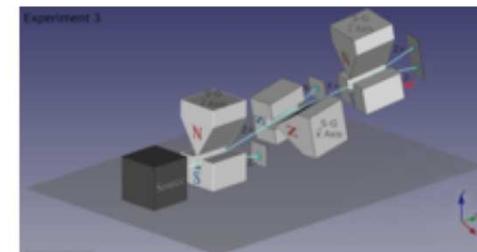


Exp. 2 - The z -spin is known, now measuring the x -spin.

have one beam with the x characteristic oriented $+$ and the z characteristic oriented $+$, and another with the x characteristic oriented $-$ and the z characteristic oriented $+$.^[10]

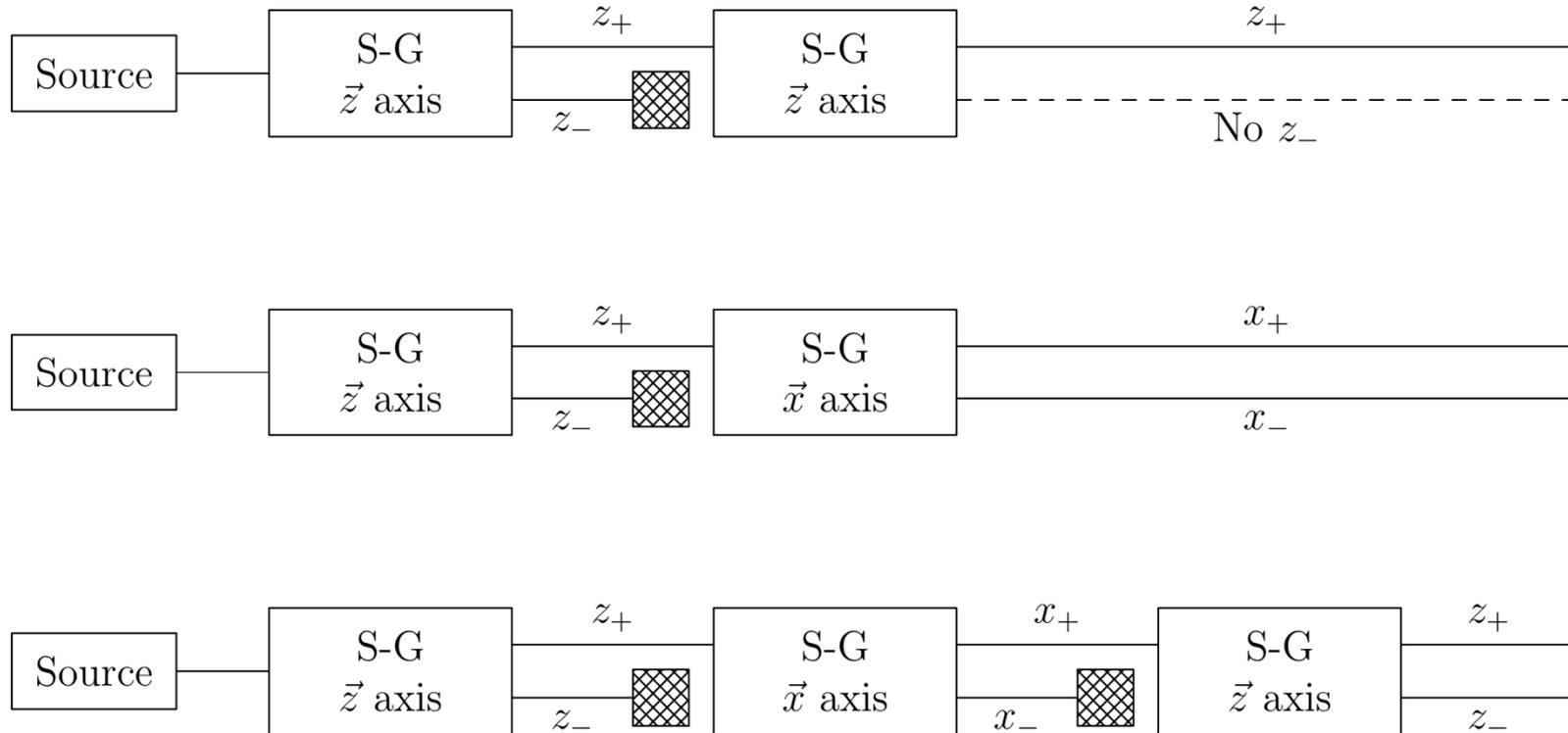
Experiment 3

The bottom system contradicts that expectation. The output of the third apparatus which measures the deflection on the z axis again shows an **output of $z-$** as well as $z+$. Given that the input to the second S-G apparatus consisted **only of $z+$** , it can be inferred that a S-G apparatus must be altering the states of the particles that pass through it. This experiment can be interpreted to exhibit the uncertainty principle: since the angular momentum cannot be measured on two perpendicular directions at the same time, the measurement of the angular momentum on the x direction destroys the previous determination of the angular momentum in the z direction. That's why the third apparatus measures renewed $z+$ and $z-$ beams like the x measurement really made a clean slate of the $z+$ output.^[10]



Exp. 3 - Neutrons thought to have only $z+$ spin are measured again, finding that the z -spin has been 'reset'.

https://en.wikipedia.org/wiki/Stern%E2%80%93Gerlach_experiment



A spin bármire állhat, de ha megmérjük, két opció között dönt: elemi bit

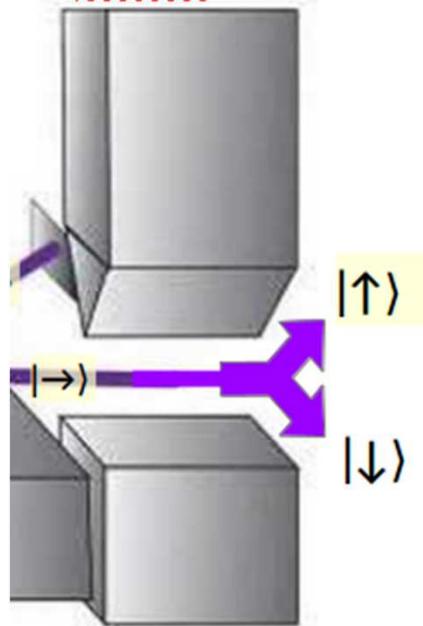
Mérés előtt:
szuperpozíció

$$|\rightarrow\rangle = |\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle$$

Relatív fázis

Mérés

3.
z tengely
mentén



Mérés után:
Egyik állapot

$$|\uparrow\rangle \text{ vagy } |\downarrow\rangle$$

Relatív fázis fontos,
eldönti, merre áll a spin

$$|\leftarrow\rangle = |\uparrow\rangle - |\downarrow\rangle$$

A spin bármerre állhat, de ha megmérjük, két opció között dönt: elemi bit

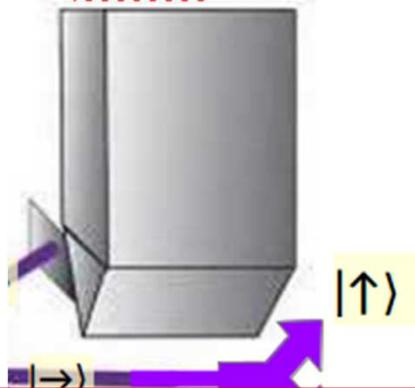
Mérés előtt:
szuperpozíció

$$|\rightarrow\rangle = |\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle$$

Relatív fázis

Mérés

3.
z tengely
mentén



Mérés után:
Egyik állapot

$|\uparrow\rangle$ vagy $|\downarrow\rangle$

$$\psi = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} \rightarrow \varphi_{1,z+} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \varphi_{1,z-} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \rightarrow \psi = c_1 \underline{\varphi_{1,z+}} + c_2 \varphi_{1,z-}$$

$$\varphi_{x+} = \frac{\sqrt{2}}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad \varphi_{x-} = \frac{\sqrt{2}}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \rightarrow \varphi_{1,z+} = \frac{\sqrt{2}}{2} (\underline{\varphi_{x+}} + \varphi_{x-})$$

$$\varphi_{x+} = \frac{\sqrt{2}}{2} (\underline{\varphi_{1,z+}} + \varphi_{1,z-})$$

Relatív fázis fo
eldönti, merre



Einstein: Az elektron nem tud “spontán” dönteni!
Kell legyen valami rejtett tulajdossága, ami
az eredményt megjósolja
→ *lokális realizmus*

Bohr: ez csak üres filozofálgatás,
az elmélet helyesen jósolja a kísérletet,
csak ez számít
→ *pragmatizmus*

A kvantummechanikai mérés: beavatkozás, ”beugrasztja” a hullámfüggvényt

THE COPENHAGEN INTERPRETATION

The act of measurement causes all the possible positions of the wave function to collapse into a single point. What happens to the other positions? According to Hugh Everett, they split off into other worlds.

