

Modern fizika vegyészmérnököknek

4. óra: Schrödinger-egyenlet, hidrogénatom, spin, mérés

Budapest, 2022. október 5.

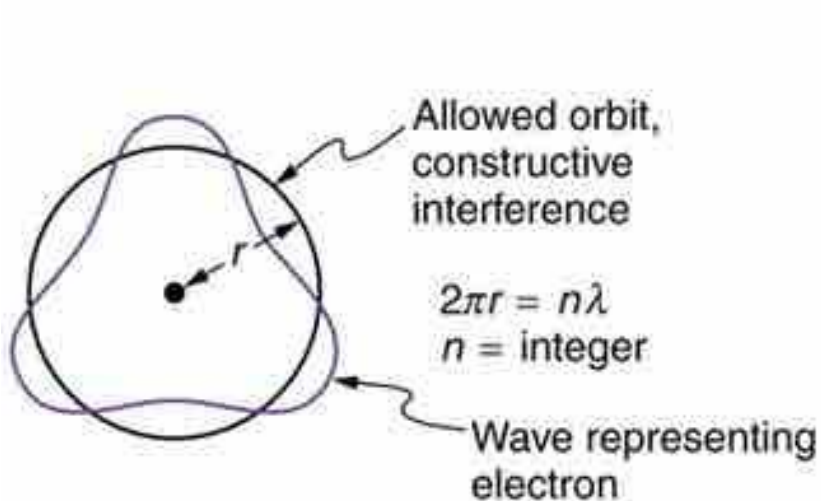
1924, de Broglie herceg doktorija → a Bohr-féle atommodellt magyarázza, hogy az elektronok hullámok!

foton impulzusa:
(ismert)

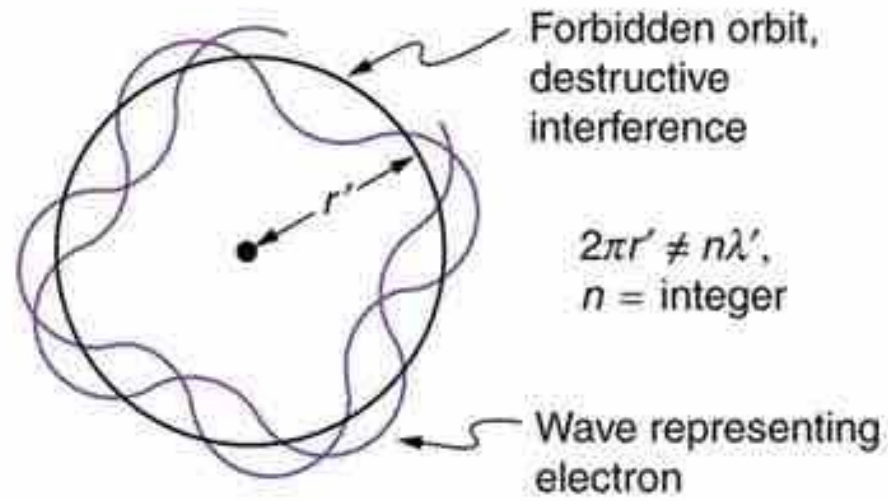
$$p = \frac{h}{\lambda}$$

elektron hullámhossza:
(posztulált)

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



(b)



(c)

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

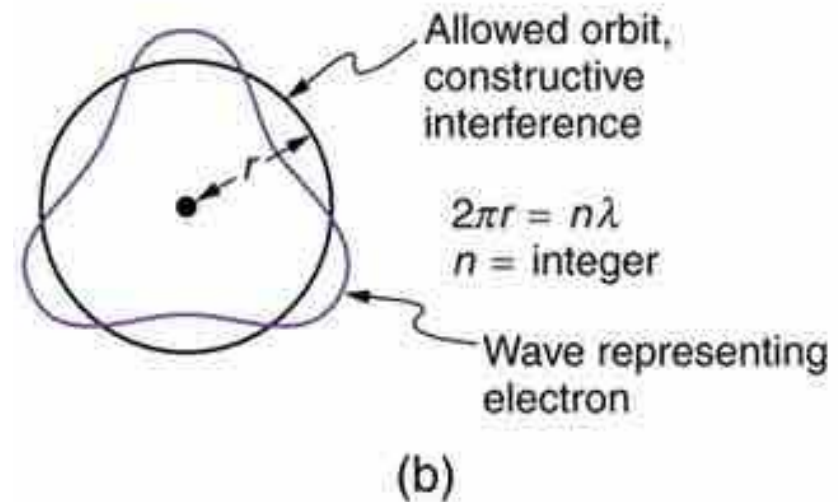
$$F_{\text{cp}} = F_{\text{el}} \quad \text{azaz} \quad \frac{mv^2}{r} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{r^2}$$

$$E = E_{\text{kin}} + E_{\text{pot}} = \frac{mv^2}{2} - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{r} = -\frac{Ze^2}{8\pi\epsilon_0 r}$$

de Broglie: $\lambda = \frac{h}{mv} = \frac{2\pi r}{n}$

egymásba helyettesítgetve...

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



n-edik pálya sugara:

$$r_n = nr_{\text{Bohr}} = n \underbrace{\frac{\hbar^2 4\pi\epsilon_0}{Zme^2}}_{53\text{pm}}$$

Teljesebb képet a természetről a Schrödinger-egyenlet ad: hullámfüggvény, operátorok

elektron állapota:
komplex értékű hullámfüggvény

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

helyének valószínűségeloszlása:

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

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

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

Schrödinger-egyenlet

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

időfüggetlen:

$$\Psi(\vec{r},t) = e^{-iEt/\hbar}\psi(\vec{r}) \quad -\frac{\hbar^2}{2m}(\partial_x^2 + \partial_y^2 + \partial_z^2)\psi(\vec{r}) + V(\vec{r})\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r})$$

Na de mi jön ki a Schrödinger-egyenletből a hidrogénatomra?

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

Rövid válasz: bonyolultabb számolás, de még pont megoldható

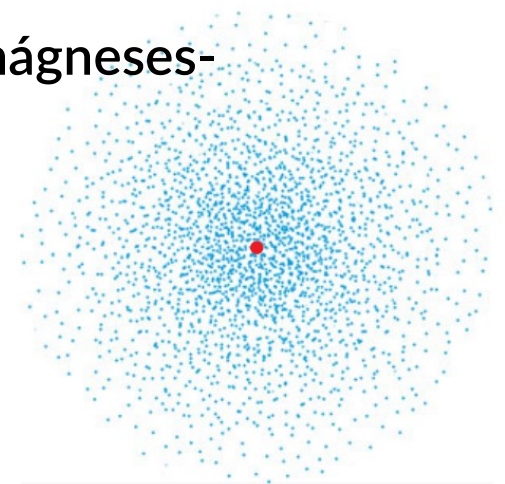
Spektrum, alapállapot “mérete”, mint Bohr-modellből

Körpályák helyett valószínűségi felhők

Extra kvantumszámok: n főkvantumszám, l mellék-, m_l = mágneses-

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

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



alapállapot:

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

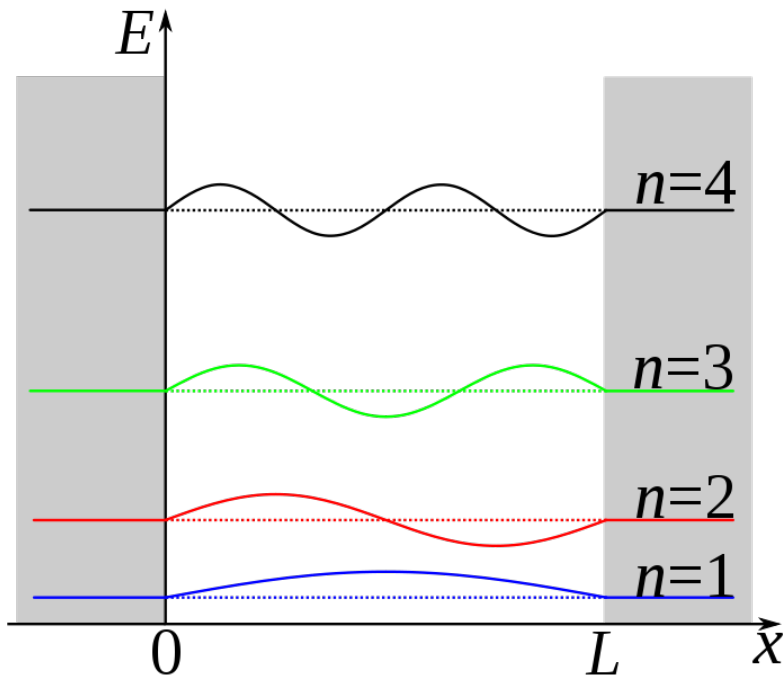
$$\psi(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi}a^{3/2}} e^{-r/a}$$

Rákészülés a hidrogénatomra: 1D dobozba zárt elektron

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

$$V(x) = 0, \text{ ha } 0 < x < L; \quad V(x) = \infty \text{ egyebkent}$$

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right)$$



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

Feladatok:

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

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

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

- Hány eV a minimális gerjesztési energia?

- Az első néhány energiasajátállapotig még egydimenziósnek tűnik a drót. Hányadik energiasajátállapotnál jelennek meg az x és y irányú gerjesztések?

Számolós feladat

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

Számolós feladat

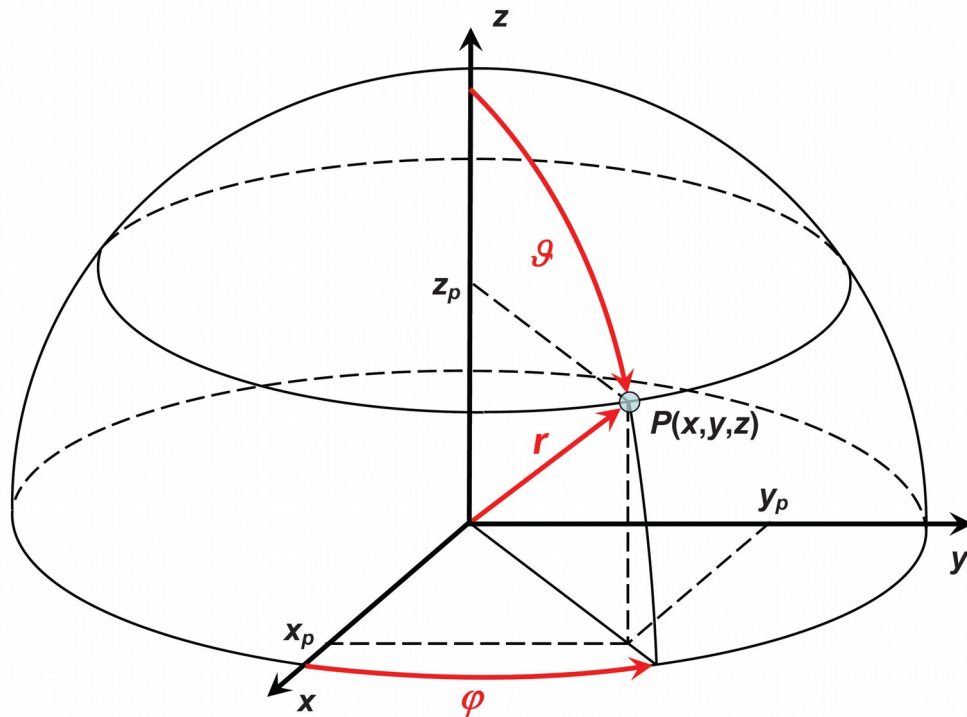
- Egy 200 pm élhosszúságú kockában egy elektron 8. energiasajátállapota hányszorosan degenerált?

Számolós feladat

- Egy nanodrótot közelítsünk $3 \times 3 \times 200$ nm élhosszúságú négyzetes hasábbal.
 - Hány eV a minimális gerjesztési energia?
 - Az első néhány energiasajátállapotig még egydimenziósnek tűnik a drót. Hányadik energiasajátállapotnál jelennek meg az x és y irányú gerjesztések?

Hidrogénatom Schrödinger-egyenlete: 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:

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

redukált távolság a magtól:

$$\rho = \frac{r}{a}$$

Hidrogénatom Schrödinger-egyenlete: Megoldásokhoz 3 kvantumszám, 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-

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

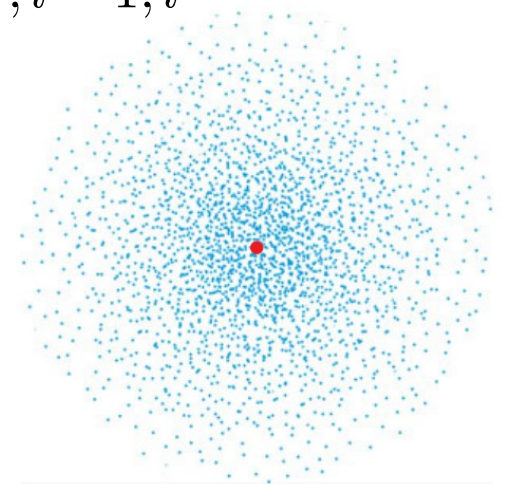
Energia csak az n főkvantumszámtól függ

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

alapállapot:

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

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



H-atom: Néhány energiasajátállapot

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

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

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

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

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

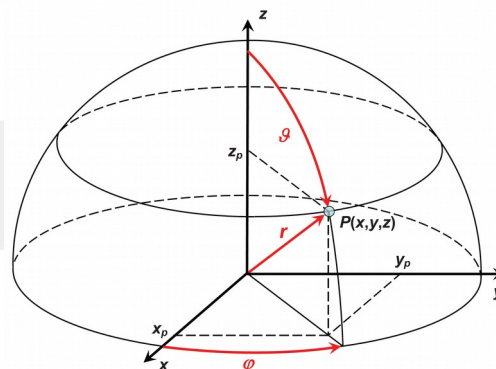
$$\ell = 1 \quad m = 0$$

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

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

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

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



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

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

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

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

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

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

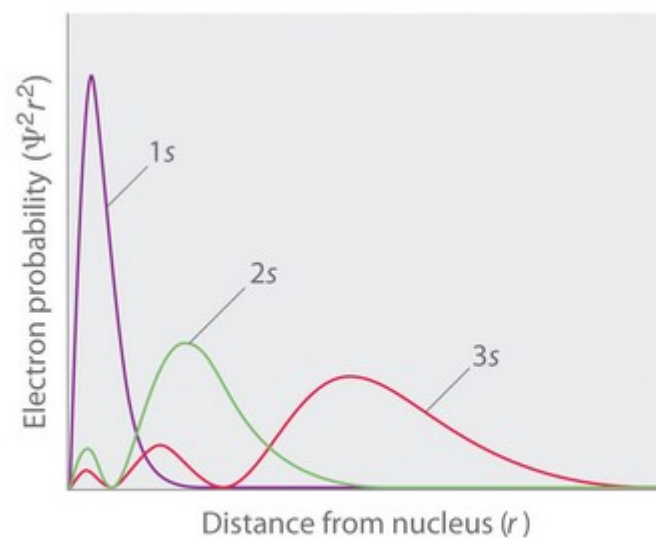
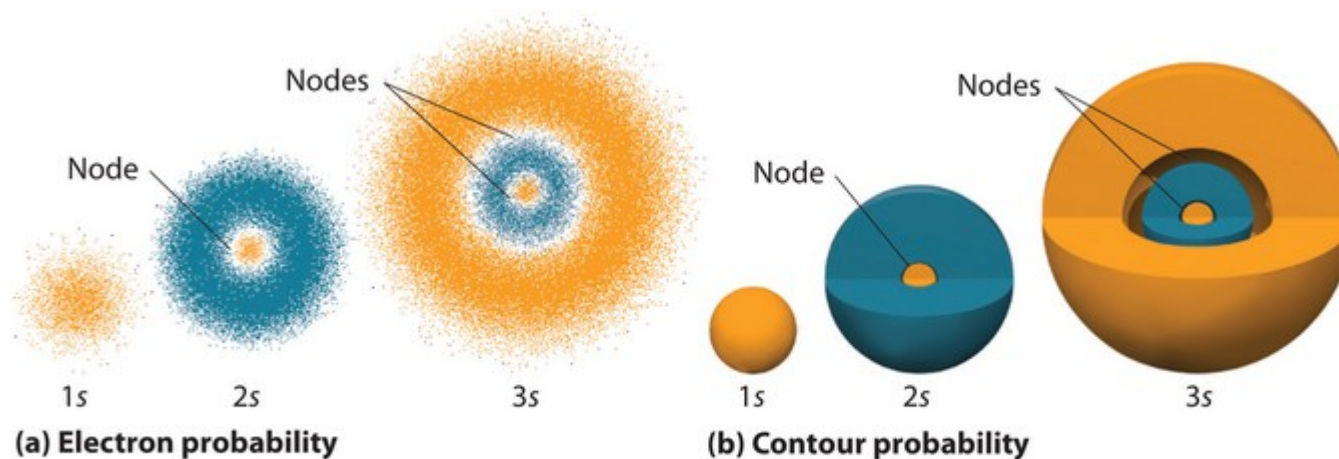
$$\psi_{31\pm 1} = \frac{1}{81\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{\frac{3}{2}} (6\rho - \rho^2) e^{-\rho/3} \sin(\theta) e^{\pm i\phi}$$

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

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

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

A hullámfüggvényeket nehéz vizualizálni



(c) Radial probability

“Fizikus” hullámfüggvények:
színek = komplex fázis



$1s_0$

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



$2s_0$

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

azonos energiájú megoldások
szuperpozíciója is megoldás



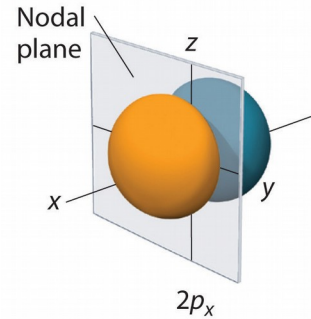
$2p_{-1}$



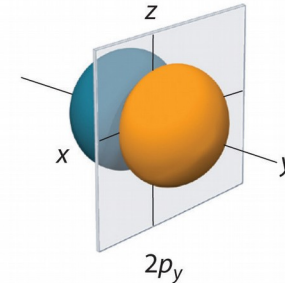
$2p_0$



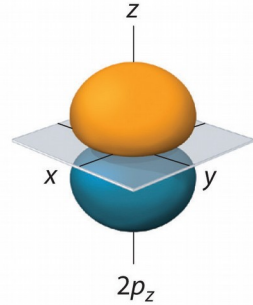
$2p_1$



$2p_x$



$2p_y$



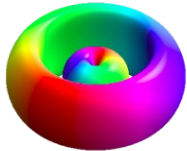
$2p_z$

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

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



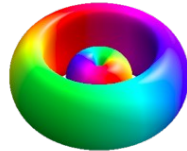
$3s_0$



$3p_{-1}$



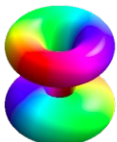
$3p_0$



$3p_1$



$3d_{-2}$



$3d_{-1}$



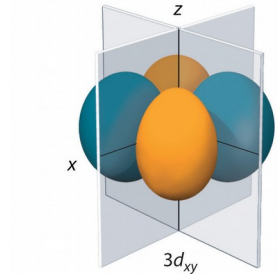
$3d_0$



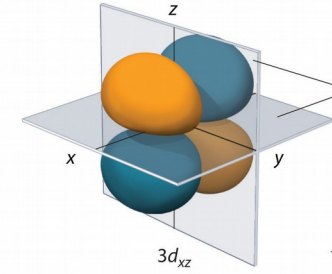
$3d_1$



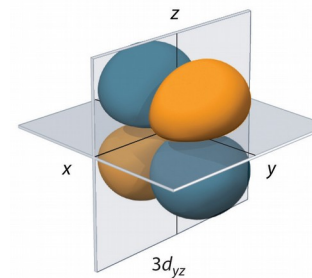
$3d_2$



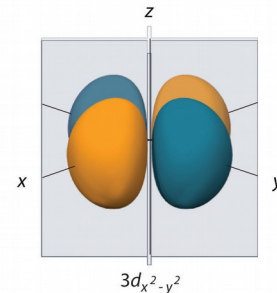
$3d_{xy}$



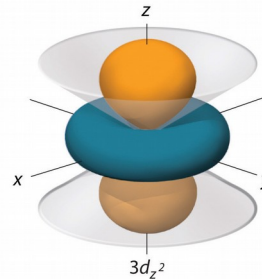
$3d_{xz}$



$3d_{yz}$



$3d_{x^2-y^2}$

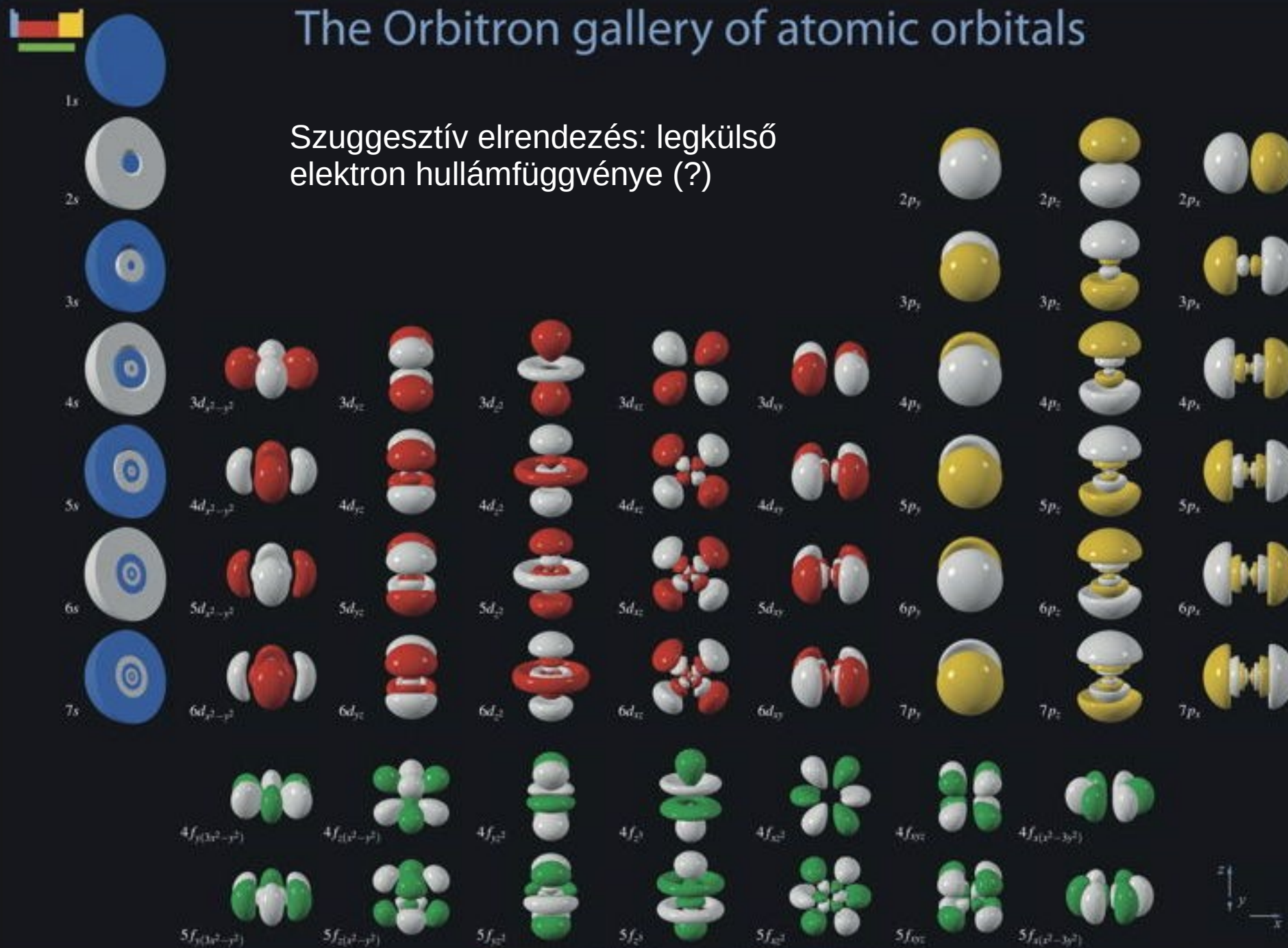


$3d_{z^2}$

The Orbitron gallery of atomic orbitals



Szuggesztív elrendezés: legkülső elektron hullámfüggvénye (?)



Dobozba zárt elektron

A doboz minden oldalát $1/10$ részére zsugorítom. Az alapállapot energiája hányszorosára változik?

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

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

H-atom

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

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

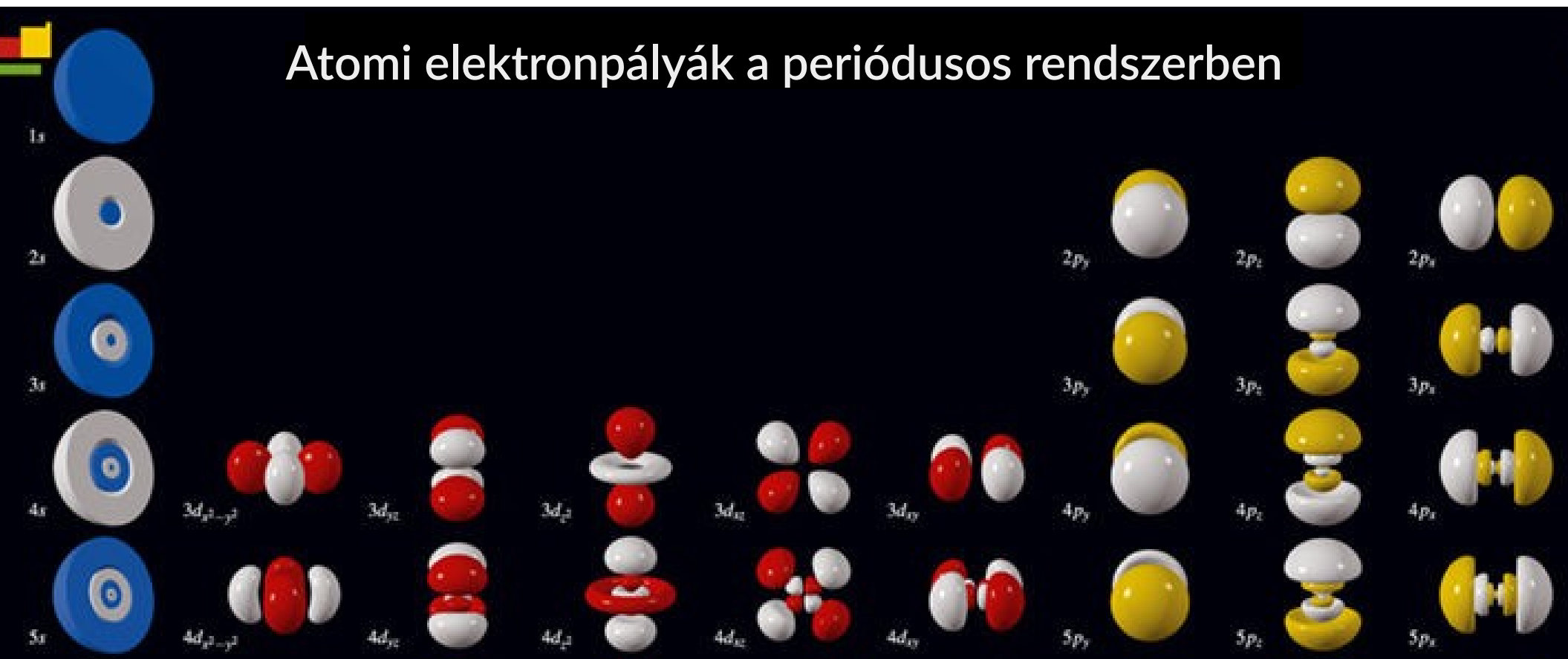
H-atom

Hányszorosan degenerált a H-atom 4. energiasajátállapota (spint nem figyelembe véve)?

- A) 4
- B) 7
- C) 16
- D) 32

A Stern-Gerlach-kísérlet és a spin

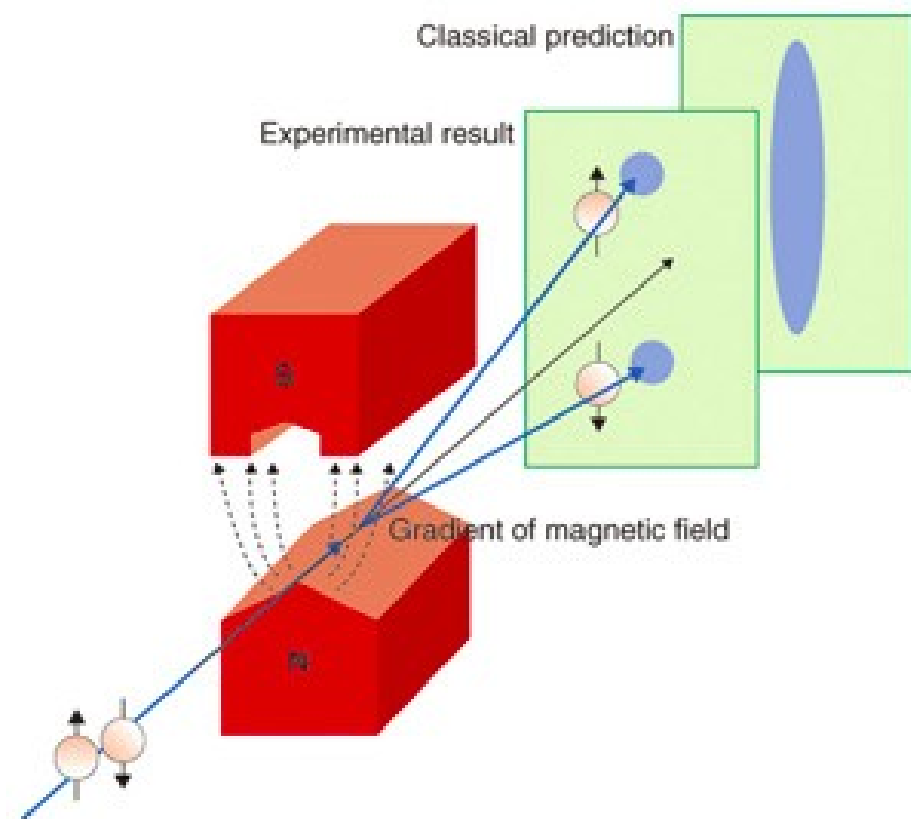
De mi dönti el, merre állnak az atomi pályák?



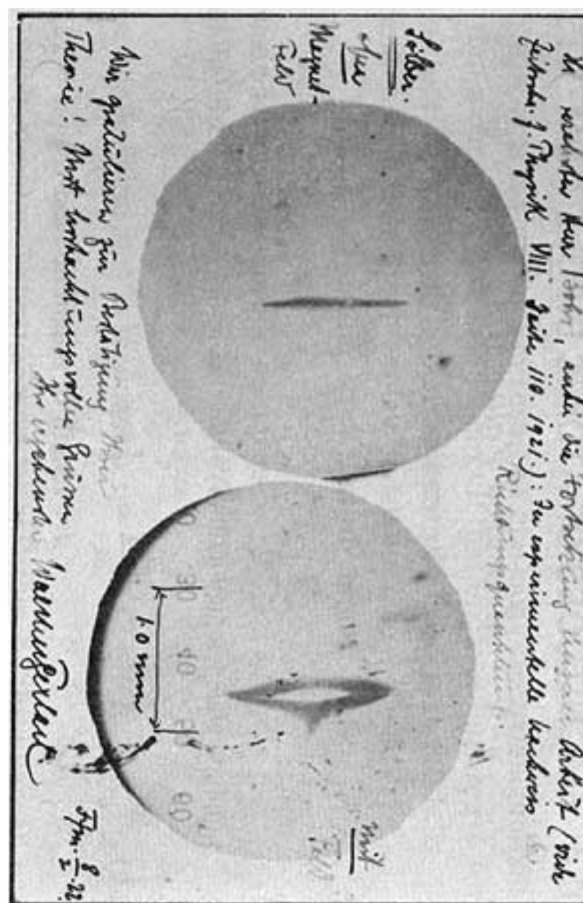
Forrás: <https://winter.group.shef.ac.uk/orbitron/>

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

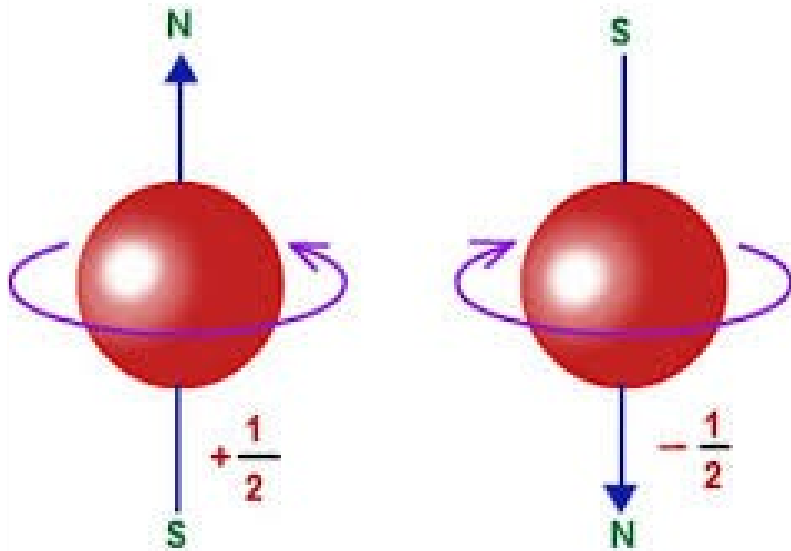
Anyagi támogatás:
Henry Goldman (Goldman-Sachs egyik alapítója)



Levelezőlap, Gerlachtól Bohrnak



Valójában a Stern-Gerlach kísérletben az elektron spinje okozza az effektust



Egyszerűsített jelölés:

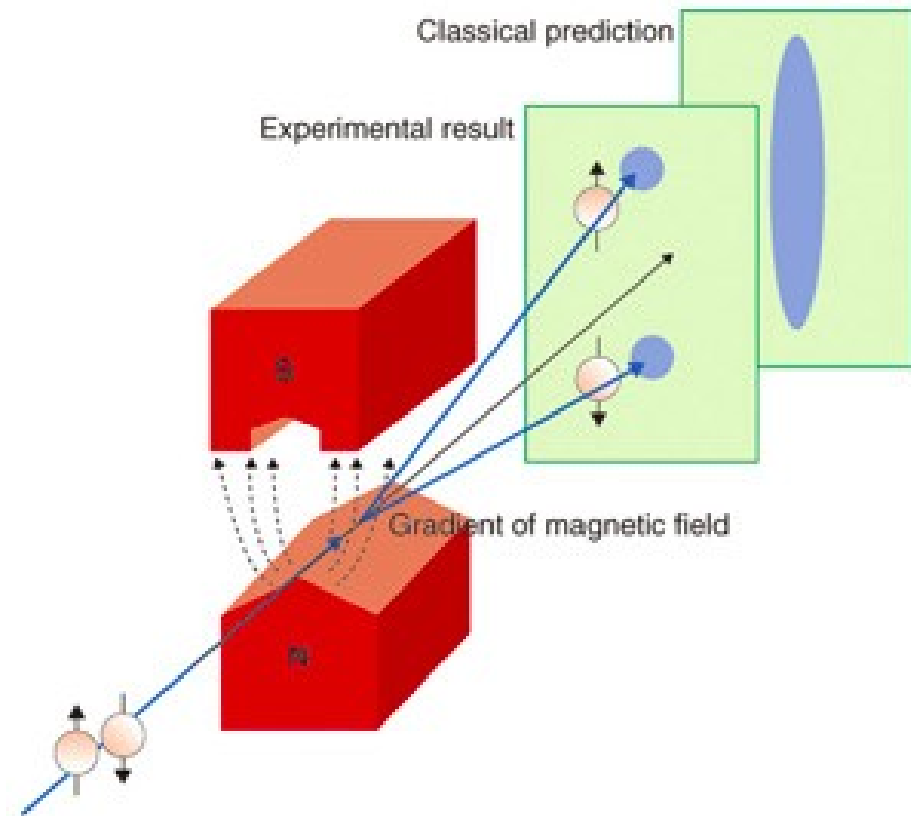
$|\uparrow\rangle$
 $|\downarrow\rangle$
 $|\leftarrow\rangle$
 $|\rightarrow\rangle$



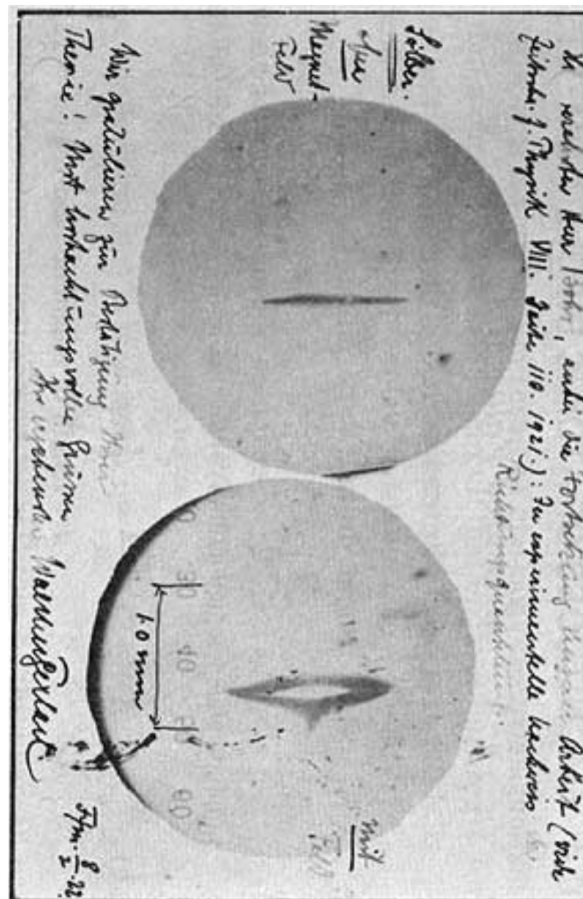
1944: Nobel-díj Sternnek, Gerlach kimarad
(nemzetiszocialista rezsimmel való együttműködés)

1922: Stern-Gerlach kísérlet: Kiszűri a fel/lefele álló spinű részecskéket?

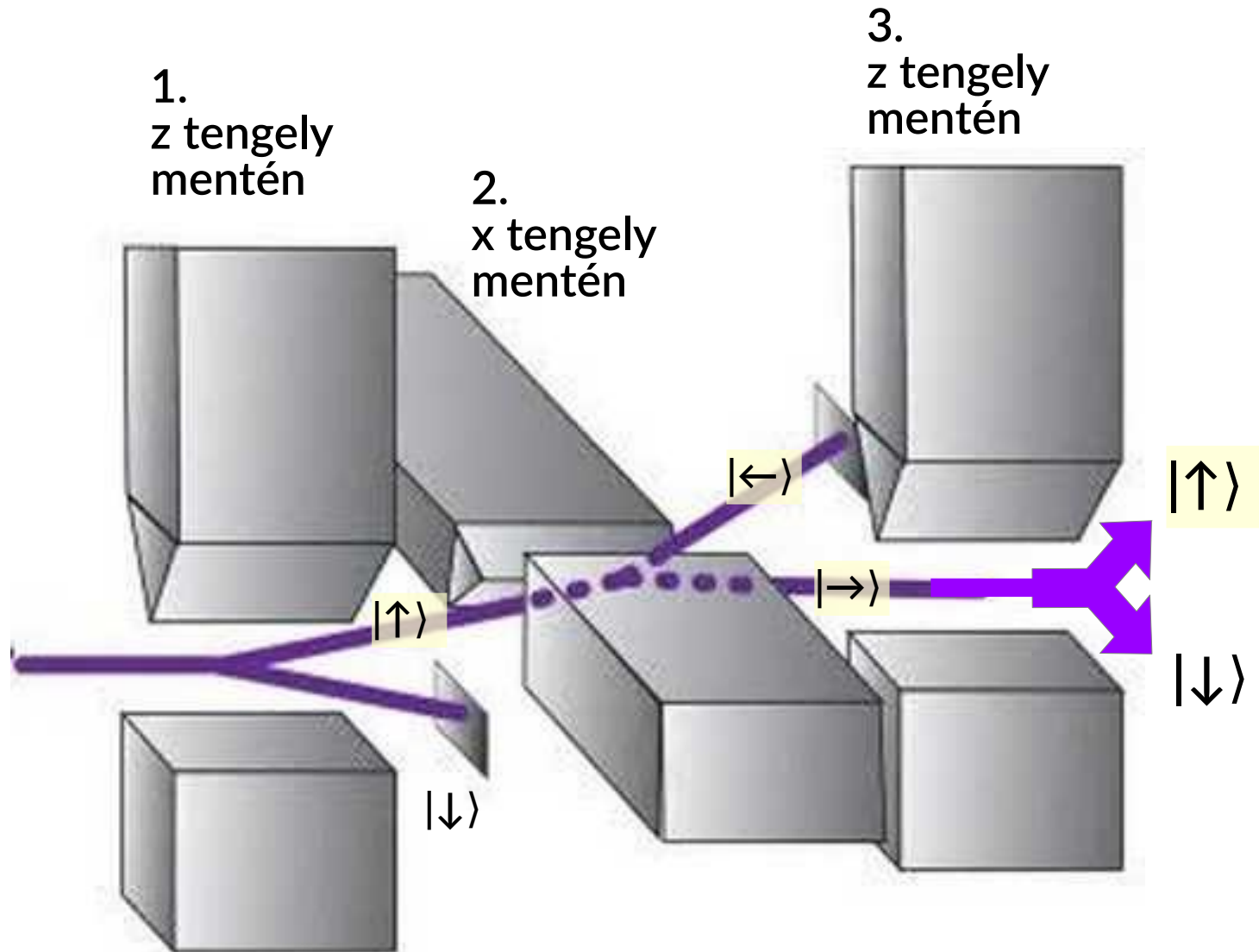
Anyagi támogatás:
Henry Goldman (Goldman-Sachs egyik alapítója)



Levelezőlap, Gerlachtól Bohrnak



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



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

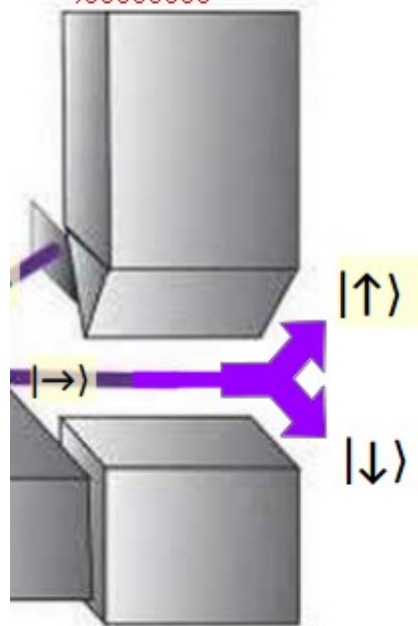
Mérés előtt:
szuperpozíció

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

Relatív fázis

Mérés

3.
z tengely
mentén



Mérés után:
Egyik állapot

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

Relatív fázis fontos,
eldönti, merre áll a spin

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



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

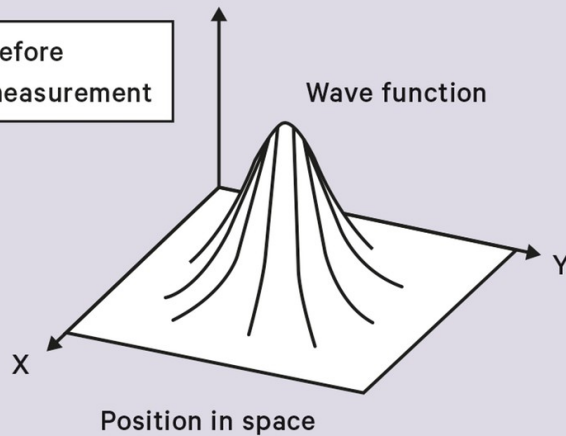
Bohr: ez csak üres filozofálgatás,
az elmélet helyesen jósolja a kísérletet,
csak ez számít
→ *pragmatizmus*

A kvantummechanikai mérés: beavatkozás, "beugrasztja" a hullámfüggvényt

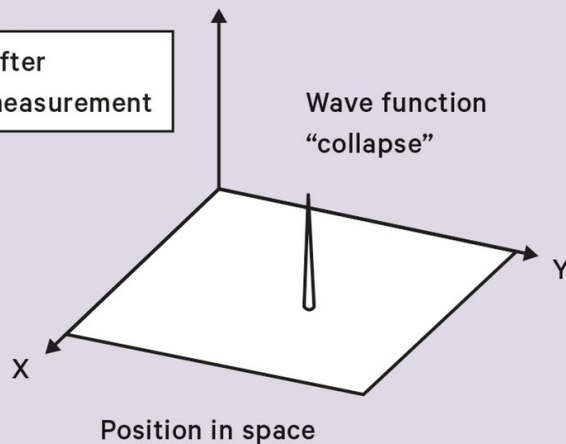
THE COPENHAGEN INTERPRETATION

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.

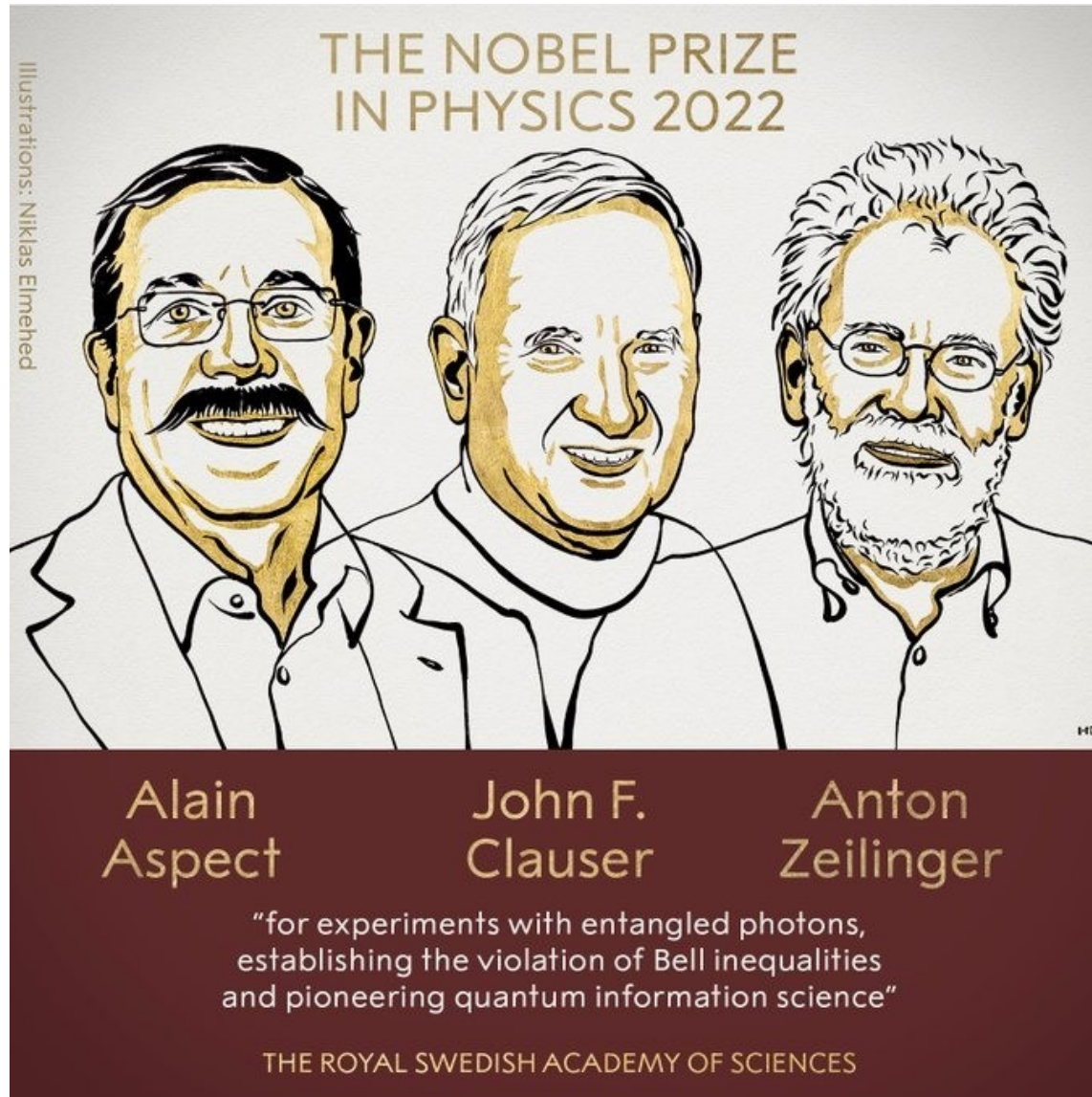
Before
measurement



After
measurement



1935-től a 2022-es Nobel-díjig: A kvantumoz összefonódás



1935: Einstein – Podolsky – Rosen gondolkísérlete

MAY 15, 1935

PHYSICAL REVIEW

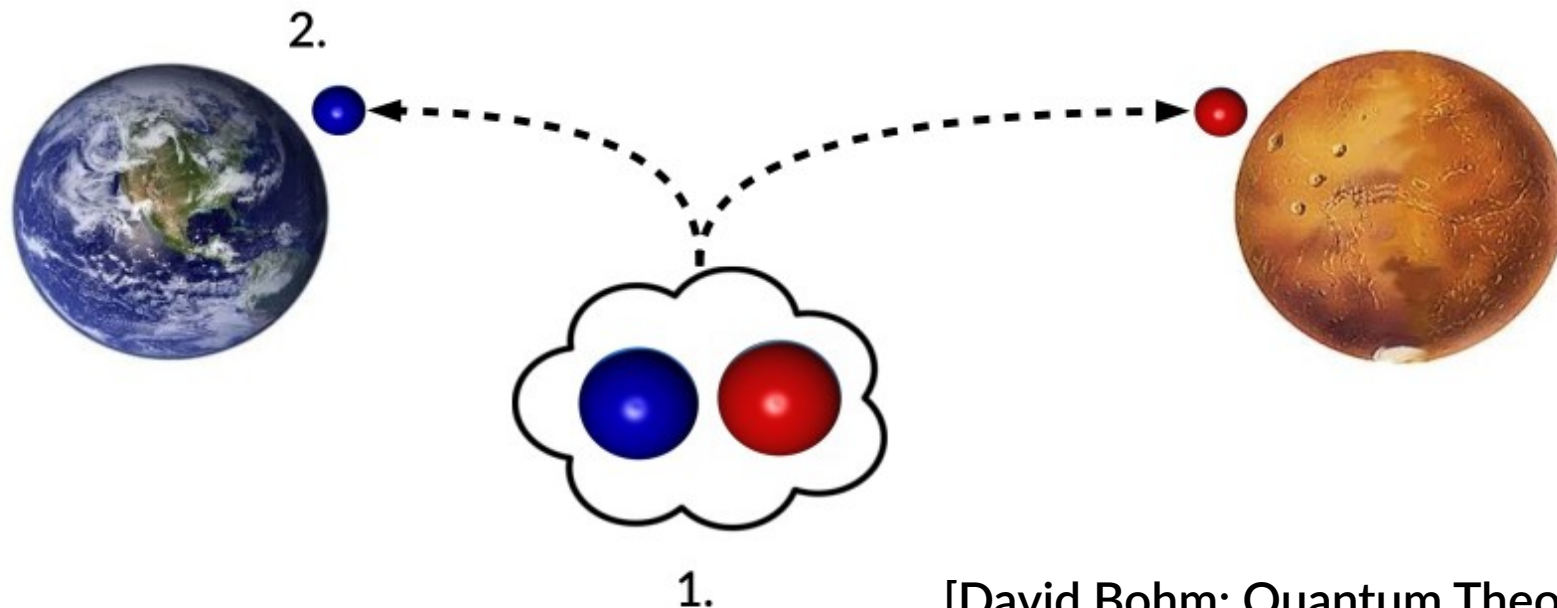
VOLUME 47

Can Quantum-Mechanical Description of Physical Reality Be Considered Complete?

A. EINSTEIN, B. PODOLSKY AND N. ROSEN, *Institute for Advanced Study, Princeton, New Jersey*

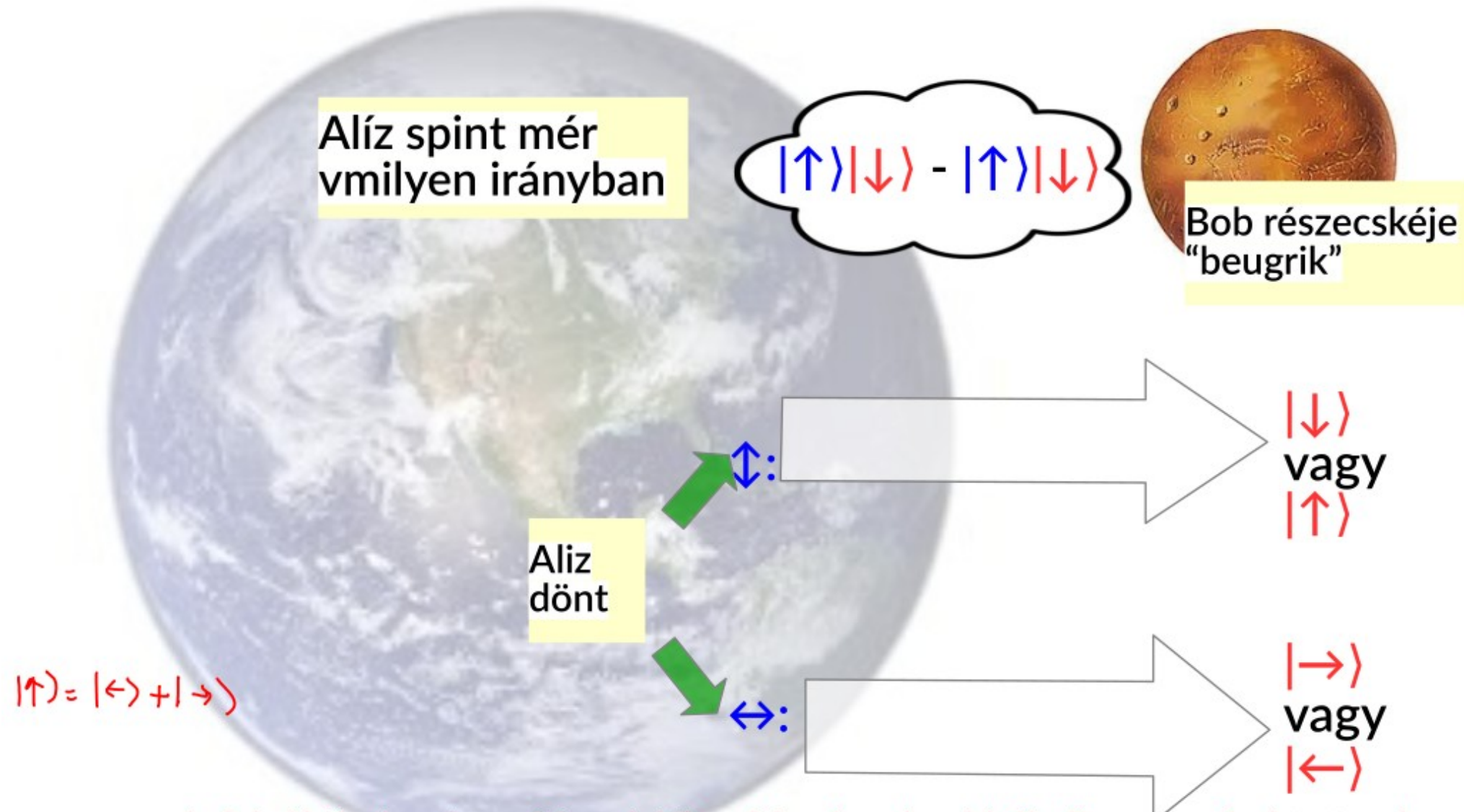
(Received March 25, 1935)

1. Megfelelő előkészítés, kvantummechanikával
2. A Földön valamit csinállok, ami azonnali hatást fejt ki a Marson.
3. Ez képtelenség: a kvantummechanikával valami gond van.



[David Bohm: Quantum Theory (1951)]

1935, Einstein – Podolsky – Rosen gondolatkísérlete:
 Einstein: Ez abszurd, Bob választása a Földön nem
 okozhat azonnali változást a Marson (legfeljebb
 fénysebességgel terjednek a hatások)



de: Bob oldalán nincs olyan mérés, ami eldöntené, h a részecske spinje függőleges vagy vízszintes tengely mentén áll. Ez egy olyan kérdés, amit nem lehet feltenni a részecskének. Csak azt lehet megkérdezni tőle, h egy adott tengely mentén felfele v lefele áll-e a spinje

II. Az összefonódás mérhetővé tétele -kísérleti metafizika: A Bell-egyenlőtlenség

1964: Bell északír elméleti fizikus megmutatja, hogyan lehetne kimérni az összefonódást.

1969: Clauser (friss PhD), Horn, Shimony, Holt: A Bell-egyenlőtlenség kísérletközeli formája

Alíz dönt:

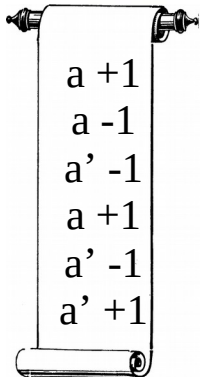


$a = x$ -tengely
 $a' = z$ -tengely



Bob dönt:

$b =$ ferde tengely
 $b' =$ másik ferde tengely

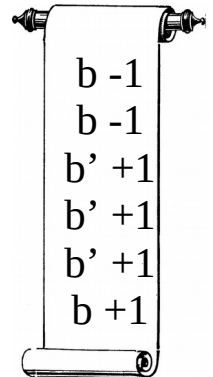


Alíz statisztikát
gyűjt

$a + 1$
 $a - 1$
 $a' - 1$
 $a + 1$
 $a' - 1$
 $a' + 1$

A két számsorozatból Bell (CHSH) egy
statisztikai mutatót gyárt le.
Ha Alíz és Bob nem tud kommunikálni:

Bob statisztikát
gyűjt



$b - 1$
 $b - 1$
 $b' + 1$
 $b' + 1$
 $b' + 1$
 $b + 1$

$$C_h(a, b) + C_h(a, b') + C_h(a', b) - C_h(a', b') \leq 2$$

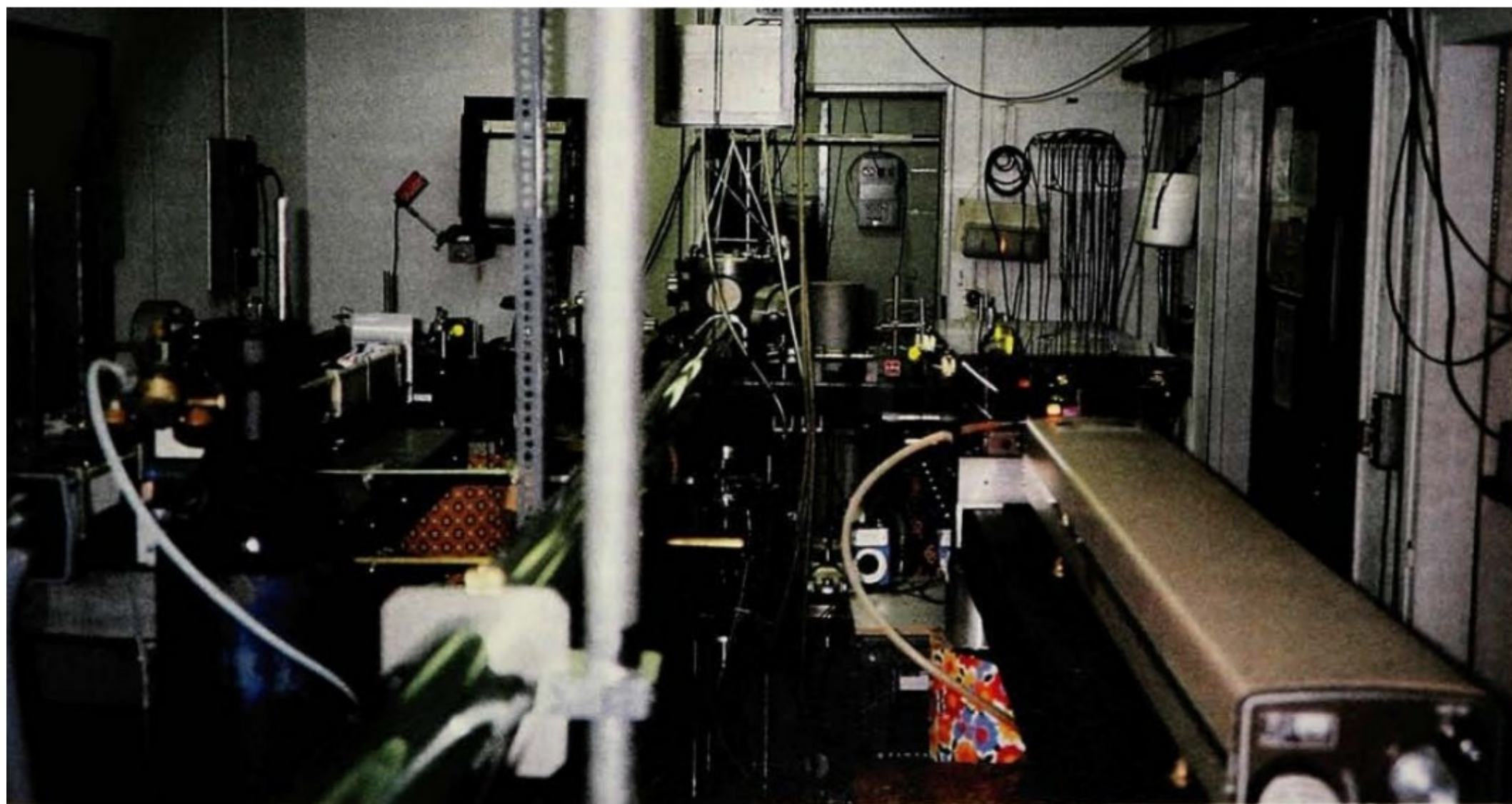
De a kvantummechanika összefonott részecskékkal 2.8-at is megenged

“A tudomány legmélyebb felfedezése”

- Kísérletileg cáfolható a lokális realizmus (csak az “itt és most” számít)

1972-74, Clauser és Freedman: Az első kísérleti vizsgálat

1984, Aspect, Párizs: a Bell-egyenlőtlenség első komoly kísérleti tesztje



Kísérleti metafizika: Bújócska

1997, *Zeilinger*, Innsbruck: fotonok,
kampusz két végén detektálva
Szigorúan lokális kísérlet
Statisztikus kibúvó?



2001, *Wineland*, Colorado:
csapdázott Be-ionokkal:
Statisztikus kibúvó kizárva.
Lokalitás kibúvó?



2012

2015: statisztikus és lokalitás kibúvók egyszerre kizárva

Kísérleti versenyfutás, “loophole-free Bell test”

- Hanson, Delft [Nature, Oct 29 2015]
- Shalm, Colorado [Phys. Rev. Lett., Dec 18 2015]
- Zeilinger, Bécs [Phys. Rev. Lett., Dec 18 2015]

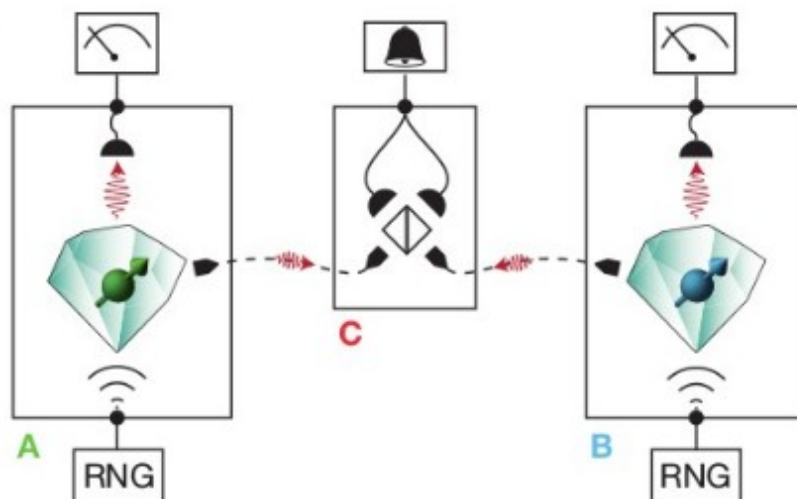
Viewpoint: Closing the Door on Einstein and Bohr's Quantum Debate

Alain Aspect, Laboratoire Charles Fabry, Institut d'Optique Graduate School, CNRS, Université Paris-Saclay, Palaiseau, France

December 16, 2015 • *Physics* 8, 123

By closing two loopholes at once, three experimental tests of Bell's inequalities remove the last doubts that we should renounce local realism. They also open the door to new quantum information technologies.

Hanson kísérlete Delftben



Fotonforrás: Nitrogén-vakancia centrum gyémántban

RNG = gyors, kvantumos véletlenszám-generátor



Mi van a szabad akarattal?

2016, Zeilinger: Bell-egyenlőtlenség kozmikus fotonokkal

