

# **Modern Fizika Gépészsmérnököknek**

## **Fizika M1**

[http://physics.bme.hu/BMETE15MX27\\_kov](http://physics.bme.hu/BMETE15MX27_kov)

2019. őszi félév

3. előadás  
2019. szeptember 24.

# Menetrend

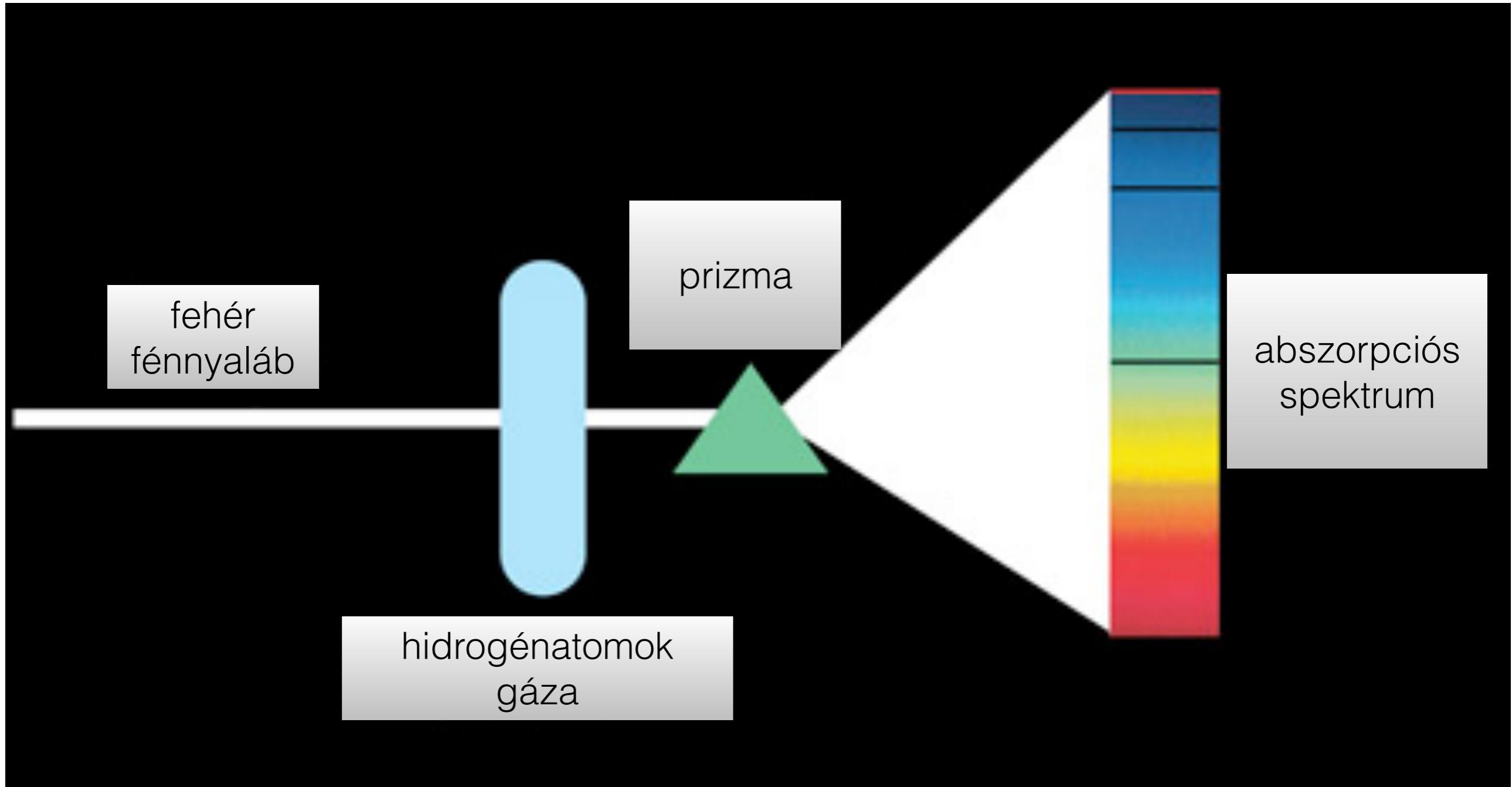
1. előadás (sep 10) \_\_\_\_\_
2. előadás (sep 17) \_\_\_\_\_
3. előadás (sep 24) \_\_\_\_\_
4. előadás (okt 01) \_\_\_\_\_
5. előadás (okt 08) \_\_\_\_\_
6. előadás (okt 15) \_\_\_\_\_
7. előadás (okt 22) - 1. zh \_\_\_\_\_
8. előadás (okt 29) \_\_\_\_\_
9. előadás (nov 05)  
nov 12 - nincs előadás
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](mailto:palyi@mail.bme.hu)

# (I) Elektronok atomokban

Ism.: Atomok abszorpciószínképe vonalas szerkezetet mutat

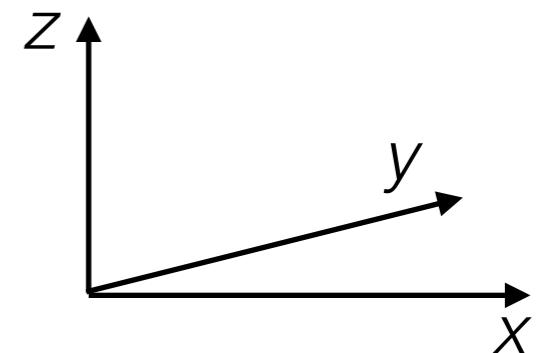
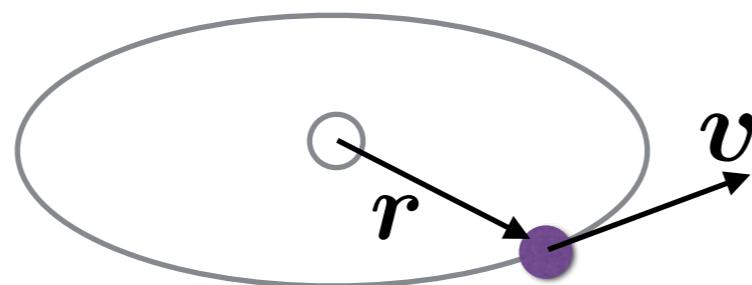


Miért jelennek meg ezek a vonalak?  
A klasszikus fizika nem ad magyarázatot. A kvantumelmélet ad.  
3

# (I) Elektronok atomokban

(I/F) A klasszikus Rutherford-modell nem magyarázza meg az atomok vonalas színképét

- elektron
- proton



## Rutherford-modell:

- elektron ( $e$ ) és proton ( $p$ ) között Coulomb-vonzás
- proton ( $p$ ) rögzített
- elektron ( $e$ ) egyenletes körmozgást végez

# (I) Elektronok atomokban

(I/F) A klasszikus Rutherford-modell nem magyarázza meg az atomok vonalas színképét

**Feladat:** Rutherford-atomban  $r = 0.2 \text{ \AA}$ .

(megjegyzés:  $\text{\AA}$ : angström,  $1 \text{ \AA} = 10^{-10} \text{ m} = 0.1 \text{ nm}$ )

(a)  $v = ?$  ( $e$  sebessége)

(b)  $L = \mathbf{r} \times \mathbf{p} = ?$  ( $e$  impulzusmomentuma)

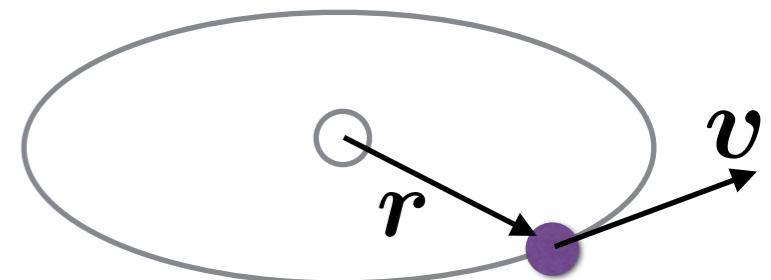
(c)  $E_{\text{mozg}} = ?$  ( $e$  mozgási energiája)

$E_{\text{helyz}} = ?$  ( $e$  helyzeti energiája)

$E_{\text{teljes}} = E_{\text{mozg}} + E_{\text{helyz}} = ?$  ( $e$  teljes energiája)

(d)  $E_{\text{teljes}}(L_z) = ?$

(energia mint az impulzusmomentum  $z$  komponensének függvénye)



# (I) Elektronok atomokban

(I/F) A klasszikus Rutherford-modell nem magyarázza meg az atomok vonalas színképét

Megoldás:

$$(a) v = \sqrt{\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{m_e r}} \approx 3.6 \times 10^6 \text{ m/s} \approx 0.012 c$$

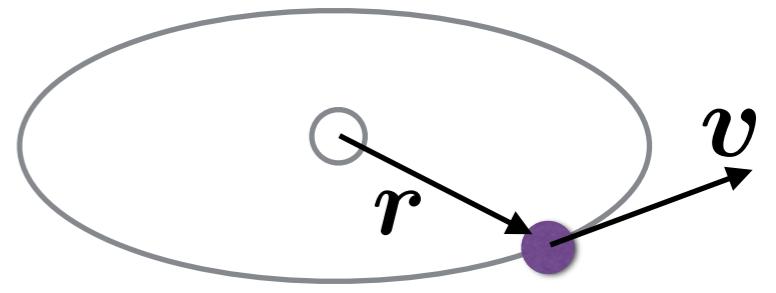
$$(b) \mathbf{L} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ L_z \end{pmatrix} = L_z \mathbf{e}_z = \sqrt{\frac{m_e r e^2}{4\pi\epsilon_0}} \mathbf{e}_z$$
$$L_z \approx 6.5 \times 10^{-35} \text{ kg m}^2 \text{s}^{-1} \approx 0.61 \hbar$$

$$(c) E_{\text{mozg}} = \frac{1}{2} m_e v^2 \approx 36 \text{ eV}$$

$$E_{\text{helyz}} = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \approx -72 \text{ eV}$$

$$E_{\text{teljes}} \approx -36 \text{ eV}$$

$$(d) E_{\text{teljes}}(L_z) = -\frac{1}{2} \frac{m_e^2 e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 L_z^2}$$



**Adatok:** (zh-n meg lesznek adva, nem kell bemagolni)

- $e$  töltése:  $e \approx 1.6 \times 10^{-19} \text{ As}$
- $e$  tömege:  $m_e \approx 9.1 \times 10^{-31} \text{ kg}$
- vákuum permittivitása:  $\epsilon_0 \approx 8.9 \times 10^{-12} \frac{\text{s}^4 \text{ A}^2}{\text{kg m}^3}$

# (I) Elektronok atomokban

(I/F) A klasszikus Rutherford-modell nem magyarázza meg az atomok vonalas színképét

Rutherford-modell hibái, #1

$r$  tetszőleges



$E$  tetszőleges



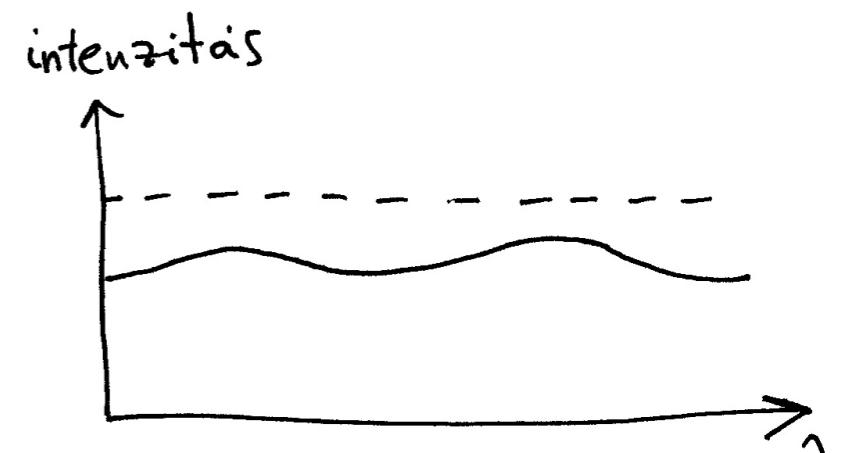
Rutherford-atom abszorpciójának energiafüggése folytonos



nincs vonalas színkép

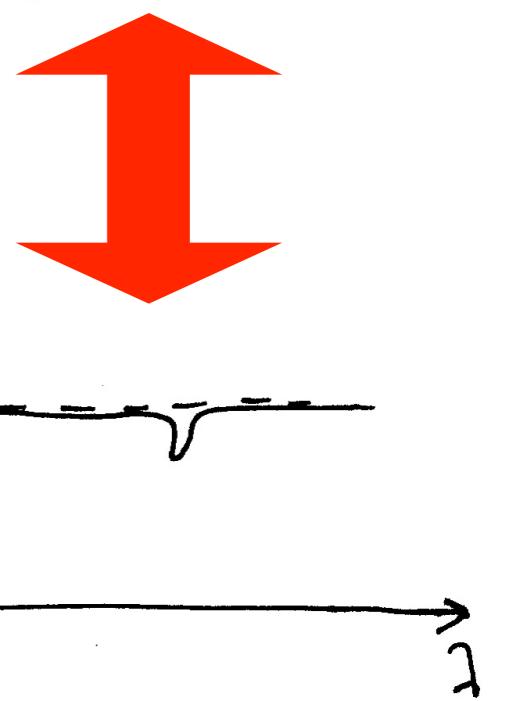


elltentmondás a kísérlettel



Rutherford-modell

intenzitás



kísérlet

# (I) Elektronok atomokban

(I/F) A klasszikus Rutherford-modell nem magyarázza meg az atomok vonalas színképét

## Rutherford-modell hibái, #2

Rutherford-atom elektronja körpályán mozog



elektron gyorsuló mozgást végez



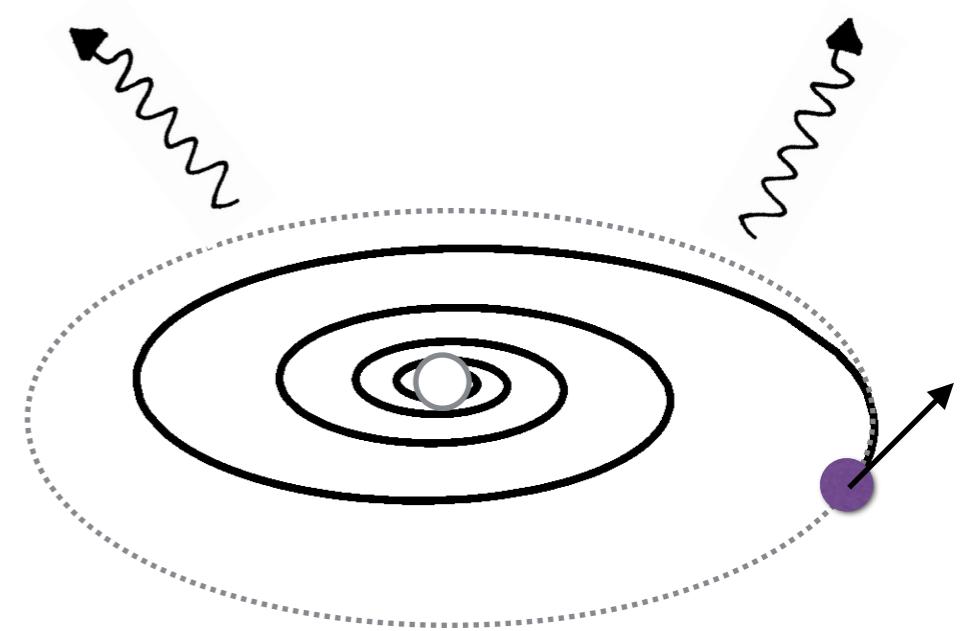
elektron sugároz, energiát veszít



elektron bezuhan a protonba



elltentmond a megfigyelésnek



# (I) Elektronok atomokban

(I/G) A félklasszikus Bohr-modell megmagyarázza az atomok vonalas színképét

**Bohr-modell:**

Rutherford-modell + tegyük fel, hogy  $L_z$  kvantált:

$$L_z = L_{z,n} = n \hbar, \text{ ahol } n \in \{1, 2, \dots\}$$

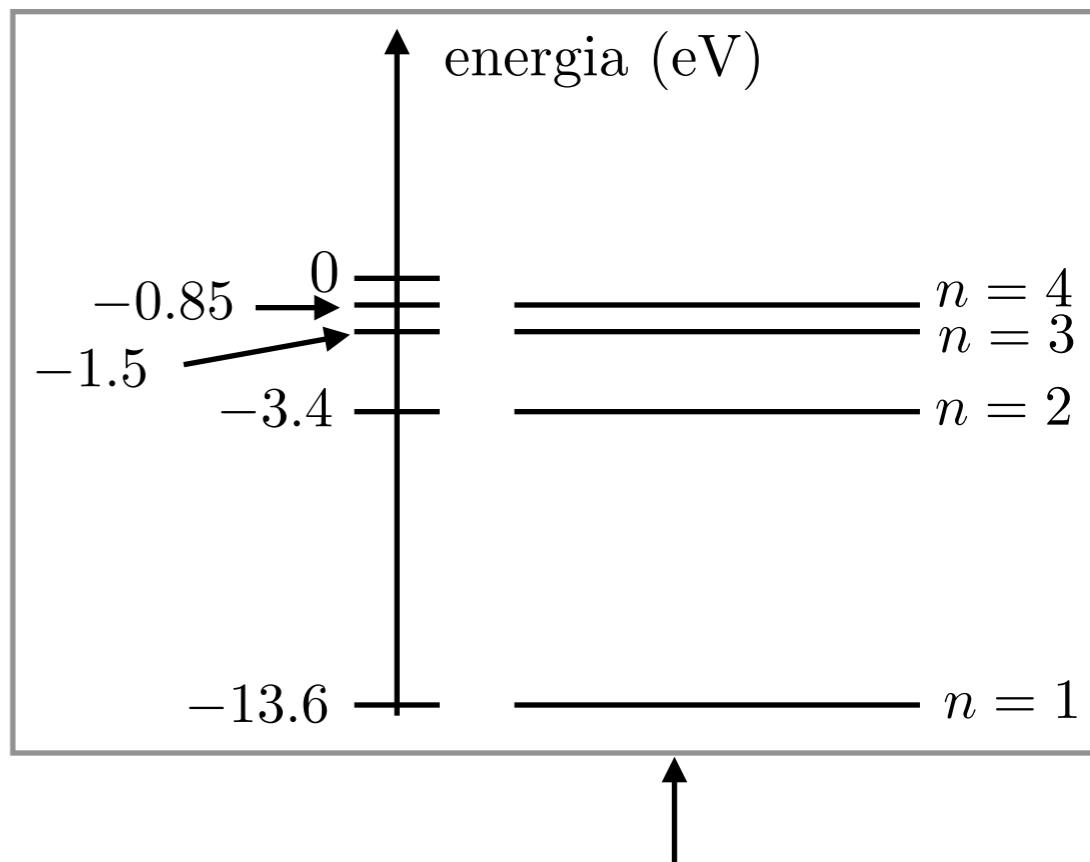
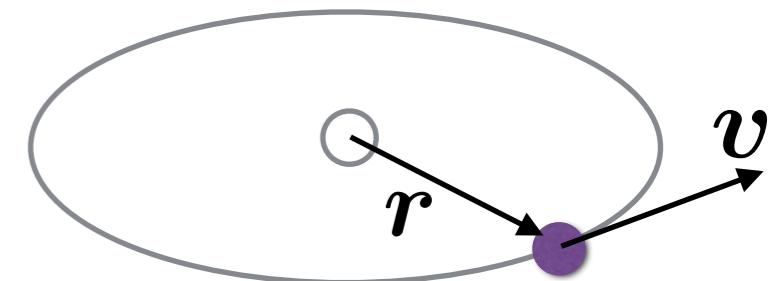
**Következmény:**

$L_z$  kvantált, az energia pedig  $E = E(L_z)$ , emiatt

$E$  is kvantált:

$$E_n = E(L_{z,n}) = -\frac{1}{2} \frac{m_e^2 e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 \hbar^2} \frac{1}{n^2} \approx -13.6 \text{ eV} \frac{1}{n^2}$$

$$[ \text{Definíció: } 1 \text{ rydberg} = 1 \text{ Ry} = \frac{1}{2} \frac{m_e^2 e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 \hbar^2} \approx 13.6 \text{ eV} ]$$

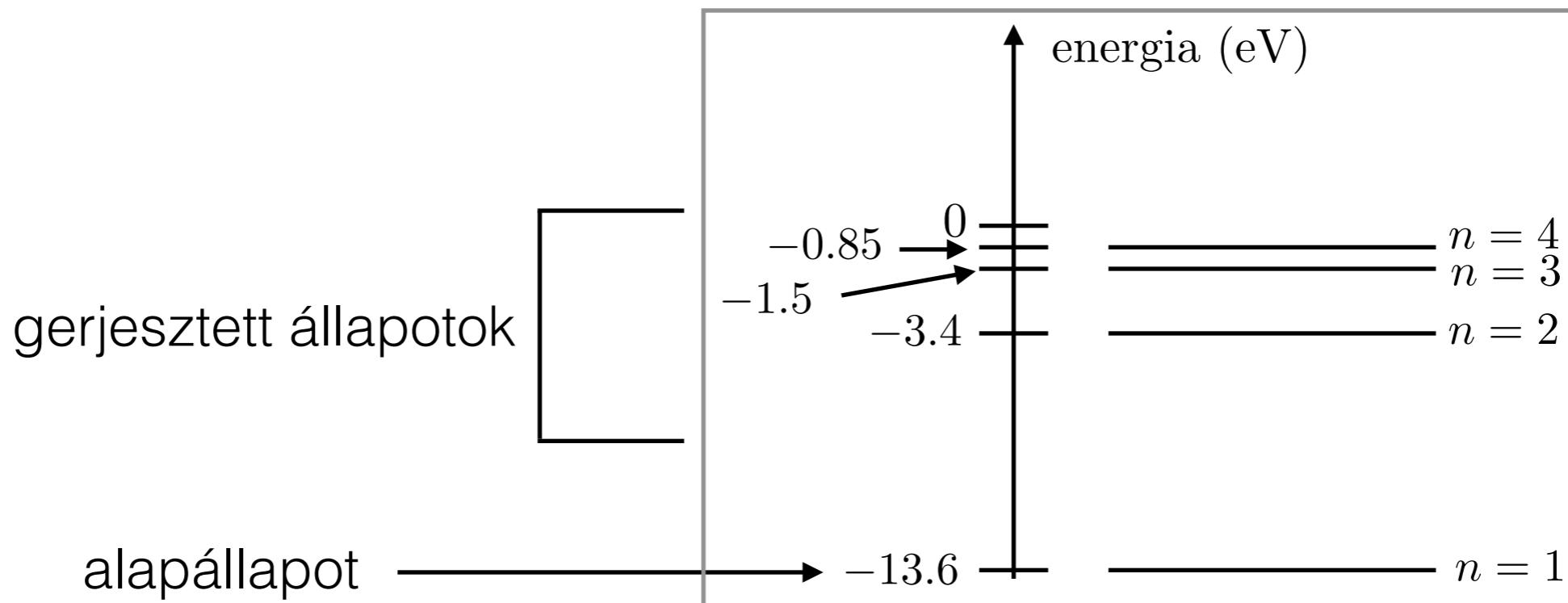


hidrogénatom  
elektronjának  
energiaspektruma  
a Bohr-modell alapján

# (I) Elektronok atomokban

(I/G) A félklasszikus Bohr-modell megmagyarázza az atomok vonalas színképét

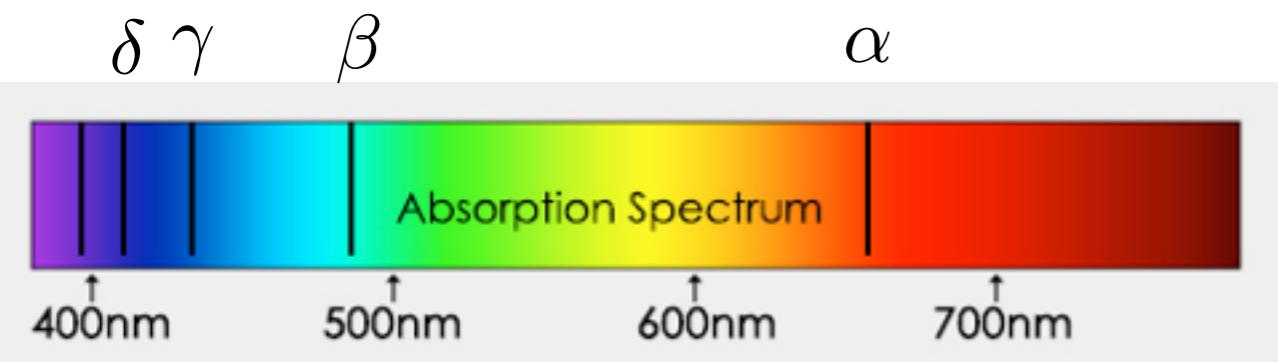
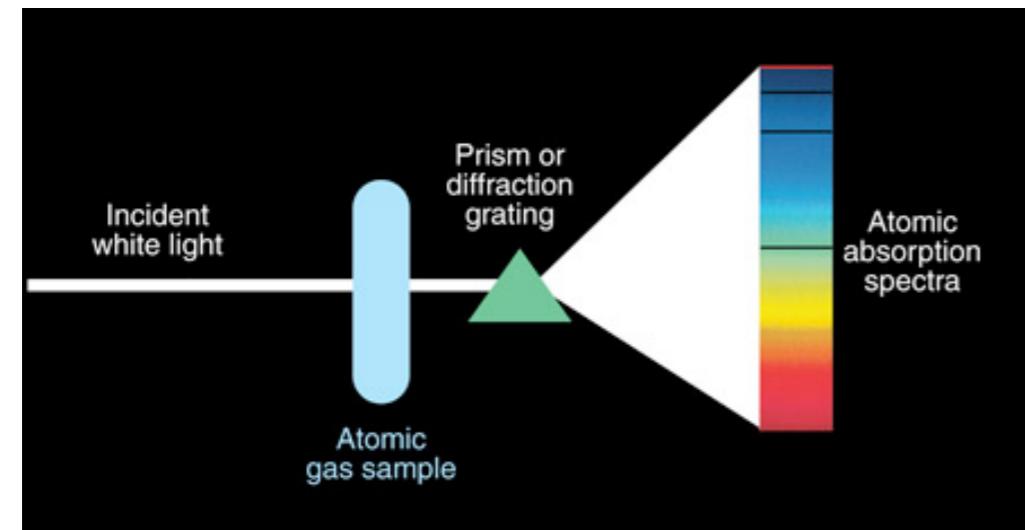
$$E_n = E(L_{z,n}) = -\frac{1}{2} \frac{m_e^2 e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 \hbar^2} \frac{1}{n^2} \approx -13.6 \text{ eV} \frac{1}{n^2}$$



Elnevezés:  $n$ -ik főkvantumszámú energiaszint vagy nívó

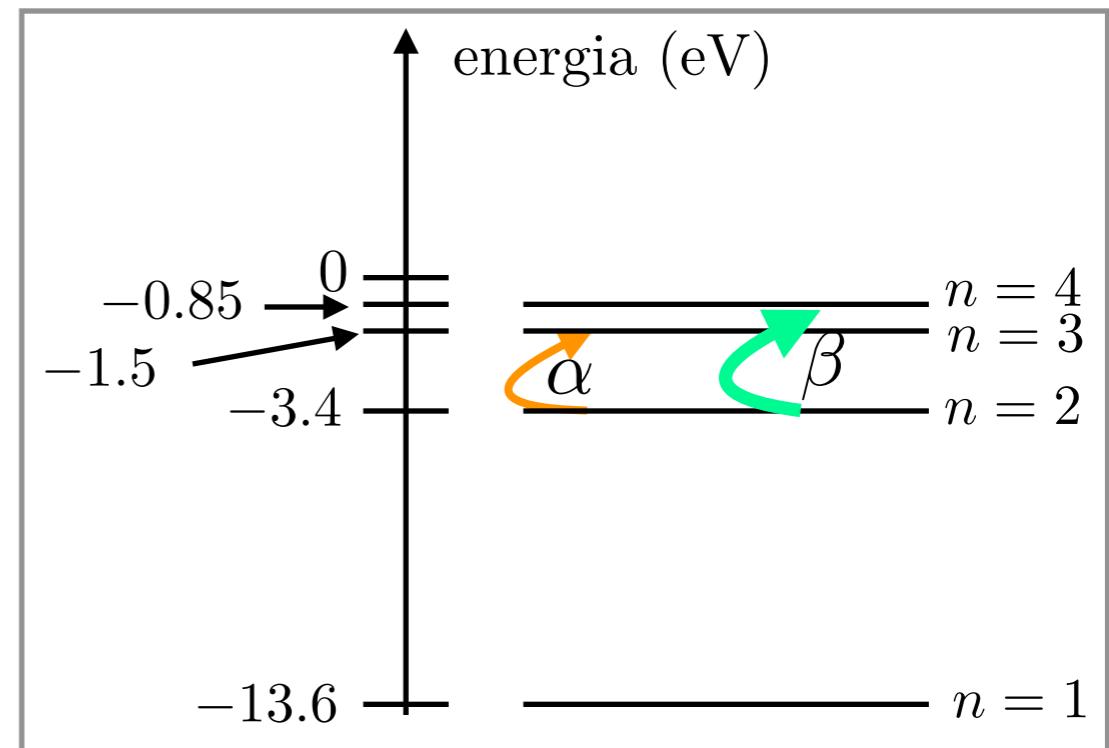
# (I) Elektronok atomokban

Kísérlet



név	$\lambda$ (nm)	$\gamma$ (THz)	E(eV)
$\alpha$	656	456	1,9
$\beta$	486	617	2,55
$\gamma$	434	691	2,85
$\delta$	410	731	3,05

Bohr-modell



$$E_2 - E_3 = 1.9 \text{ eV} \text{ (Balmer-}\alpha\text{)}$$

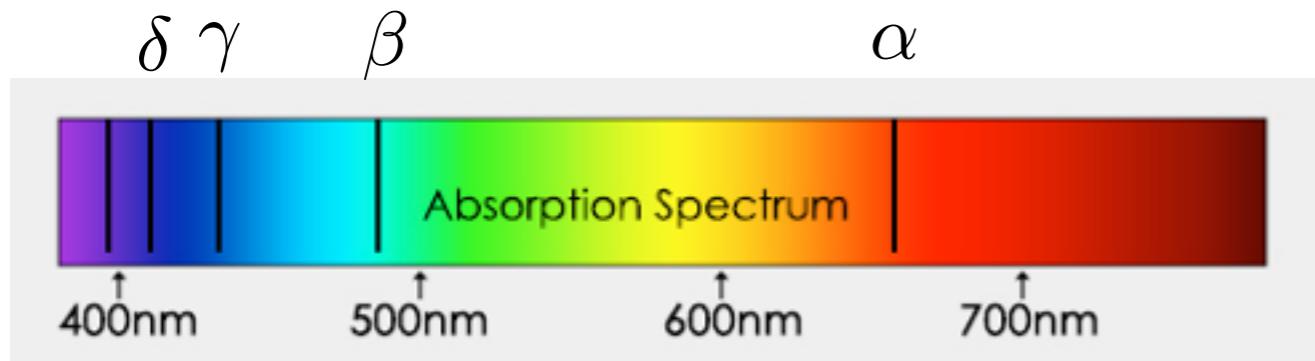
$$E_2 - E_4 = 2.55 \text{ eV} \text{ (Balmer-}\beta\text{)}$$

...

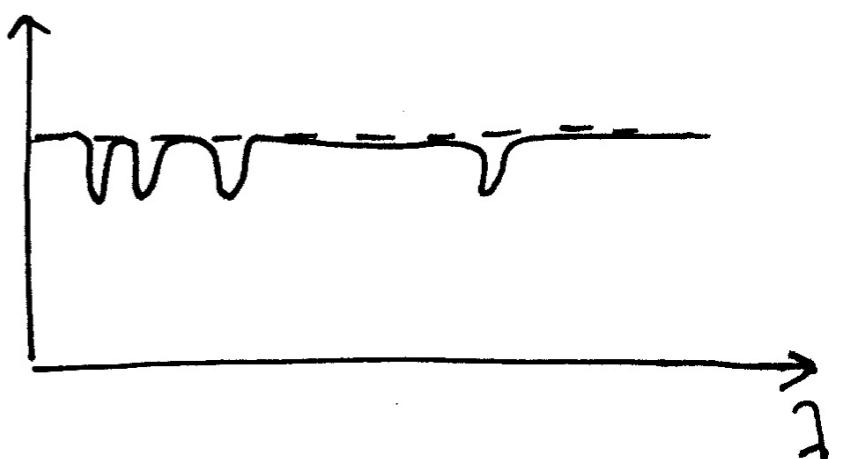
Bohr-modell megmagyarázza a H-atom vonalas színképét!

# (I) Elektronok atomokban

(I/G) A félklasszikus Bohr-modell megmagyarázza az atomok vonalas színképét



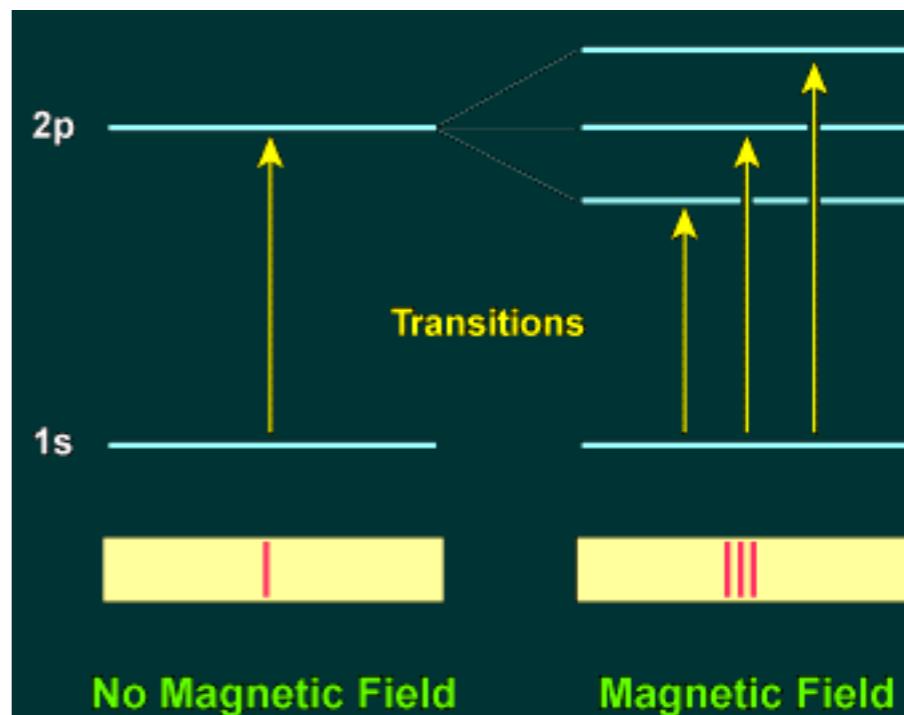
intenzitás



De: Bohr-modell nem magyarázza meg például:

- az abszorpciós vonalak intenzitásait
- mágneses térbe helyezett H-gáz abszorpciós spektrumát
- a periódusos rendszer szabályait
- ...

A standard periodic table showing elements from Hydrogen (H) to Oganesson (Og) across seven periods and fifteen groups. Elements are color-coded by group: alkali metals (pink), alkali earth metals (light blue), transition metals (yellow), post-transition metals (orange), and noble gases (light green).



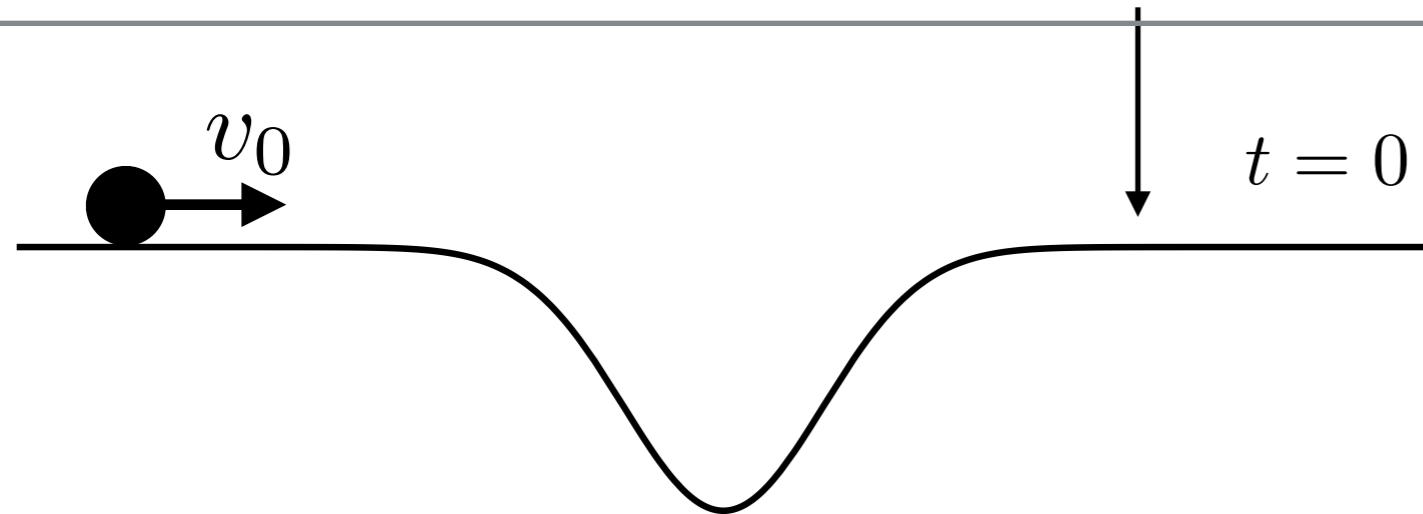
# (I) Elektronok atomokban

(I/H) A hidrogénatom energiaspektruma és energiasajátállapotai

Ismétlés: Kötött állapotok és szórási állapotok (klasszikus mechanika)

Példa: guruló labda, gödör

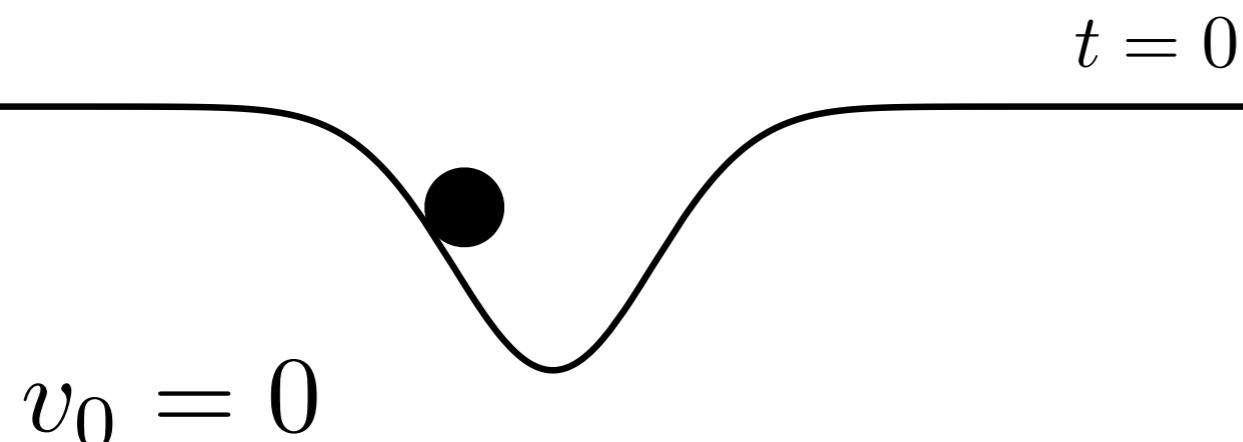
helyzeti energia:  $V(x) = -V_0 e^{-x^2/(2\ell^2)}$



$$E = \frac{1}{2}mv^2 + V(x) = \frac{p^2}{2m} + V(x)$$

$$E(t=0) = \frac{1}{2}mv_0^2 = \frac{p_0^2}{2m} > 0$$

*szórási állapot, kijut a gödörből*



$$-V_0 < E < 0$$

*kötött állapot, rezeg a gödörben*

# (I) Elektronok atomokban

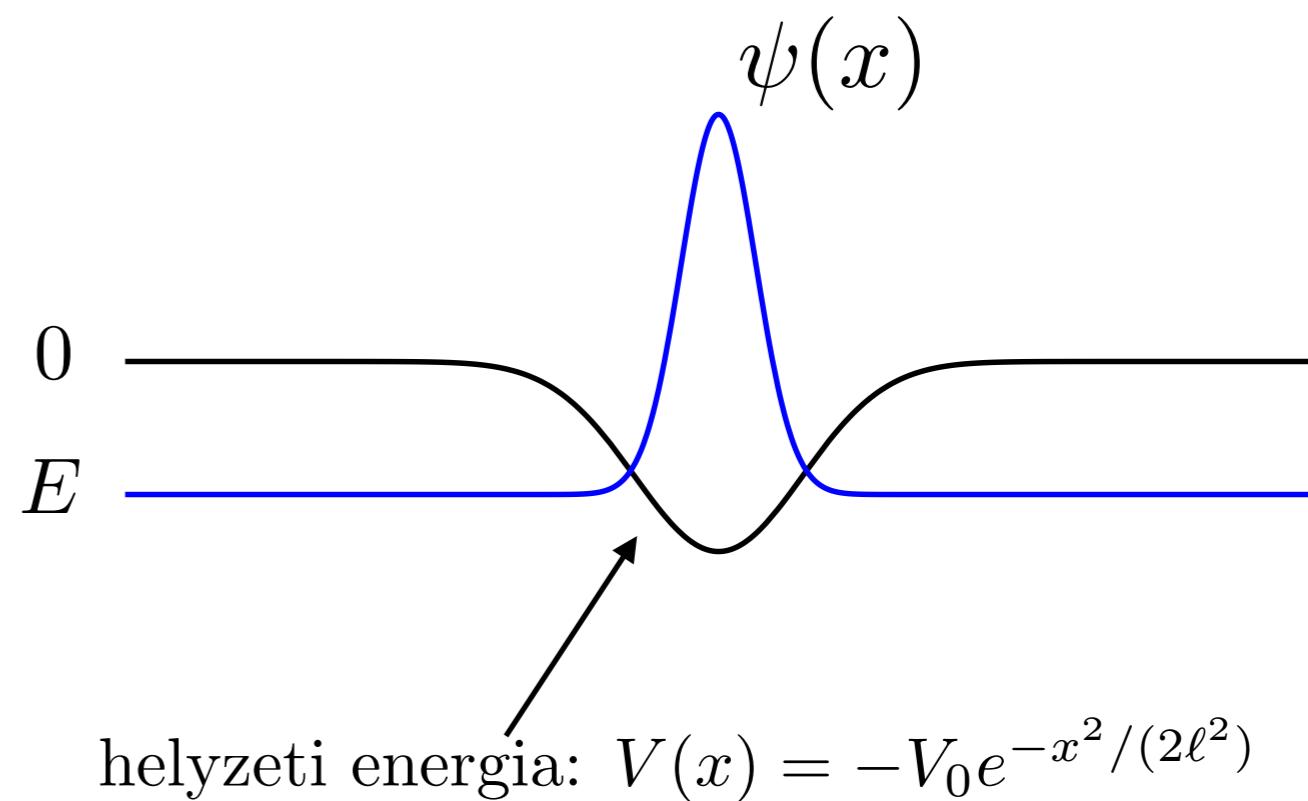
## (I/H) A hidrogénatom energiaspektruma és energiasajátállapotai

H-atom minimális modellje 1D-ben:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m_e} - V_0 e^{-\hat{x}^2/(2\ell^2)}$$

Stacionárius állapotokat keresünk:  
olyan  $(\psi, E)$  párokat, melyben  
 $\psi$  normált, és a  $(\psi, E)$  pár kielégíti  
az időfüggetlen Schrödinger-egyenletet:

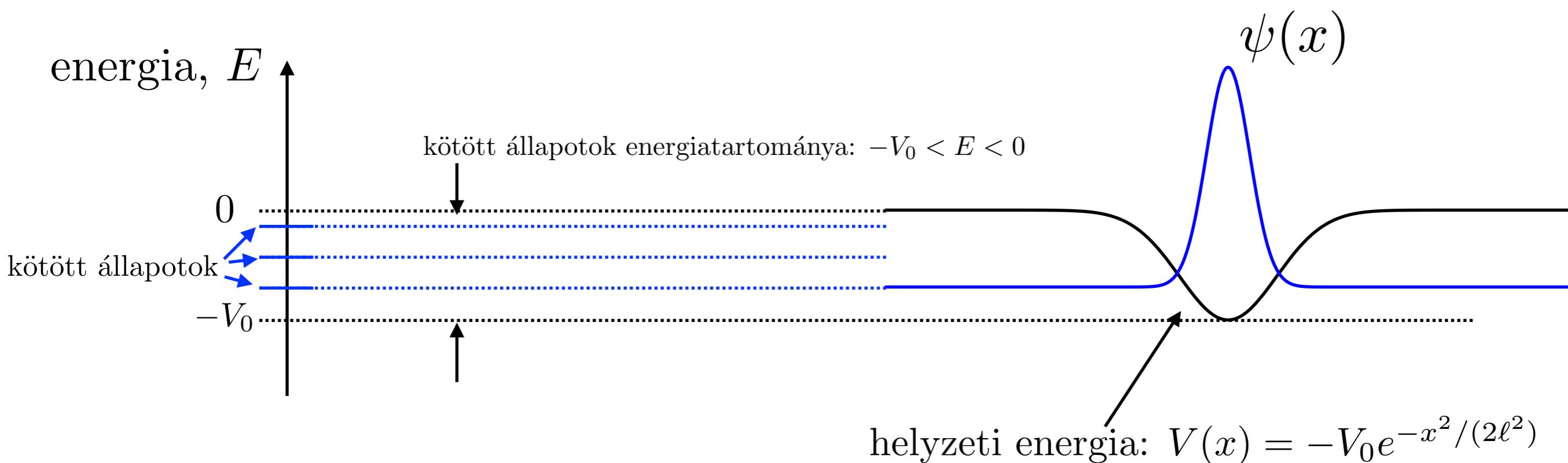
$$-\frac{\hbar^2}{2m_e} \psi''(x) - V_0 e^{-x^2/(2\ell^2)} \psi(x) = E \psi(x)$$



# (I) Elektronok atomokban

(I/H) A hidrogénatom energiaspektruma és energiasajátállapotai

**Állítás:** kötött állapotok energiaspektruma diszkrét



# (I) Elektronok atomokban

(I/H) A hidrogénatom energiaspektruma és energiasajátállapotai

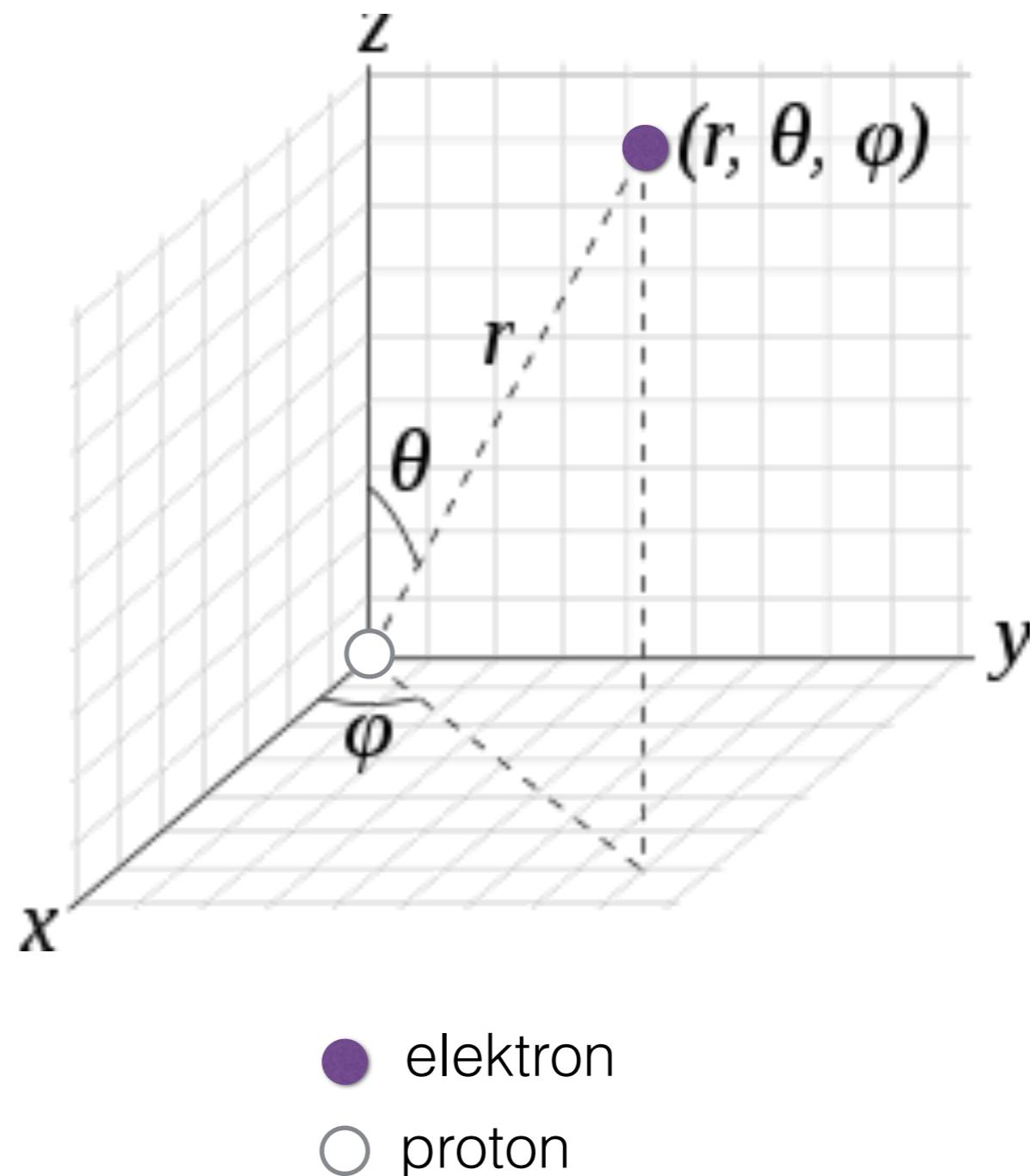
H-atom valódi, 3D modellje

Energia (klasszikusan):

$$E = \frac{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}{2m_e} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

helyzeti energia: Coulomb-vonzás

$$r = |\mathbf{r}| = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$$



# (I) Elektronok atomokban

## (I/H) A hidrogénatom energiaspektruma és energiasajátállapotai

Hamilton-operátor:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2}{2m_e} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

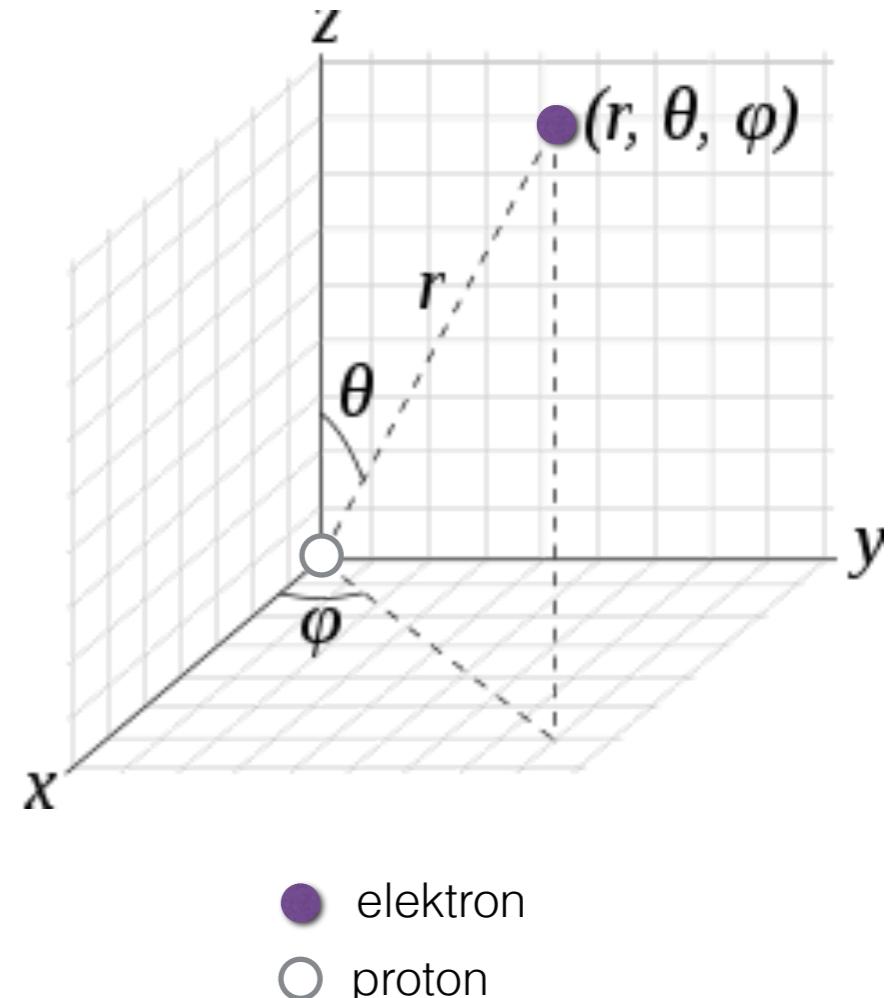
időfüggetlen Schrödinger-egyenlet:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e} (\partial_x^2 + \partial_y^2 + \partial_z^2) \psi(x, y, z) - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \psi(x, y, z) = E\psi(x, y, z)$$

kicsit rövidebben:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta \psi(x, y, z) - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \psi(x, y, z) = E\psi(x, y, z)$$

[ Definíció: Laplace-operátor:  $\Delta \equiv \partial_x^2 + \partial_y^2 + \partial_z^2$  ]



**Állítás:** A kötött állapotok ( $-\infty < E < 0$ ) energiaspektruma diszkrét, és uaz mint a Bohr-modellben:

$$E_n = -\frac{1}{2} \frac{m_e^2 e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 \hbar^2} \frac{1}{n^2} \approx -13.6 \text{ eV} \frac{1}{n^2}$$

# (I) Elektronok atomokban

## (I/I) Elektronállapotok hidrogénatomban

időfüggetlen Schrödinger-egyenlet:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta \psi(x, y, z) - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \psi(x, y, z) = E \psi(x, y, z)$$

Keressük az  $(E, \psi)$  megoldásokat, ahol  
 $\psi$  normált és kötött állapot ( $-\infty < E < 0$ )

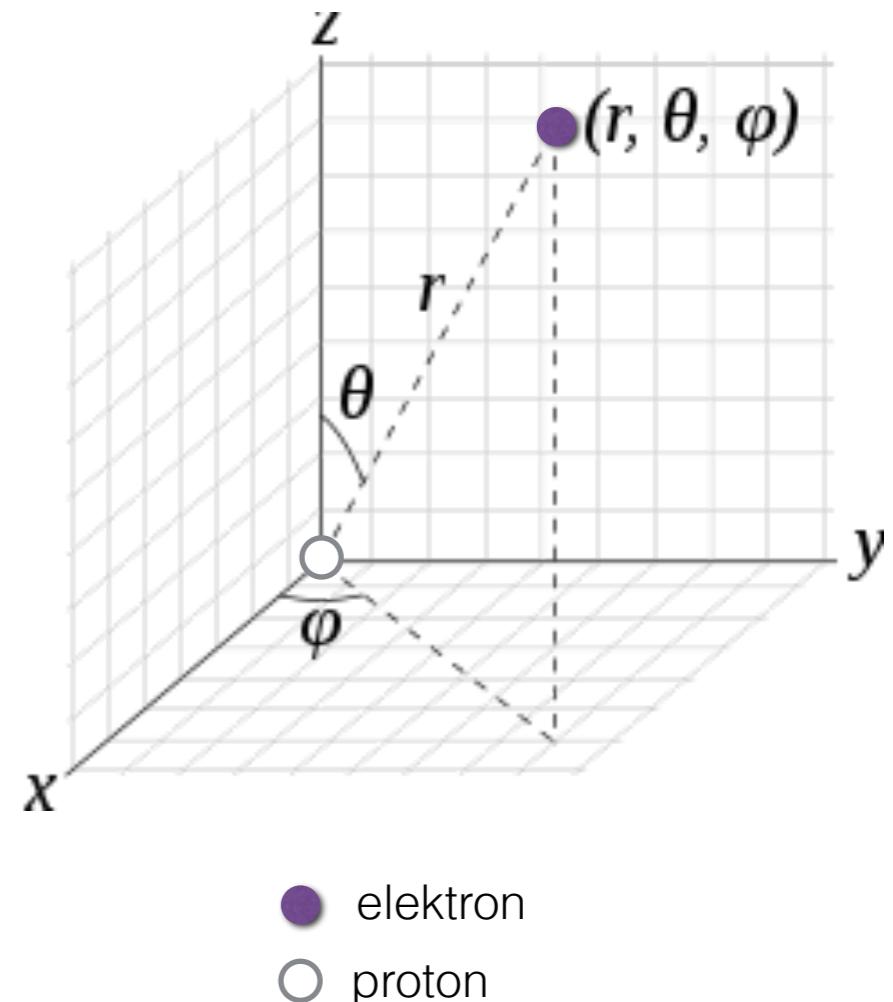
$\psi$ -t szorzatalakban keressük:  $\psi(r, \theta, \varphi) = R(r) \cdot Y(\theta, \varphi)$

**Állítás:** megoldásokat  $(n, l, m_l)$  egész számok indexelik:

- *főkvantumszám:*  $n \in \{1, 2, 3, \dots\}$
- *mellékkvantumszám:*  $l \in \{0, 1, \dots, n-1\}$
- *mágneses kvantumszám:*  $m_l \in \{-l, -l+1, \dots, l-1, l\}$

$$\psi_{nlm_l}(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r)Y_l^{m_l}(\theta, \varphi)$$

$Y_l^{m_l}(\theta, \varphi)$ : gömbfüggvények (spherical harmonics)



# (I) Elektronok atomokban

## (I/I) Elektronállapotok hidrogénatomban

név	$n, l, m_l$	$E_{nlm_l}$	$\psi_{nlm_l}(r, \theta, \varphi)$
1s	1,0,0	−1 Ry	$R_{10}(r) \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$
2s	2,0,0	− $\frac{1}{4}$ Ry	$R_{20}(r) \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$
2p <sub>-1</sub>	2,1,-1	− $\frac{1}{4}$ Ry	$R_{21}(r) \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \sin \theta e^{-i\varphi}$
2p <sub>0</sub>	2,1,0	− $\frac{1}{4}$ Ry	$R_{21}(r) \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta$
2p <sub>+1</sub>	2,1,1	− $\frac{1}{4}$ Ry	$R_{21}(r) \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \sin \theta e^{i\varphi}$
...	...	...	...

# (I) Elektronok atomokban

## (I/I) Elektronállapotok hidrogénatomban

név	$n, l, m_l$	$E_{nlm_l}$	$\psi_{nlm_l}(r, \theta, \varphi)$
1s	1,0,0	−1 Ry	$R_{10}(r) \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$
2s	2,0,0	− $\frac{1}{4}$ Ry	$R_{20}(r) \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$
2p <sub>−1</sub>	2,1,-1	− $\frac{1}{4}$ Ry	$R_{21}(r) \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \sin \theta e^{-i\varphi}$
2p <sub>0</sub>	2,1,0	− $\frac{1}{4}$ Ry	$R_{21}(r) \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta$
2p <sub>+1</sub>	2,1,1	− $\frac{1}{4}$ Ry	$R_{21}(r) \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \sin \theta e^{i\varphi}$
...	...	...	...

**Definíció:** degenerált nívó: pl. az  $n = 2$  főkvantumszámú pálya négyeszeren degenerált, mert az  $E_2$  energiához négy különböző pálya tartozik.

# (I) Elektronok atomokban

## (I/I) Elektronállapotok hidrogénatomban

**Feladat:** Hányszorosan degenerált az  $n = 3$  nívó?

**Megoldás:** 9-szeresen degenerált. Indoklás:

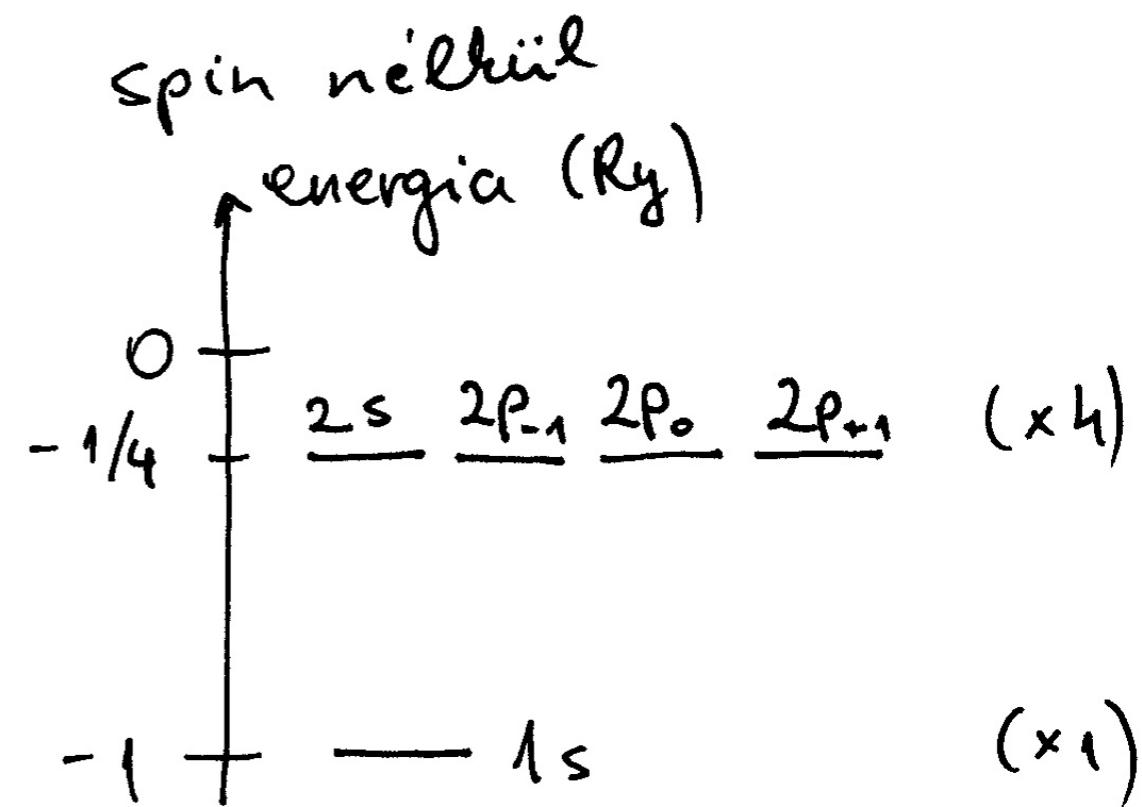
Az  $n = 3$  főkvantumszámhoz  $l = 0$  vagy  $l = 1$  vagy  $l = 2$  mellékkvantumszám tartozhat.

Az  $l = 0$ -hoz egyetlen mágneses kvantumszám tartozik ( $m_l = 0$ ).

Az  $l = 1$ -hez három mágneses kvantumszám tartozik ( $m_l \in \{-1, 0, 1\}$ ).

Az  $l = 2$ -höz öt mágneses kvantumszám tartozik ( $m_l \in \{-2, -1, 0, 1, 2\}$ ).

Tehát  $1 + 3 + 5 = 9$  mágneses alnívó tartozik az  $n = 3$  főkvantumszámhoz.



# (I) Elektronok atomokban

## (I/I) Elektronállapotok hidrogénatomban

**Feladat:** Hányszorosan degenerált az  $n = 3$  nívó?

**Megoldás:** 9-szeresen degenerált. Indoklás:

Az  $n = 3$  főkvantumszámhoz  $l = 0$  vagy  $l = 1$  vagy  $l = 2$  mellékkvantumszám tartozhat.

Az  $l = 0$ -hoz egyetlen mágneses kvantumszám tartozik ( $m_l = 0$ ).

Az  $l = 1$ -hez három mágneses kvantumszám tartozik ( $m_l \in \{-1, 0, 1\}$ ).

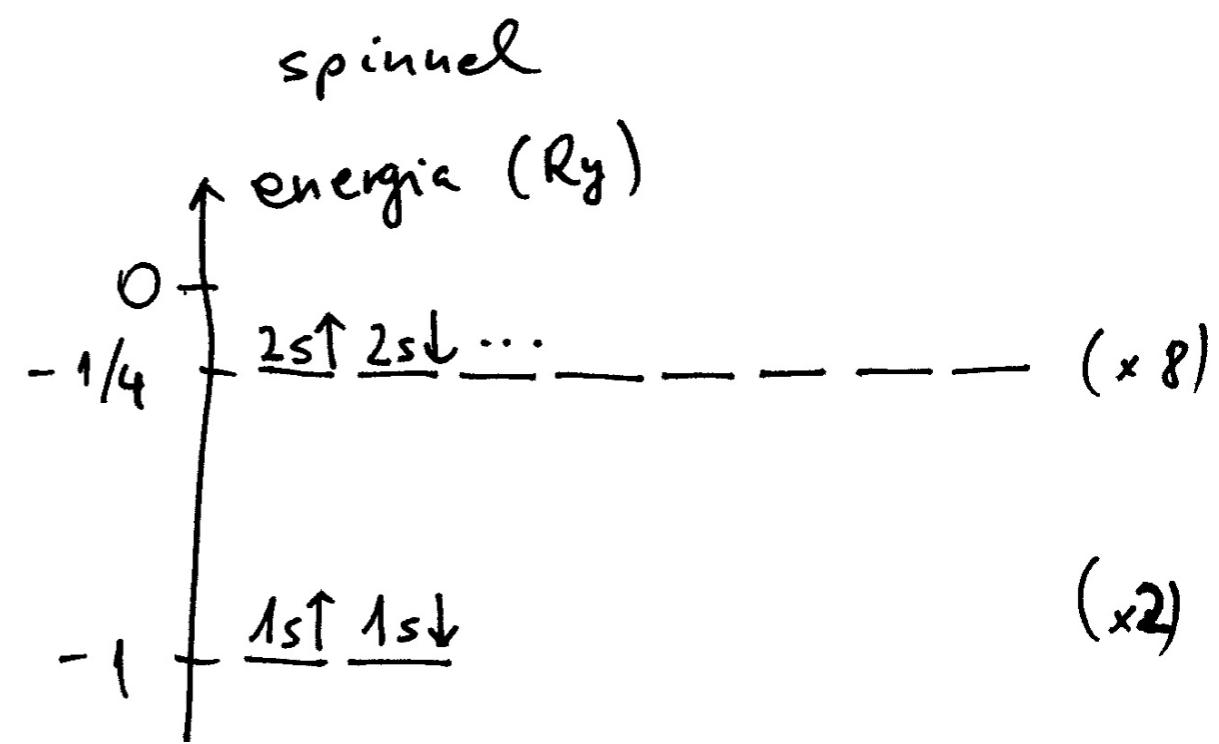
Az  $l = 2$ -höz öt mágneses kvantumszám tartozik ( $m_l \in \{-2, -1, 0, 1, 2\}$ ).

Tehát  $1 + 3 + 5 = 9$  mágneses alnívó tartozik az  $n = 3$  főkvantumszámhoz.

**Axióma:** Valójában minden pályához két spin-állapot ( $\uparrow, \downarrow$ ) tartozik.

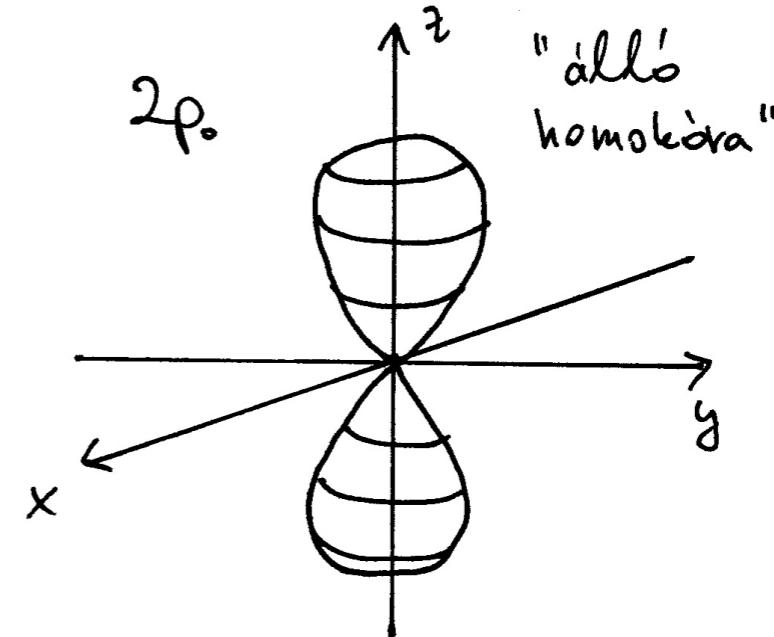
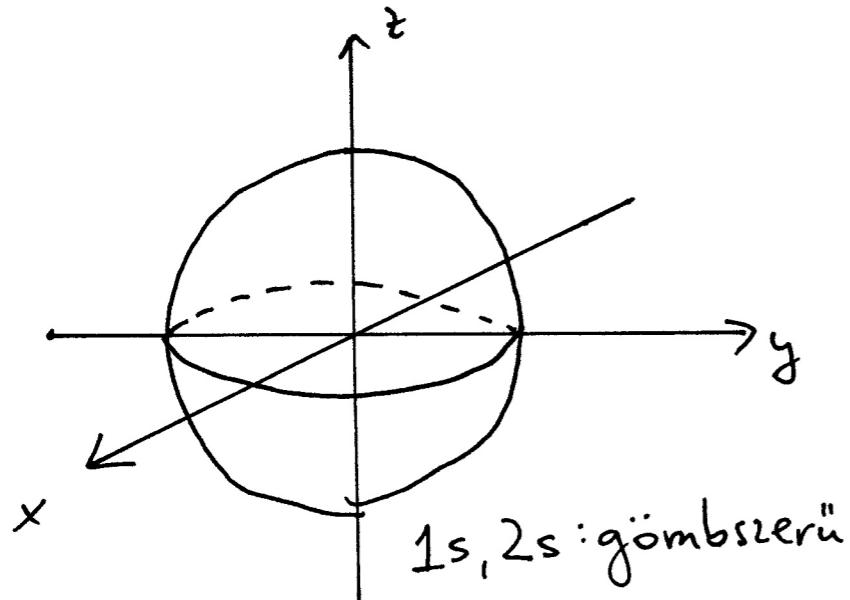
Tehát a spint is figyelembe véve

1. az  $n = 1$  nívó  $2 \times$  degenerált,
2. az  $n = 2$  nívó  $8 \times$  degenerált,
3. az  $n = 3$  nívó  $18 \times$  degenerált,
4. stb.

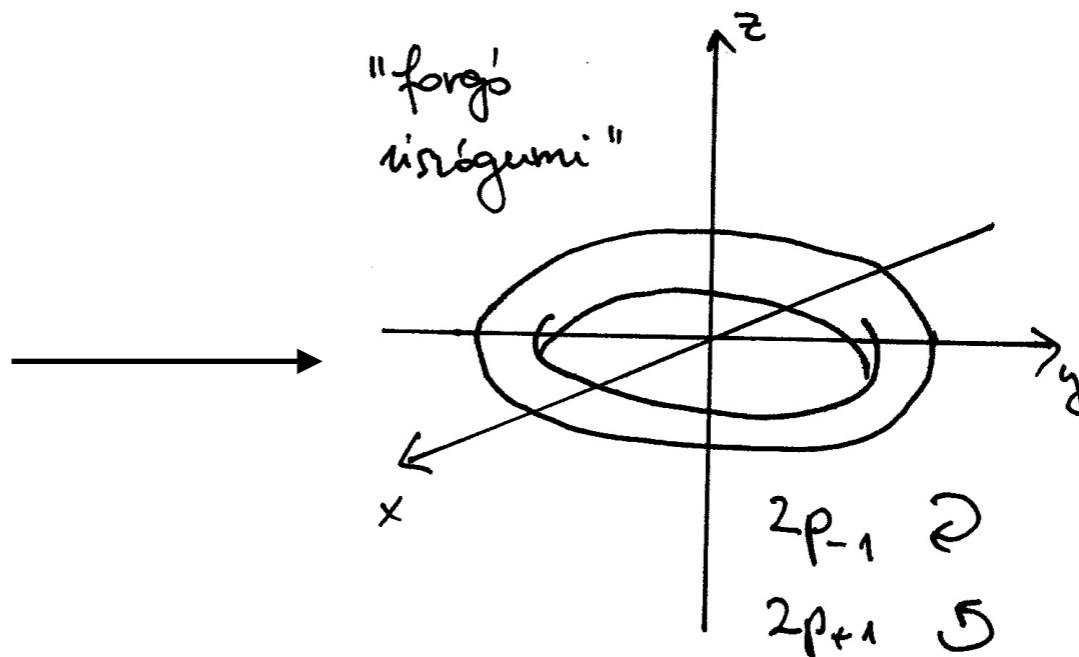


# (I) Elektronok atomokban

Az elektronfelhő alakja az egyes energiasajátállapotokban

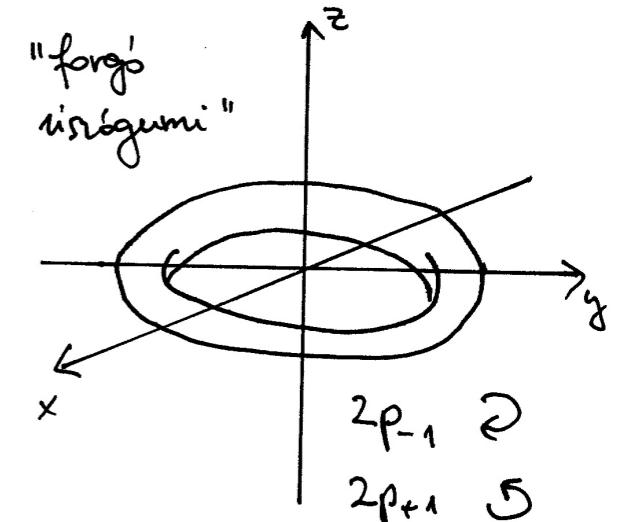
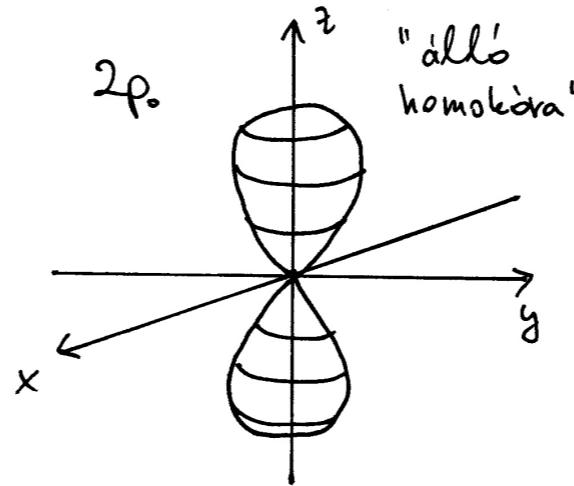
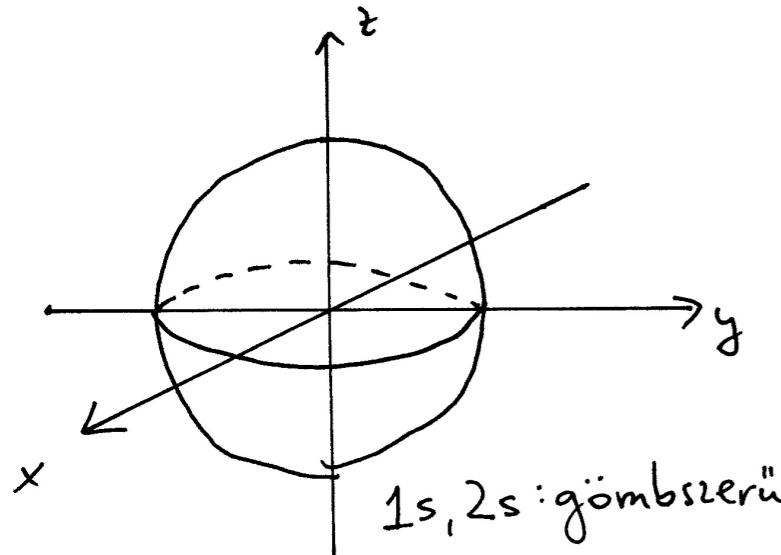


hasonló, mint a  
klasszikus elektronpályák  
a Rutherford- és a Bohr-modellben



# (I) Elektronok atomokban

## (I/I) Elektronállapotok hidrogénatomban



Mit jelent az, hogy "forgó"?

Részecskesűrűség (3D):  $\rho(\mathbf{r}, t) = |\psi(\mathbf{r}, t)|^2$ .

Részecske-áramsűrűség (3D):  $\mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = \text{Re} \left( \psi^*(\mathbf{r}, t) \frac{\hat{\mathbf{p}}}{m_e} \psi(\mathbf{r}, t) \right)$ .

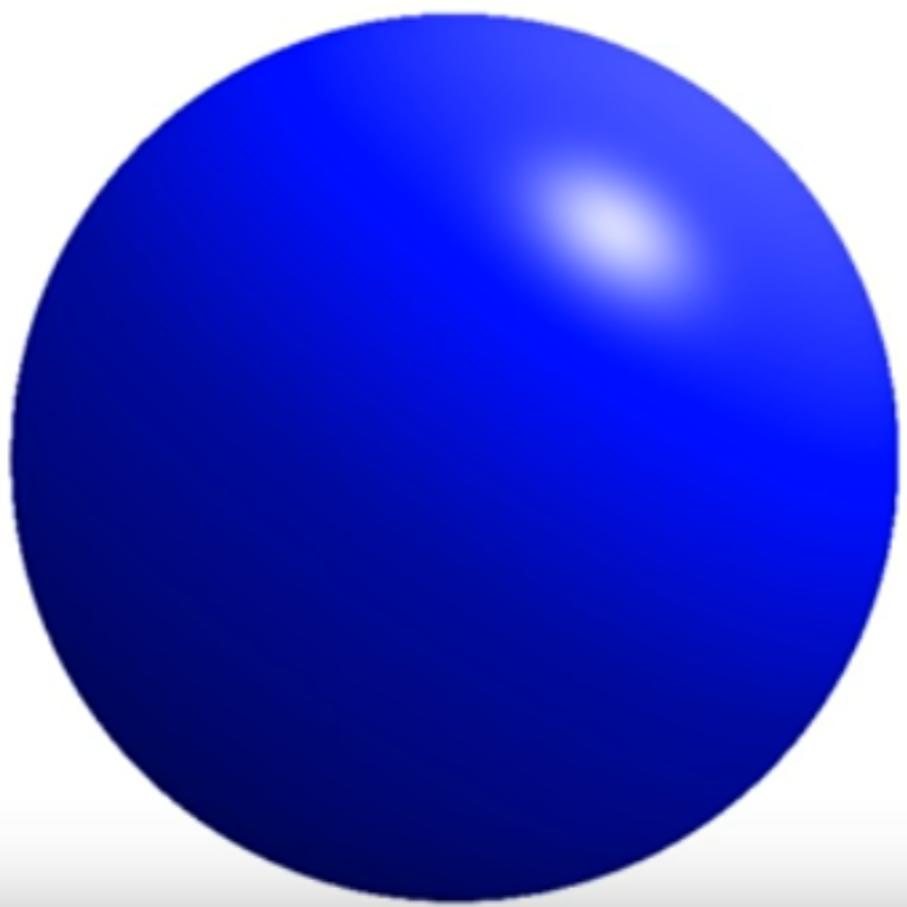
Stacionárius állapotban:  $\rho(\mathbf{r}, t) = \rho(\mathbf{r})$  és  $\mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{j}(\mathbf{r})$ .

Néha  $\mathbf{j}(\mathbf{r}) = 0$ , például 1s, 2s, 2p<sub>0</sub> pályákon.

Néha  $\mathbf{j}(\mathbf{r}) \neq 0$ , például 2p<sub>-1</sub> és 2p<sub>+1</sub> pályákon.



hydrogen atom

Visualizations:  $(n, l, m) = (1, 0, 0)$ 

## Hydrogen atom wavefunctions

150,206 views • Published on May 15, 2013

1.5K

43

SHARE

SAVE

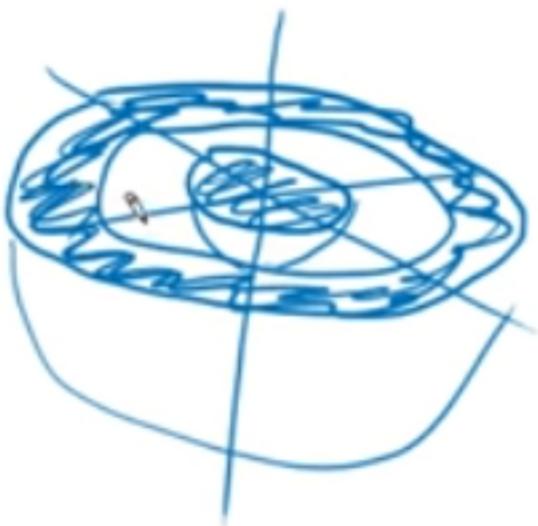
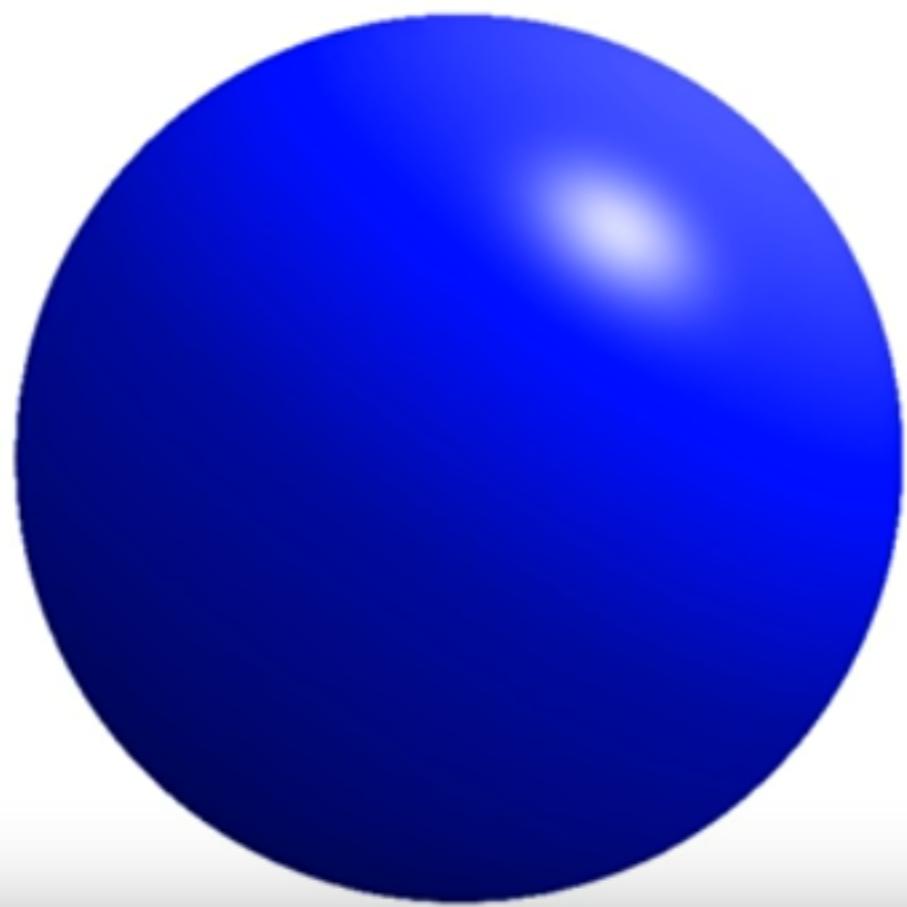
...

Brant Carlson  
13.4K subscribers



hydrogen atom

# Visualizations: $(n, l, m) = (2, 0, 0)$



6:49 / 19:58



Hydrogen atom wavefunctions. 5/10

## Hydrogen atom wavefunctions

150,206 views • Published on May 15, 2013

1.5K

43

SHARE

SAVE

...



Brant Carlson  
13.4K subscribers



i 🔒 https://www.youtube.com/watch?v=DvRzdCnsiYw

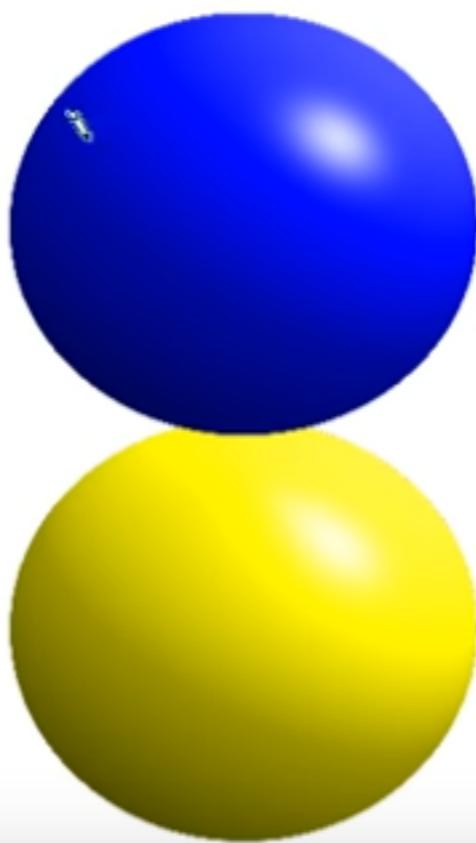


sited Getting Started



hydrogen atom

# Visualizations: $(n, l, m) = (2, 1, 0)$



7:23 / 19:58



Hydrogen atom wavefunctions: 6/10

## Hydrogen atom wavefunctions

150,206 views • Published on May 15, 2013

1.5K

43

SHARE

SAVE

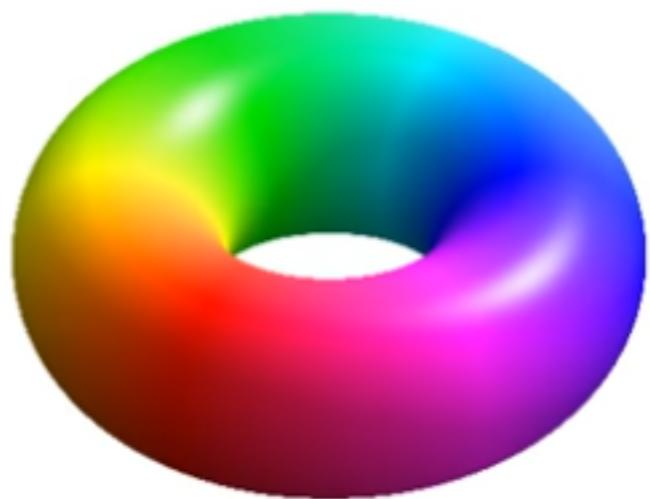
...



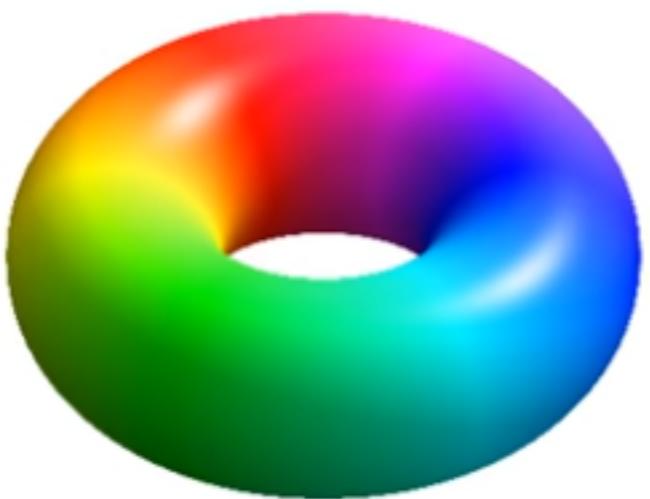
Brant Carlson  
13.4K subscribers

# Visualizations: $(n, l, m) = (2, 1, \pm 1)$

$m = -1$



$m = +1$



8:28 / 19:58



Hydrogen atom wavefunctions: 7/10

## Hydrogen atom wavefunctions

150,206 views • Published on May 15, 2013

1.5K

43

SHARE

SAVE

...

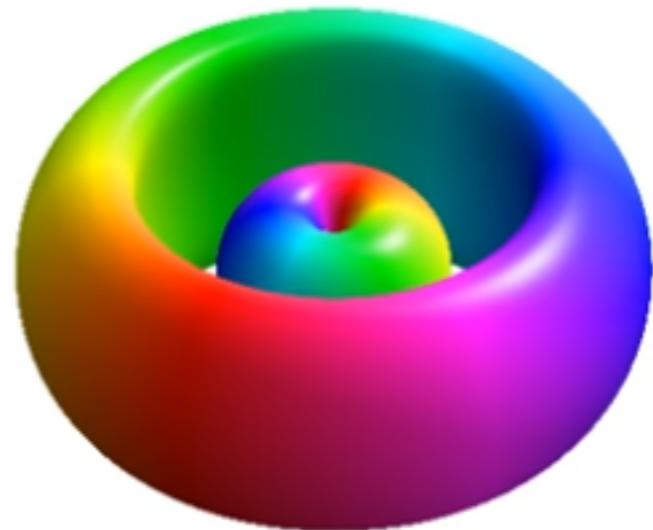
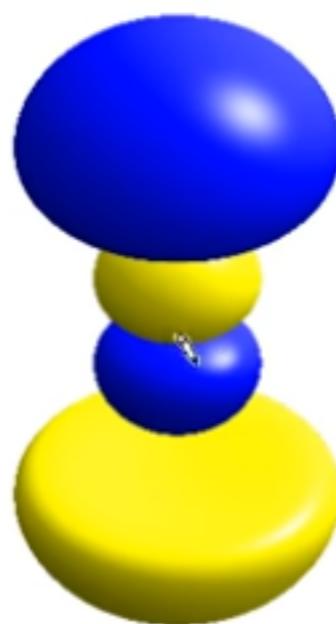
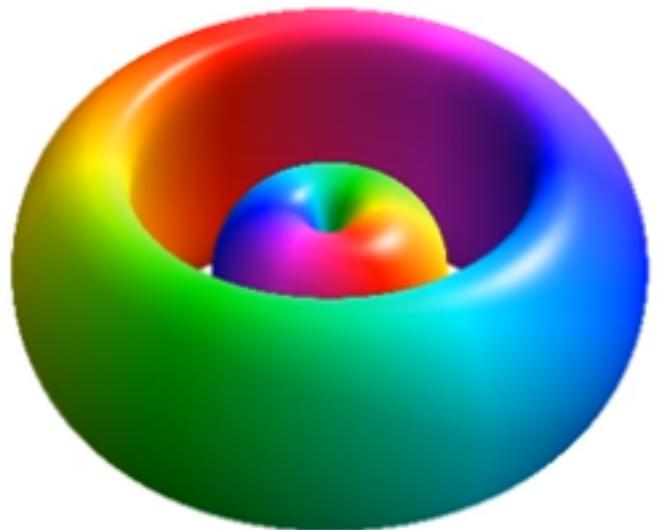


Brant Carlson  
13.4K subscribers



hydrogen atom

## Visualizations: $(n, l, m) = (3, 1, \dots)$

 $m = -1$  $m = 0$  $m = 1$ 

12:31 / 19:58



Hydrogen atom wavefunctions. 8/10

### Hydrogen atom wavefunctions

150,206 views • Published on May 15, 2013

1.5K

43

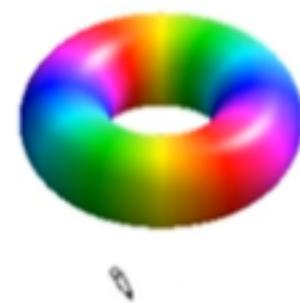
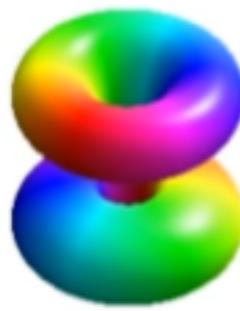
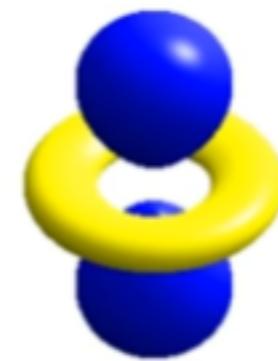
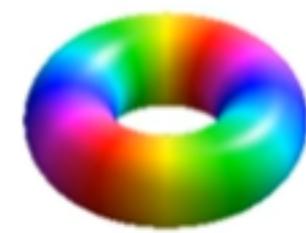
SHARE

SAVE

...

Brant Carlson  
13.4K subscribers

## Visualizations: $(n, l, m) = (3, 2, \dots)$

 $m=-2$  $m=-1$  $m=0$  $m=1$  $m=2$ 

▶ ▶ 🔍 14:18 / 19:58

CC 🔍 Hydrogen atom wavefunctions: 9/10

### Hydrogen atom wavefunctions

150,206 views • Published on May 15, 2013

1.5K

43

SHARE

SAVE

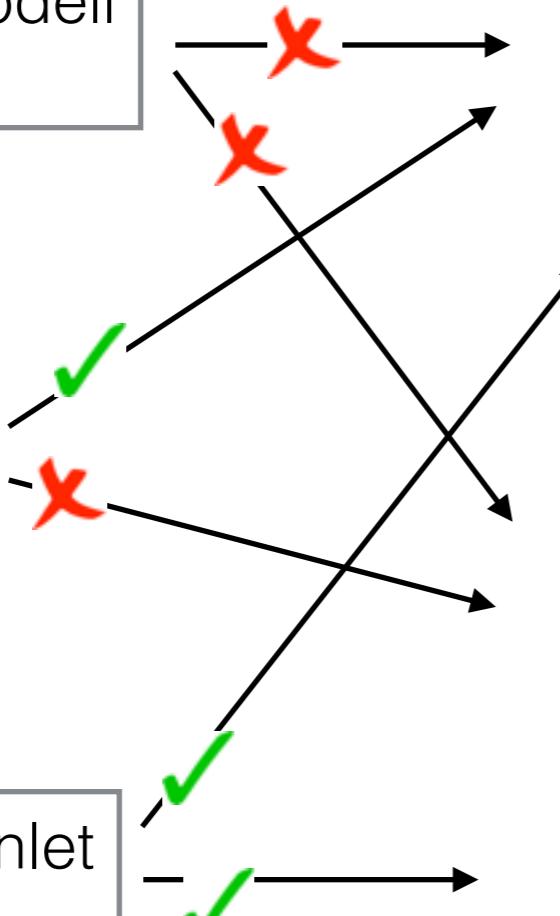
...



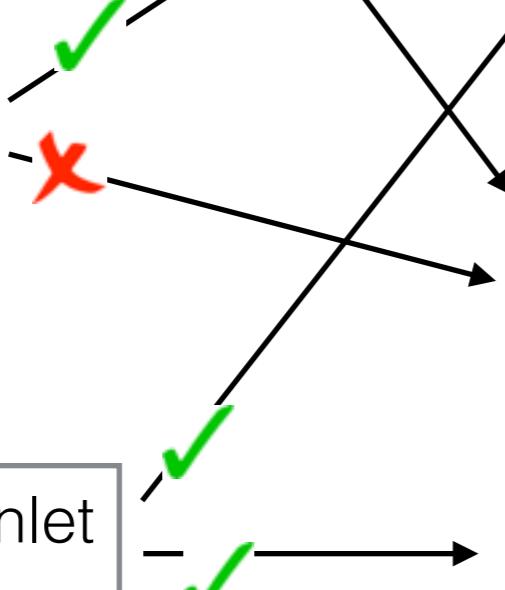
Brant Carlson  
13.4K subscribers

# Összefoglalás

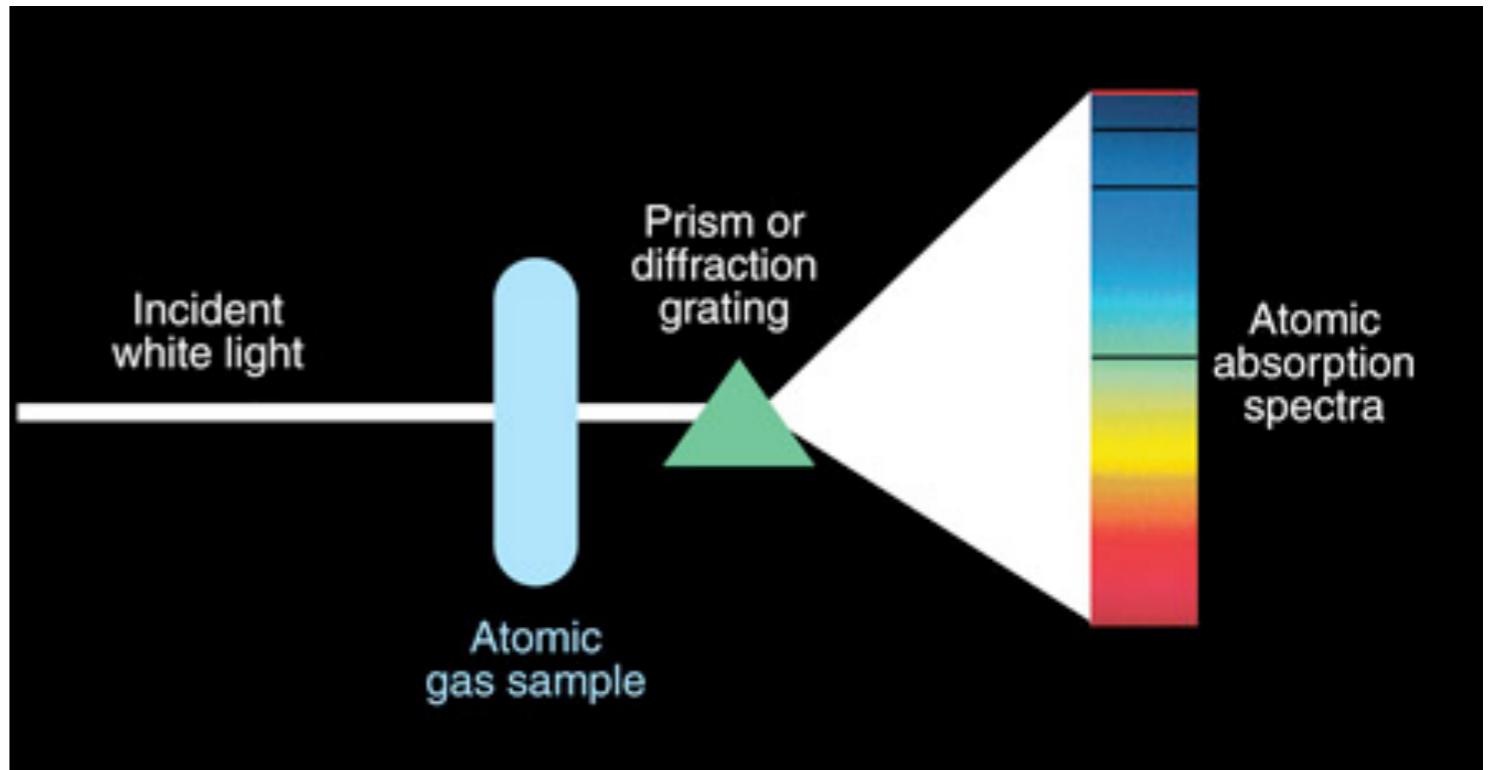
Rutherford-atommodell  
(klasszikus)



Bohr-atommodell  
(félklasszikus)



Schrödinger-egyenlet  
(kvantumos)



Group	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
Period	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
1	H																	He
2	Li	Be																Ne
3	Na	Mg																Ar
4	K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
5	Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
6	Cs	Ba	La	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pd	Bi	Po	At	Rn
7	Fr	Ra	Ac	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Ds	Rg	Cn	Nh	Fl	Mc	Lv	Ts	Og
	*	*	*	104	105	106	107	108	109	110	111	112	113	114	115	116	117	118
	*	*	*	58	59	60	61	62	63	64	65	66	67	68	69	70	71	
	*	*	*	90	91	92	93	94	95	96	97	98	99	100	101	102	103	