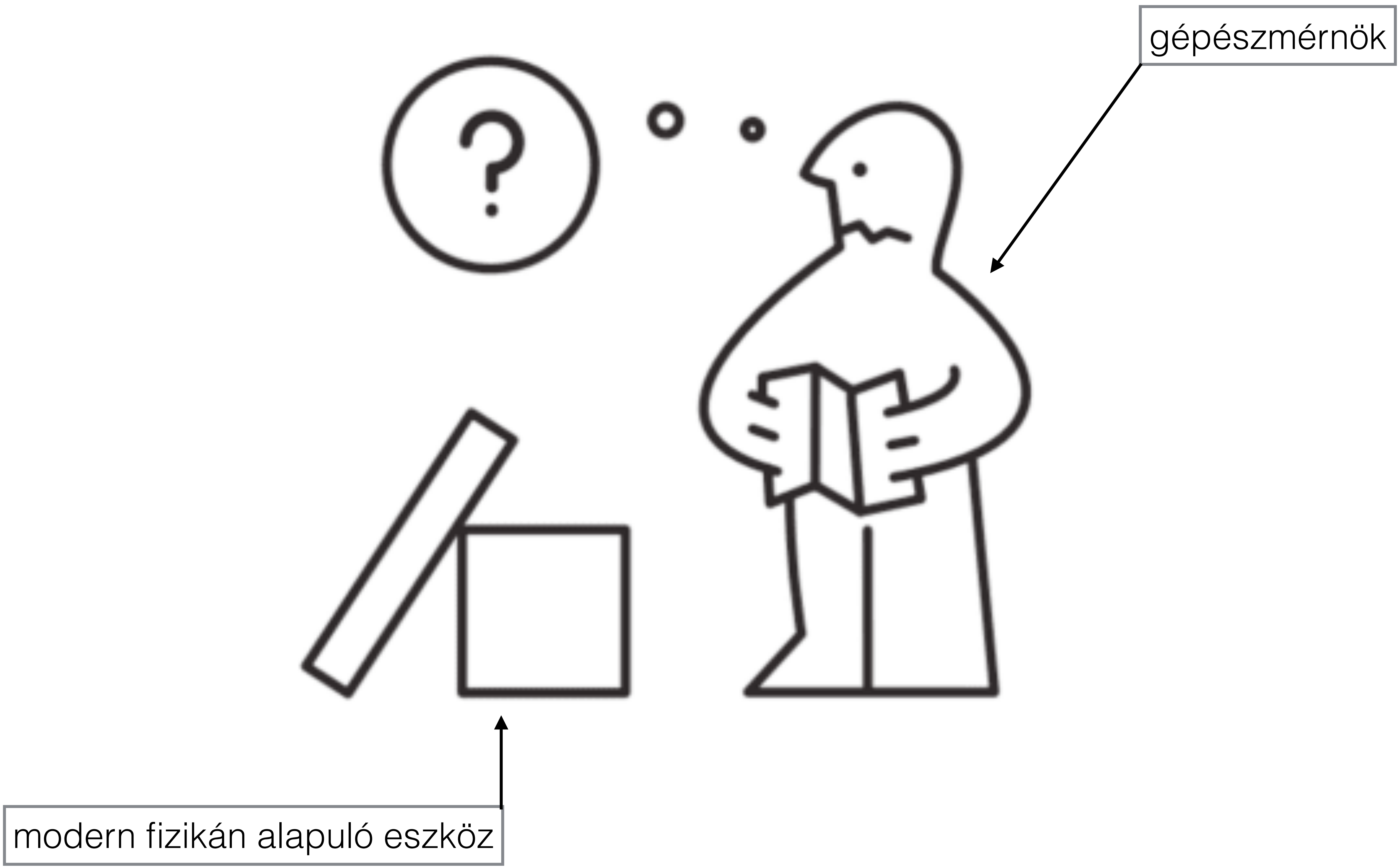
Modern Fizika Gépészmérnököknek
Fizika M1



Modern Fizika Gépészmérnököknek
Fizika M1

http://physics.bme.hu/BMETE15MX27_kov

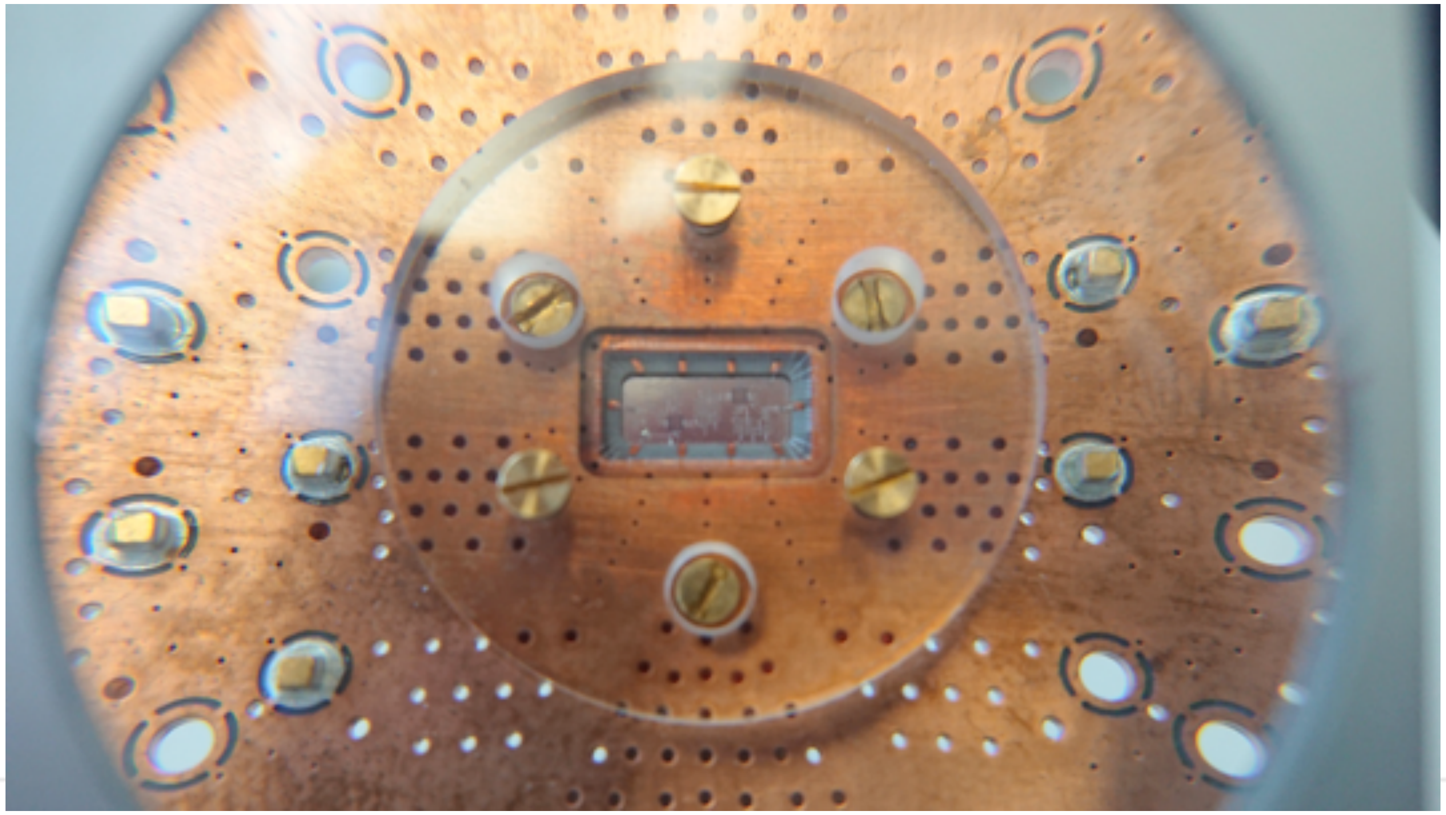
2019. őszi félév

1. előadás
2019. szeptember 10.

előadó: Pályi András
palyi@mail.bme.hu
http://eik.bme.hu/~palyi/
egyetemi docens
BME Természettudományi Kar
Elméleti Fizika Tanszék

Fizika	Gépészmérnöki alkalmazások
atomok, kristályok elektronjainak kvantummechanikája	lézerek: anyagmegmunkálás, méréstechnika
kristálybeli elektronok sávszerkezete	piezoelektromos és piezorezisztív szenzorok és aktuátorok
szupravezető mágnesek	mágneses levitáció, MagLev vonatok
mikromechanika, mikroelektromechanika	miniatűr szenzorok és aktuátorok telefonokban, autókban, stb.
diffrakció elmélete	anyagok szerkezetvizsgálata
…	…

Láttam a jövőt, és olyan volt, mint egy villanybojler



HEGYESHALMI RICHÁRD 2018.11.23. 22:07

Univerzális kvantumszámítógép ma még nem létezik, de az IBM szeretne egyet létrehozni, és úgy tűnik, az erre irányuló kezdeményezésük, az IBM Q Experience igencsak életképes. Még csak egy primitív torpedójáték fut rajta, nem a Counter-Strike, de éveken belül feltörheti az összes titkosítási protokollt, olyan komplex vegyi folyamatokat modellezhet, amire a mai számítógépek képtelenek, és két másodperc alatt komplexebb üzleti elemzéseket készíthet, mint a komplett Wall Street. És úgy néz ki, hogy az beszarás – kár, hogy el kellett dugni egy semmitmondó fémhengerbe.

Menetrend

1. előadás (sep 10)
2. előadás (sep 17)
3. előadás (sep 24)
4. előadás (okt 01)
5. előadás (okt 08)
6. előadás (okt 15)
7. előadás (okt 22) - 1. zh

Elektronok kvantummechanikája atomokban, kristályokban

8. előadás (okt 29)
9. előadás (nov 05)

   nov 12 - nincs előadás

10. előadás (nov 19)
11. előadás (nov 26)
12. előadás (dec 03)
13. előadás (dec 10) - 2. zh

Alkalmazások
Miről hallanál szívesen?
palyi@mail.bme.hu

Félévközi számonkérések

http://physics.bme.hu/BMETE15MX27_kov

A félév során két zárthelyi dolgozat (zh) lesz, a 7. és 13. előadások időpontjában, azaz a 7. és a 14. héten, azaz október 22-én és december 10-én. A zh-kon zsebszámológépre szükség lesz, más segédeszköz nem használható. Mobiltelefon nem használható zsebszámológépként. Fényképes igazolványra szükség lesz a személyazonosság igazolásához. Egy zh-n maximum 100 pont érhető el. A zh eredményesnek minősül, ha az eredménye legalább 40 pont. Ha egy hallgató a zh írásakor meg nem engedett eszközt használ, elégtelent kap az egész tantárgyból, és a féléve érvénytelen. Mindkét zh feleletválasztós teszt, 20-20 kérdéssel, minden helyes megoldás 5 pontot ér. Gyakorló feladatokat az itt közzétett feladatgyűjtemény tartalmaz, érdemes ezeket hétről-hétre házi feladatként megoldani.

Félévközi jegy

Az előadásokon jelenléti ívet vezetünk. Azok esetében, akik az előadások (a két reguláris zh-t is beleértve) legalább 70%-án, azaz legalább 10 alkalommal, jelen vannak, az érdemjegy megállapításánál a két (egyenként eredményes) zh átlagpontszámához 10-et hozzáadunk, egyébként a zárthelyik átlagával számolunk.
Ponthatárok (az aláhúzott érték a jegyhez tartozó alsó határ):
2 (elégséges) : 40 - 55
3 (közepes) : 55 - 70
4 (jó) : 70 - 85
5 (jeles) : 85 -

Egyéb feltételek

Egyetlen összevont pótzárthelyi (pótzh) lesz, a tervek szerint december 16-án hétfőn 8:30-10:00 között. A pótzh-n bárki részt vehet, ismétlés és pótlás egyaránt lehetséges. A pótzh-n egyetlen feladatsor lesz, ami az egész félév anyagát lefedi. Aki megírja a pótzh-t, az az ott kapott pontszám alapján kapja meg a jegyét, tehát ilyenkor az esetlegesen megírt 1. és 2. zárthelyi eredménye nem számít. A jelenlétért kapott bónuszpontok a pótzh eredményéhez is hozzáadódnak.

Modern Fizika Gépészmérnököknek
Fizika M1

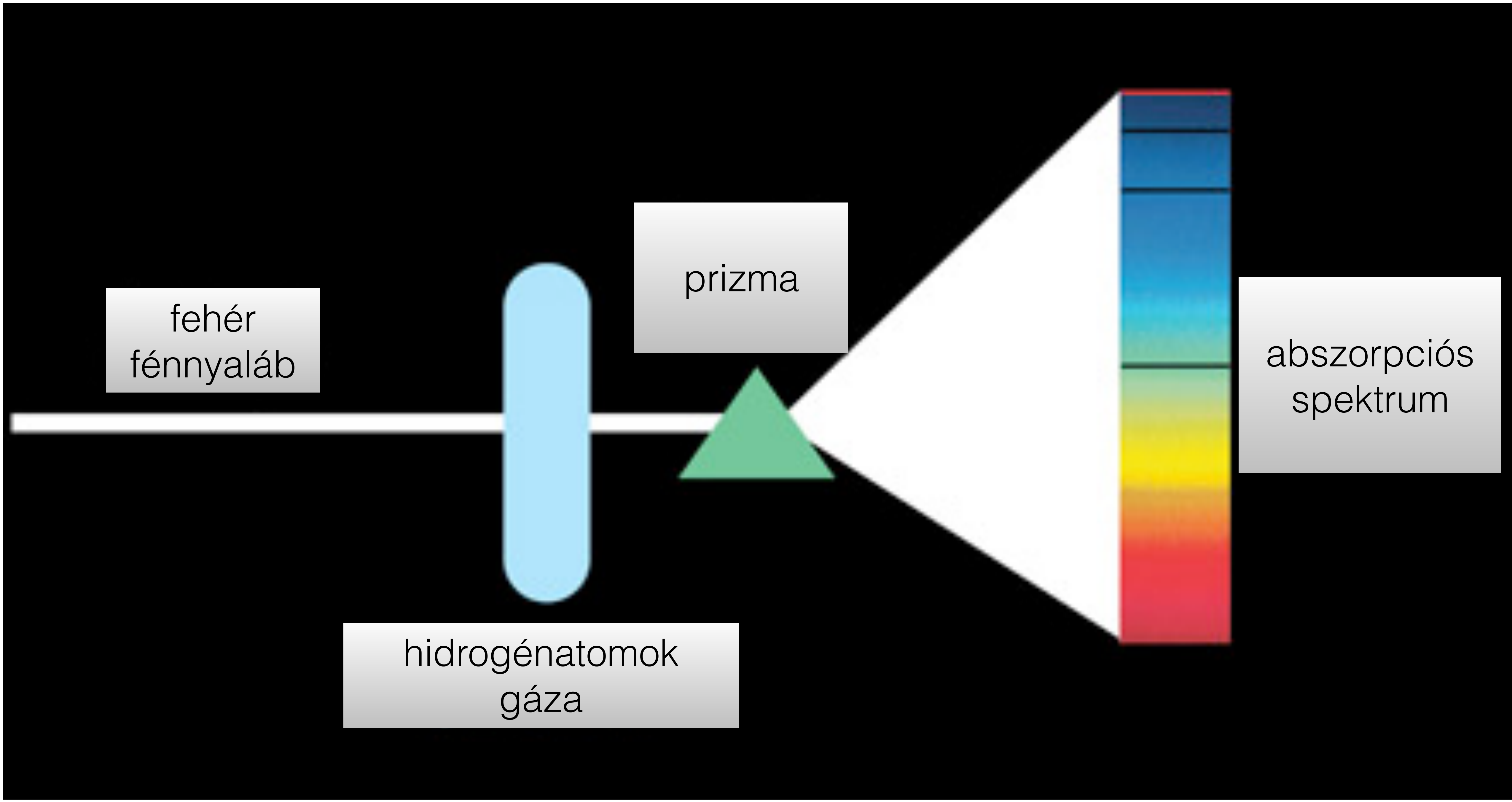
http://physics.bme.hu/BMETE15MX27_kov

2019. őszi félév

1. előadás
2019. szeptember 10.

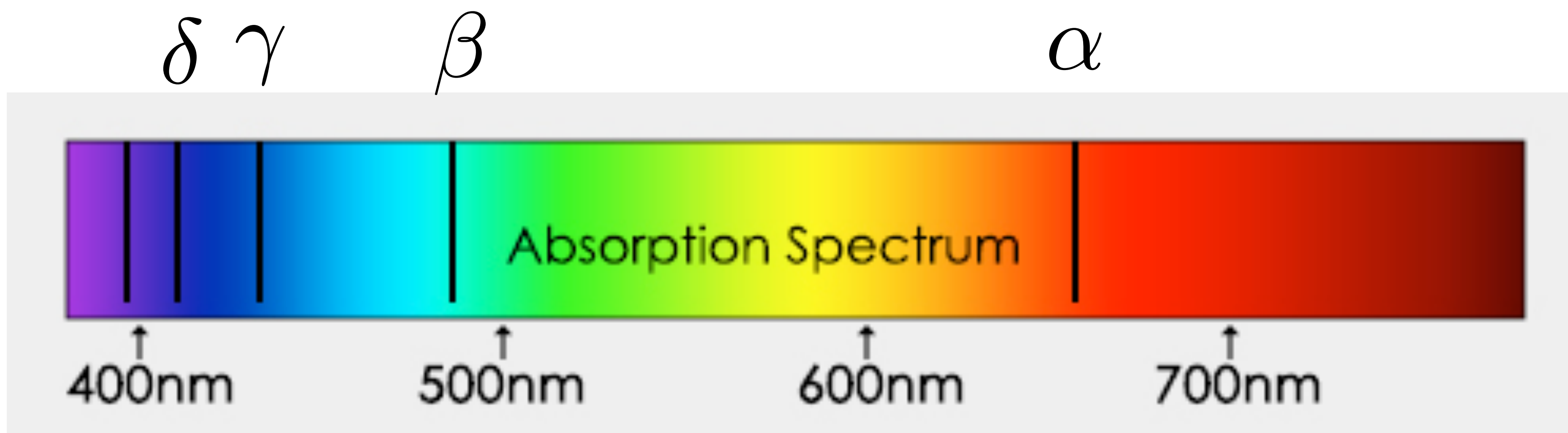
(I) Elektronok atomokban

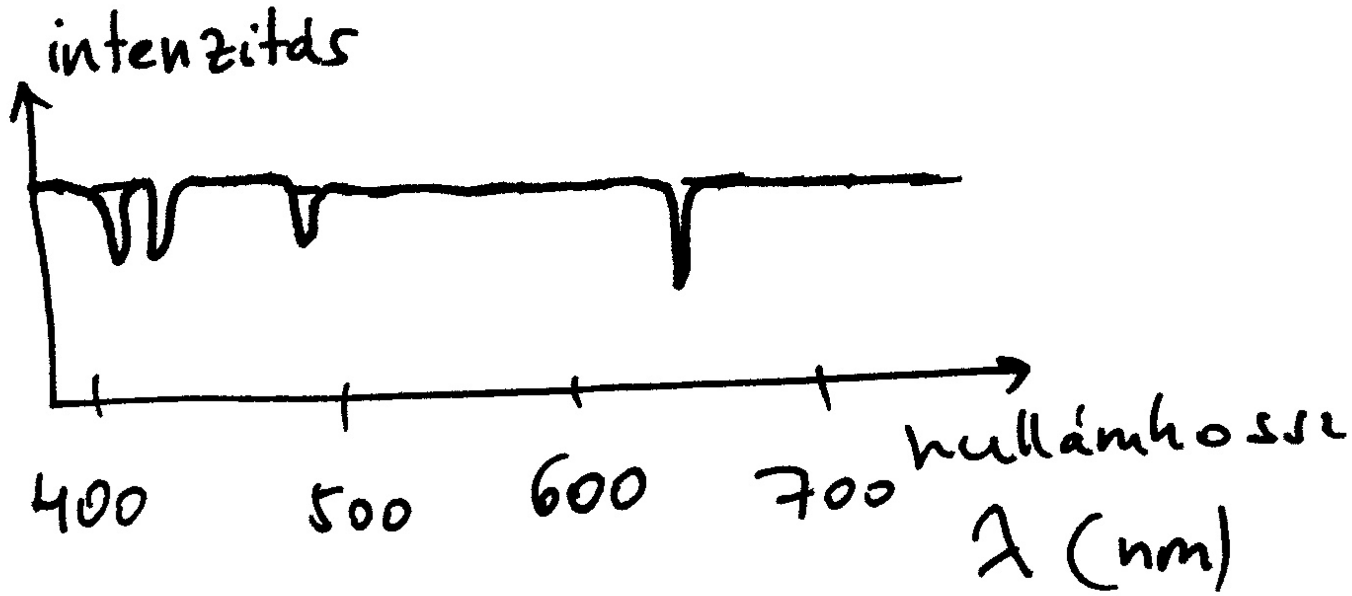
(I/A) Atomok abszorpciós színképe vonalas szerkezetet mutat



Miért jelennek meg ezek a vonalak?
A klasszikus fizika nem ad magyarázatot. A kvantumelmélet ad.

(I/A) Atomok abszorpciós színképe vonalas szerkezetet mutat

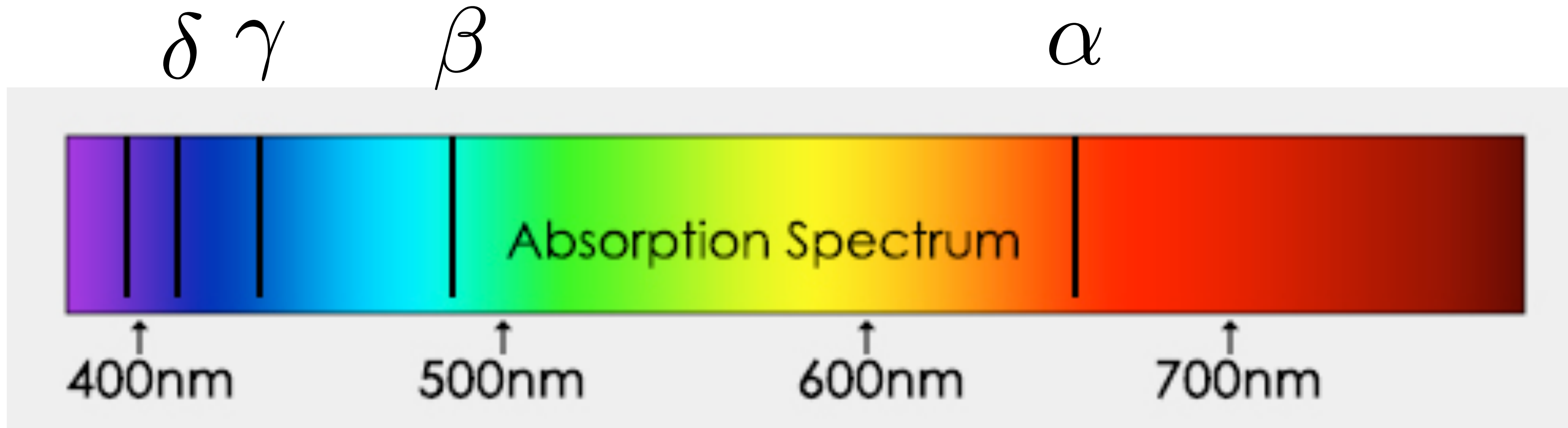




név	λ (nm)
α	656
β	486
γ	434
δ	410

- 4 abszorpciós színképvonal
- ez a „Balmer-sorozat"
- további vonalak láthatók más λ-tartományokban

(I/A) Atomok abszorpciós színképe vonalas szerkezetet mutat

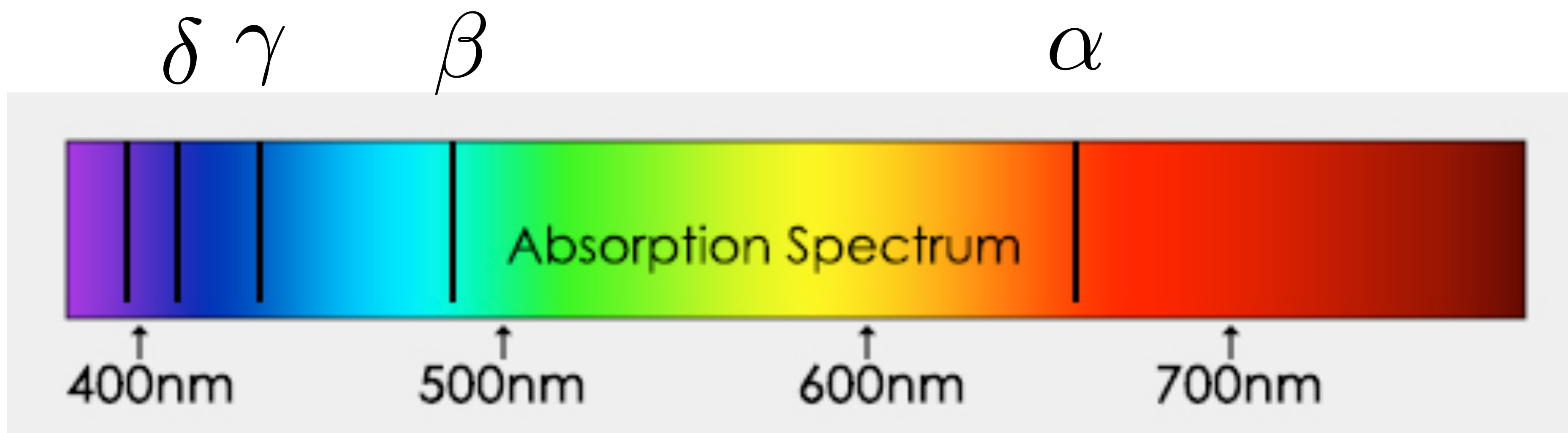


Emlékeztető:

- $E = h\nu$
- $c = \lambda\nu$
- $1\,\mathrm{eV} = 1\,\text{elektronvolt} \approx 1.6 \times 10^{-19}\,\mathrm{J}$
- SI alapegységek:
  méter (m)
  kilogram (kg)
  szekundum (s)
  amper (A)
- $\mathrm{J} = \mathrm{kg}\,\mathrm{m}^2\,\mathrm{s}^{-2}$

- E foton energiakvantuma
- Planck-állandó: $h \approx 6.6 \times 10^{-34}\,\mathrm{m}^2\,\mathrm{kg}\,\mathrm{s}^{-1}$
- fénysebesség: $c \approx 3 \times 10^{8}\,\mathrm{m/s}$
- λ: fény hullámhossza
- ν: fény frekvenciája

(I/A) Atomok abszorpciós színképe vonalas szerkezetet mutat



Emlékeztető:

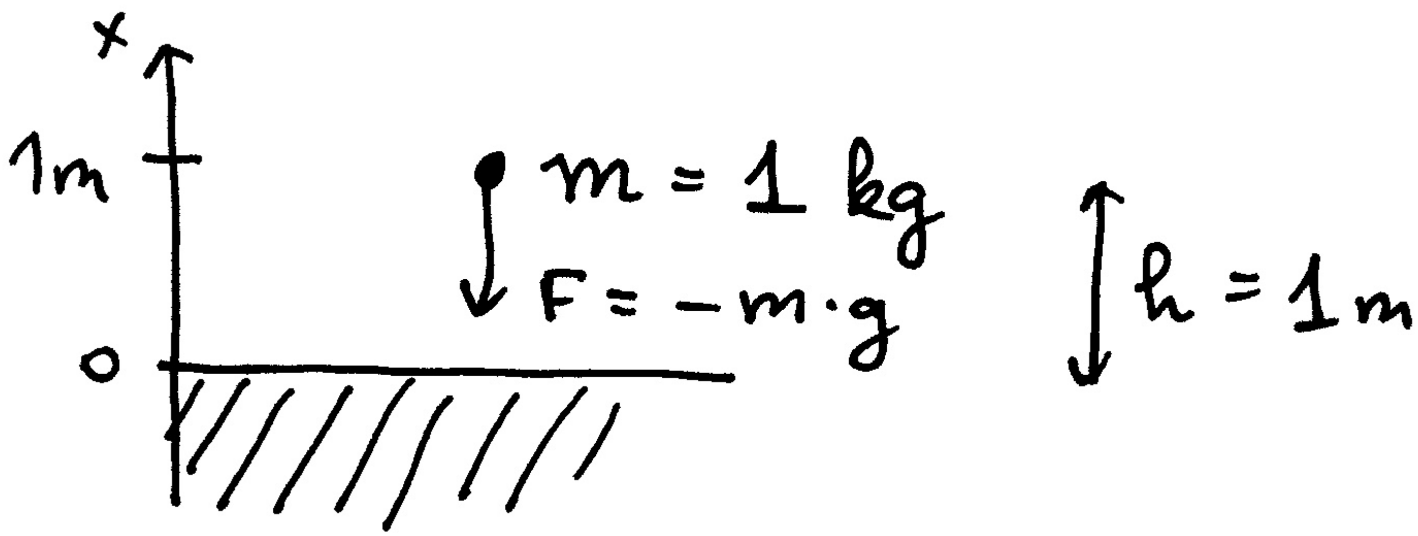
- $E = h\nu$
- $c = \lambda\nu$
- $1\,\mathrm{eV} = 1\,\mathrm{elektronvolt} \approx 1.6 \times 10^{-19}\,\mathrm{J}$
- SI alapegységek:
  méter (m)
  kilogram (kg)
  szekundum (s)
  amper (A)
- $\mathrm{J} = \mathrm{kg\,m^2\,s^{-2}}$

név	λ(nm)	ν(THz)	E(eV)
α	656	456	1,9
β	486	617	2,55
γ	434	691	2,85
δ	410	731	3,05

Miért jelennek meg ezek a vonalak?
A klasszikus fizika nem ad magyarázatot. A kvantumelmélet ad.

(I/B) Klasszikus mechanika: állapotjelzők, fizikai mennyiségek, mozgásegyenlet

Példa: szabadesés



Állapotjelzők:

- *pozíció* vagy *hely* vagy *koordináta*: $x(t)$
- *sebesség*: $v(t) = \dot{x}(t) \equiv \frac{dx(t)}{dt}$

Mindkettő $\mathbb{R} \to \mathbb{R}$ függvény

Mozgásegyenlet: Newton II.

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

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

Kérdés: $x(t) =?$, $v(t) =?$

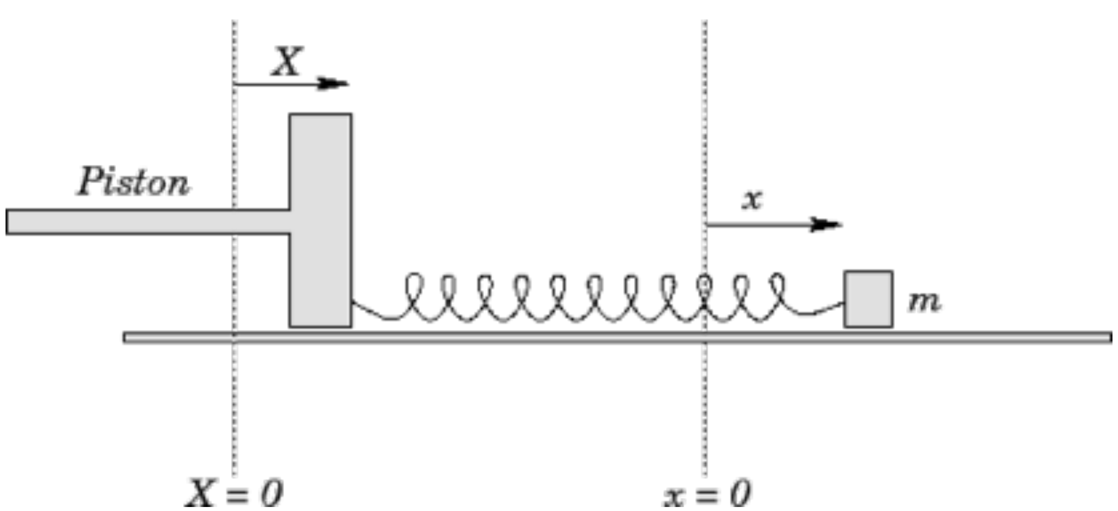
Megoldás: $x(t) = h - gt^2/2$, $v(t) = -gt$

(I/B) Klasszikus mechanika: állapotjelzők, fizikai mennyiségek, mozgásegyenlet

Példa: szabadesés ← időfüggetlen probléma

Példa: gerjesztett harmonikus oszcillátor ← időfüggő probléma

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



Numerikus megoldás:

$\dot{x}(t) = \lim_{\Delta t \to 0} \frac{x(t+\Delta t) - x(t)}{\Delta t}$ segítségével

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

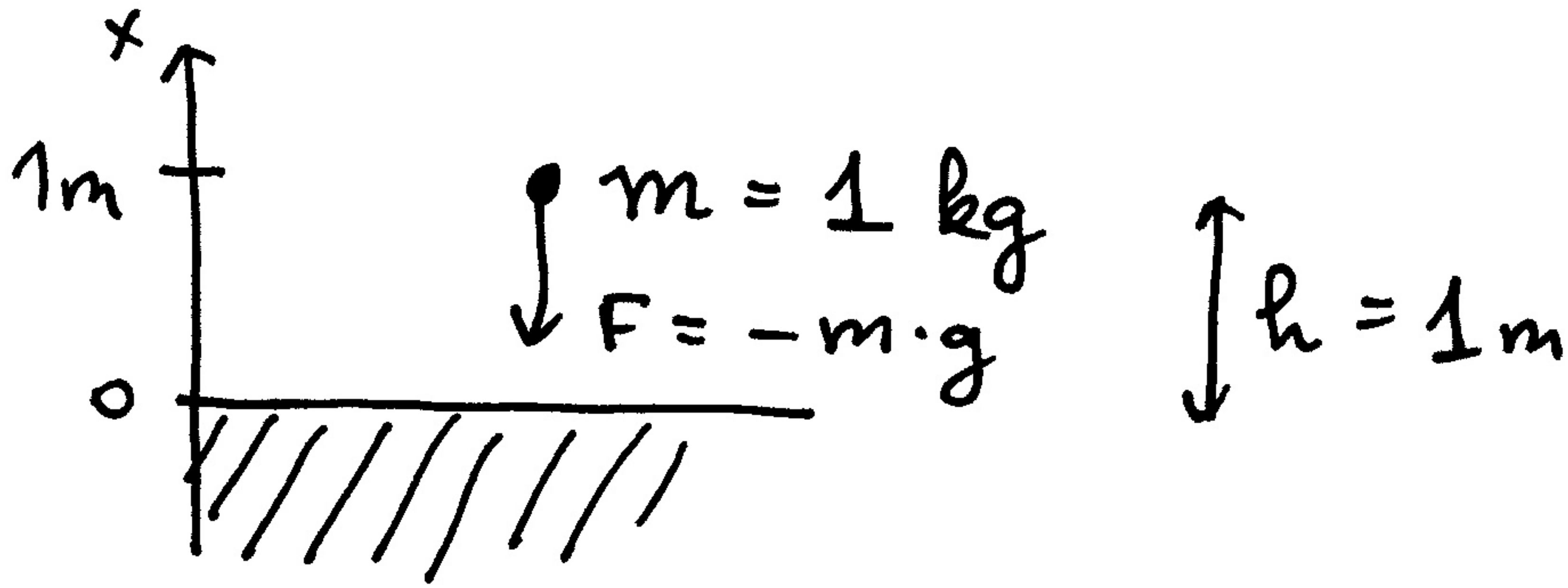
$\dot{v}(t) = F(t)/m \mapsto v(t+\Delta t) \approx v(t) + F(t)\Delta t/m$

Ez a megoldás egyre pontosabb, ha $\Delta t \to 0$.

Ha máshogy nem, akkor numerikusan meg tudjuk oldani a problémát.

(I/B) Klasszikus mechanika: állapotjelzők, fizikai mennyiségek, mozgásegyenlet

Példa: szabadesés



Mozgási és helyzeti energia.

- példa: szabadesés
- $E = E_{\text{mozg}} + E_{\text{helyz}} = \frac{1}{2}mv^2 + mgx$
- *mozgási* vagy *kinetikus*, E_{mozg} vagy K
- *helyzeti* vagy *potenciális*, E_{helyz} vagy V
- erő és potenciális energia kapcsolata: $F(x) = -\frac{dV(x)}{dx}$ (itt $= -mg$)

Impulzus (= lendület)

- $p(t) = mv(t)$
- $E(x, p) = \frac{p^2}{2m} + mgx$

(I/C) Kvantummechanika: állapotjelzők, fizikai mennyiségek, mozgásegyenlet

Klasszikus mechanika: *determinisztikus jóslat*.

$$\Updownarrow$$

Kvantummechanika: *valószínűségi jóslat*.

(I/C) Kvantummechanika: állapotjelzők, fizikai mennyiségek, mozgásegyenlet

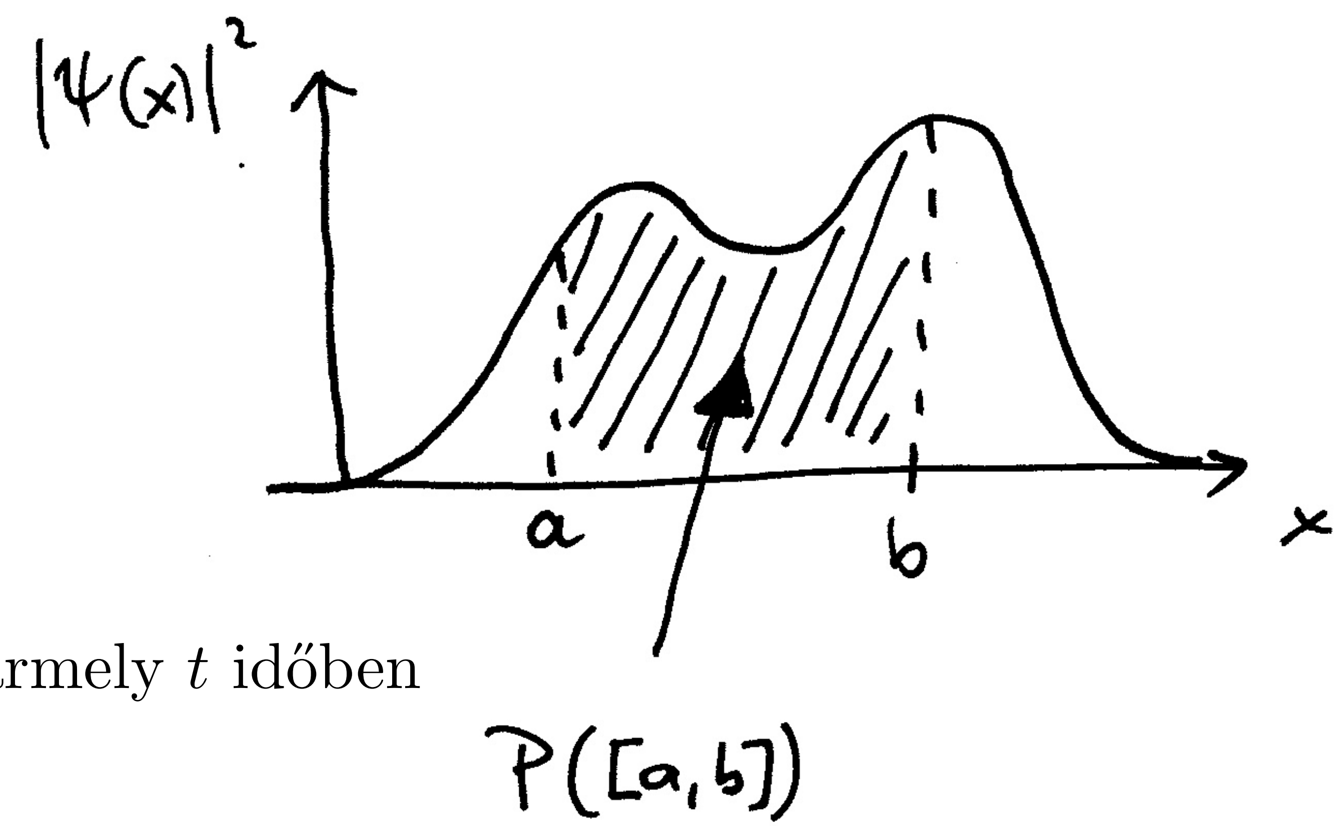
Példa: egy darab elektron, egy dimenzió (1D), szabad mozgás

Példa: egy darab elektron, 1D, szabadesés

Példa: egy darab elektron, 1D, harmonikus oszcillátor

Állapotjelző:

- *hullámfüggvény* (*hfv*), $\psi(x,t)$
- $\psi : \mathbb{R} \times \mathbb{R} \to \mathbb{C}$
- hely $\times$ idő $\to$ komplex szám



Hullámfüggvény értelmezése:

- $|\psi(x,t)|^2$ valószínűségi sűrűségfüggvény bármely t időben
- ψ *normált*, azaz $\int_{-\infty}^{\infty} dx |\psi(x)|^2 = 1$
- az elektron megtalálási valószínűsége az $[a,b]$ szakaszon a t időpillanatban $P([a,b]) = \int_a^b dx |\psi(x,t)|^2$

(I/C) Kvantummechanika: állapotjelzők, fizikai mennyiségek, mozgásegyenlet

Kérdés

Mi a ψ dimenziója? (mértékegysége) $[\psi] =$?

(a) méter

(b) 1

(c) méter^{-1}

(d) méter$^{-1/2}$

(I/C) Kvantummechanika: állapotjelzők, fizikai mennyiségek, mozgásegyenlet

Kérdés

Mi a ψ dimenziója? (mértékegysége) $[\psi] =?$

(a) méter

(b) 1

(c) méter^{-1}

(d) méter$^{-1/2}$

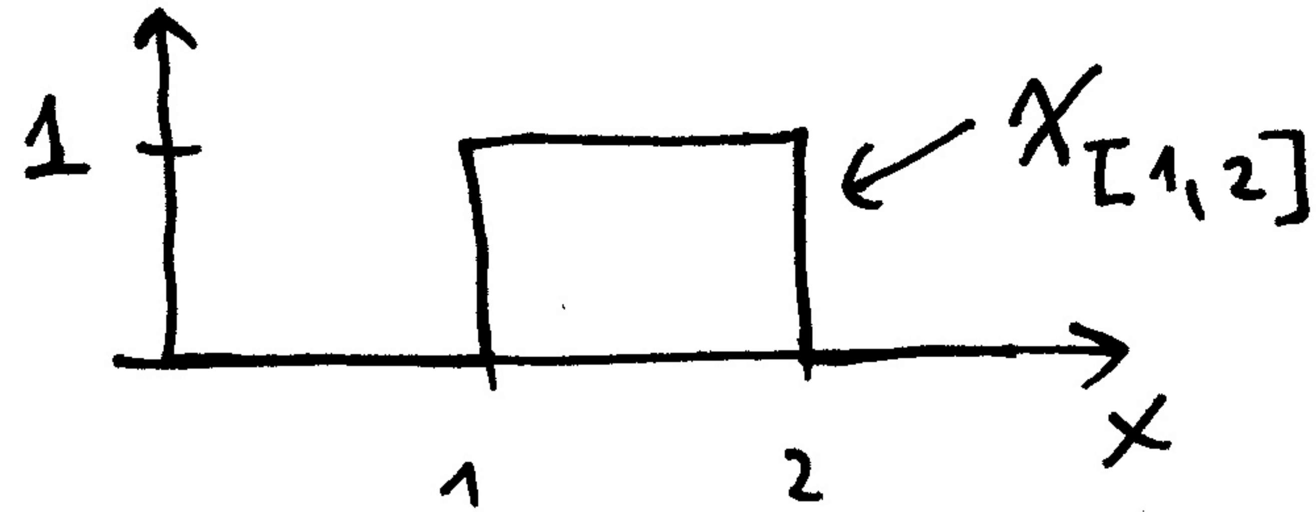
Válasz:

$[\psi] = \mathrm{m}^{-1/2}$, hiszen $|\psi(x,t)|^2$ egy egydimenziós térben értelmezett valószínűségi sűrűségfüggvény, azaz

$1 = \int_{-\infty}^{\infty} dx |\psi(x,t)|^2$, tudjuk hogy $[dx] = \mathrm{m}$, tehát $[\psi] = \mathrm{m}^{-1/2}$

(I/C) Kvantummechanika: állapotjelzők, fizikai mennyiségek, mozgásegyenlet

Definíció: az $[a, b]$ intervallum *karakterisztikus függvénye* $\chi_{[a,b]} : x \mapsto \begin{cases} 1, & \text{ha } x \in [a, b] \\ 0, & \text{egyébként} \end{cases}$

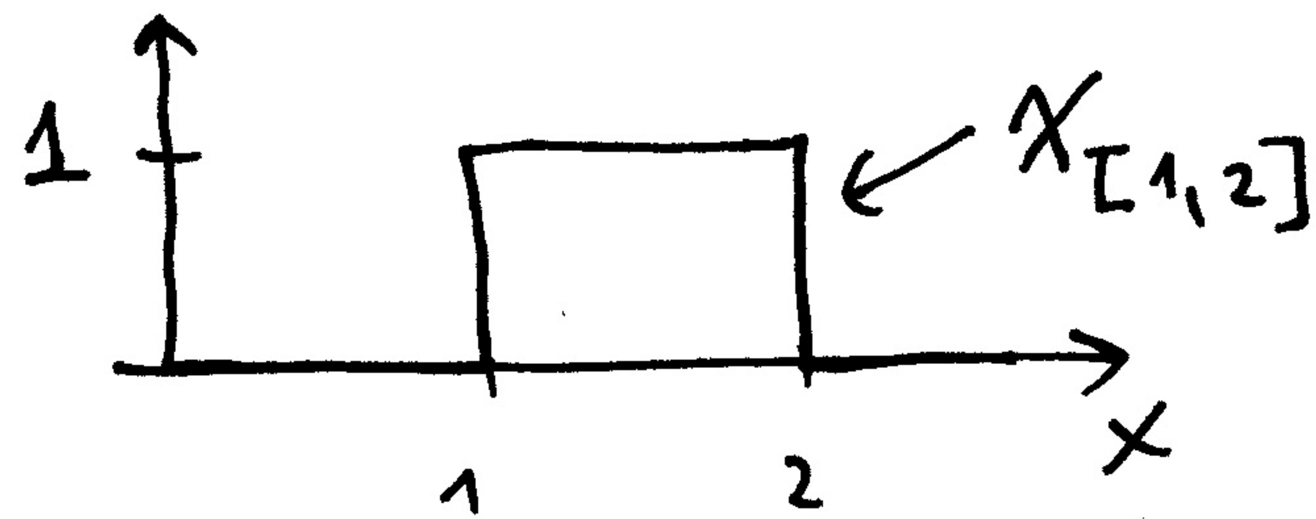


Kérdés

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

(I/C) Kvantummechanika: állapotjelzők, fizikai mennyiségek, mozgásegyenlet

Definíció: az $[a,b]$ intervallum *karakterisztikus függvénye* $\chi_{[a,b]} : x \mapsto \begin{cases} 1, & \text{ha } x \in [a,b] \\ 0, & \text{egyébként} \end{cases}$



Kérdés

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

Válasz:

$$1 = \int_{-\infty}^{\infty} dx |\psi(x)|^2 = |N|^2 \int_0^a dx 1 = |N|^2 a \qquad \Rightarrow \qquad |N| = 1/\sqrt{a}$$

Tehát pl. az $N = 1/\sqrt{a}$ jó választás.

(I/C) Kvantummechanika: állapotjelzők, fizikai mennyiségek, mozgásegyenlet

Definíció: hullámfüggvények skalárszorzata:

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

($*$: komplex konjugálás)

Kérdés: Legyen $\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{a}}\chi_{[0,a]}(x)$ és $\varphi(x) = \frac{i}{\sqrt{2a}}\chi_{[0,2a]}$.

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

Válasz:

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

$= \int_{-\infty}^{\infty} dx\, \frac{1}{\sqrt{a}}\, \chi_{[0,a]}(x) \frac{i}{\sqrt{2a}}\, \chi_{[0,2a]}(x) =$

$= \frac{i}{\sqrt{2a}} \int_0^a dx\, 1 = i/\sqrt{2}$

Állítás: Egy hullámfüggvény pontosan akkor normált, ha önmagával vett skalárszorzata 1:

ψ normált $\Leftrightarrow \langle\psi|\psi\rangle = 1$

(I/C) Kvantummechanika: állapotjelzők, fizikai mennyiségek, mozgásegyenlet

Fizikai mennyiségek a kvantummechanikában: hely, impulzus.

A kvantummechanikában a fizikai mennyiségeket *lineáris leképezések*, vagy más szóval *lineáris operátorok* írják le.

Ezek a lineáris operátorok minden hfv-hez egy másik hfv-t rendelnek.

$\hbar$: redukált Planck-állandó, $\hbar = \frac{h}{2\pi}$

hely: $\hat{x} : \psi \mapsto (\hat{x}\psi : \mathbb{R} \to \mathbb{C}, x \mapsto x\psi(x))$

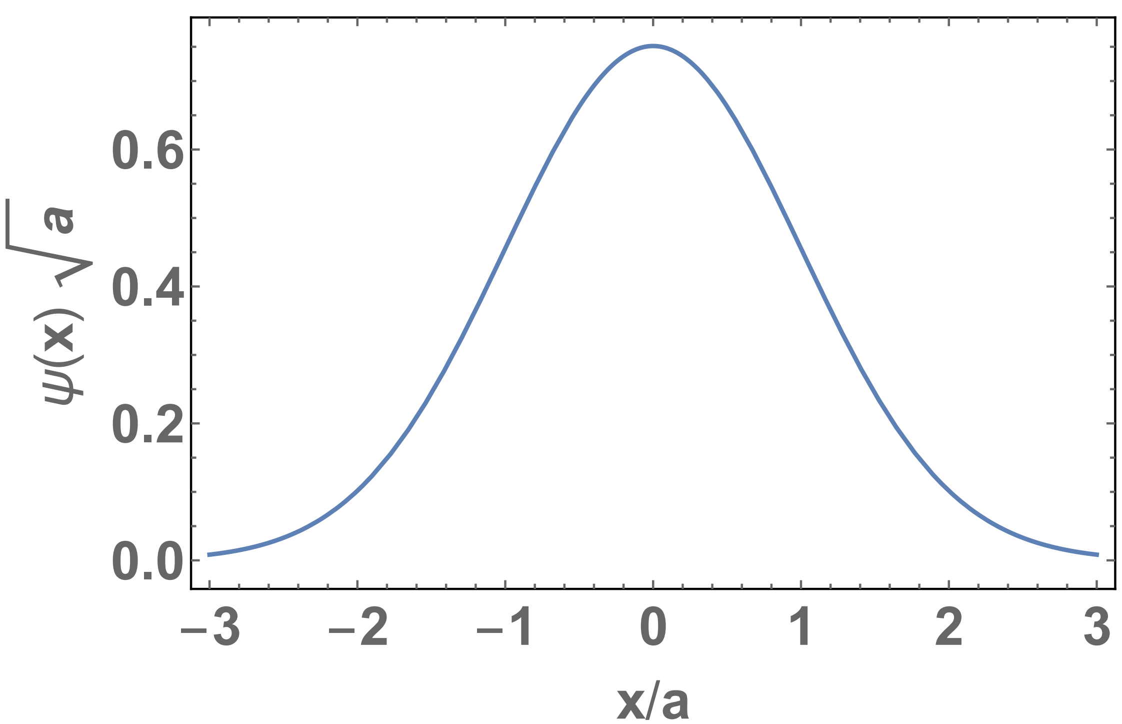
impulzus: $\hat{p} : \psi \mapsto \left(\hat{p}\psi : \mathbb{R} \to \mathbb{C}, x \mapsto \frac{\hbar}{i}\frac{d\psi(x)}{dx}\right)$

Feladat: Legyen $\psi(x) = \frac{1}{\pi^{1/4}\sqrt{a}} e^{-\frac{x^2}{2a^2}}$.

(a) Normált-e ψ?

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

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



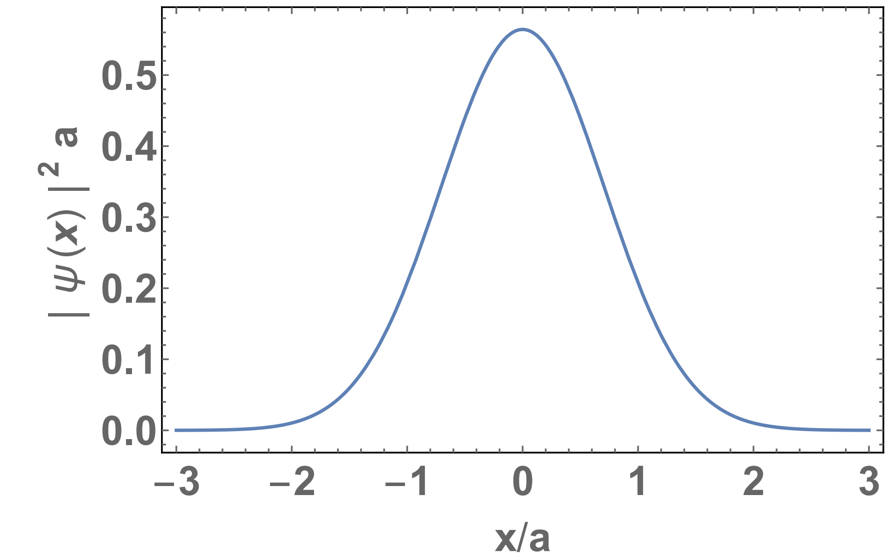
(I/C) Kvantummechanika: állapotjelzők, fizikai mennyiségek, mozgásegyenlet

Feladat: Legyen $\psi(x) = \frac{1}{\pi^{1/4}\sqrt{a}} e^{-\frac{x^2}{2a^2}}$.

(a) Normált-e ψ?

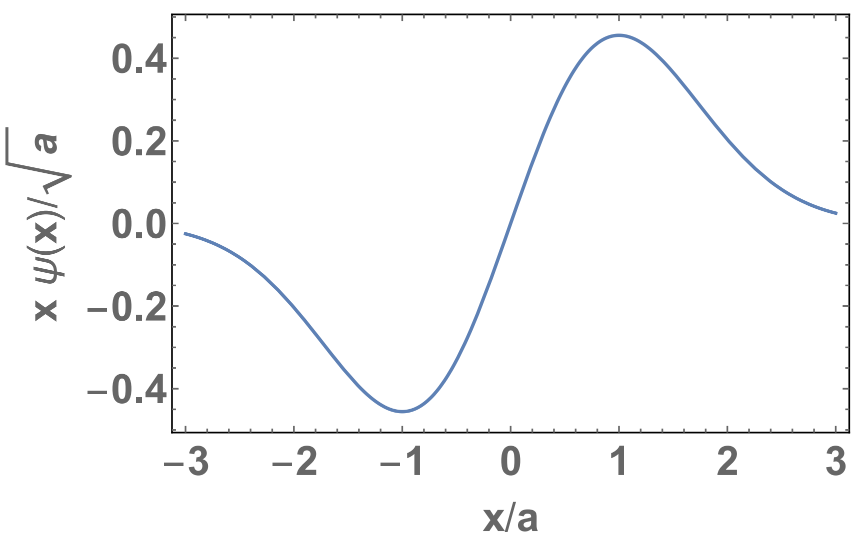
(b) $(\hat{x}\psi)(x) = ?$

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



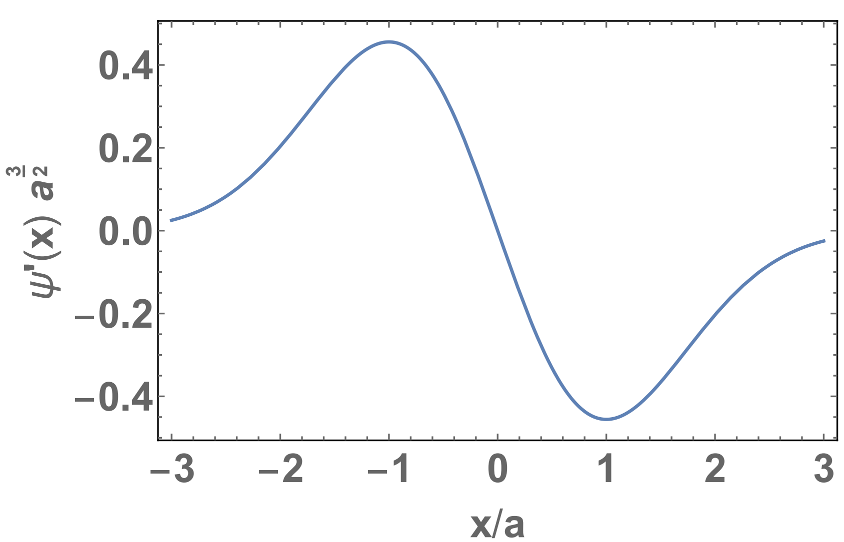
Megoldás:

(a) Igen. Házi feladat.



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

(c) $(\hat{p}\psi)(x) = \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}\frac{1}{\pi^{1/4}\sqrt{a}} e^{-\frac{x^2}{2a^2}} = -\frac{\hbar}{i\pi^{1/4}a^{5/2}} x e^{-\frac{x^2}{2a^2}}$



(I/C) Kvantummechanika: állapotjelzők, fizikai mennyiségek, mozgásegyenlet

Klasszikus mechanika: *determinisztikus jóslat*.

$$\Updownarrow$$

Kvantummechanika: *valószínűségi jóslat*.

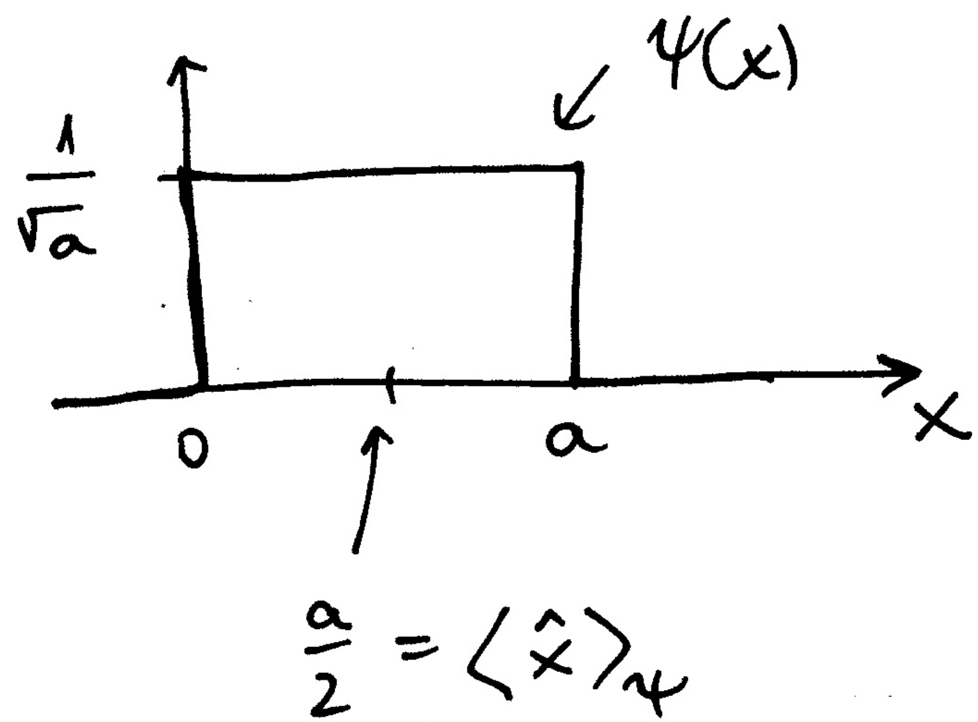
Fizikai mennyiségek várhatóértéke a ψ állapotban:

hely várhatóértéke: $\langle \hat{x} \rangle_\psi = \langle \psi | \hat{x} \psi \rangle$

impulzus várhatóértéke: $\langle \hat{p} \rangle_\psi = \langle \psi | \hat{p} \psi \rangle$

(I/C) Kvantummechanika: állapotjelzők, fizikai mennyiségek, mozgásegyenlet

Feladat: Legyen egy elektron állapota $\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{a}}\chi_{[0,a]}(x)$.
Mi az elektron helyének várhatóértéke ebben az állapotban? $\langle\hat{x}\rangle_\psi = ?$



Megoldás:

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

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

(I/C) Kvantummechanika: állapotjelzők, fizikai mennyiségek, mozgásegyenlet

Mozgásegyenlet: (recept)

- példa: harmonikus oszcillátor
- klasszikus energia: $E = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}kx^2$
- x, $p \to$ operátorokkal helyettesítjük $\to$

  $\to$ *Hamilton-operátor:* $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}k\hat{x}^2$
- mozgásegyenlet: *időfüggő Schrödinger-egyenlet*:

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

- itt:

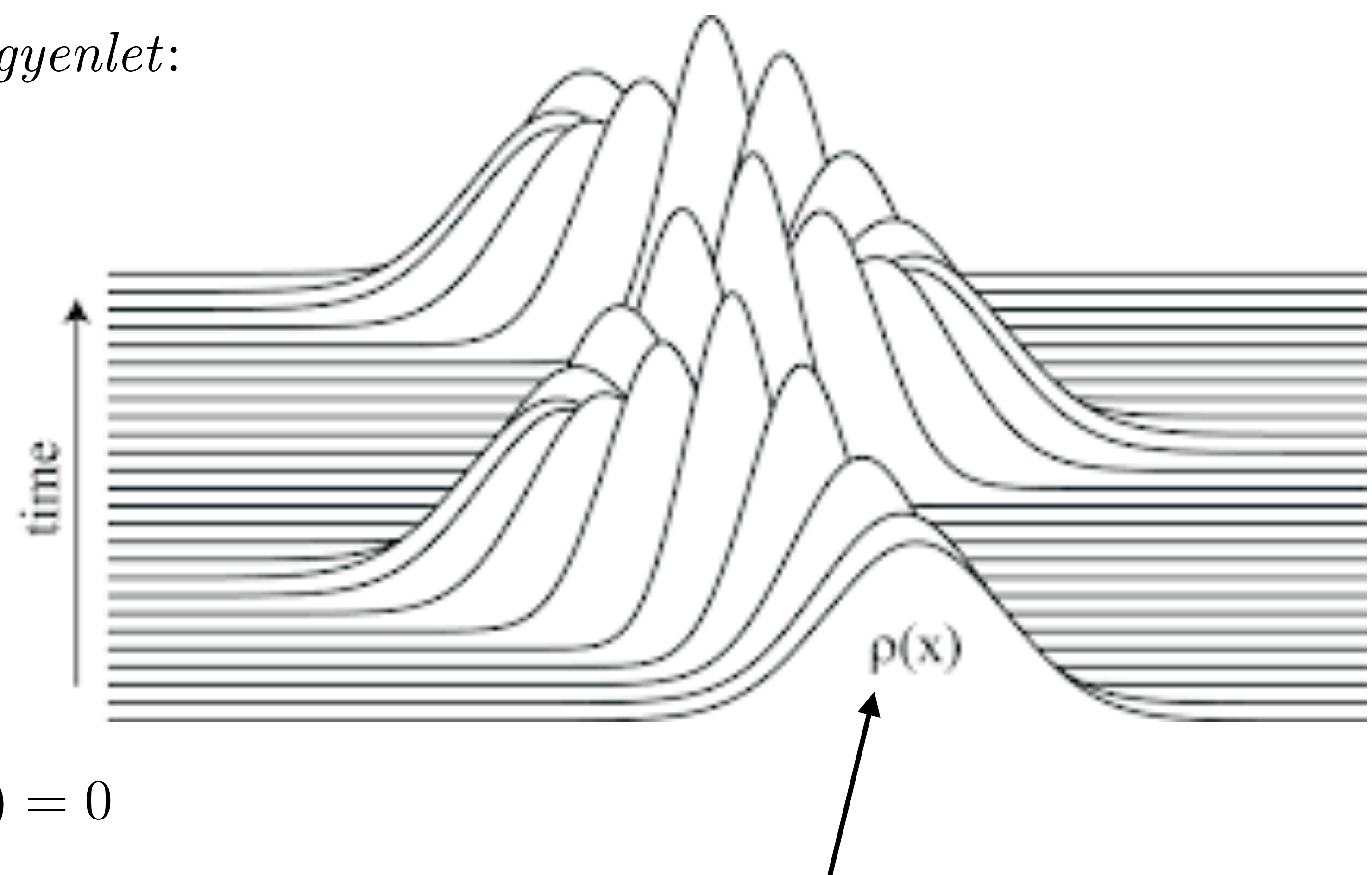
$$\frac{\hbar}{i}\dot{\psi}(x,t) + \left(\frac{\hat{p}^2}{2m}\psi\right)(x,t) + \frac{1}{2}k\hat{x}^2\psi(t) = 0$$

azaz

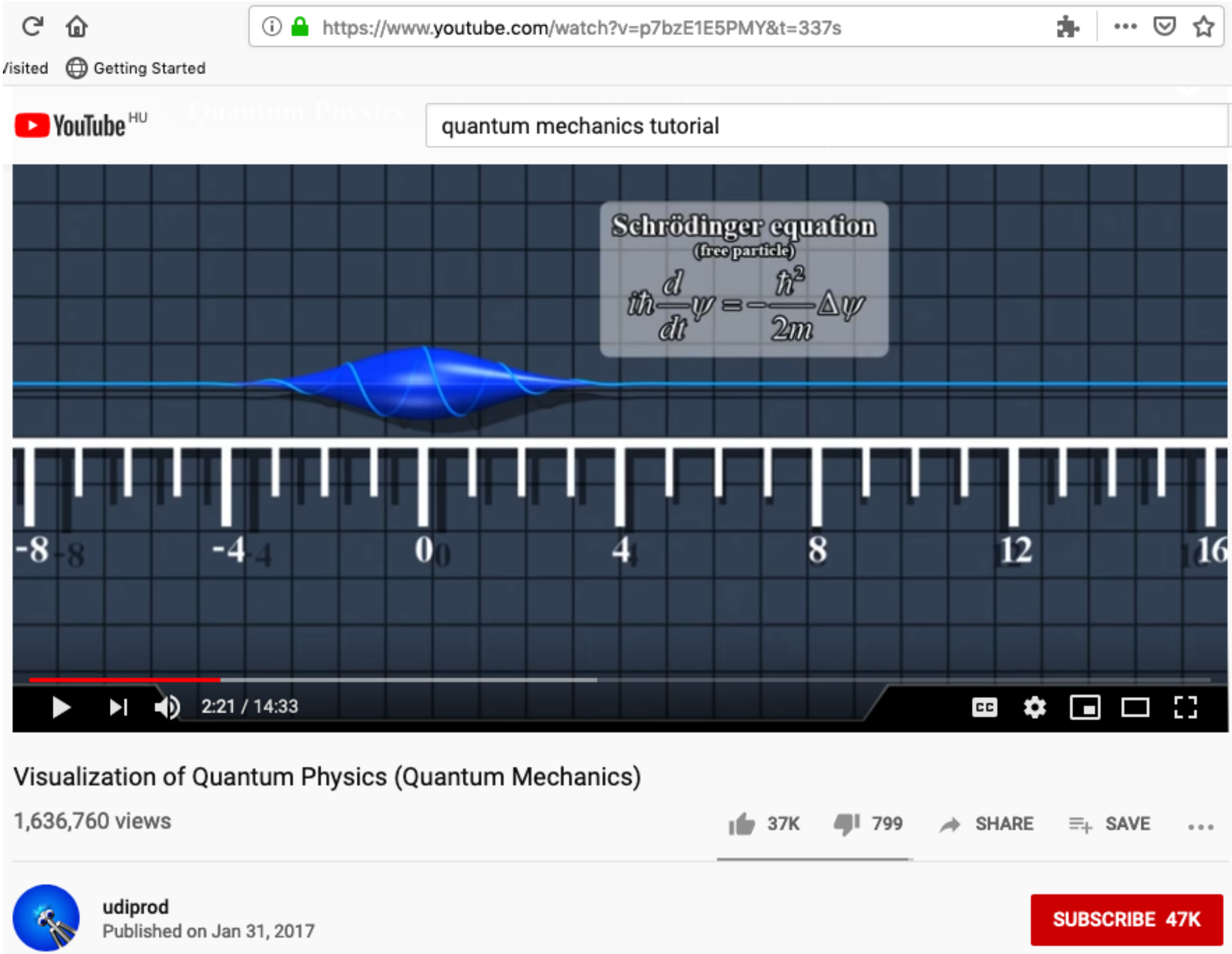
$$\frac{\hbar}{i}\dot{\psi}(x,t) + \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x,t)\right) + \frac{1}{2}kx^2\psi(x,t) = 0$$

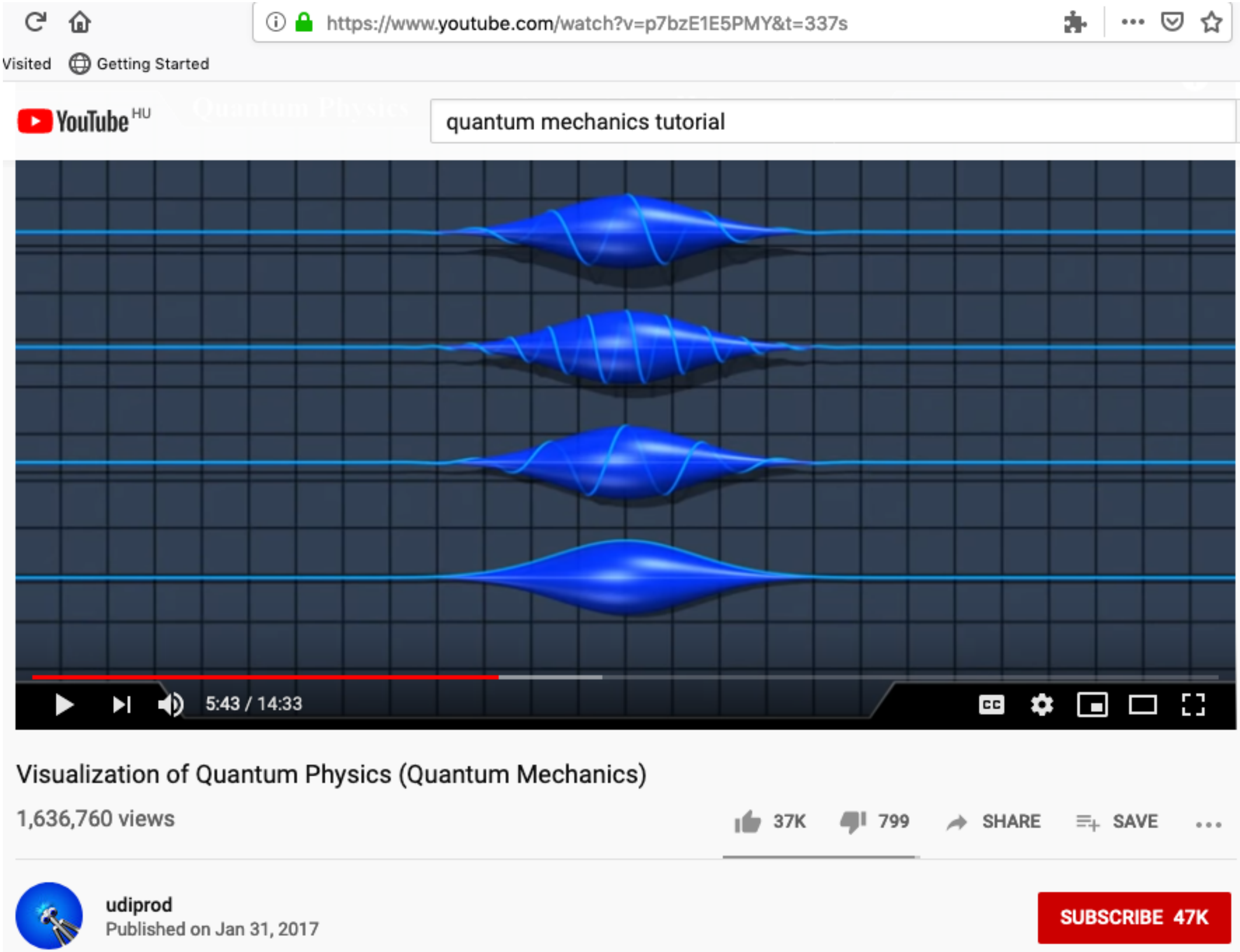
- Az időfüggő Schrödinger-egyenlet egy időben elsőrendű, térben másodrendű, lineáris parciális differenciálegyenlet
- kezdeti feltétel: pl. $\psi(x,t=0) = \frac{1}{\sqrt{a}}\chi_{[0,a]}(x)$

  kérdés: $\psi(x,t) = ?$
- Az időfüggő Schrödinger-egyenlet normatartó, azaz ha $\psi(x,0)$ normált, akkor bármely t-re $\psi(x,t)$ is az.



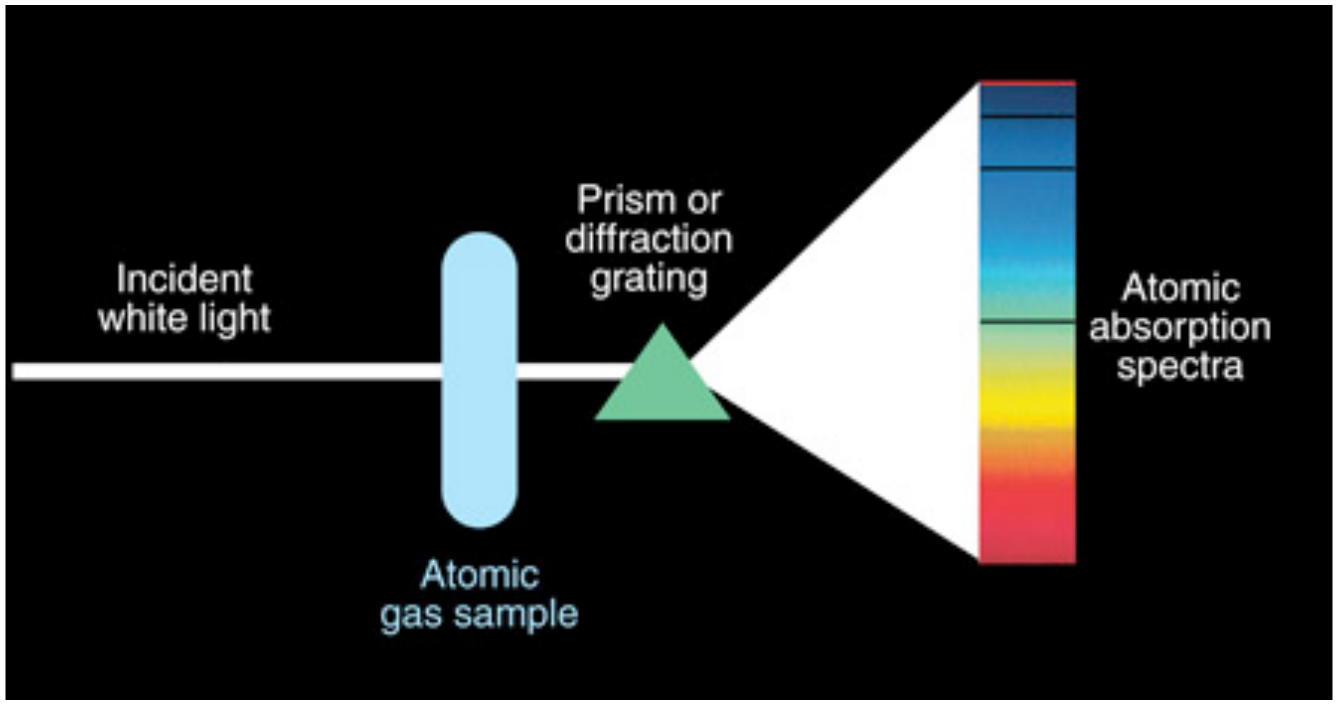
gyakori jelölés: $\rho(x,t) = |\psi(x,t)|^2$


https://www.youtube.com/watch?v=p7bzE1E5PMY&t=337s
Visited
Getting Started
YouTube HU
quantum mechanics tutorial
Schrödinger equation
(free particle)
$i\hbar\frac{d}{dt}\psi=-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi$
-8
-4
0
4
8
12
16
2:21 / 14:33
Visualization of Quantum Physics (Quantum Mechanics)
1,636,760 views
37K
799
SHARE
SAVE
udiprod
Published on Jan 31, 2017
SUBSCRIBE 47K


https://www.youtube.com/watch?v=p7bzE1E5PMY&t=337s
Visited
Getting Started
YouTube HU
quantum mechanics tutorial
5:43 / 14:33
Visualization of Quantum Physics (Quantum Mechanics)
1,636,760 views
37K
799
SHARE
SAVE
udiprod
Published on Jan 31, 2017
SUBSCRIBE 47K

Összefoglalás

Atomok abszorpciós színképe vonalas szerkezetet mutat



Miért jelennek meg ezek a vonalak?
A klasszikus fizika nem ad magyarázatot.
A kvantumelmélet ad.

Kvantumelmélet alkalmazásai:
lézerek
tranzisztorok / elektronika
szupravezetés
piezoelektromosság
…