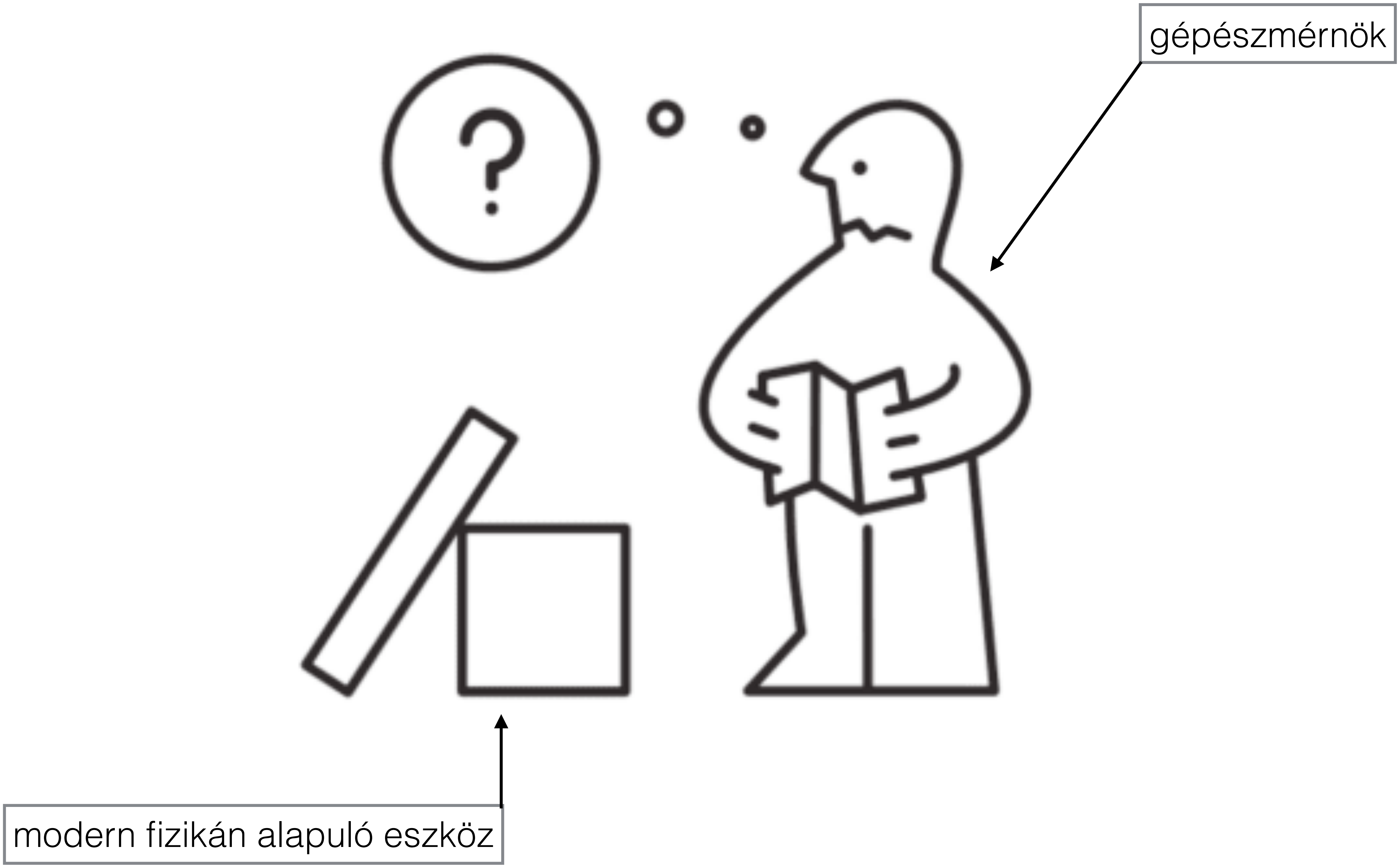
# Modern Fizika Gépészmérnököknek
# Fizika M1

http://physics.bme.hu/BMETE15MX27_kov

2019. őszi félév

2. előadás
2019. szeptember 17.

# Modern Fizika Gépészmérnököknek
# Fizika M1



## 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
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

Elektronok kvantummechanikája atomokban, kristályokban

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

# Hallgatói kérdés

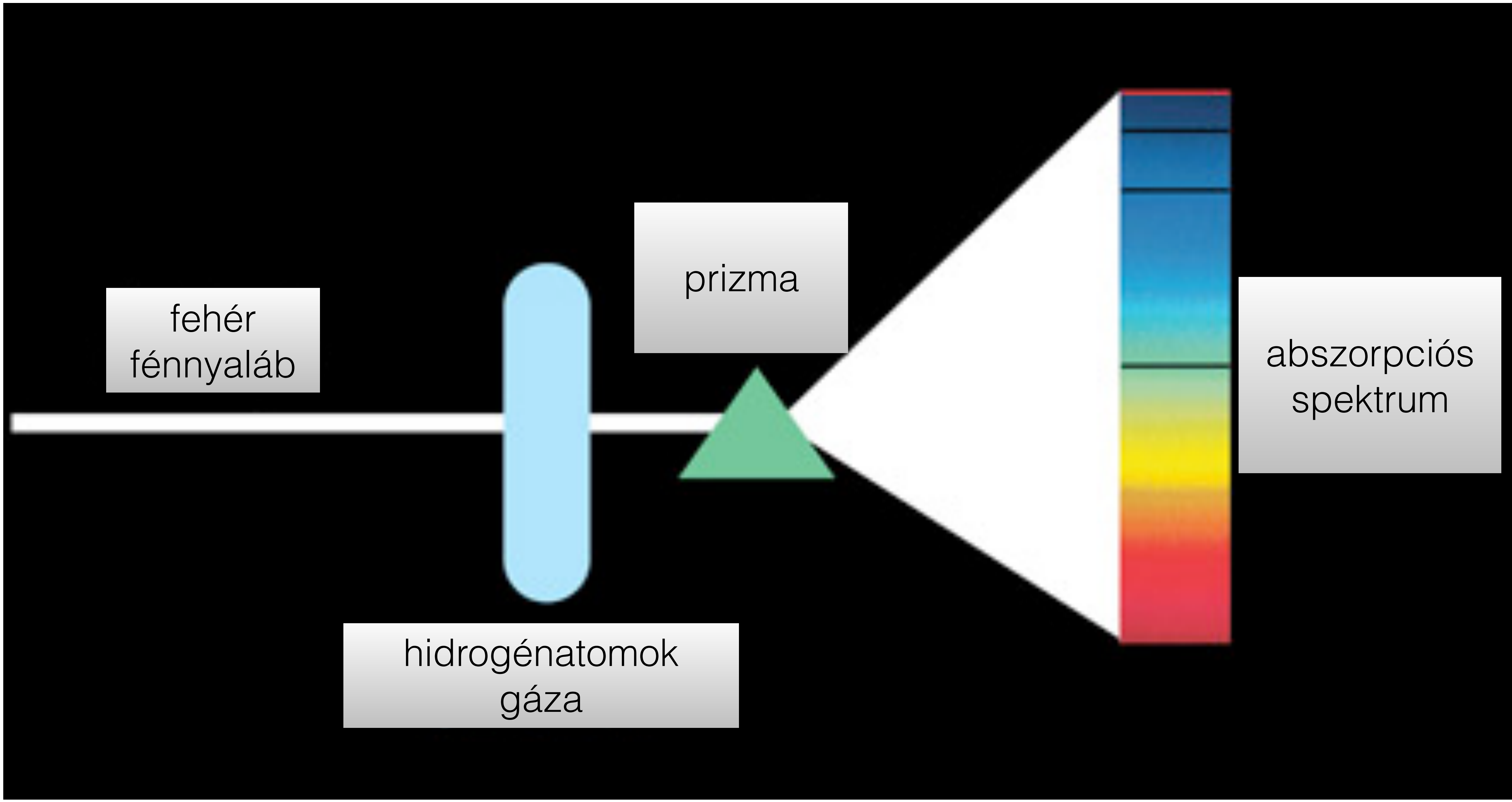
$$\int_{-\infty}^{\infty} dx f(x)$$

ugyanaz, mint

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x) dx$$

# (I) Elektronok atomokban

**Ism.:** Atomok abszorpciós színképe vonalas szerkezetet mutat



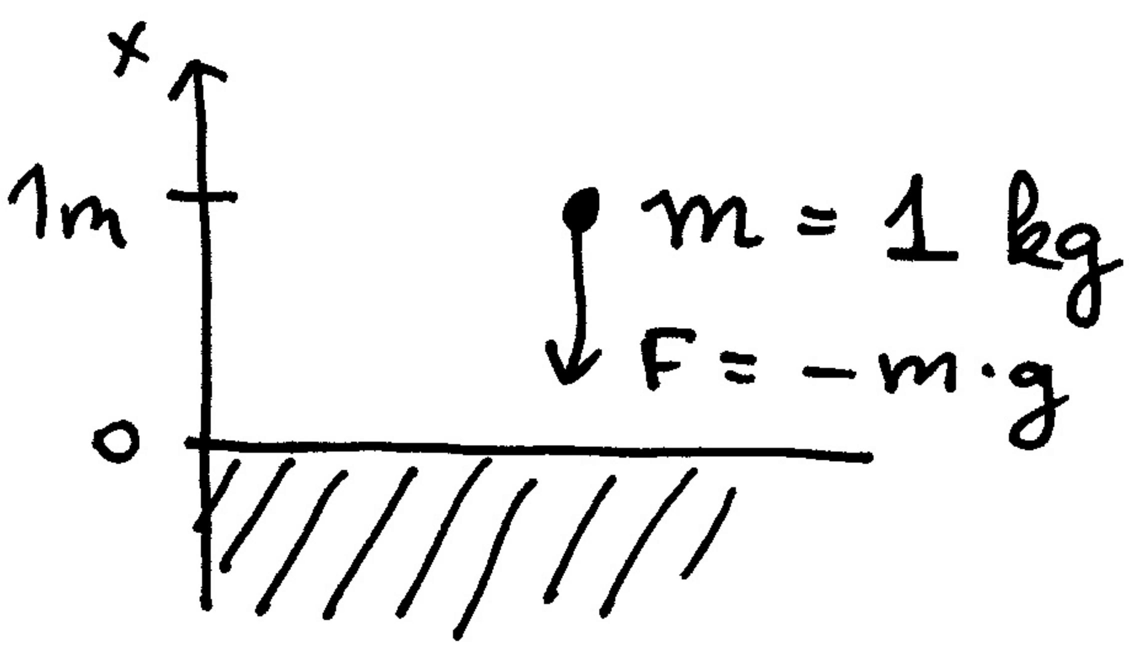

Miért jelennek meg ezek a vonalak?
A klasszikus fizika nem ad magyarázatot. A kvantumelmélet ad.

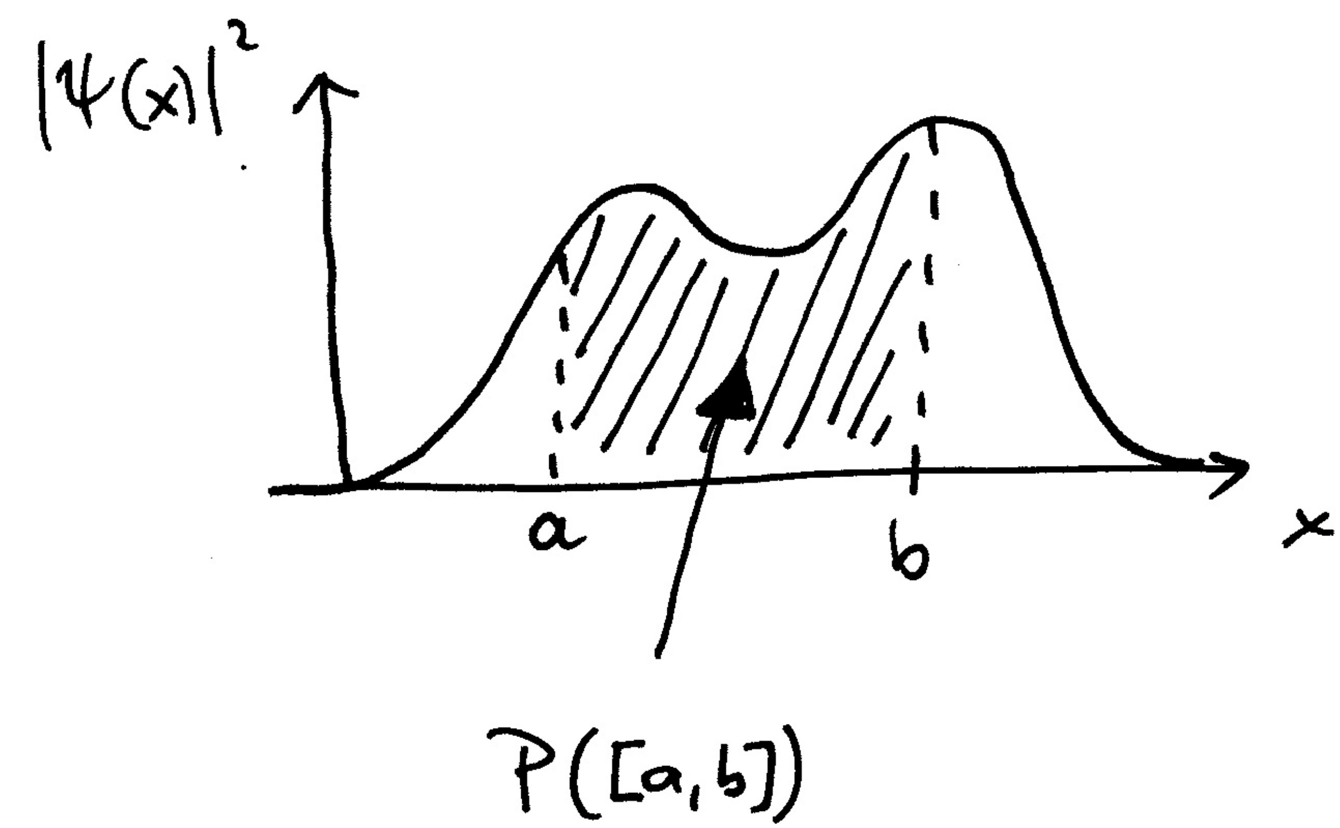
# Klasszikus vs. Kvantummechanika: állapotjelzők, fizikai mennyiségek, mozgásegyenlet

Klasszikus mechanika: *determinisztikus jóslat.*

$\Updownarrow$

Kvantummechanika: *valószínűségi jóslat.*

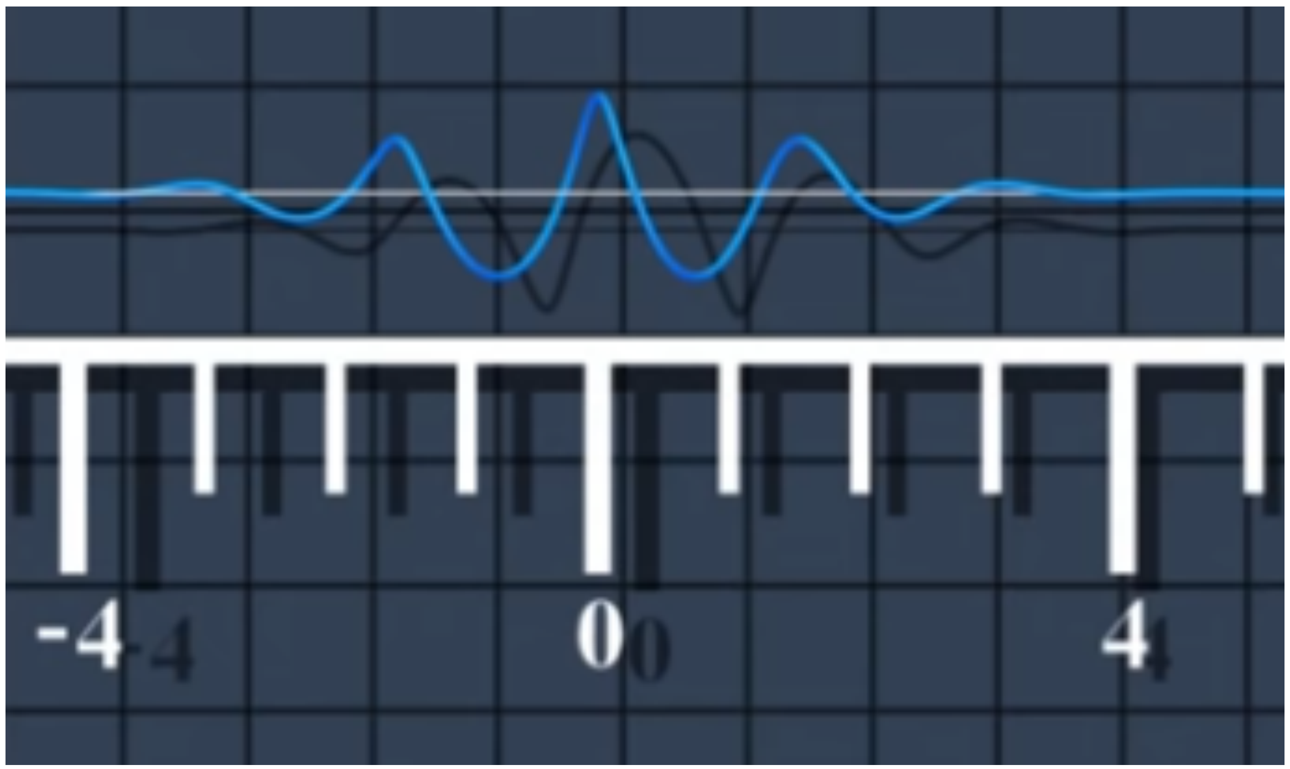


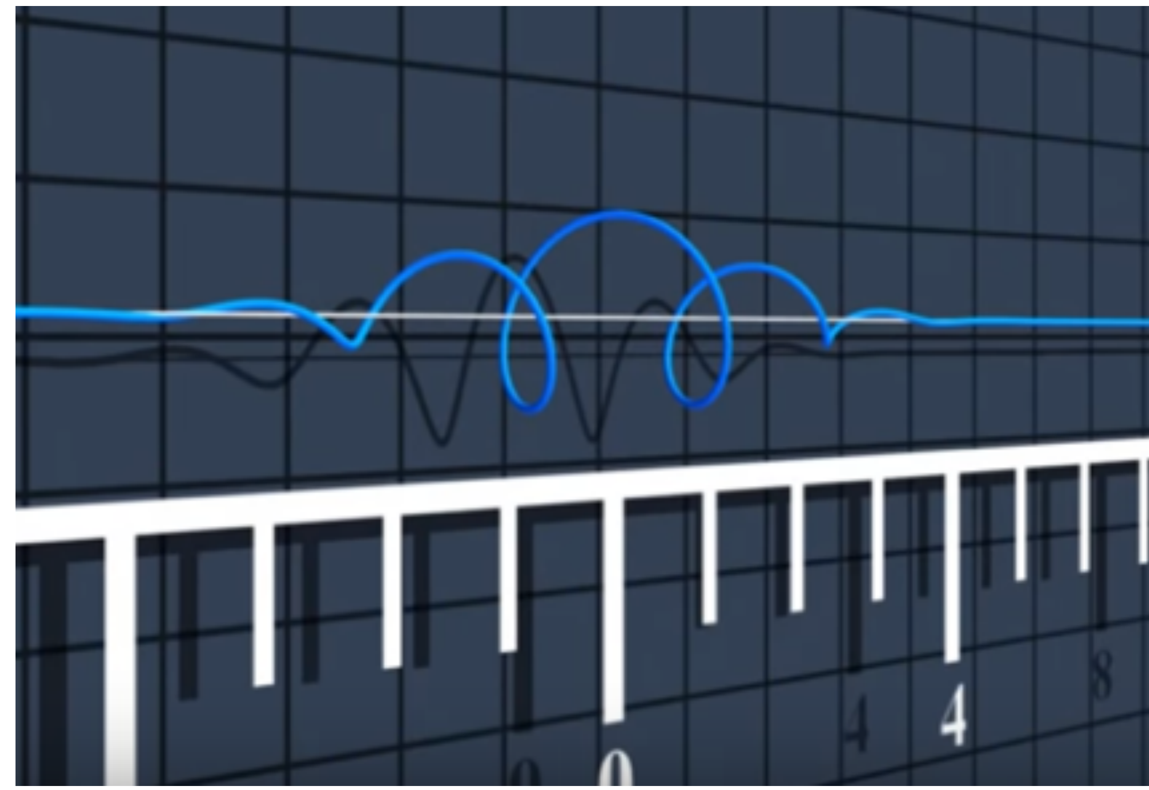



# (I) Elektronok atomokban

## (I/D) Hullámfüggvény és részecskeáramsűrűség

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




Melyik hullámfüggvényt látjuk?

$a$: pozitív és hossz dimenziójú

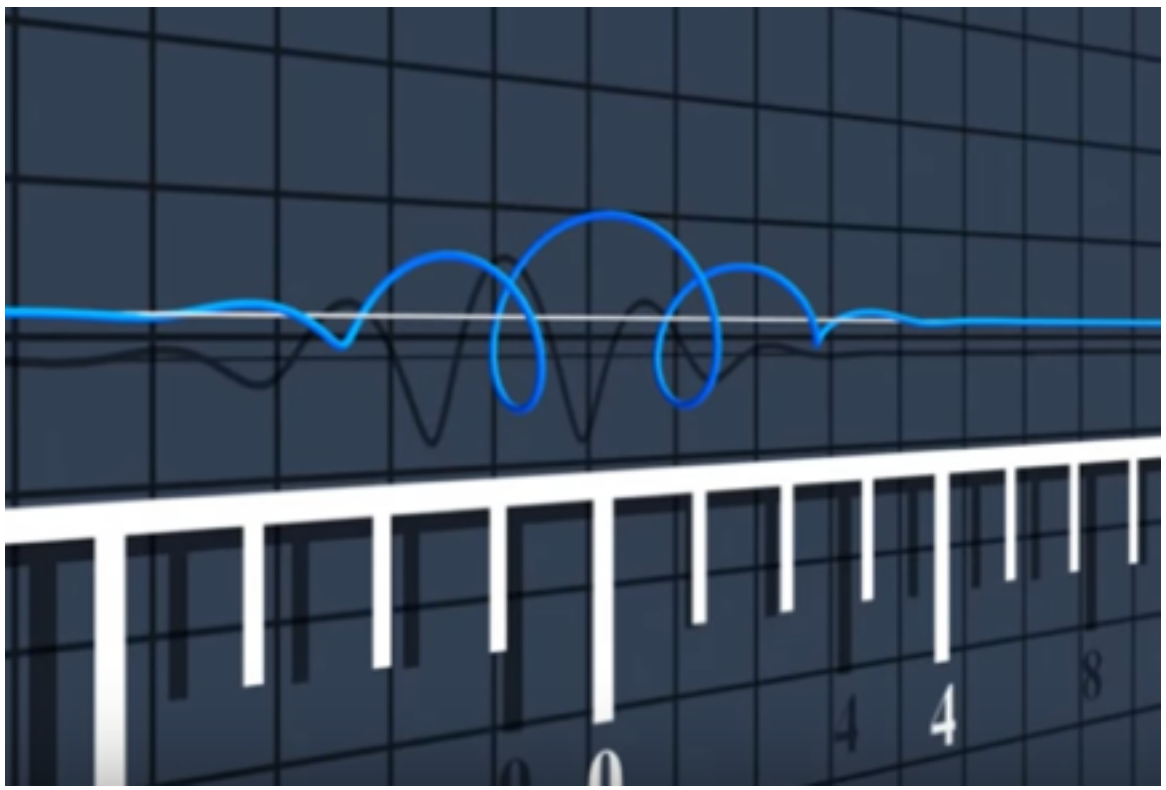
$k$: pozitív és 1/hossz dimenziójú

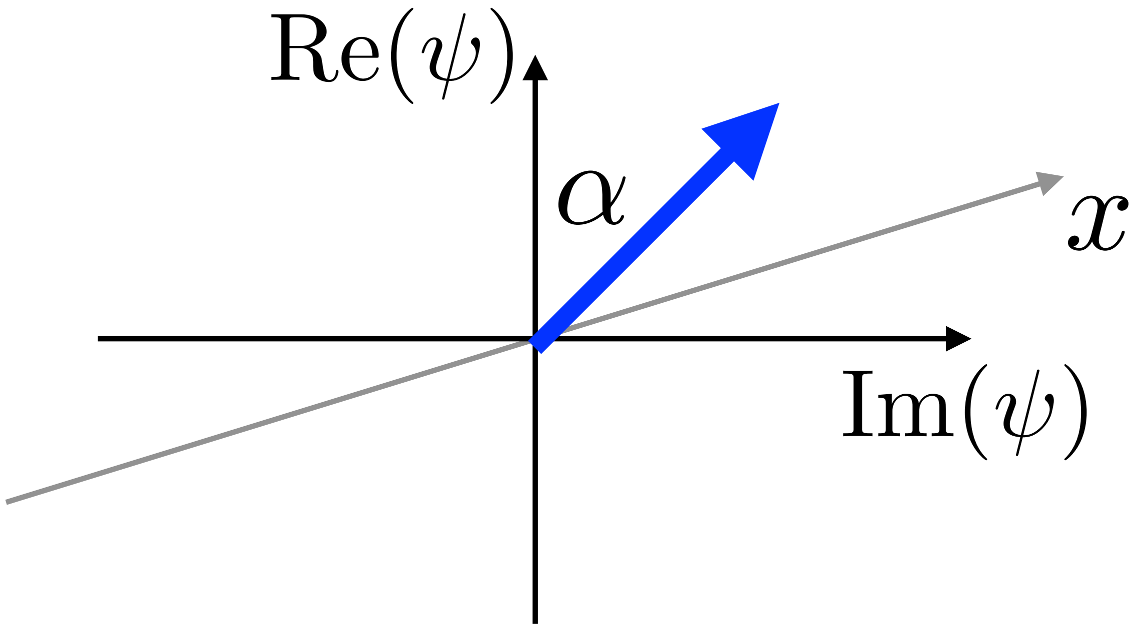
(1/hossz $\equiv$ hullámszám )

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

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

# Komplex értékű hfv ábrázolása ebben a videóban

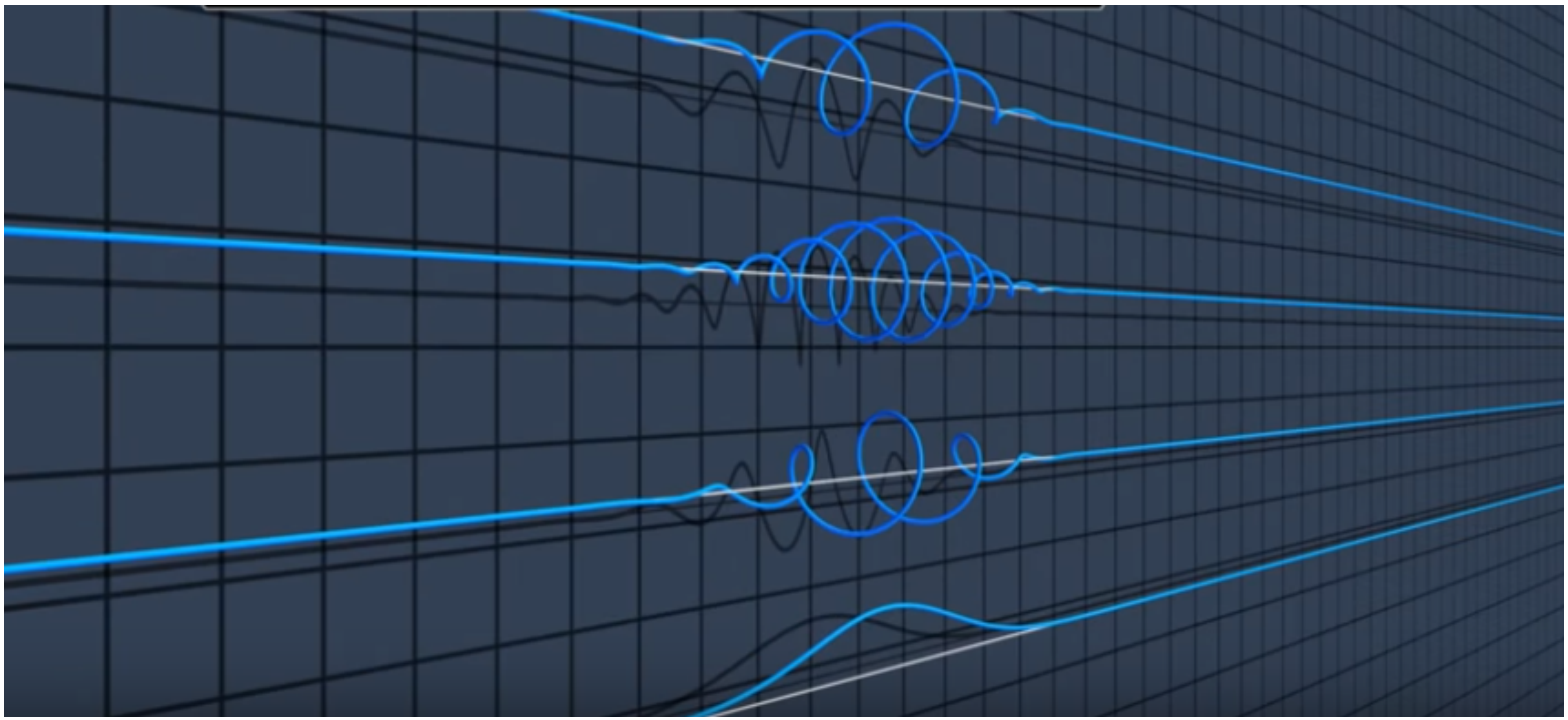



hfv abszolútértéke és fázisszöge: $\psi(x) = \sqrt{\rho(x)}e^{i\alpha(x)}$

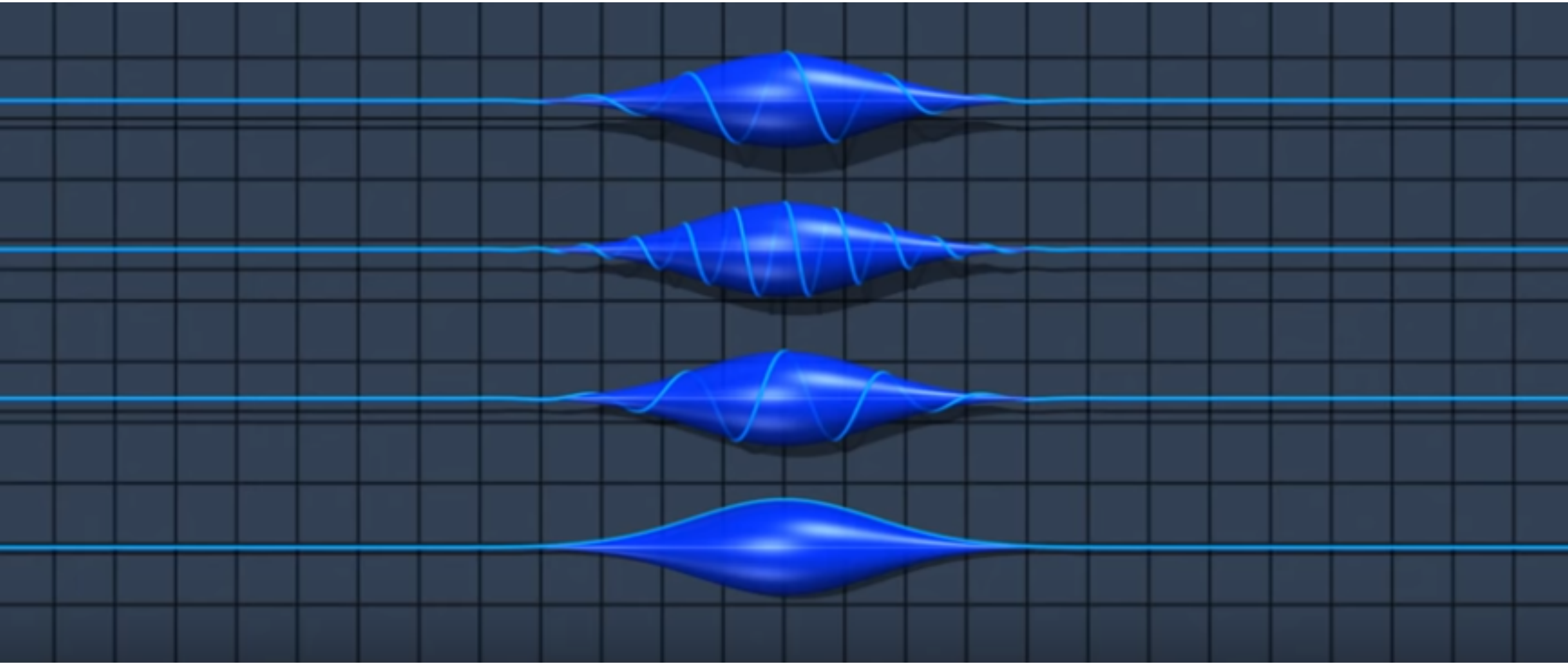
# Melyik ez a hullámfüggvény?

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



A legalsó.
(Hiszen egyedül az “nem tekeredik”, azaz valós értékű.)

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



Négy különböző kezdeti állapot.
Ugyanaz a részecskesűrűségük.
Hogyan fejlődnek az időben?

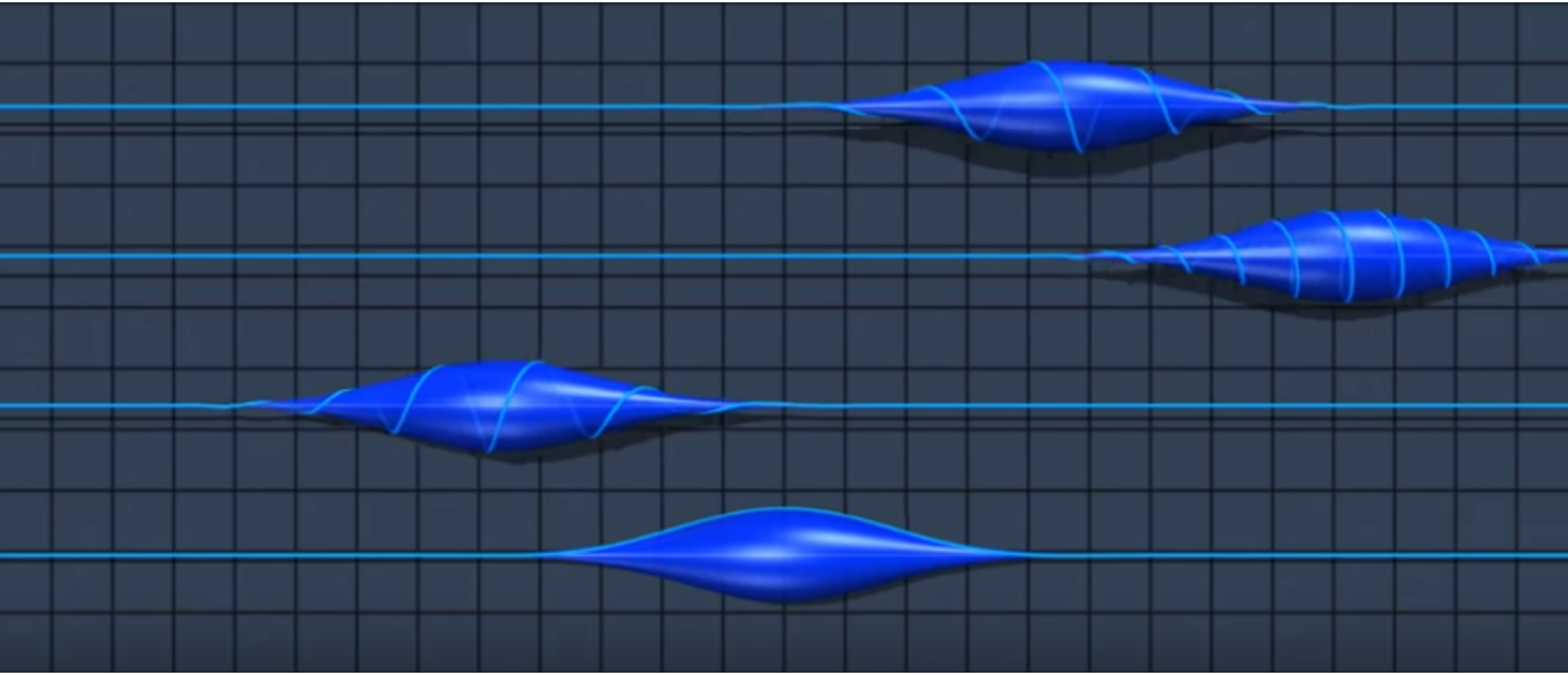
Példa: egy darab elektron, egy dimenzió (1D), szabad mozgás

# időfüggő Schrödinger-egyenlet:

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

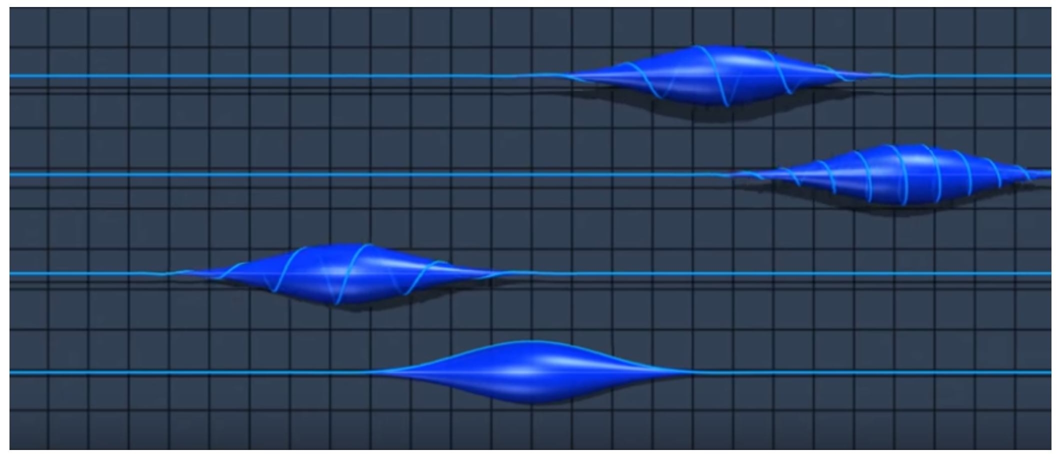
Négy különböző kezdeti állapot.
Ugyanaz a részecskesűrűségük.
Hogyan fejlődnek az időben?

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



Négy különböző kezdeti állapot.
Különbözőképpen időfejlődnek.

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



**Megfigyelések:**

1. Ugyanaz a kiindulási részecskesűrűség, de különböző mozgás.
2. Amelyik hfv nem tekeredik, az nem is mozdul el.
3. A hfv tekeredésének iránya megadja az elmozdulás irányát
4. Minél gyorsabb a hfv tekeredése, annál gyorsabb az elektron.
5. A tekeredés mértéke a mozgás során nem változik láthatóan.

https://hu.wikipedia.org/wiki/Kontinuitási_egyenlet

## Áramlástan [ szerkesztés ]

Az áramlástanban a **kontinuitási egyenlet** a tömegmegmaradás kifejezése. Differenciális alakban:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0$$

ahol $\rho$ a sűrűség, *t* az idő, és **u** a folyadéksebesség.

# Kontinuitási egyenlet egydimenziós kvantummechanikában

időfüggő Schrödinger-egyenlet következménye:

$\boxed{\text{Jelölés: } \rho(x,t) = |\psi(x,t)|^2}$

$$\frac{\partial \rho(x,t)}{\partial t} + \frac{\partial j(x,t)}{\partial x} = 0 \leftrightarrow \frac{\partial}{\partial t} \int_a^b \rho(x,t) dx = j(a,t) - j(b,t)$$

ahol a *részecske-áramsűrűség* vagy *valószínűségi áram* definíciója

$$j(x,t) = \mathrm{Re}\left[\psi^*(x) \frac{\hat{p}}{m} \psi(x)\right]$$

https://en.wikipedia.org/wiki/Probability_current

# Feladat

Egy dimenzióban mozgó elektron esetén mi a részecske-áramsűrűség dimenziója?

$\mathrm{s}^{-1}$ (1/szekundum)

## Kontinuitási egyenlet egydimenziós kvantummechanikában

időfüggő Schrödinger-egyenlet következménye:

$\boxed{\text{Jelölés: } \rho(x,t) = |\psi(x,t)|^2}$

$$\frac{\partial \rho(x,t)}{\partial t} + \frac{\partial j(x,t)}{\partial x} = 0 \leftrightarrow \frac{\partial}{\partial t}\int_a^b \rho(x,t)dx = j(a,t) - j(b,t)$$

ahol a *részecske-áramsűrűség* vagy *valószínűségi áram* definíciója

$$j(x,t) = \mathrm{Re}\left[\psi^*(x)\frac{\hat{p}}{m}\psi(x)\right]$$

https://en.wikipedia.org/wiki/Probability_current

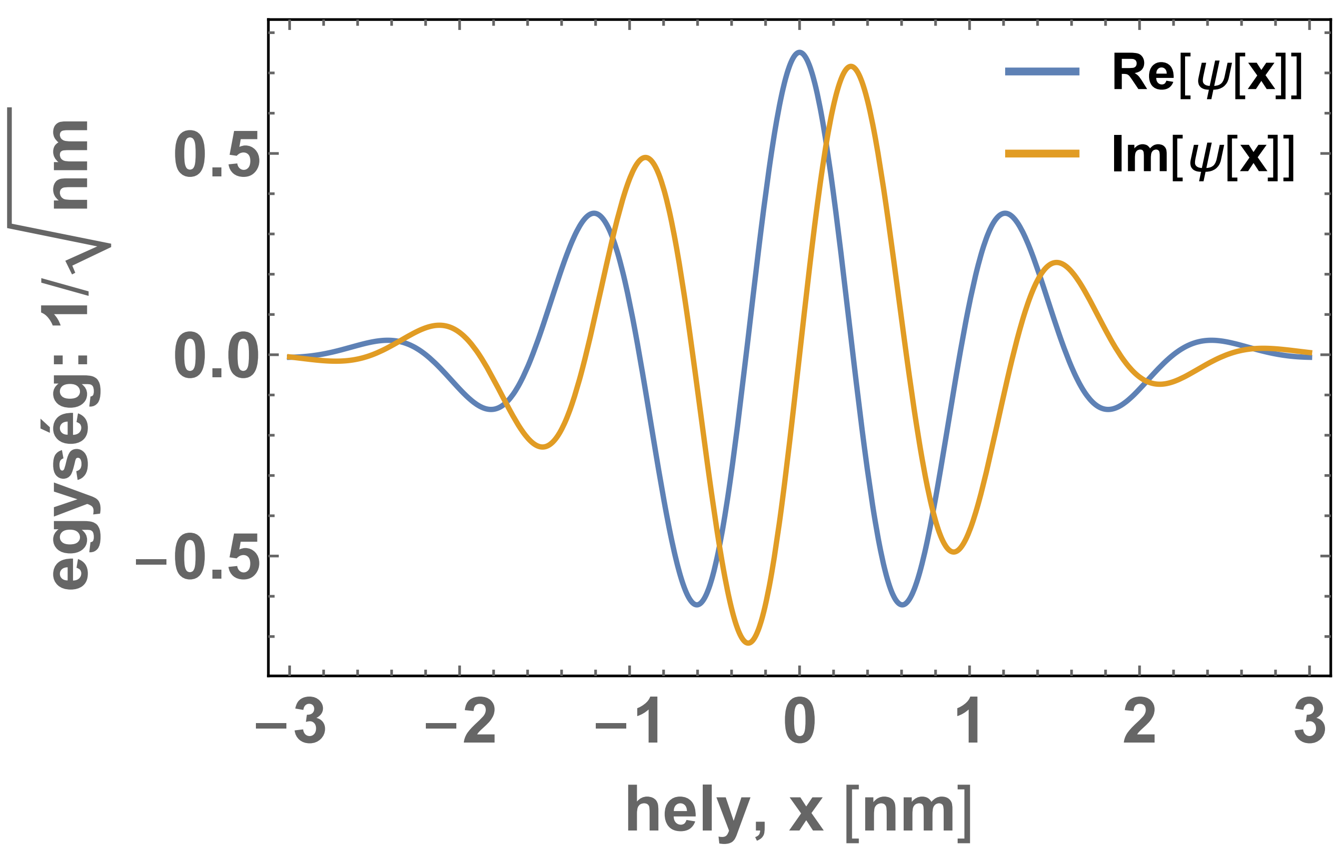
# Feladat

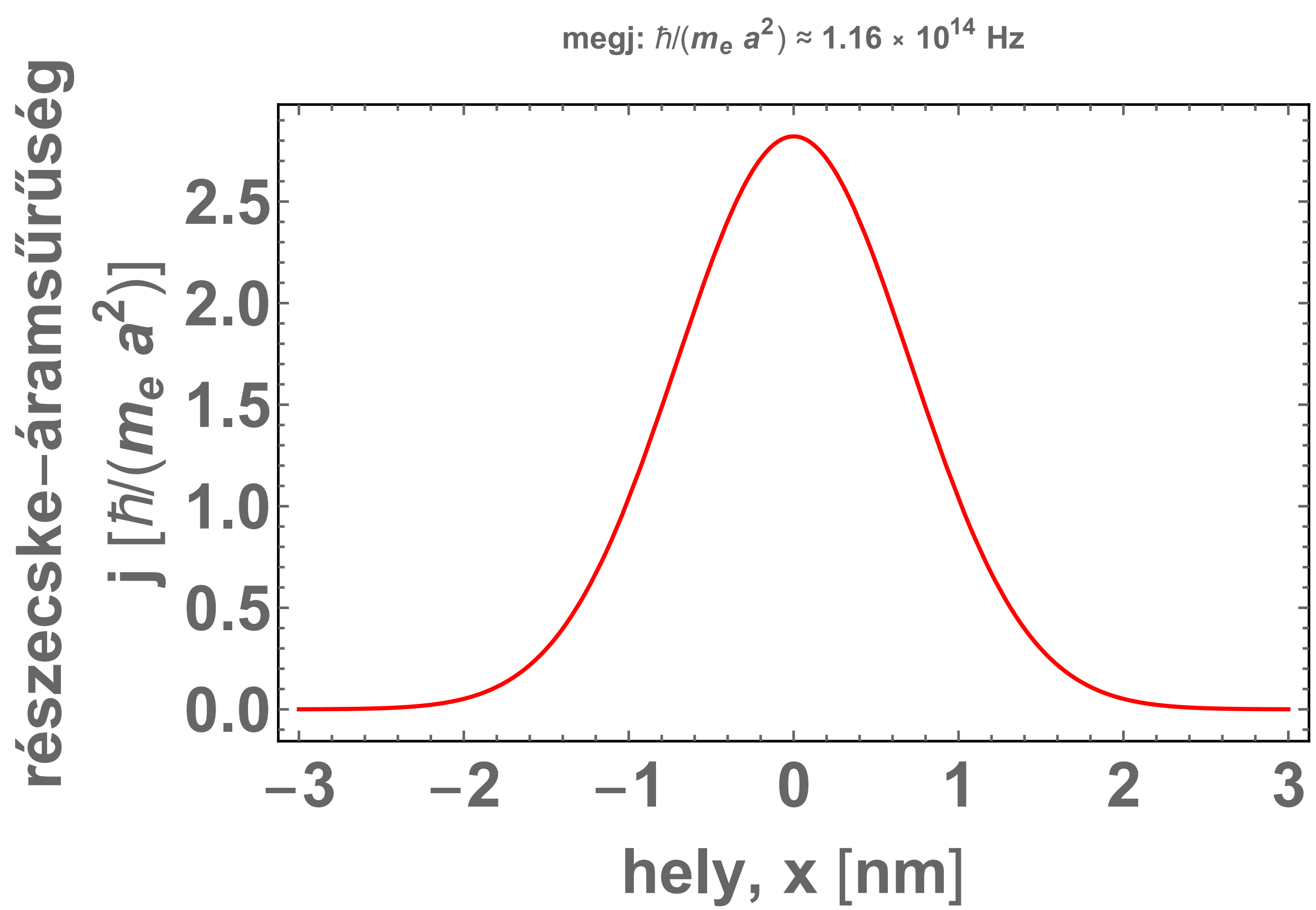
$$\psi(x) = \frac{1}{\pi^{1/4}\sqrt{a}} e^{-x^2/(2a^2)} e^{ikx}$$

Legyen $a = 1$ nm és $k = 5$ nm$^{-1}$.

Számold ki és ábrázold a hfv valós részét, képzetes részét, és a részecske-áramsűrűséget, az $x \in [-3\,\text{nm}, 3\,\text{nm}]$ intervallumban.

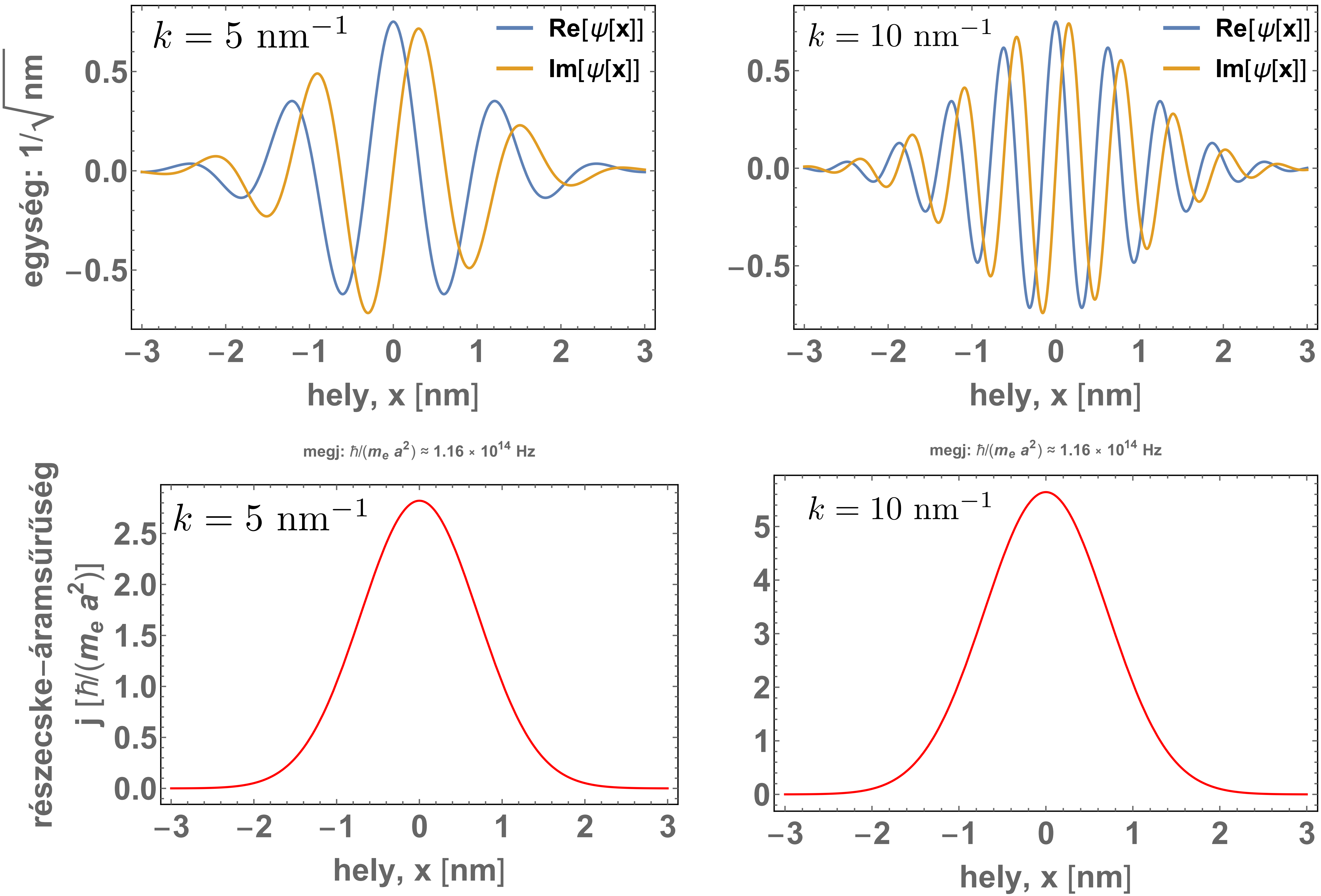
# Megoldás



# Feladat

Hasonlítsd össze a $k = 5\ \text{nm}^{-1}$ és $k = 10\ \text{nm}^{-1}$ értékekhez tartozó megoldásokat.

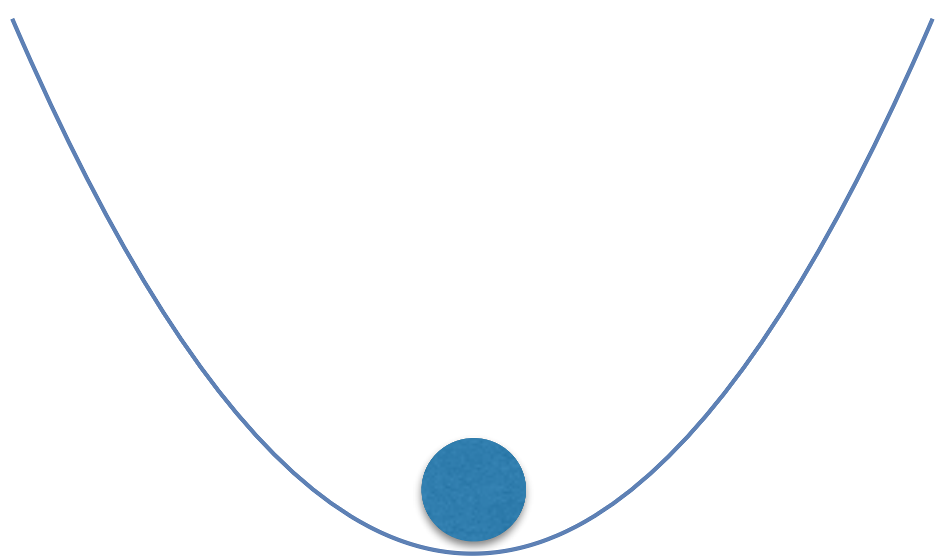


# (I) Elektronok atomokban

## (I/E) Stacionárius állapotok a kvantummechanikában

Klasszikus mechanika: stacionárius állapot = egyensúly.
Példa: gödör alján nyugvó labda

Kvantummechanika: stacionárius állapot mást jelent.



# (I) Elektronok atomokban

## (I/E) Stacionárius állapotok a kvantummechanikában

**Definíció:** (emlékeztető) Egy $\hat{M}$ mátrixnak a $\boldsymbol{v}$ vektor *sajátvektora* a $\lambda$ *sajátértékkel*, ha $\hat{M}\boldsymbol{v} = \lambda\boldsymbol{v}$.

Az $\hat{M}\boldsymbol{v} = \lambda\boldsymbol{v}$ egyenletet szokás *sajátérték-egyenletnek* hívni.

**Példa:** $\hat{M} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$.

Ennek sajátvektora
a $\boldsymbol{v} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$ vektor a $\lambda = +1$ sajátértékkel, és
a $\boldsymbol{v} = \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$ vektor a $\lambda = -1$ sajátértékkel

# (I) Elektronok atomokban

## (I/E) Stacionárius állapotok a kvantummechanikában

Időfüggetlen Schrödinger-egyenlet = a Hamilton-operátor sajátértékegyenlete

$$\boxed{\hat{H}\psi = E\psi}$$

Az $(E, \psi)$ megoldásban

- $E$-t energiasajátértéknek,
- $\psi$-t energia-sajátvektornak vagy energia-sajátállapotnak vagy energia-sajátfüggvénynek

hívjuk.

# (I) Elektronok atomokban

## (I/E) Stacionárius állapotok a kvantummechanikában

**Példa:** Egydimenziós harmonikus oszcillátor: $E = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega_0^2 x^2$, ahol $\omega_0 = \sqrt{k/m}$.
Ennek a rendszernek az időfüggetlen Schrödinger-egyenlete:

elektrontömeg: $m \equiv m_{\mathrm{e}} \approx 9.1 \times 10^{-31}\,\mathrm{kg}$

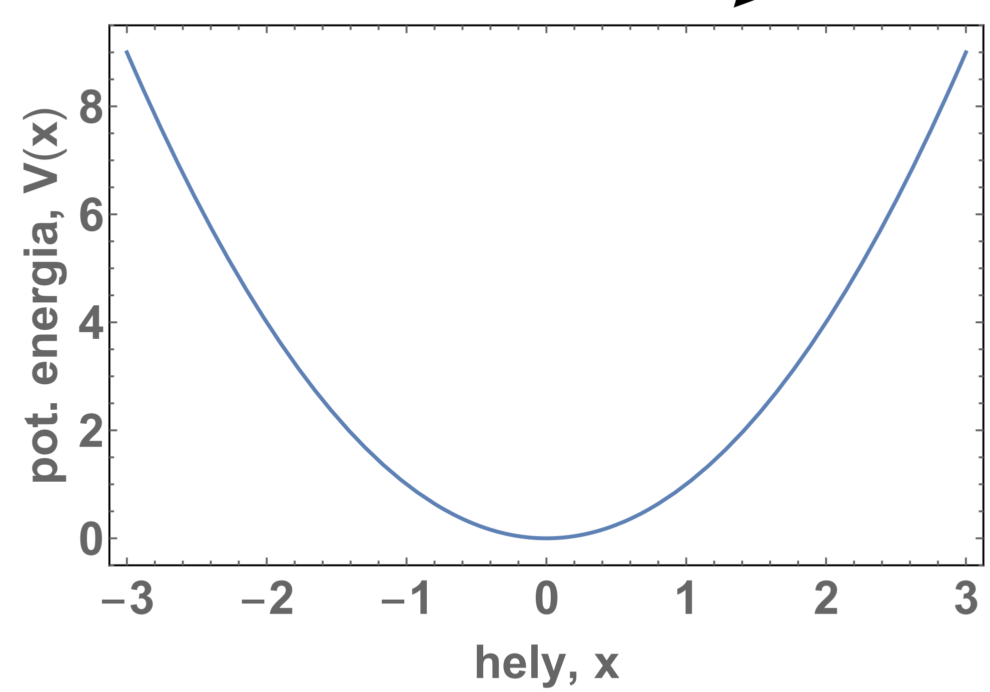
$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x) + \frac{1}{2}m\omega_0^2 x^2 \psi(x) = E\psi(x)$$

Ez egy közönséges, másodrendű diffegyenlet.
Peremfeltételek: a hfv-nek normáltnak kell lennie, amihez szükséges ez:

$$\lim_{x\to\pm\infty} \psi(x) = 0$$

Keressük azokat az $(E, \psi)$ párokat, melyek

1. megoldják a fenti időfüggetlen SE-t, és
2. kielégítik a fenti peremfeltételeket.



# (I) Elektronok atomokban

## (I/E) Stacionárius állapotok a kvantummechanikában

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x) + \frac{1}{2}m\omega_0^2 x^2 \psi(x) = E\psi(x)$$

Megoldások:

- $E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega_0,$ $\psi_0(x) = \frac{1}{\pi^{1/4}\sqrt{L}} e^{-x^2/(2L^2)}$
- $E_1 = \frac{3}{2}\hbar\omega_0,$ $\psi_1(x) = \dots$
- $\dots$
- $E_n = (n+1/2)\,\hbar\omega_0,\ \psi_n(x) = \dots$

$L := \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_0}}$

*oszcillátorhossz*

*zérusponti kitérés*

**Elnevezések:**

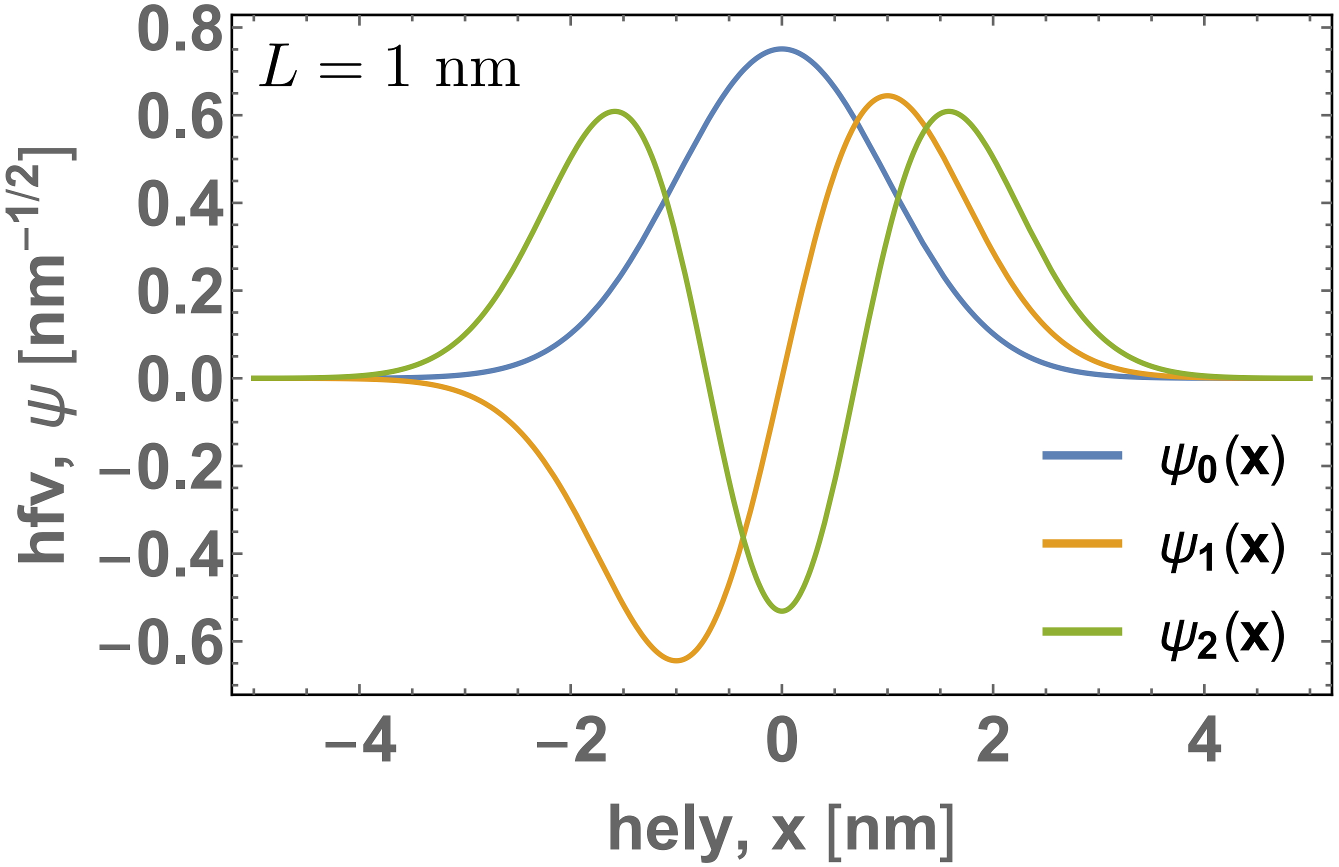
$E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega_0$: zérusponti energia

$\{E_0, E_1, \dots E_n, \dots\}$: spektrum, energiaspektrum

$\psi_0$: alapállapot

$\psi_1$: első gerjesztett állapot

$\psi_2$: második gerjesztett állapot, stb.



# (I) Elektronok atomokban

## (I/E) Stacionárius állapotok a kvantummechanikában

**Állítás:** az időfüggetlen SE megoldásai lényegében megoldják az időfüggő SE egyenletet is.

Formálisan: ha $\hat{H}\psi_n = E_n\psi_n$, akkor $\psi(t) = e^{-iE_nt/\hbar}\psi_n$ megoldja az időfüggő SE-et.

**Bizonyítás:** $\frac{\hbar}{i}\dot{\psi}(t) + \hat{H}\psi(t) = \frac{\hbar}{i}\left(-\frac{iE_n}{\hbar}\right)e^{-iE_nt/\hbar}\psi_n + E_n e^{-iE_nt/\hbar}\psi_n = 0$

**Állítás:** a fenti $\psi(t) = e^{-iE_nt/\hbar}\psi_n$ *stacionárius*,
azaz bármely fizikai mennyiség várhatóértéke ebben az állapotban időben állandó.

**Bizonyítás:** (példa)

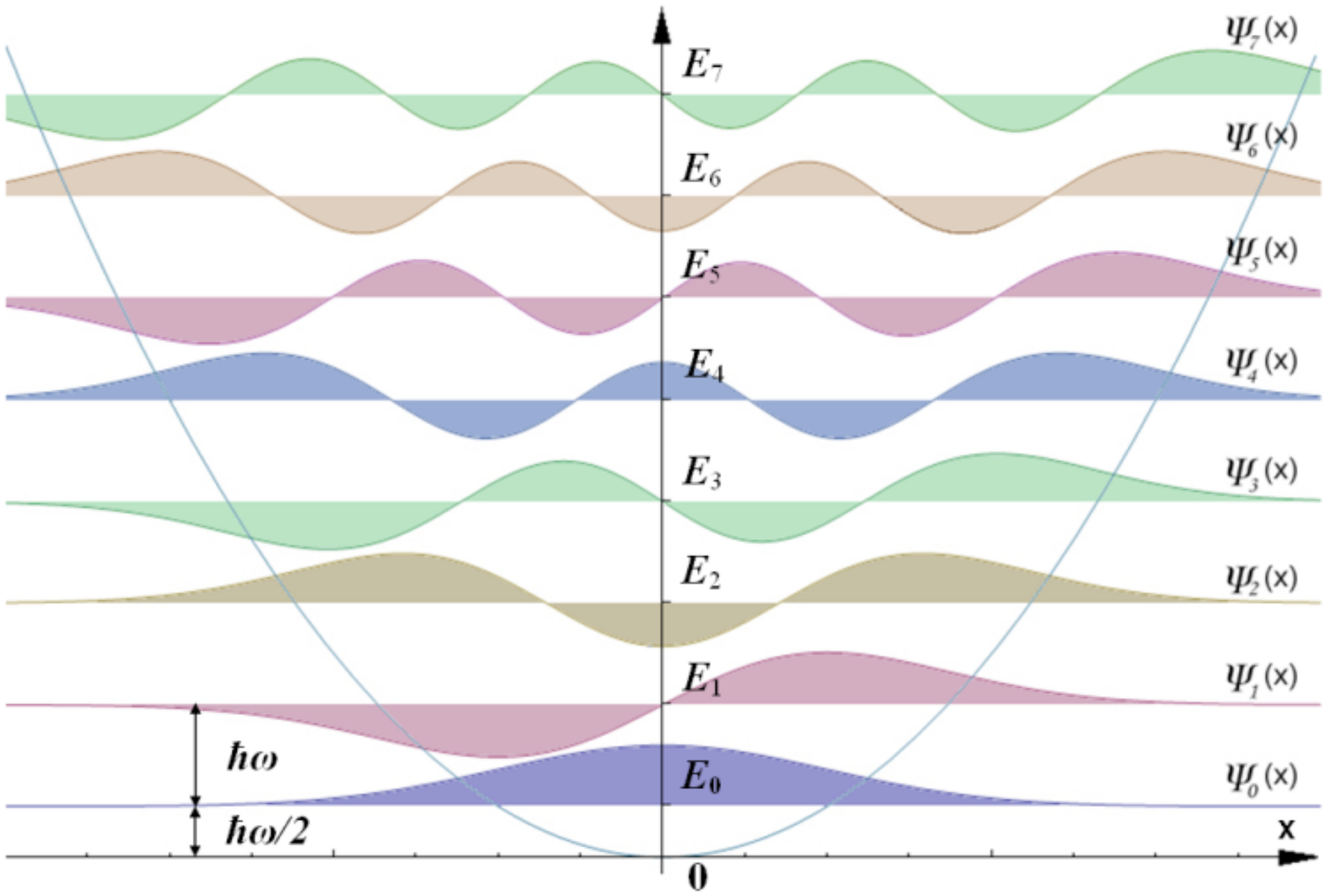
$$\langle\psi(t)|\hat{x}\psi(t)\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} e^{iE_nt/\hbar}\psi_n^*(x)xe^{-iE_nt/\hbar}\psi_n(x)dx = \int_{-\infty}^{\infty}\psi_n^*(x)x\psi_n(x)dx = \langle\psi_n|\hat{x}\psi_n\rangle$$

ami tényleg időfüggetlen.

# (I) Elektronok atomokban

## (I/E) Stacionárius állapotok a kvantummechanikában

Oszcillátor energia-sajátértékei, energia-sajátfüggvényei:




*diszkrét* vagy *kvantált* energiaspektrum

az elektron energiája nem lehet tetszőleges, csak diszkrét értéket vehet fel

| Klasszikus harmonikus oszcillátor | Kvantumos harmonikus oszcillátor |
|---|---|
| egyetlen egyensúlyi helyzet | végtelen sok stacionárius állapot |
| egyensúlyban hely jól meghatározott | a hely még az alapállapotban sem jól meghatározott |
| egyensúlyban az összenergia nulla | még az alapállapotban sem nulla az összenergia |

# (I) Elektronok atomokban

## (I/E) Stacionárius állapotok a kvantummechanikában

**Feladat:** Milyen hullámhosszú, frekvenciájú, és energiakvantumú elektromágneses sugárzás kell ahhoz, hogy az oszcillátor-potenciálba zárt elektront az alapállapotából az első gerjesztett állapotába felgerjesszük, ha az elektron zérusponti kitérése $L = 1$ nm?

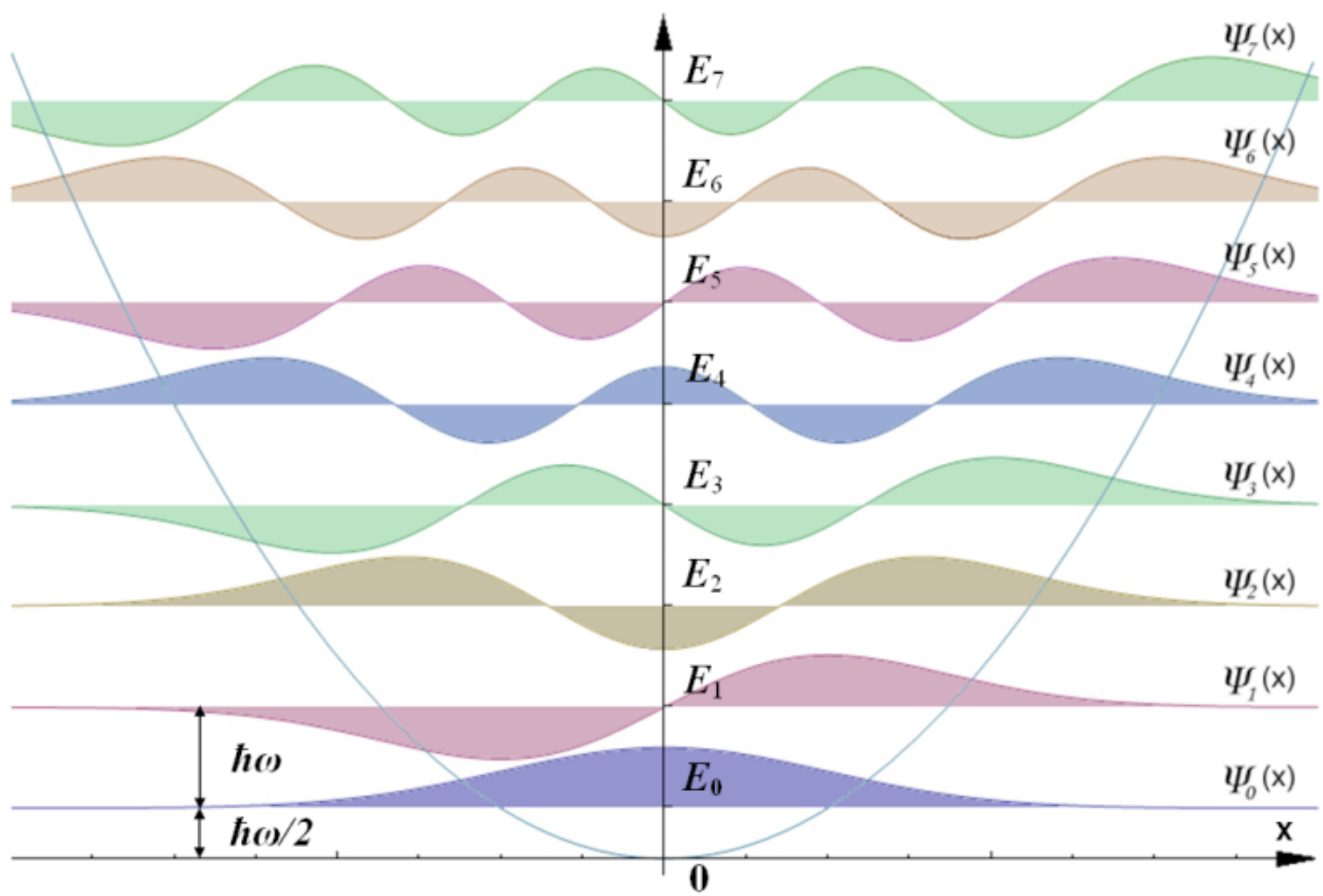
**Megoldás:**

$\Delta E = E_1 - E_0 = \hbar\omega_0 = \frac{\hbar^2}{mL^2} \approx 76$ meV

$\nu = \Delta E/h \approx 18.4$ THz

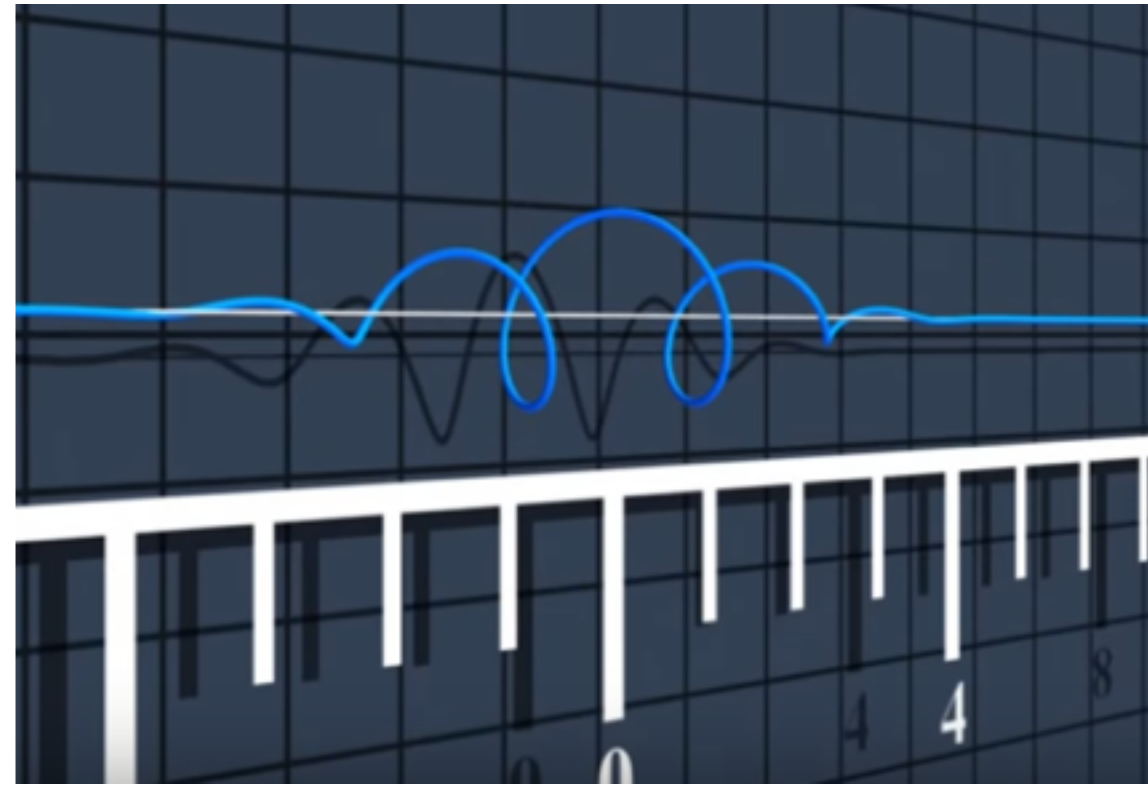
$\lambda = c/\nu \approx 16.3\,\mu$m

(közép-infravörös sugárzás)



# Összefoglalás

(I/E) Hullámfüggvény és részecske-áramsűrűség



(I/E) Stacionárius állapotok a kvantummechanikában (diszkrét energiaspektrum egyik legegyszerűbb modellje)