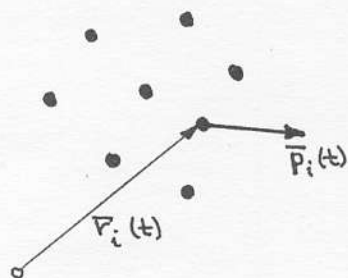


BEVEZETÉS

Klasszikus fizikai kiegészítés

- részecske modell
 - hullám modell
- } a klasszikus fizikában

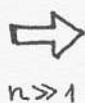
pontrendszer (MECHANIKA)



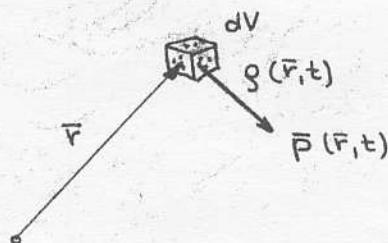
$$i = 1, 2, 3, \dots, n$$

$$\left\{ \vec{r}_i(t), \vec{p}_i(t) \right\}_{i=1}^n$$

kontinuum (MECHANIKA)



$n \gg 1$



általánosítás

FIZIKAI MEZŐ
(tetszőleges fizikai mennyiség)

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

pl: $\vec{p}(\vec{r}, t), \vec{E}(\vec{r}, t), \vec{B}(\vec{r}, t), \dots$

elemi gerjesztések $\rightarrow$ hullámjelenség

Síkhullám:

$$\Psi(\vec{r}, t) = A \sin 2\pi \left(\frac{x}{\lambda} - \frac{t}{T} \right) = A \sin \left(\frac{2\pi}{\lambda} x - \frac{2\pi}{T} t \right) \equiv A \sin(kx - \omega t)$$

$$\Psi(\vec{r}, t) = A \sin(\vec{k}\vec{r} - \omega t)$$



$$\Psi(\vec{r}, t) = \text{állandó}$$

$$\vec{k}\vec{r} - \omega t = \text{állandó}$$

$$kx - \omega t = \text{állandó}$$

$$k\dot{x} - \omega = 0$$

$$v_f = \dot{x} = \frac{\omega}{k}$$

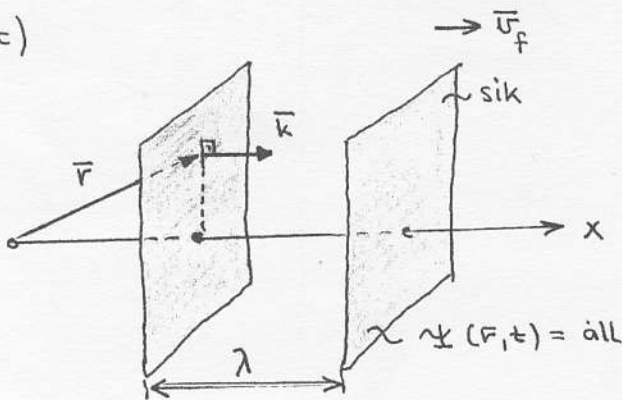
(fázissebesség)

$$\Psi(\vec{r}, t) = A \cdot \sin(\vec{k}\vec{r} - \omega t)$$

MATEMATIKA

$$\Psi(\vec{r}, t) = A e^{j(\vec{k}\vec{r} - \omega t)}$$

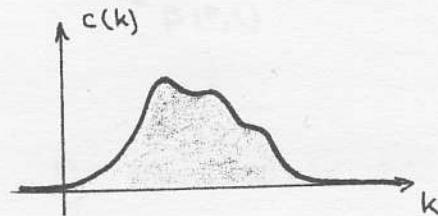
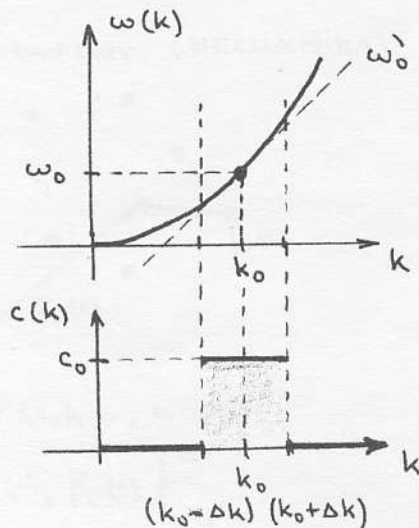
$$j \equiv \sqrt{-1}$$



2

Hullámcsomag

$$\Psi(x,t) = \int_{-\infty}^{+\infty} c(k) e^{j(kx - \omega t)} dk$$



$$\omega(k) = \omega(k_0) + \left[\frac{d\omega}{dk} \right]_{k_0} \cdot (k - k_0) + \dots \equiv \omega_0 + \omega'_0 \cdot (k - k_0) + \dots$$

$$\Psi(x,t) \approx c_0 \int_{k_0 - \Delta k}^{k_0 + \Delta k} e^{j[kx - \omega_0 t - \omega'_0 k \cdot t + \omega'_0 \cdot k_0 \cdot t]} dk =$$

$$= c_0 e^{j(\omega'_0 k_0 - \omega_0) t} \cdot \int_{k_0 - \Delta k}^{k_0 + \Delta k} e^{j(x - \omega'_0 t) k} dk =$$

$$\frac{1}{j(x - \omega'_0 t)} \left[e^{j(x - \omega'_0 t) k} \right]_{k_0 - \Delta k}^{k_0 + \Delta k}$$

$$= c_0 e^{j(\omega'_0 k_0 - \omega_0) t} \cdot e^{j(x - \omega'_0 t) k_0} \cdot \frac{1}{j(x - \omega'_0 t)} \left[e^{j(x - \omega'_0 t) \cdot k} \right]_{-\Delta k}^{+\Delta k} =$$

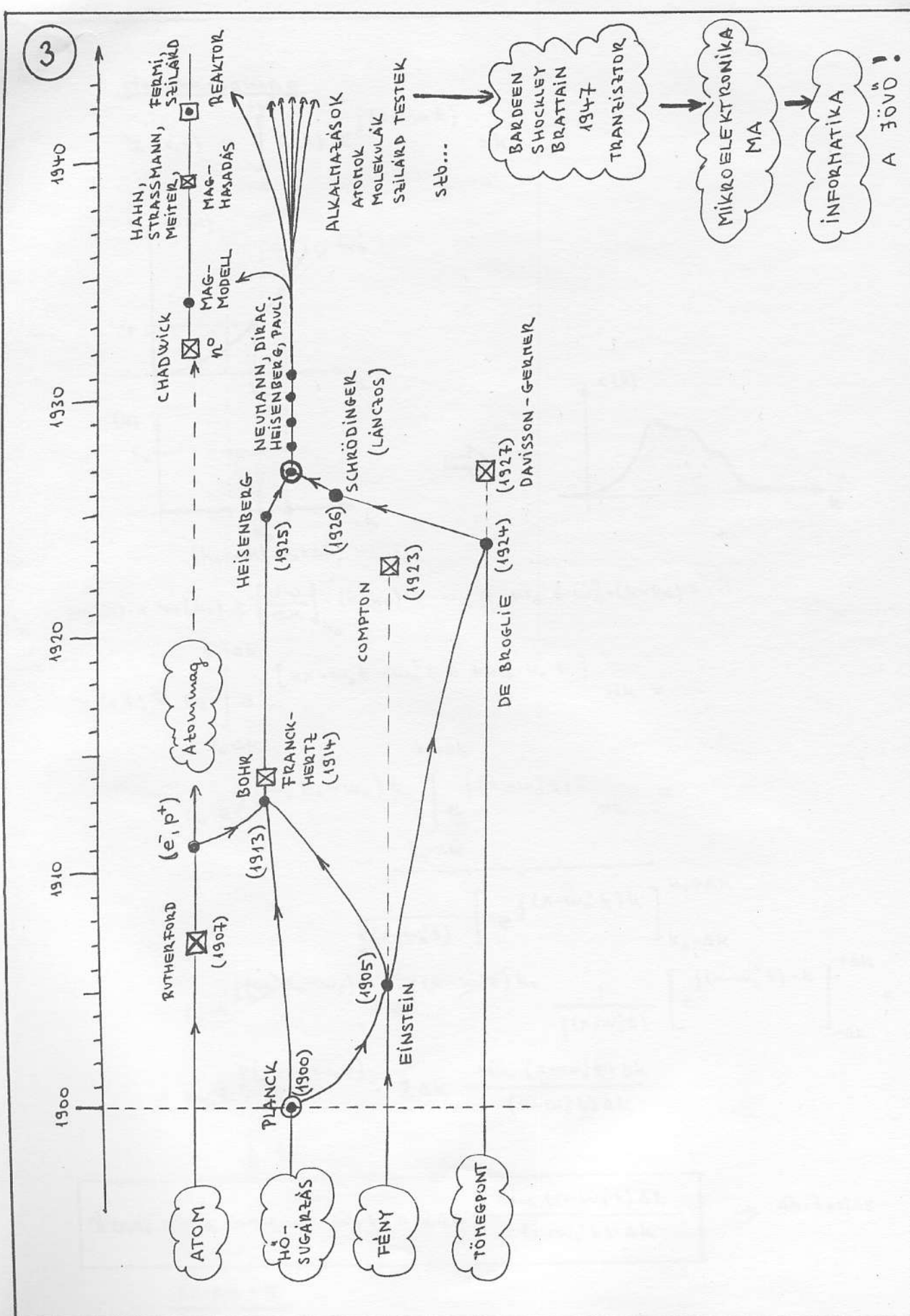
$$= c_0 e^{j(k_0 x - \omega_0 t)} \cdot 2\Delta k \cdot \frac{\sin(x - \omega'_0 t) \Delta k}{(x - \omega'_0 t) \Delta k}$$

↓ Re

$$\Psi(x,t) = c_0 \cos(k_0 x - \omega_0 t) \cdot 2\Delta k \cdot \frac{\sin(x - \omega'_0 t) \Delta k}{(x - \omega'_0 t) \cdot \Delta k}$$

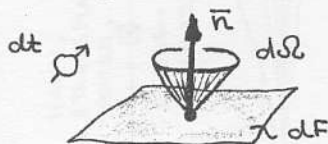
→ ábrázolás

$$\underline{\Delta x \cdot \Delta k = \pi}$$



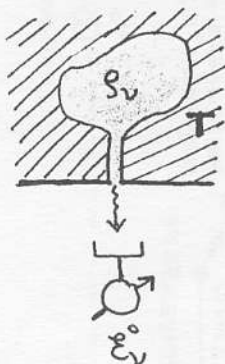
Bevezető (Történeti áttekintés)

A fekete test sugárzása



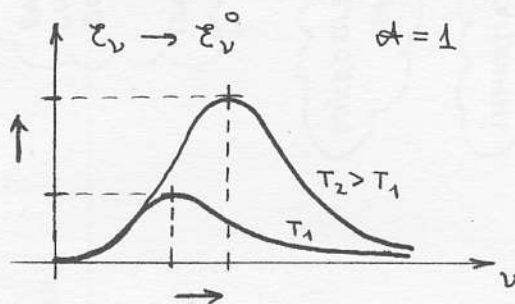
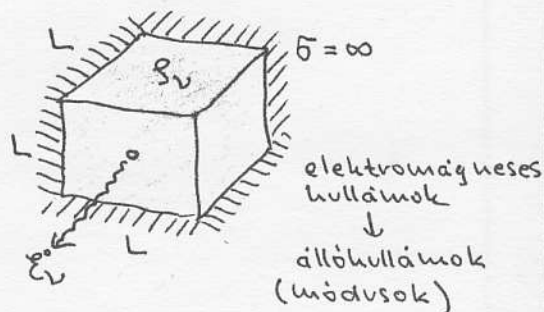
$$\xi_\nu d\nu$$

modell:



$$g_\nu \sim \xi_\nu^0$$

↑ ↑
SZÁMÍTHATÓ MÉRHETŐ



$$g_\nu = \frac{1}{L^3} n(\nu) \cdot \langle \xi_\nu \rangle$$

↓ ↑ ↑
 $\sim \nu^2$ kT

$$\xi_\nu^{Rf} = A \cdot \nu^2 kT \quad (\text{Rayleigh-Jeans})$$

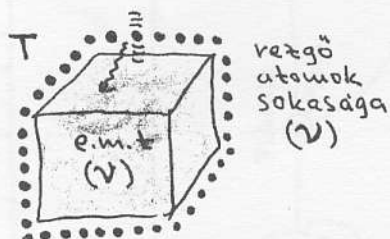
PLANCK (1900)

$$\xi_\nu^{PL} = A \frac{h\nu^3}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1}$$

$$h = 6,625 \cdot 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s.}$$

$$\xi_\nu^{PL} \rightarrow \xi_\nu^{Rf} \quad h\nu \ll kT$$

elméleti magyarázat

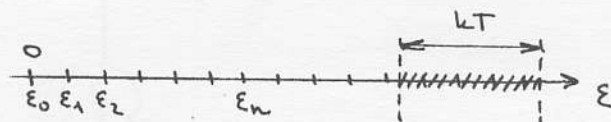


termikus egyensúly

$$\langle \xi_\nu \rangle = \langle \xi_\nu \rangle$$

e.m.t. atomok

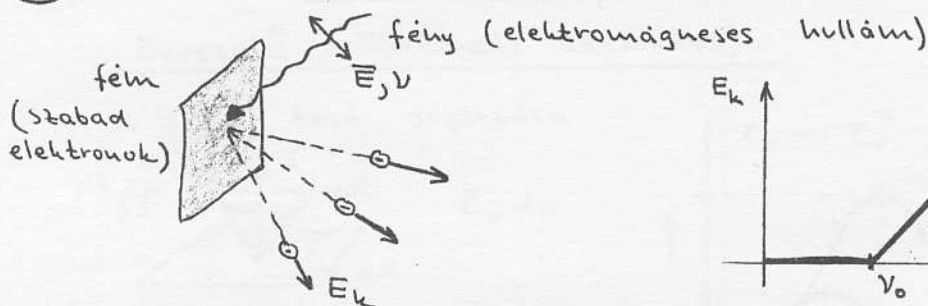
$$\langle \xi_\nu \rangle^{PL} = \frac{h\nu}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1} \xrightarrow{h\nu \ll kT} kT$$



$$\epsilon_n = n \cdot h\nu$$

5

A fényelektromos jelenség

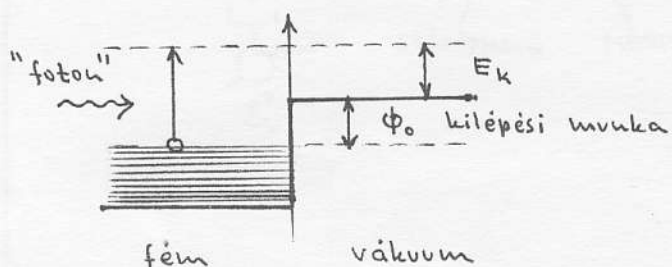


a kilépő elektronok kinetikus energiája mérhető

a klasszikus elképzelés:

$$E(t) \updownarrow \updownarrow E_k \sim |E|^2 \sim I \text{ (a fény intenzitása)} \quad \text{NEM JO!}$$

EINSTEIN (1905)



$$E_k = h\nu - \Phi_0 = h\left(\nu - \frac{\Phi}{h}\right) \equiv \nu_0$$

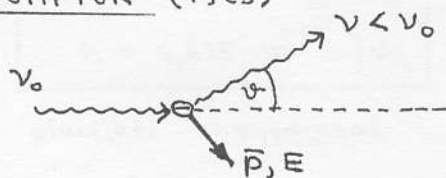
A foton $\rightarrow$ "részeske tulajdonság"

$$p = mc = \frac{mc^2}{c} = \frac{E}{c} = \frac{h\nu}{c} = \frac{h}{\lambda} \quad \xrightarrow{3 \text{ dim}}$$

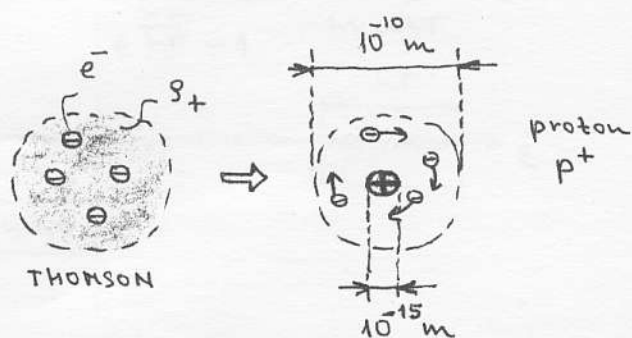
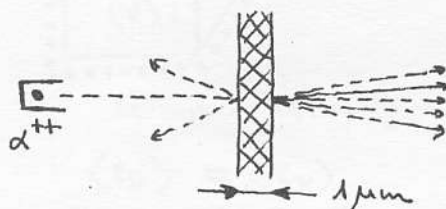
$$\begin{aligned} \vec{p} &= \hbar \vec{k} \\ E &= \hbar \omega \end{aligned}$$

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

COMPTON (1923)



$$\Delta\lambda = \lambda(1 - \cos\theta) \quad \left(\lambda = \frac{h}{mc}\right)$$

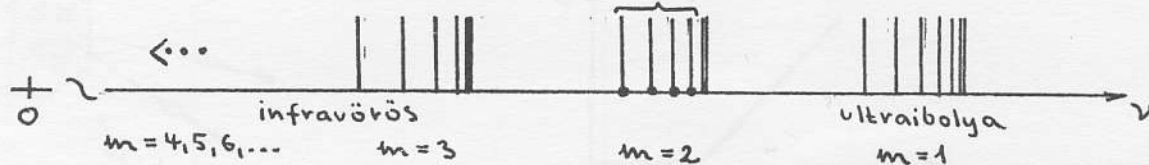
Az atom szerkezete
RUTHERFORD (1907, 1911)

6

Atomok emissziós spektruma (vonalas szinképek)

Hidrogén atom (BALMER 1885)

látható



$$\text{Balmer: } \nu = R \left(\frac{1}{4} - \frac{1}{n^2} \right)$$

$$n = 3, 4, 5, 6$$

→ általánosítás
RYDBERG-RITZ

$$\nu_{m,n} = R \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right)$$

$$m = 1, 2, 3, 4, \dots$$

$$n > m$$

BOHR atommodellje (1913)

Posztulátumok:

P1: $E_1, E_2, E_3, \dots$ körpályák, stacionárius állapot

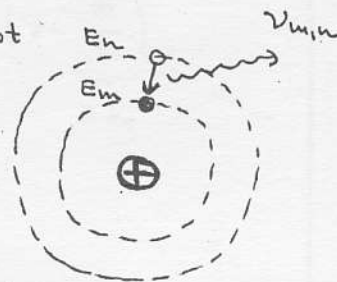
$$P2: \nu_{m,n} = \frac{E_n - E_m}{h} \quad E_n \rightarrow E_m$$

$$P3: L_n = n \cdot \hbar \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

eredmény

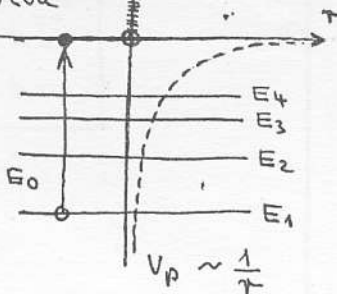
$$E_n = -\frac{E_0}{n^2}$$

↓
Rydberg - Ritz $\nu_{m,n} = \dots$

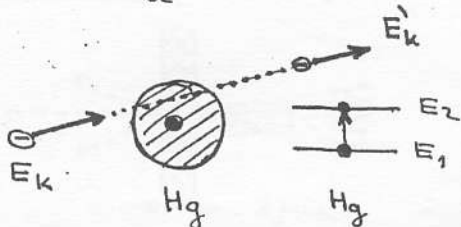
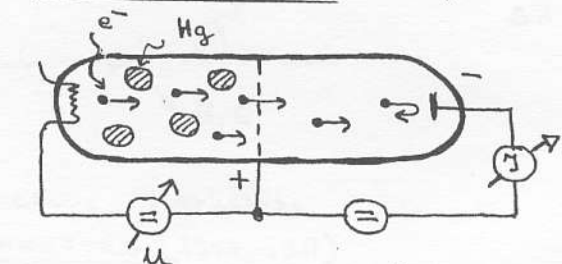


nem kötött állapotok

$E = 0$
kötött állapotok



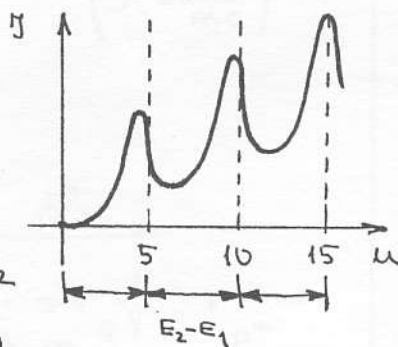
FRANCK-HERTZ (1914)



$$E_k + E_1 = E'_k + E_2$$

$$E_k - E'_k = E_2 - E_1$$

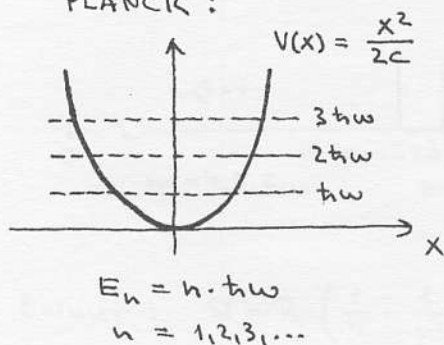
"rugalmatlan" üthözések



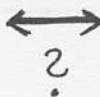
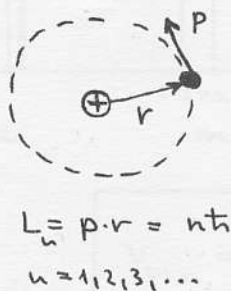
7

A BOHR-féle kvantálási feltétel általánosítása :
BOHR-SOMMERFELD (1916)

PLANCK :



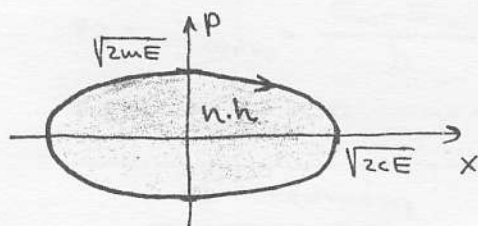
BOHR :



A teljes energiafüggvény ($\equiv$ Hamilton függvény)

$$H(p, x) = \frac{p^2}{2m} + \frac{x^2}{2c} = E \quad (\text{állandó})$$

$$\frac{p^2}{2mE} + \frac{x^2}{2cE} = 1$$



$$\oint p dx = \pi \cdot \sqrt{2mE} \cdot \sqrt{2cE} = 2\pi \cdot E \cdot \underbrace{\sqrt{\frac{m}{c}}}_{\frac{1}{\omega}} \quad \text{kvantált}$$

$$\oint p dx = 2\pi \cdot h \cdot n \cdot \frac{1}{\cancel{\omega}} = n \cdot h$$



ÁLTALÁNOSÍTÁS

Általános koordináták:

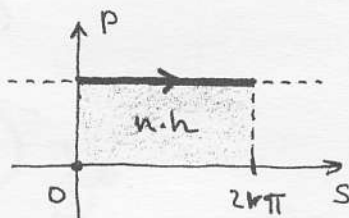
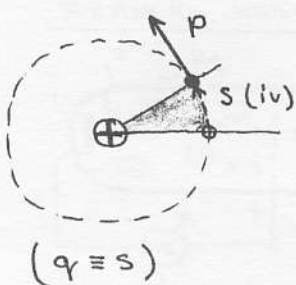
$\{q_1, q_2, q_3, \dots, q_f\}$



$$\oint p_k dq_k = n_k \cdot h$$

($k=1, 2, 3, \dots, f$)

Alkalmazása a BOHR-féle atommodellben



$$\oint p ds = p \cdot 2\pi r = L \cdot 2\pi = n \cdot h$$

$$\underline{L = n \cdot h}$$

DE BROGLIE (1923)

Elektromágneses
hullám
 ν, λ

→ fény

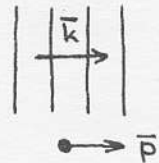
→ foton
 $E, \bar{p}$

tömegpont
modell
 $E, \bar{p}$

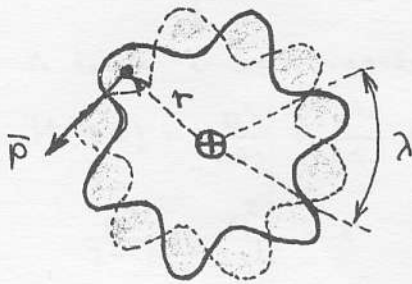
→ elektron

→ HULLÁM
 ν, λ

$$\left. \begin{array}{l} E = h\nu \\ \bar{p} = h\bar{k} \end{array} \right\}$$



(Bohr P3)

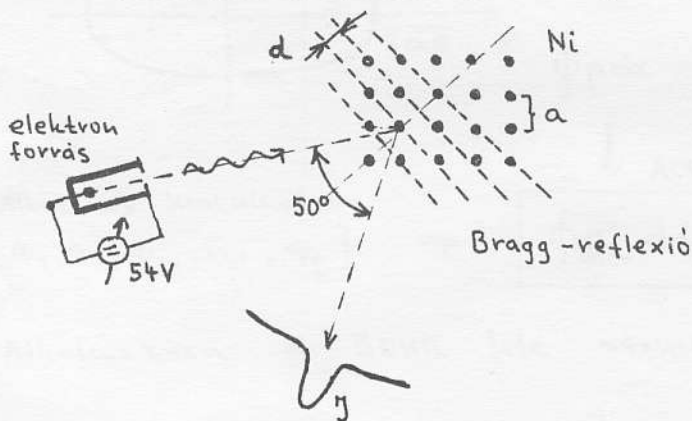


$$2\pi r = n \cdot \lambda \quad (\text{állóhullám})$$

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

$$\underbrace{pr = n \cdot h}_{\equiv L_n} \quad (\text{P3})$$

DAVISSON - GERMER (1927)



→ Thomson - Stern (H atom)

HEISENBERG (1925)

$$\begin{bmatrix} \omega_{11} & \omega_{12} & \omega_{13} & \dots \\ \omega_{21} & \omega_{22} & \omega_{23} & \dots \\ \omega_{31} & \omega_{32} & \omega_{33} & \dots \\ \vdots & & & \end{bmatrix} \equiv \underline{\underline{\omega}}$$

$\equiv \underline{\underline{\omega}}$

→

$\underline{x}, \underline{p}_x, \underline{E}$, "mátrix diagonalizálás" (algebra)

TÚL ABSZTRAKT !

SCHRÖDINGER (1926)

De Broglie hullám → hullámegyenlet →

↕
"SZÉHLÉLETES" !

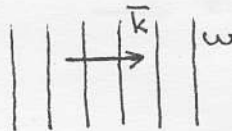
1.1. Hullámmechanika

1.1.1. A SCHRÖDINGER egyenlet és a hullámfüggvény

szabadon
mozgó tömegpont



Síkhullám



$$\left. \begin{array}{l} E = \hbar \omega \\ \bar{p} = \hbar \bar{k} \end{array} \right\} \text{(de Broglie)}$$

$$\Psi_0(\vec{r}, t) = A e^{j(\bar{k}\vec{r} - \omega t)}$$

$$\left\{ \begin{array}{ll} \frac{\bar{p}^2}{2m} + V_0 = E & \text{(mechanika)} \quad V_0 = \text{állandó} \\ \frac{\hbar^2 \bar{k}^2}{2m} + V_0 = \hbar \omega & \text{(diszperziós reláció)} \end{array} \right.$$

"Ha van hullám, akkor hullámegyenletnek is kell lennie!"

$$\left. \begin{array}{l} \bar{k} = (k_x, k_y, k_z) \\ \vec{r} = (x, y, z) \\ \bar{k}\vec{r} = k_x \cdot x + k_y \cdot y + k_z \cdot z \end{array} \right\} \Psi_0(\vec{r}, t)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \Psi_0 = -j\omega \Psi_0 \quad \rightarrow \quad \omega = -\frac{1}{j} \frac{\partial \Psi_0}{\partial t} \cdot \frac{1}{\Psi_0}$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi_0 = -k_x^2 \Psi_0 \\ \frac{\partial^2}{\partial y^2} \Psi_0 = -k_y^2 \Psi_0 \\ \frac{\partial^2}{\partial z^2} \Psi_0 = -k_z^2 \Psi_0 \end{array} \right\} \rightarrow \underbrace{(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)}_{k^2} = -\left(\frac{\partial^2 \Psi_0}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi_0}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Psi_0}{\partial z^2} \right) \cdot \frac{1}{\Psi_0}$$

Tehát

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + V_0 = \hbar \omega$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2 \Psi_0}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi_0}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Psi_0}{\partial z^2} \right) \cdot \frac{1}{\Psi_0} + V_0 = -\frac{\hbar}{j} \frac{\partial \Psi_0}{\partial t} \cdot \frac{1}{\Psi_0} \quad | \cdot \Psi_0$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2 \Psi_0}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi_0}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Psi_0}{\partial z^2} \right) + V_0 \Psi_0 = -\frac{\hbar}{j} \frac{\partial \Psi_0}{\partial t}$$

10

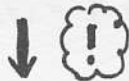
Új matematikai szimbólumot vezetünk be:

$$\frac{\partial^2 \Psi_0}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi_0}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Psi_0}{\partial z^2} \equiv \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \cdot \Psi_0 \equiv \Delta \cdot \Psi_0$$

Neve: LAPLACE operátor
(műveleti utasítások)

Így tehát írható, hogy:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi_0 + V_0 \cdot \Psi_0 = -\frac{\hbar}{j} \dot{\Psi}_0$$



ÁLTALÁNOSÍTÁS

$$V_0 \rightarrow V(F, t)$$

$$\Psi_0 \rightarrow \Psi(F, t)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi + V(F, t) \cdot \Psi = -\frac{\hbar}{j} \dot{\Psi}$$

Időfüggő SCHRÖDINGER egyenlet

Vezessünk be egy új matematikai szimbólumot

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(F, t) \right] \Psi \equiv \hat{H} \cdot \Psi$$

matematikai műveletek (operációk) sorozata $\equiv$ operátor ($\hat{H}$)

HAMILTON OPERÁTOR

Így:

$$\hat{H} \Psi = -\frac{\hbar}{j} \dot{\Psi}$$

Időfüggő Schrödinger egyenlet
operátor szimbólumot használva

Kvantummechanika

V. postulatuma

Parciális differenciál egyenlet $\rightarrow$ közönséges differenciál egyenlet(ek)
(SZEPARÁLÁS)

$$\begin{cases} V(F, t) \rightarrow V(F) & \text{konzervatív rendszer } E = \text{állandó} \\ \Psi(F, t) \rightarrow \psi(F) \cdot \theta(t) & \text{(szeparálható alakba írható)} \end{cases}$$

$$\hat{H} \Psi = -\frac{\hbar}{j} \dot{\Psi} \rightarrow \theta \hat{H} \psi = -\frac{\hbar}{j} \psi \cdot \dot{\theta} \quad \left| \cdot \frac{1}{\psi \cdot \theta} \right.$$

$$\underbrace{\frac{\hat{H} \psi}{\psi}}_{(F)} = -\frac{\hbar}{j} \underbrace{\frac{\dot{\theta}}{\theta}}_{(t)} \quad V(F, t)$$

11

Bizonyítás:

$$\begin{aligned}
 u(x+a) &= \sum_n e^{-jk([x+a]-na)} \chi([x+a]-na) = \\
 &= \sum_n e^{-jk(x-\underbrace{[n-1]}_{[n-1]}a)} \chi(x-\underbrace{[n-1]}_{[n-1]}a) = u(x)
 \end{aligned}$$

A normálási feltétel (I. Axióma)

$$\langle \tilde{\psi} | \tilde{\psi} \rangle = |A|^2 \sum_{n'} \sum_n \underbrace{e^{-jk(x-na-x+n'a)}}_{e^{-jk(n'-n)a}} \langle \chi(x-n'a) | \chi(x+na) \rangle = 1$$

A lehetséges energiaszintek tehát:

$$\begin{aligned}
 \hat{H} \psi &= \varepsilon \psi \quad \longrightarrow \quad \varepsilon = \langle \psi | \hat{H} \psi \rangle \quad (\psi\text{-t kellene tudni}) \\
 \text{közelítő megoldás} \quad \varepsilon &\approx \underbrace{\langle \tilde{\psi} | \hat{H} \tilde{\psi} \rangle}_{\downarrow} \quad (\text{IV. axióma})
 \end{aligned}$$

$$\hat{H} \tilde{\psi} = A \sum_n e^{jkna} \hat{H} \chi(x-na) =$$

$$\underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) - \omega(x-na) + \omega(x-na)}_{\equiv V_n(x)}$$

$$= A \sum_n e^{jkna} \underbrace{\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \omega(x-na) \right] \chi(x-na)}_{\varepsilon_A \cdot \chi(x-na)} + A \sum_n e^{jkna} V_n(x) \chi(x-na) =$$

$$= \varepsilon_A \cdot \tilde{\psi} + A \sum_n e^{jkna} V_n(x) \chi(x-na)$$

Tehát:

$$\varepsilon \approx \langle \tilde{\psi} | \hat{H} \tilde{\psi} \rangle = \varepsilon_A \underbrace{\langle \tilde{\psi} | \tilde{\psi} \rangle}_1 + |A|^2 \sum_{n'} \sum_n e^{jk(n-n')a} \underbrace{\langle \chi(x-n'a) | V_n(x) | \chi(x-na) \rangle}_{\substack{\text{ez a skalár szorzat} \\ \text{csak } (n-n')\text{-től} \\ \text{függ.}}}$$

↓
egyszerűsítő feltevések

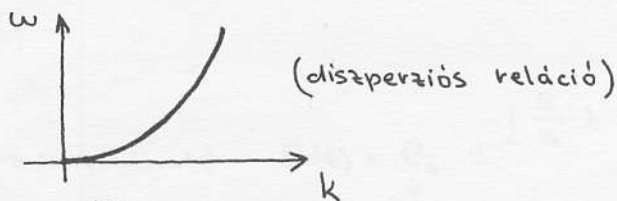
Próbálkozások:

PL: szabadon mozgó részecske $\rightarrow$ síkhullám (de Broglie)

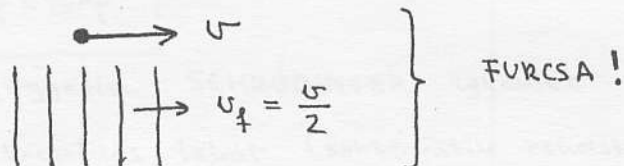
$$\Psi(x,t) = A \cdot e^{j(EF - \omega t)}$$

$V_0 \equiv 0$ választással

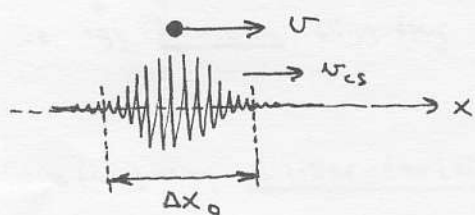
$$\omega = \frac{\hbar k^2}{2m}$$



$$v_f = \frac{\omega}{k} = \frac{\hbar k}{2m} = \frac{p}{2m} = \frac{v}{2} \quad (?)$$



szabadon mozgó részecske $\rightarrow$ hullámcsoport (lokalizált)



$$v_{cs} = \frac{d\omega}{dk} = \frac{\hbar k}{m} = \frac{p}{m} = v \quad (!)$$

(EZ TALÁN ÉRTELMEZHETŐ)

↓
(DE) diszperzió is van

$\left. \begin{array}{l} t \text{ időpillanatban} \quad \Delta x_0 \\ t+T_2 \text{ időpillanatban} \quad 2 \cdot \Delta x_0 \end{array} \right\}$ a hullámcsoport SZÉTFOLYIK

$$T_2 \approx \frac{m}{\hbar} (\Delta x_0)^2$$

PL: $\left. \begin{array}{l} m = 1 \text{ gr} \\ \Delta x_0 = 1 \text{ mm} \end{array} \right\} T_2 = 10^{19} \text{ év}$

Ez jó (makroszkópikus részecske)

$\left. \begin{array}{l} m = 9 \cdot 10^{-31} \text{ kg} \\ \Delta x_0 = 10^{-10} \text{ m} \end{array} \right\} T_2 = 10^{-17} \text{ sec}$

Ez rossz!
(az elektron nem stabil)



EI kell vetnünk azt az (egyébként tetszetősnek tűnő) elképzelést, hogy a Ψ hullámfüggvény: valamilyen "anyagi közeg"-ben gerjesztett hullámjelenséget ír le, amit a méréseink során egy elektronként detektálunk.

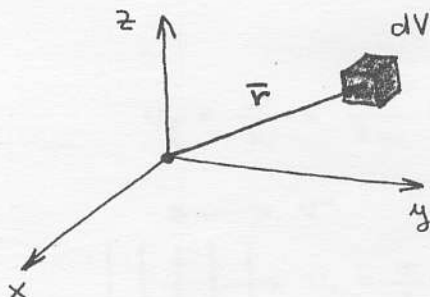
(ANYAG-HULLÁM NINCSEN!)

13

MAX BORN (1926) + (Jordan, Bohr)

tapasztalati tény : csak egész elektront mérünk
(elemi töltés kvantálás)

$$P(\mathbf{r}, t) \equiv |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2$$



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

megtalálási
valószínűség !

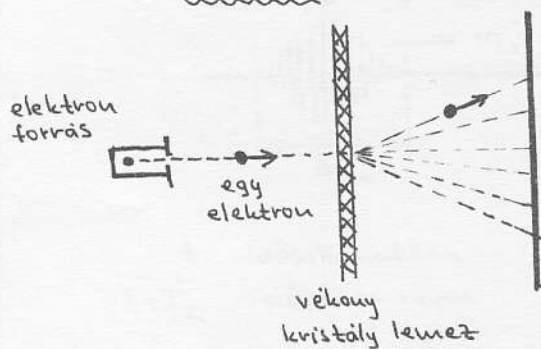
konzervatív rendszer esetén

$$V(\mathbf{r})$$

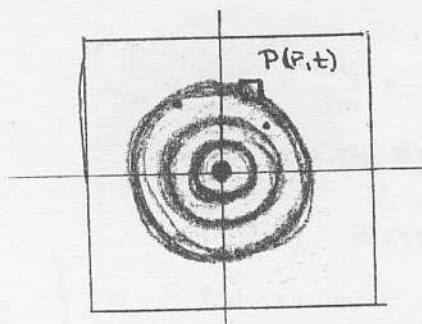
$$|\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 = |\Psi(\mathbf{r})|^2 \equiv \Psi(\mathbf{r})^* \Psi(\mathbf{r})$$

↑
komplex
konjugált

kísérleti ellenőrzés :



(egyszerre csak egyetlen elektron
van a rendszerben!)



becsapódási pontok

↓
"INTERFERENCIA" görbék

1.1.2. A hullámfüggvény matematikai tulajdonságai

$$\hat{H}\psi = E\psi \quad | \cdot c$$

$$\underbrace{\hat{H}(c\psi)}_{\equiv \psi} = E \underbrace{(c\psi)}_{\equiv \psi}$$

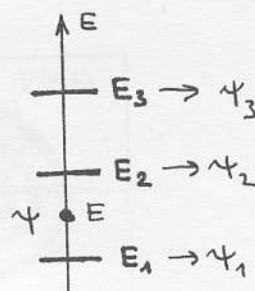
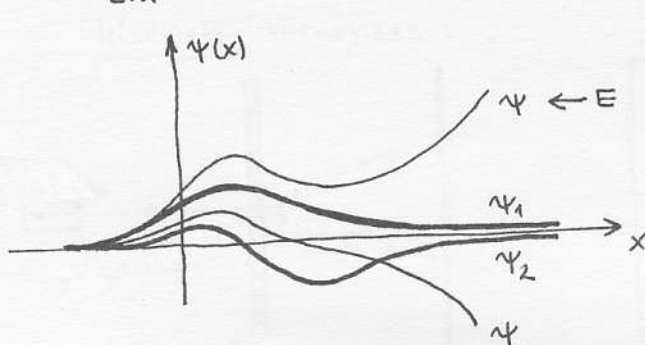
$$\rightarrow \int |\psi|^2 dV = \int |c\psi|^2 dV = 1 \rightarrow \boxed{|c|=1}$$

Gondolatmenet: 1 dim. (szemléletes) $\rightarrow$ 3 dim. (reális jelenségek)
általánosítás

(Modern mikroelektronikai eszközök
pl: kvantum völgyek)

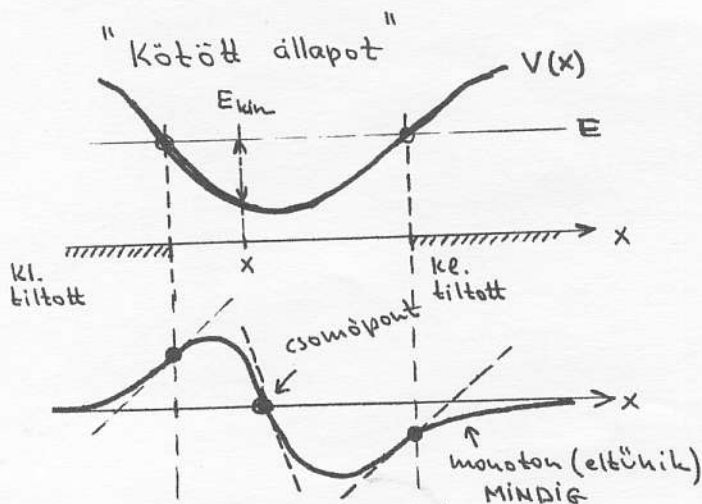
$$\hat{H}\psi = E\psi$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \psi'' + V(x)\psi = E\psi \quad + \text{REGULARITÁS}$$



ψ : matematikai megoldás de nem reguláris így FIZIKAILAG nem értelmezhető!

$$\hat{H}\psi_i = E_i \psi_i \rightarrow \text{sajátérték egyenlet: } E_i \text{ sajátérték, } \psi_i \text{ sajátfüggvény.}$$



a csomópontok száma változik
E nagyobb $\rightarrow$ több csomópont $\rightarrow \left\{ E_{kin} \sim \frac{1}{\lambda(x)^2} \right\}$

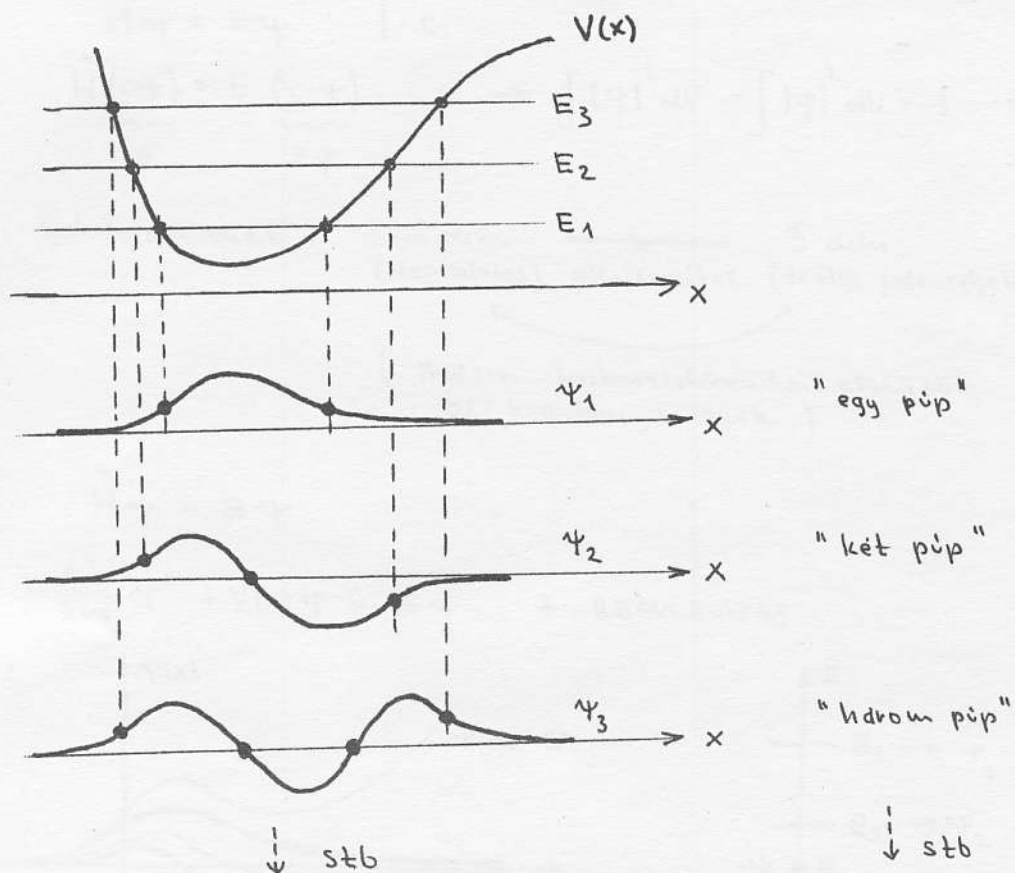
$$\psi'' = \frac{2m}{\hbar^2} (V(x) - E)\psi$$

$$V(x) > E \quad \psi'' = \begin{cases} > 0 \rightarrow \psi > 0 \\ < 0 \leftarrow \psi < 0 \end{cases}$$

$$V(x) < E \quad \psi'' = \begin{cases} > 0 \leftarrow \psi < 0 \\ < 0 \leftarrow \psi > 0 \end{cases}$$

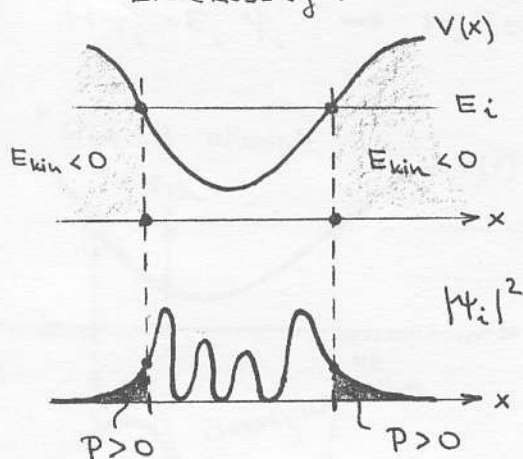
$$\left. \begin{array}{l} V(x) = E \quad \psi'' = 0 \\ \psi = 0 \quad \psi'' = 0 \end{array} \right\} \text{inflexió}$$

Kötött állapotok esetén általában kapjuk, hogy:



(ψ_i pontos meghatározása a Schrödinger egyenlet megoldásával történik $\rightarrow$ analitikus vagy numerikus módszerekkel)

Érdekeség:

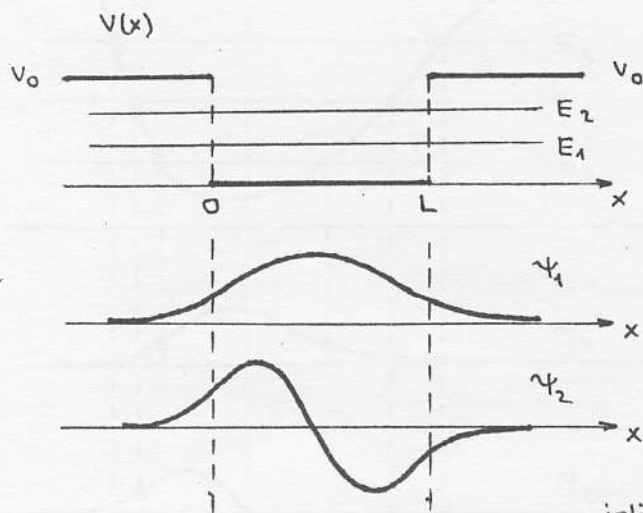


A "részcseke" $P > 0$ valószínűséggel megtalálható abban a térrészben is, ahol a "kinetikus energiája" negatív

↓
A "tömegpont szemlélet" nem jó!

1.1.3. Egyszerű példák kötött állapotokra

1.1.3.1. Potenciál völgy (Vázlatos tárgyalás)



$$\begin{aligned} \hat{H}\psi &= E\psi \\ -\frac{\hbar^2}{2m}\psi'' + V(x)\psi &= E\psi \\ &+ \text{REGULARITÁS} \end{aligned} \quad \downarrow \text{(Matematika)}$$

$$\psi'' = + \underbrace{\frac{2m}{\hbar^2} [V(x) - E]}_{\equiv +\alpha^2} \psi$$

$$\text{jelölések: } \begin{cases} + \frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - E) \equiv +\alpha^2 \\ - \frac{2m}{\hbar^2} E \equiv -k^2 \end{cases}$$

$x < 0$ tartományban:

$$\begin{aligned} \psi'' &= +\alpha^2 \psi \rightarrow \psi(x) = A_0 e^{\alpha x} + B_0 e^{-\alpha x} \\ \text{REGULARITÁS} &\rightarrow \lim_{x \rightarrow -\infty} \psi(x) = 0 \end{aligned} \quad \left. \vphantom{\begin{aligned} \psi'' &= +\alpha^2 \psi \\ \text{REGULARITÁS} &\rightarrow \lim_{x \rightarrow -\infty} \psi(x) = 0 \end{aligned}} \right\} \psi(x) = A_0 e^{\alpha x}$$

$x > L$ tartományban:

$$\begin{aligned} \psi'' &= +\alpha^2 \psi \rightarrow \psi(x) = A_0 e^{\alpha x} + B_0 e^{-\alpha x} \\ \text{REGULARITÁS} &\rightarrow \lim_{x \rightarrow \infty} \psi(x) = 0 \end{aligned} \quad \left. \vphantom{\begin{aligned} \psi'' &= +\alpha^2 \psi \\ \text{REGULARITÁS} &\rightarrow \lim_{x \rightarrow \infty} \psi(x) = 0 \end{aligned}} \right\} \psi(x) = B_0 e^{-\alpha x}$$

$0 \leq x \leq L$ tartományban:

$$\psi'' = -k^2 \psi \rightarrow \psi(x) = A \sin kx + B \cos kx \quad (\text{REGULÁRIS})$$

MEGOLDÁS a teljes $(-\infty < x < +\infty)$ tartományban

REGULARITÁS: $\psi(x)$ folytonosan differenciálható [Feladat]

$$\begin{aligned} \downarrow \\ x=0 \text{ pontban } \left\{ \begin{array}{l} A_0 = B \\ \alpha A_0 = k \cdot A \end{array} \right. \\ x=L \text{ pontban } \left\{ \begin{array}{l} B_0 e^{-\alpha L} = A \sin kL + B \cos kL \\ -\alpha B_0 e^{-\alpha L} = kA \cos kL - kB \sin kL \end{array} \right. \end{aligned} \quad \left. \vphantom{\begin{aligned} x=0 \text{ pontban } \\ x=L \text{ pontban } \end{aligned}} \right\} \rightarrow \alpha \rightarrow E$$

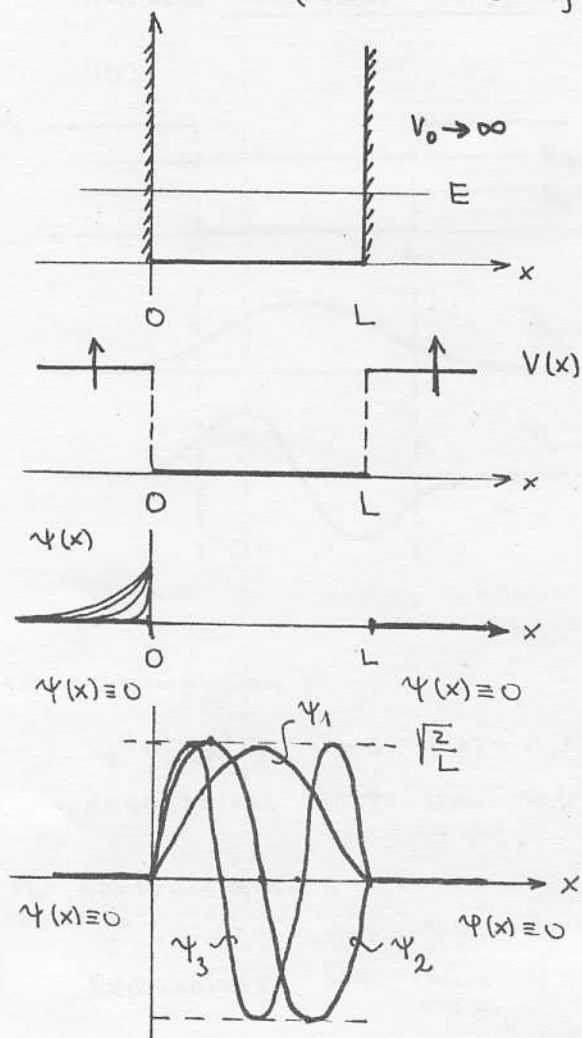
számítható
[Feladat]

Megjegyzés: 1 dimenzióban mindig van legalább egy kötött állapot

GYAKORLATI ALKALMAZÁS: "kvantum völgyek" (Szilárdtestfizika)

1.1.3.2. Potenciál doboz

(Matematikailag egyszerűen megoldható)



$$\alpha^2 \equiv \frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - E)$$

$$\lim_{V_0 \rightarrow \infty} e^{\alpha x} = 0 \quad (\forall x < 0)$$

$$\begin{cases} 0 \leq x \leq L & \text{tartományban} \\ V(x) \equiv 0 \end{cases}$$

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

$$\psi(x) \equiv 0 \quad \{x < 0, x > L\}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \psi'' = E\psi \quad (0 \leq x \leq L)$$

$$\psi'' = -\underbrace{\frac{2mE}{\hbar^2}}_{\equiv k^2} \psi$$

Regularitási feltétel: $\psi(x)$ folytonos $\leftarrow \begin{cases} \psi(x) = A \sin kx + B \cos kx \\ \text{(matematikai megoldás)} \end{cases}$

azaz

$$\psi(0) = \psi(L) = 0$$

$$\psi(0) = \phi + B = 0 \quad \text{azaz } B \equiv 0$$

$$\psi(L) = A \sin \underbrace{kL}_{n\pi} = 0$$

$$\downarrow$$

$$k = \frac{\pi}{L} n$$

$$n = 0 \pm 1 \pm 2 \pm \dots \quad (\text{matematika})$$

$$\left. \begin{aligned} & \rightarrow E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} n^2 \\ & \psi(x) = A \sin \frac{n\pi}{L} x \end{aligned} \right\} \begin{array}{l} \text{Fizika} \\ (n = 1, 2, 3, \dots) \end{array}$$

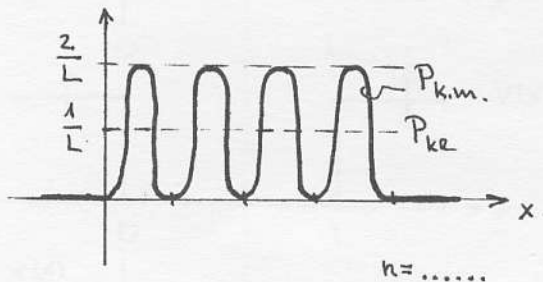
$$\int_0^L |\psi|^2 dx = 1 \rightarrow A = \sqrt{\frac{2}{L}}$$

A kapott megoldás értelmezése:

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

$$\psi_n = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{n\pi}{L} x$$

$$n = 1, 2, 3, \dots$$



A megtalálási valószínűség-sűrűség a klasszikus mechanika szerint

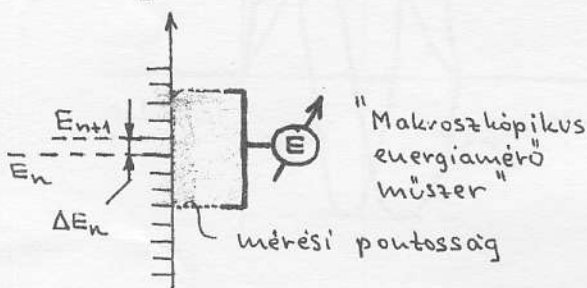
$$P_{ke} dx = A \cdot dt$$

$$P_{ke} = A \cdot \frac{dt}{dx} = \frac{A}{\dot{x}} \equiv P_0 = \frac{1}{L}$$

Erdemes megvizsgálni: Kvantummechanika $\rightarrow$ klasszikus mechanika
(Korrespondencia elv)

Az energia:

$$E_n = E_0 \cdot n^2$$

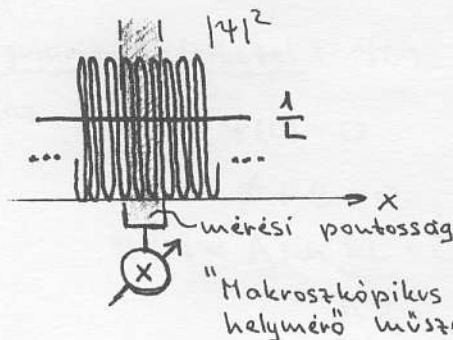


$$\frac{\Delta E_n}{E_n} = \frac{(n+1)^2 - n^2}{n^2} = \frac{2n+1}{n^2} \quad (n \gg 1)$$

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\Delta E_n}{E_n} = 0$$

A kvantáltság "eltűnik"

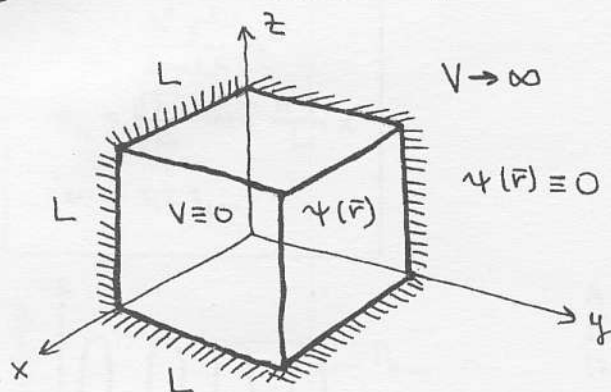
A megtalálási valószínűség



$\rightarrow$ a helymérés átlaga: $\frac{1}{L}$

19

Háromdimenziós potenciál doboz



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

$$\psi(\vec{r}) \equiv 0 \quad \text{ha } \vec{r} \notin L^3$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi = E\psi \quad \text{ha } \vec{r} \in L^3$$

$$\Delta \psi = -\underbrace{\frac{2mE}{\hbar^2}}_{\equiv k^2} \psi$$

Szeparálás : $\psi(\vec{r}) \equiv X(x) \cdot Y(y) \cdot Z(z)$

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \psi = -k^2 \psi$$

$$X''YZ + XY''Z + XYZ'' = -k^2 XYZ \quad \left| \cdot \frac{1}{XYZ} \right.$$

$$\frac{X''}{X} + \frac{Y''}{Y} + \frac{Z''}{Z} = -k^2$$

$$\underbrace{\frac{X''}{X}}_{(x)} + \underbrace{\frac{Y''}{Y}}_{(y)} + \underbrace{\frac{Z''}{Z}}_{(z)} = -k^2$$

$$-k_x^2 - k_y^2 - k_z^2 = -k^2 \quad \rightarrow \quad E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m} (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)$$

$$\left. \begin{aligned} X'' &= -k_x^2 X \\ Y'' &= -k_y^2 Y \\ Z'' &= -k_z^2 Z \end{aligned} \right\} + \text{PEREMFELTÉTELEK} \rightarrow \left\{ \begin{aligned} k_x &= \frac{\pi}{L} n_x & (n_x = 1, 2, 3, \dots) \\ k_y &= \frac{\pi}{L} n_y & (n_y = 1, 2, 3, \dots) \\ k_z &= \frac{\pi}{L} n_z & (n_z = 1, 2, 3, \dots) \end{aligned} \right.$$

($\psi(\vec{r}) = 0$ a falnál)

Adódott tehát:

$$E = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2)$$

$$\psi(x, y, z) = \sqrt{\frac{8}{L^3}} \sin\left(\frac{n_x \pi}{L} x\right) \cdot \sin\left(\frac{n_y \pi}{L} y\right) \cdot \sin\left(\frac{n_z \pi}{L} z\right)$$

$$n_x, n_y, n_z = 1, 2, 3, \dots$$

u.n.: kvantum számok

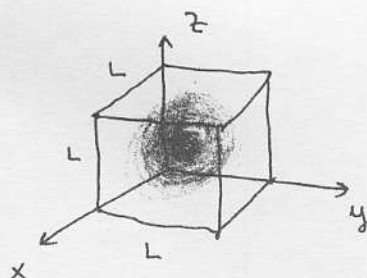
Degenerált (elfajult) állapotok

$$\left. \begin{aligned} \{n_x, n_y, n_z\} &\rightarrow \Psi(F) \\ &\rightarrow E = E_0 (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2) \end{aligned} \right\}$$

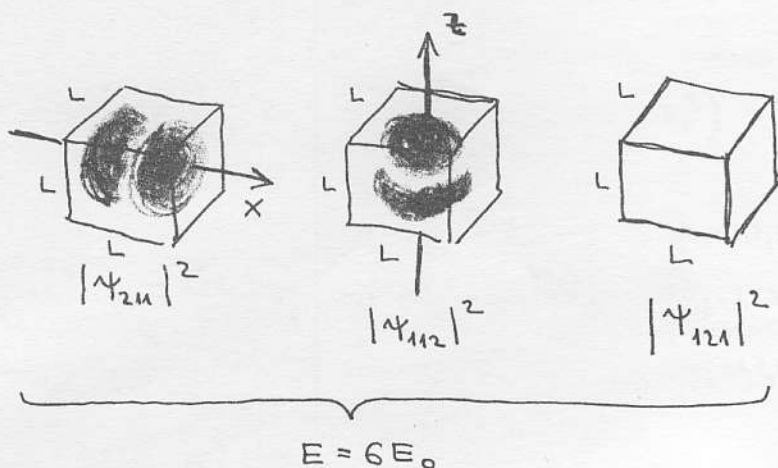
Ψ	n_x	n_y	n_z	E
Ψ_{111}	1	1	1	$3E_0$
Ψ_{211}	2	1	1	$6E_0$
Ψ_{121}	1	2	1	
Ψ_{112}	1	1	2	

→ Egy sajátértékhez több sajátfüggvény tartozik.

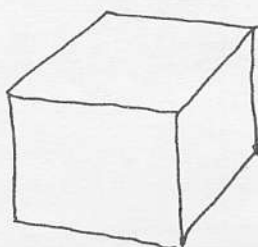
Degenerált állapotok és a "szimmetria"



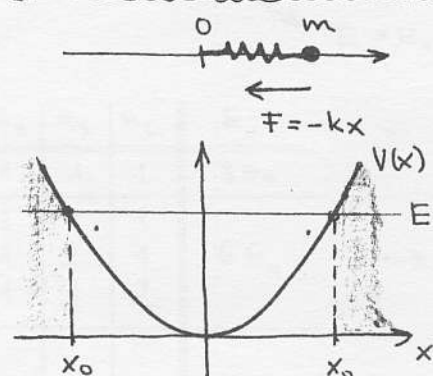
$$|\Psi_{111}|^2 \quad E = 3E_0$$



Feladat:



$$|\Psi_{221}|^2$$

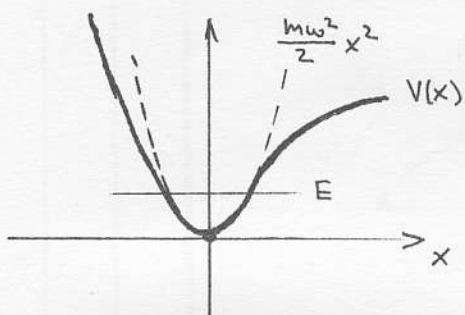
1.1.3.3. Harmonikus lineáris oszcillátorKlasszikus pontmechanikában

$$x(t) = x_0 \sin(\omega t + \sigma)$$

$$\omega \equiv \sqrt{\frac{k}{m}}$$

$$V(x) = \frac{k}{2} x^2 = \frac{m\omega^2}{2} x^2$$

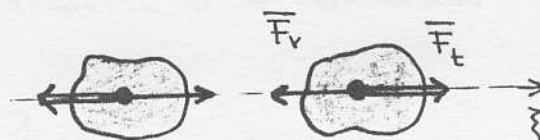
↓ általánosítás



koordináta rendszer választás

$$\begin{cases} \xi \rightarrow x \\ V(\xi) \rightarrow V(x) \end{cases}$$

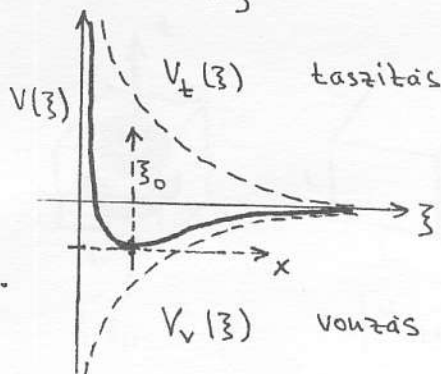
$$V(x) = \underbrace{V(0)}_{=0} + \underbrace{\left[\frac{dV}{dx}\right]_0}_{=0} x + \frac{1}{2} \underbrace{\left[\frac{d^2V}{dx^2}\right]_0}_{\equiv \frac{1}{2} m\omega^2} x^2 + \dots$$



"Vonzás és taszítás"

$$F_t = -\frac{d}{d\xi} V_t$$

$$F_v = -\frac{d}{d\xi} V_v$$

Kvantummechanikai tárgyalás

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

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \psi'' + \frac{m\omega^2 x^2}{2} \psi = E\psi$$

$$\rightarrow \left. \begin{array}{l} \psi(x) = ? \\ E = ? \end{array} \right\} \text{ sajátérték feladat}$$

Matematika:

$$\psi'' + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E - \frac{m\omega^2}{2} x^2 \right) \psi = 0$$

$$\psi'' + \left(\underbrace{\frac{2mE}{\hbar^2}}_{\equiv \eta} - \underbrace{\frac{m^2\omega^2}{\hbar^2} x^2}_{\equiv \alpha^2} \right) \psi$$

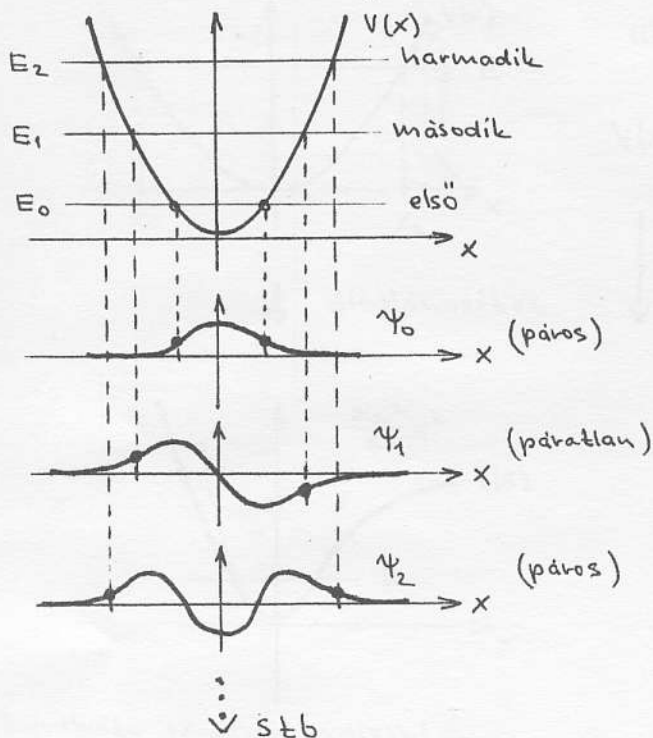
(jelölés bevezetésével)

22

$$\psi'' + (\eta - \alpha^2 x^2) \psi = 0$$

$\downarrow$ $\downarrow$
 $?$ $?$

A már ismertetett általános megközelítések alapján a kvalitatív eredmény felrajzolható:



$$V(x) = \frac{1}{2} m \omega^2 x^2$$

$$V(x) = V(-x)$$

$$\psi(x) = \psi(-x) \quad \text{páros}$$

$$\psi(x) = -\psi(-x) \quad \text{páratlan}$$

$$|\psi(x)|^2 = |\psi(-x)|^2$$

Legyen (próbalgatás!)

$$\psi_0 = A_0 e^{-\gamma x^2}$$

$$E_0 \rightarrow \eta_0$$

$$\psi_0'' + (\eta_0 - \alpha^2 x^2) \psi_0 = 0$$

$$\psi_0' = -2\gamma x \cdot \psi_0$$

$$\psi_0'' = -2\gamma \psi_0 - 2\gamma x \psi_0' = \dots$$

$$= (-2\gamma + 4\gamma^2 x^2) \psi_0$$

Tehát:

$$\underbrace{(-2\gamma + 4\gamma^2 x^2 + \eta_0 - \alpha^2 x^2)}_{\equiv 0} \underbrace{\psi_0}_{\neq 0} = 0 \quad (\forall x)$$

$$\underbrace{(\eta_0 - 2\gamma)}_{\equiv 0} + \underbrace{(4\gamma^2 - \alpha^2)}_{\equiv 0} x^2 = 0 \quad (\forall x) \quad (\text{KELL!})$$

$$\eta_0 = 2\gamma$$

$$2\gamma = \pm \alpha \rightarrow \psi_0 = A_0 e^{\pm \frac{\alpha}{2} x^2}$$

(matematikai megoldás) $\rightarrow$

23

Regularitási feltétel:

$$\lim_{x \rightarrow \pm\infty} \psi_0(x) = 0 \quad \rightarrow \quad \psi_0(x) = A_0 e^{-\frac{\alpha}{2} x^2}$$

$$A_0 \text{ meghatározása: } \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi_0(x)|^2 dx = 1 \quad A_0 = \dots\dots\dots$$

Az E_0 energiaszint (alapállapot energiája) meghatározása:

$$E_0 = \frac{\hbar^2}{2m} \gamma_0 = \frac{\hbar^2}{2m} \alpha = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{m\omega}{\hbar} = \frac{1}{2} \hbar \omega$$

Tehát:

$$\boxed{E_0 = \frac{1}{2} \hbar \omega}$$

$$\psi_0 = A_0 e^{-\frac{\alpha}{2} x^2} \quad \leftarrow \alpha = \frac{m\omega}{\hbar}$$

További próbálkozások

$$\psi_1(x) = (c_1 \cdot x) \psi_0 \quad (\text{páratlan})$$

$$\psi_2(x) = (c_0 + c_2 x^2) \psi_0 \quad (\text{páros})$$

$$\psi_3(x) = (c_1 x + c_3 x^3) \psi_0 \quad (\text{páratlan})$$

⋮

$$\psi_n(x) = \underbrace{\mathcal{H}_n(x)}_{n\text{-ed fokú polinom}} \cdot \psi_0$$

 n -ed fokú polinom (páros vagy páratlan)

$$\boxed{\mathcal{H}_n(x) \equiv \sum_{k=1}^n c_k x^k}$$

$$\{c_k\} \rightarrow \mathcal{H}_n(x)$$

↑
ezeket kell meghatározni

A Schrödinger egyenlet:

$$\psi_n'' + (\gamma_n - \alpha^2 x^2) \psi_n = 0 \quad \rightarrow \quad \psi_0'' + (\gamma_0 - \alpha^2 x^2) \psi_0 = 0$$

$$\psi_n = \mathcal{H}_n \cdot \psi_0$$

$$\psi_n'' = \mathcal{H}_n'' \cdot \psi_0 + 2 \mathcal{H}_n' \psi_0' + \mathcal{H}_n \cdot \psi_0''$$

$$\uparrow$$

$$-\alpha x \psi_0$$

matematika:

24

$$\mathcal{H}_n'' \psi_0 - 2\alpha x \mathcal{H}_n' \psi_0 + \underbrace{\mathcal{H}_n \cdot \psi_0'' + (\eta_n - \alpha^2 x^2) \mathcal{H}_n \psi_0}_{\mathcal{H}_n \cdot [\psi_0'' + (\eta_n - \alpha^2 x^2) \psi_0]} = 0$$

$$\mathcal{H}_n \cdot [\psi_0'' + (\eta_n - \alpha^2 x^2) \psi_0]$$

$$\underbrace{\psi_0'' + (\eta_0 - \alpha^2 x^2) \psi_0}_{\equiv \emptyset} + (\eta_n - \eta_0) \psi_0$$

azaz

$$\mathcal{H}_n'' - 2\alpha x \mathcal{H}_n' + (\eta_n - \eta_0) \mathcal{H}_n = 0$$

(HERMITE diff. egyenlet)

$$\mathcal{H}_n = \sum_k c_k x^k$$

$$\mathcal{H}_n' = \sum_k c_k \cdot k \cdot x^{k-1}$$

$$\mathcal{H}_n'' = \sum_k c_k \cdot k \cdot (k-1) \cdot x^{k-2}$$

$$\underbrace{\sum_{k=0} k(k-1) c_k \cdot x^{k-2}}_{\text{átindexelés } k \rightarrow k+2} - \sum_{k=0} 2\alpha \cdot k \cdot c_k x^k + \sum_{k=0} (\eta_n - \eta_0) c_k x^k = \emptyset$$

$$c_0 \cdot \emptyset + c_1 \cdot \emptyset + 2c_2 x^0 + \dots$$

átindexelés $k \rightarrow k+2$

$$\sum_{k=0} (k+2)(k+1) c_{k+2} x^k$$

Tehát

$$\sum_k \underbrace{\left[(k+2)(k+1) c_{k+2} - 2\alpha k c_k + c_k (\eta_n - \eta_0) \right]}_{\equiv \emptyset} x^k = 0$$

$$c_{k+2} = c_k \frac{2\alpha k - (\eta_n - \eta_0)}{(k+2)(k+1)}$$

u.n. rekurziós formula

↓
(HERMITE polinomok)

$$c_0 \rightarrow c_2, c_4, c_6, c_8, \dots$$

$$\rightarrow \mathcal{H}_n(x) \text{ páros}$$

$$c_1 \rightarrow c_3, c_5, c_7, \dots$$

$$\rightarrow \mathcal{H}_n(x) \text{ páratlan}$$

(peremfeltételekből)

↓
POLINOM kell hogy legyen!

$\eta_n(x)$ akkor lesz polinom, ha:

$$c_n \neq 0 \quad c_{n+2} = 0, \quad c_{n+4} = 0, \dots \text{stb}$$

$$c_{n+2} = c_n \frac{2\alpha n - (\eta_n - \eta_0)}{(n+2)(n+1)}$$

$$\underbrace{c_{n+2}}_{=0} = \underbrace{c_n}_{\neq 0} \underbrace{\frac{2\alpha n - (\eta_n - \eta_0)}{(n+2)(n+1)}}_{=0} \text{ kell, hogy legyen } (\eta_n \text{ még ismeretlen!})$$

$$2\alpha n - (\eta_n - \eta_0) = 0$$

$$\eta_n = \eta_0 + 2\alpha n$$

$\downarrow$
 $E_n = \text{meghatározható}$

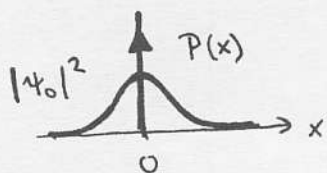
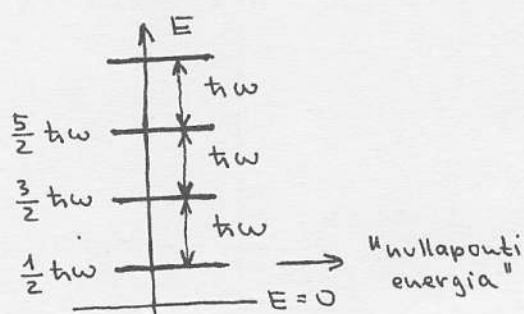
$$E_n = \frac{\hbar^2}{2m} \eta_n = \frac{\hbar^2}{2m} (\eta_0 + 2\alpha n) = E_0 + \frac{\hbar^2 \alpha}{m} n = E_0 + \hbar \omega \cdot n$$

$\uparrow$
 $\frac{1}{2} \hbar \omega$

$$E_n = \hbar \omega \left(n + \frac{1}{2} \right)$$

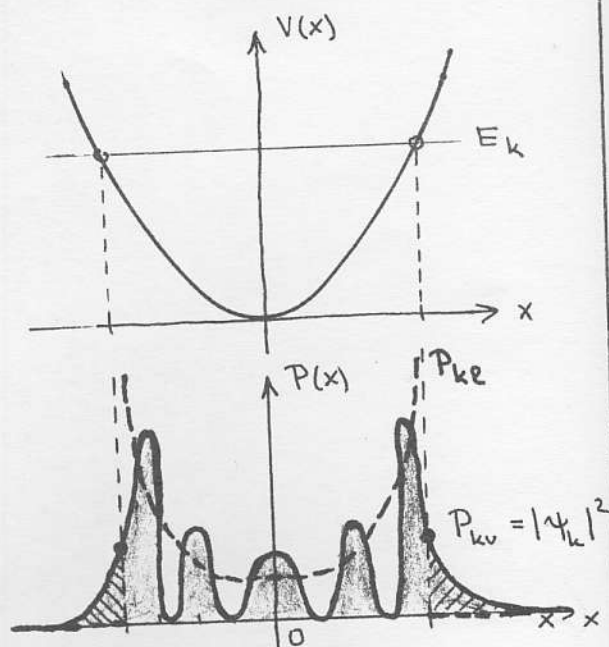
$$(n = 0, 1, 2, 3, \dots)$$

$$\psi_n = \eta_n(x) e^{-\frac{\alpha}{2} x^2}$$



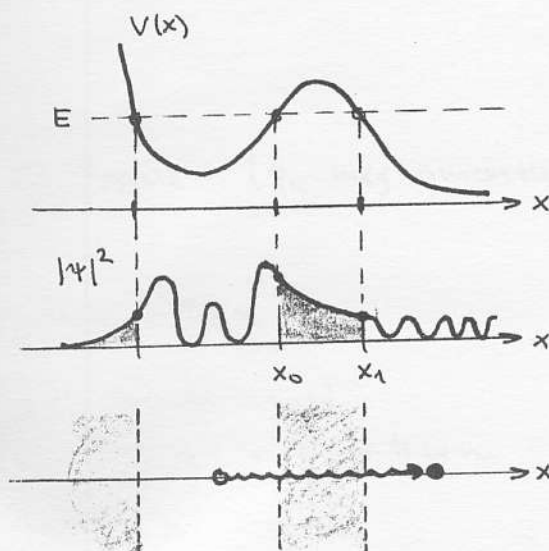
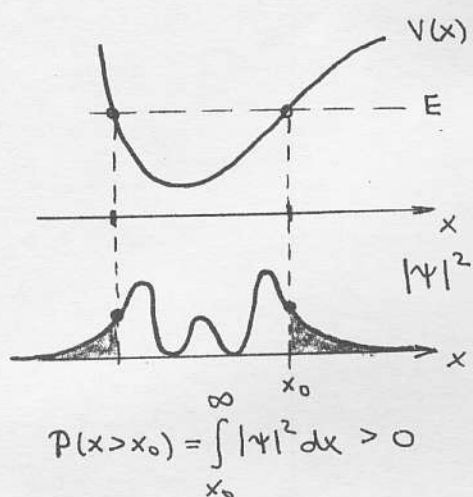
kvantum mechanika

klasszikus mechanika



$$P_{ke} = \frac{dl}{\dot{x}} = \frac{A}{\sqrt{E - V(x)}}$$

Kölcsönhatás $\hbar \omega$ energiaadagokban!

1.1.4. Nem kötött állapotok tárgyalása1.1.4.1. A valószínűségi áram sűrűség

A részecske véges valószínűséggel áthalad egy klasszikus mechanika szerint tiltott tartományon ($\equiv E_{kin} < 0$!).

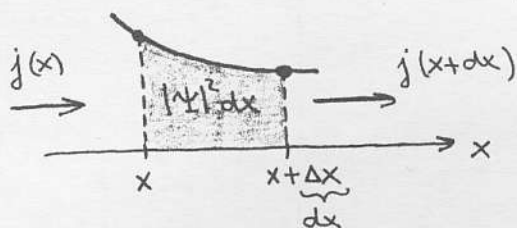
Az állapotfüggvény fizikai tartalma:

$$\psi(F) \rightarrow \psi(x) = \begin{cases} \text{kötött állapot esetén: } \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi|^2 dx = 1 \\ \text{nem kötött állapot esetén: } \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi|^2 dx = \infty (!) \end{cases}$$

↓
új fogalom: valószínűségi áram sűrűség ($\bar{j} \rightarrow j(x)$)

1 dimenziós esetben:

($\Delta x \rightarrow dx$)!



$$j(x+dx) - j(x) = - \frac{\partial}{\partial t} \left\{ |\psi|^2 dx \right\}$$

$$\frac{j(x+dx) - j(x)}{dx} = - \frac{\partial}{\partial t} |\psi|^2$$

$$\equiv \frac{d}{dx} j$$

"kontinuitási egyenlet"

↓
"mérleg egyenlet"

Mivel a $\Psi(x,t)$ -t meghatározó egyenlet az időtől függő Schrödinger egyenlet, ezért ebből kell kiindulnunk.



$$\frac{d}{dx} j = -\frac{\partial}{\partial t} |\psi|^2$$

Est well definiat !

$$\hat{H} \psi = -\frac{15}{2} \psi$$

$$(\hat{H} \psi)^* = + \frac{\hbar}{j} \dot{\psi}^*$$

$$= -\frac{j}{\hbar} \cdot \frac{\hbar^2}{2m} \left\{ \psi^* \psi'' - \psi \psi^{*''} \right\} = + \frac{\hbar}{2mj} \frac{d}{dx} (\psi^* \psi' - \psi \psi^{*'}) =$$

$$= \frac{d}{dx} \left\{ \frac{\hbar}{2m_j} (\psi^* \psi' - \psi \psi'^*) \right\} \equiv \frac{d}{dx} j(x)$$

$$f(x) \equiv \frac{\hbar}{2m_j} (\psi^* \psi' - \psi \psi'^*)$$
$$\psi(x,t) = \psi(x) e^{-j \frac{E}{\hbar} t}$$

$$\rightarrow j(x) = \frac{\hbar}{2m_j} (\psi^* \psi' - \psi \psi'^*)$$

A 3D coordinate system with axes x , y , and z . A vector $\vec{r}$ originates from the origin. Its projections onto the axes are represented by vectors $\vec{r}_x$, $\vec{r}_y$, and $\vec{r}_z$. The unit vectors $\vec{i}$, $\vec{j}$, and $\vec{k}$ are shown along the x , y , and z axes respectively. Dashed lines indicate the orthogonal projections of $\vec{r}$ onto the axes.

$$\frac{\partial}{\partial x} \rightarrow \partial_x$$

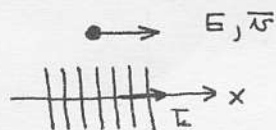
$$\frac{\partial}{\partial y} \rightarrow f_y$$

$$\frac{\partial}{\partial z} \rightarrow \delta_z$$

$$\bar{f} = \frac{\hbar}{2m_j} (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*)$$

$$\nabla \equiv \text{grad} \equiv \frac{\partial}{\partial x} \hat{i} + \frac{\partial}{\partial y} \hat{j} + \frac{\partial}{\partial z} \hat{k}$$

Példa: Szabadon mozgó részecske:



$$\Psi(x,t) = \underbrace{A \cdot e^{jkx}}_{\Psi(x)} \cdot e^{-j\frac{E}{\hbar}t}$$

$$\Psi(x) = A e^{jkx}$$

$$\Psi^*(x) = A^* e^{-jkx}$$

$$\Psi'(x) = jk \cdot \Psi$$

$$\Psi^{*'}(x) = -jk \cdot \Psi^*$$

$$j = \frac{\hbar}{2mij} \left\{ jk |A|^2 + jk |A|^2 \right\} = \frac{\hbar k}{m} |A|^2 =$$

$$= \frac{p}{m} |A|^2 = v \cdot |A|^2 = v \cdot |\Psi|^2$$

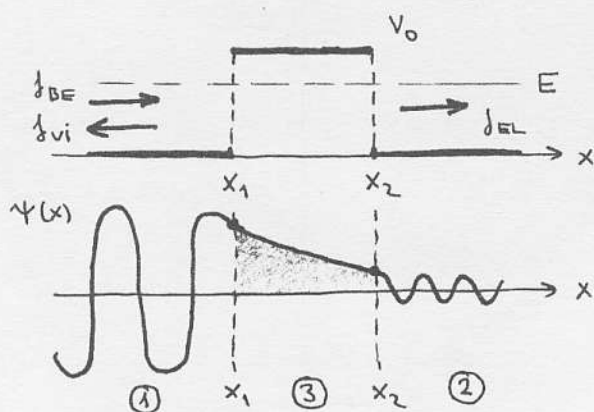
↓
általában:

$$\bar{j} = \frac{p}{m} |\Psi|^2$$

analógia: áramsűrűség a klasszikus fizikában.

1.1.4.2. Áthaladás potenciálgáton (közelítő számítás)

(GAMOW formula)



A részecske átjutásának a valószínűsége
(≡transzmisszió)

$$T \equiv \frac{j_{EL}}{j_{BE}}$$

$$\left. \begin{aligned} j_{BE} &= v_1 \cdot |\Psi_1|^2 \\ j_{EL} &= v_2 \cdot |\Psi_2|^2 \end{aligned} \right\} v_1 = v_2$$

$$T = \frac{|\Psi_2(x_2)|^2}{|\Psi_1(x_1)|^2}$$

$$\Psi_1(x_1) = \Psi_3(x_1)$$

$$\Psi_2(x_2) = \Psi_3(x_2)$$

$$T \approx \left| \frac{\Psi_3(x_2)}{\Psi_3(x_1)} \right|^2$$

$$\Psi_3'' = -\frac{2m}{\hbar^2} (E - V_0) \cdot \Psi_3 \rightarrow \Psi_3 = A e^{\pm \alpha x}$$

$$\underbrace{\frac{2m}{\hbar^2} (E - V_0)}_{\equiv \alpha^2}$$

29

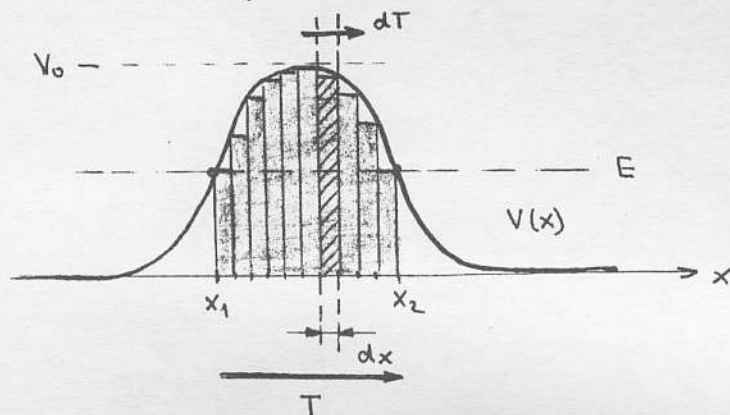
Azaz

$$T \approx \left| \frac{\psi_3(x_1)}{\psi_3(x_2)} \right|^2 = \left| e^{\pm \alpha (x_2 - x_1)} \right|^2 = e^{\pm 2\alpha (x_2 - x_1)} \leq 1$$

(T definíciója miatt!)

$$T \approx e^{-2\alpha (x_2 - x_1)} = e^{-2 \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - E)} \cdot (x_2 - x_1)}$$

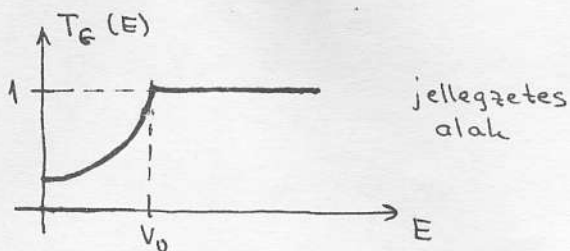
Tetszőleges alakú potenciálját:



GAMOW közelítés:

$$T \approx T_G \equiv \prod dT$$

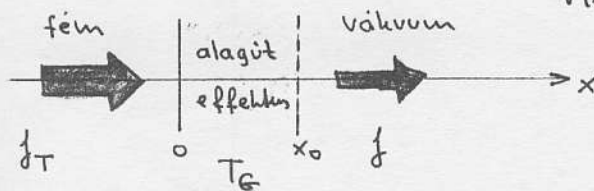
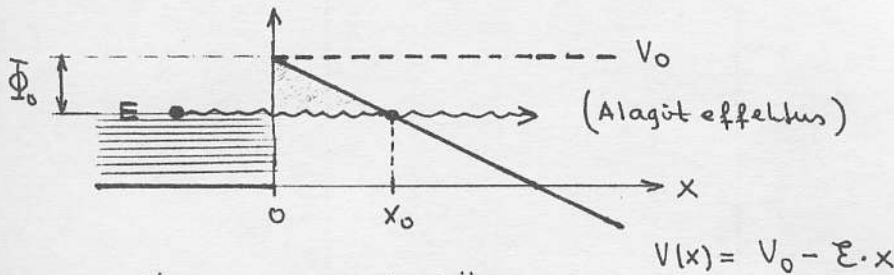
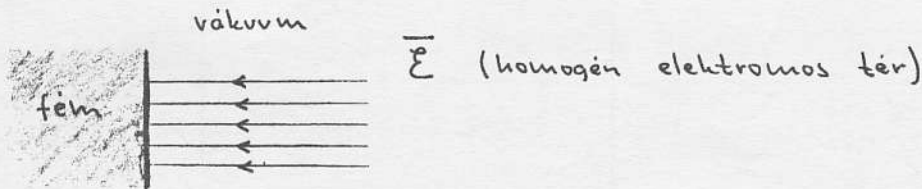
$$T_G = \prod e^{-2 \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} [V(x) - E]} \cdot dx} = e^{-2 \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}} \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{V(x) - E} dx}$$



30

Példa: Hideg-emisszió (tér-emisszió)

(Elektronok kilépése félekből elektrosztatikus tér hatására)



$$j = j_T \cdot T_G$$

$j = j_T$ ($\equiv$ telítési áram, ha $T_G = 1$)

$$T_G = e^{-2 \int_0^{x_0} \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (V(x) - E)} dx}$$

ahol $V(x) - E = (V_0 - E \cdot x) - E = (V_0 - E \cdot x) - (V_0 - \Phi_0) = \Phi_0 - E \cdot x$

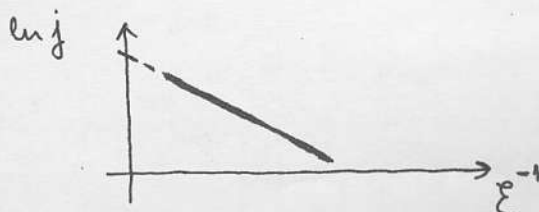
mivel $V(x_0) - E = 0 \rightarrow \Phi_0 - E \cdot x_0 = 0 \rightarrow \Phi_0 = E \cdot x_0$

$$\int_0^{x_0} \sqrt{V(x) - E} dx = \sqrt{E} \cdot \int_0^{x_0} \sqrt{x_0 - x} dx = \sqrt{E} \left[-\frac{2}{3} (x_0 - x)^{3/2} \right]_0^{x_0} = \frac{2}{3} \sqrt{E} x_0^{3/2} = \frac{2}{3} \frac{1}{E} \Phi_0^{3/2}$$

$$j = j_T \cdot e^{-\text{áll.} \cdot \frac{\Phi_0^{3/2}}{E}}$$

(közelítő összefüggés)

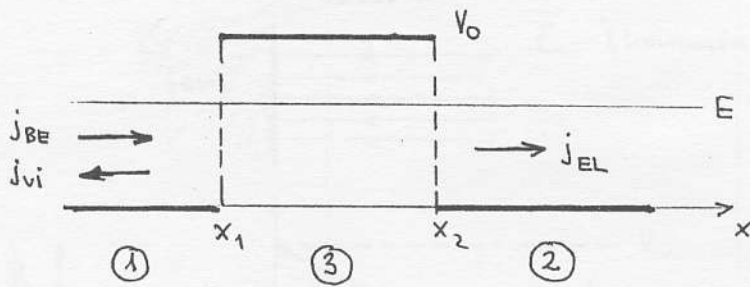
FOWLER-NORDHEIM formula



31

1.1.4.3. Áthaladás potenciálgáton, potenciálvölgyön...

Négyszögletes potenciálgát : A számolás elvégezhető



(stationárius állapot)

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

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

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

$$\psi_1(x) = A_1 e^{jkx} + B_1 e^{-jkx}$$

$$\psi_3(x) = A_3 e^{\alpha x} + B_3 e^{-\alpha x}$$

$$\psi_2(x) = A_2 e^{jkx}$$

$$\left\{ \begin{array}{l} k \equiv \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \quad (V=0) \\ \alpha \equiv \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E)} \\ L \equiv x_2 - x_1 \end{array} \right.$$

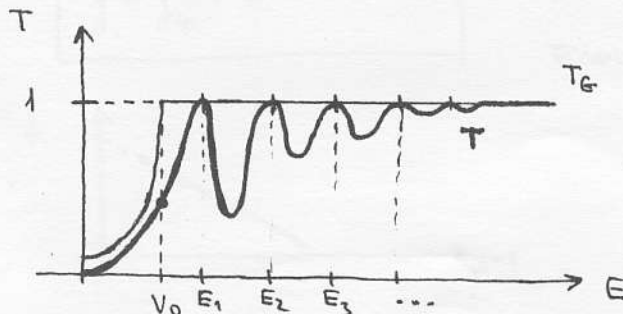
Regularitás : $\psi(x)$ folytonosan deriválható (x_1 és x_2 -ben is !)

$$\left. \begin{array}{l} (*) \quad \psi_1(x_1) = \psi_3(x_1) \\ \psi_1'(x_1) = \psi_3'(x_1) \\ (*) \quad \psi_2(x_2) = \psi_3(x_2) \\ \psi_2'(x_2) = \psi_3'(x_2) \end{array} \right\} \rightarrow T = \frac{j_{EL}}{j_{BE}} = \frac{|A_2|^2}{|A_1|^2} = \dots$$

$$T = \frac{1}{1 + \frac{V_0^2}{4E(V_0 - E)} \sinh^2 \sqrt{\frac{2mL^2}{\hbar^2}(V_0 - E)}}$$

$$\downarrow$$

$$\frac{1}{E - V_0} \sin^2 \sqrt{\frac{2mL^2}{\hbar^2}(E - V_0)}$$

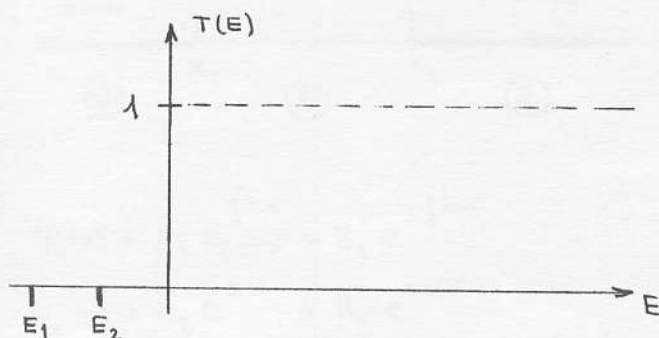
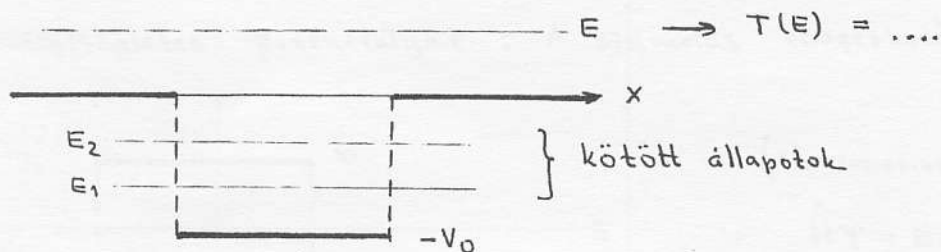
→ GAMOW ($E < V_0$)
(Feladat)Ha ($E > V_0$)

$$T(E_i) = 1$$

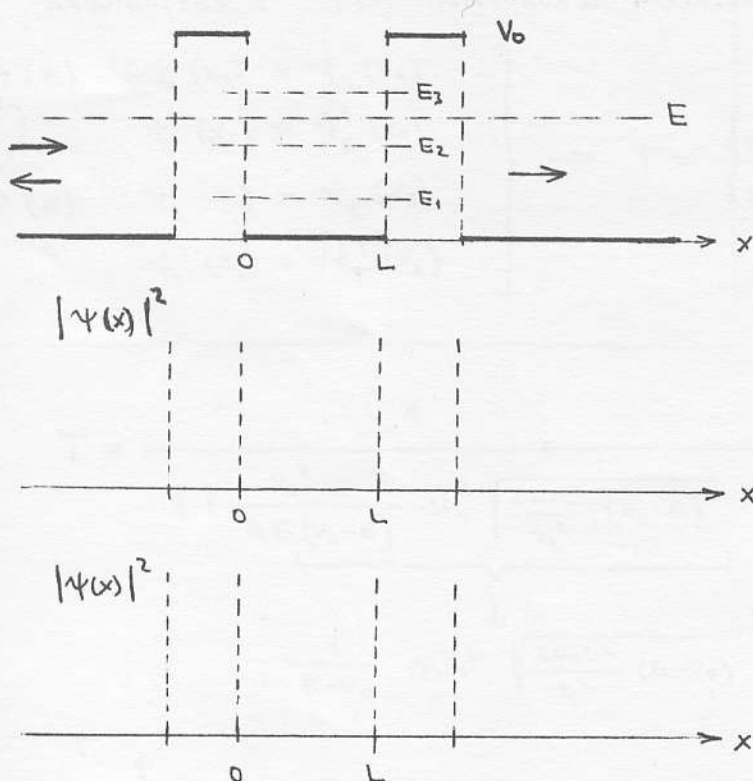
(Feladat)

32

Négyszögletes potenciálvölgy:



Rezonáns alagút effektus:



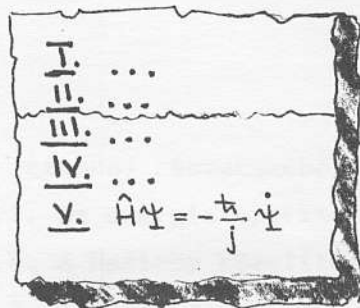
$E_1, E_2, E_3, \dots$
(u.n. virtuális energiaszintek)

$$\frac{1}{L} \int_0^L |\psi|^2 dx \gg (\text{kivül})$$

(0,L) tartományban a részecske "hosszú" ideig tartózkodik

$$E \approx E_i$$

1.2. A kvantummechanika axiomatikus felépítése



Matematikai modell

Fizikai törvények

POSTULÁTUMOK

Axiómák

1.2.1. A kvantummechanika matematikai eszközei

$$\hat{H}\psi = -\frac{\hbar}{j}\dot{\psi} \quad \rightarrow \quad \psi(r,t) = \psi(r) e^{-j\frac{E}{\hbar}t} \quad (\text{stacionárius állapot})$$

↑
V(r) konzervatív rendszer

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

Az energia számítása

ÁLTALÁNOSÍTÁS

$$\hat{F}\psi = F\psi$$

III. Axióma

MÉRHETŐ, tehát valós kell, hogy legyen.

dinamikai változó : $\mathcal{F}$?
 operátor : $\hat{F}$
 mérhető érték : F

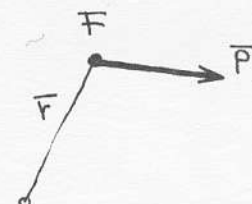
A klasszikus mechanikában

$$\left. \begin{array}{l} \bar{p}(p_x, p_y, p_z) \\ \bar{r}(x, y, z) \end{array} \right\} \text{ alap mennyiségek}$$

$$w_k = \frac{p^2}{2m} = \frac{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}{2m}$$

$$V = V(\bar{r}) = V(x, y, z)$$

$$F = F(x, y, z, p_x, p_y, p_z) \equiv F(\bar{r}, \bar{p})$$



származtatott mennyiségek

A kvantummechanikában

$$\left. \begin{array}{l} \hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{p}_z \\ \hat{x}, \hat{y}, \hat{z} \end{array} \right\} \text{ "alapvető operátorok"}$$

$$F \rightarrow \hat{F} = F(\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}, \hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{p}_z)$$

pe: ↓

Legyen ez a definíciója az $\hat{F}$ operátornak

Hamilton op: $\hat{H} = \frac{1}{2m} (\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2) + V(\hat{x}, \hat{y}, \hat{z})$

azaz

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} (\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2) + V(\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}) =$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + V(x, y, z).$$

Schrödinger:

$$\begin{array}{ll} \hat{p}_x = \frac{\hbar}{j} \frac{\partial}{\partial x} & \hat{x} = x. \\ \hat{p}_y = \frac{\hbar}{j} \frac{\partial}{\partial y} & \hat{y} = y. \\ \hat{p}_z = \frac{\hbar}{j} \frac{\partial}{\partial z} & \hat{z} = z. \end{array}$$

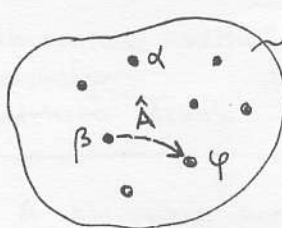
→ ÁLTALÁNOSÍTHATÓ

II. Axióma

$$\hat{F} = F(\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}, \hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{p}_z)$$

MATEMATIKAI ÖSSZEFoglaló:

Függvényter és operátorok:

 $\mathcal{H}$ (jól definiált függvények halmaza) → "Absztrakt tér"operátor:

$$\varphi = \hat{A} \beta \quad (\text{leképezés } \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H})$$

lineáris transzformáció:

$$\hat{A}(c_1 \beta_1 + c_2 \beta_2) = c_1 \hat{A} \beta_1 + c_2 \hat{A} \beta_2$$

↑
komplex számokOperátor algebra:

$$(\hat{A} + \hat{B}) \varphi = \hat{A} \varphi + \hat{B} \varphi$$

(operátorok ÖSSZEADÁSA)

$$(\hat{A} \cdot \hat{B}) \varphi = \hat{A} (\hat{B} \varphi)$$

(operátorok ÖSSZESZORZÁSA)A $\mathcal{H}$ halmaz elemeinek tulajdonságai (csak az általunk használtak)

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi|^2 dV = 1 \quad \xrightarrow{\text{általánosítás}} \quad (\alpha, \beta) = \text{komplex szám (SKALÁR SZORZAT)}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \alpha^*(F) \beta(F) dV \equiv \langle \alpha | \beta \rangle \quad (\text{jelölés})$$

$$\left. \begin{array}{l} (x, y, z) \\ (r, \vartheta, \varphi) \end{array} \right\} \text{ tetszőleges koordináta-rendszer} \\ \text{választható.}$$

35

$$\int_{\infty} \alpha^*(F) \alpha(F) dV = \int_{\infty} |\alpha(F)|^2 dV \equiv \langle \alpha | \alpha \rangle = 1 \quad (\text{NORMA})$$

ORTOGONALITÁS : $\langle \alpha | \beta \rangle = 0$

Az ADJUNGÁLT operátor : $\hat{A} \rightarrow \hat{A}^+$

$$\langle \beta | \hat{A} \gamma \rangle = \langle \hat{A}^+ \beta | \gamma \rangle \quad (\forall \beta, \gamma \in \mathcal{H})$$

részletesen kiírva (β, γ függvények esetén)

$$\int_{\infty} \dots$$

Az ÖNADJUNGÁLT operátor : $\hat{A}^+ = \hat{A}$

$$\text{azaz} \quad \langle \beta | \hat{A} \gamma \rangle = \langle \hat{A} \beta | \gamma \rangle \equiv \langle \beta | \hat{A} | \gamma \rangle \quad (\text{jelölés !})$$

részletesen kiírva (β, γ függvények esetén)

$$\int_{\infty} \dots$$

Az ÖNADJUNGÁLT operátorokra vonatkozó tételek:

1. tétel : Egy önadjungált operátor sajátértéke valós

Bizonyítás : $\hat{A} \alpha = A \alpha$
 $(\hat{A} \alpha)^* = A^* \alpha^*$

egyenlő, mert $\hat{A}^+ = \hat{A}$ $\left\{ \begin{array}{l} \langle \alpha | \hat{A} \alpha \rangle = A \langle \alpha | \alpha \rangle \\ \langle A \alpha | \alpha \rangle = A^* \langle \alpha | \alpha \rangle \end{array} \right.$

$$\downarrow \quad \underline{A^* = A} \quad \text{azaz valós}$$

2. tétel : Egy önadjungált operátor különböző sajátértékeihez tartozó sajátfüggvényei ortogonálisak egymásra

Bizonyítás : $\hat{A} \alpha_i = A_i \alpha_i$
 $\hat{A} \alpha_j = A_j \alpha_j \rightarrow (\hat{A} \alpha_j)^* = A_j^* \alpha_j^*$

egyenlő, mert $\hat{A}^+ = \hat{A}$ $\left\{ \begin{array}{l} \langle \alpha_j | \hat{A} \alpha_i \rangle = A_i \langle \alpha_j | \alpha_i \rangle \\ \langle \hat{A} \alpha_j | \alpha_i \rangle = A_j \langle \alpha_j | \alpha_i \rangle \end{array} \right.$

$$\underbrace{(A_i - A_j)}_{\neq 0} \underbrace{\langle \alpha_j | \alpha_i \rangle}_{= 0} = 0 \quad \text{helly, hogy legyen} \\ (A_i \neq A_j)$$

36

ORTONORMÁLT (függvény) rendszer

$$\{\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \dots, \alpha_i, \dots\}$$

$$\langle \alpha_i | \alpha_j \rangle = \delta_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{ha } i=j \\ 0 & \text{ha } i \neq j \end{cases}$$

lineárisan függetlenek

A $\mathcal{H}$ (függvény) tér egy BÁZISÁT alkotják (TELJES tér)

$$\forall \varphi \in \mathcal{H}$$

$$\varphi = \sum_{i=1}^{\infty} a_i \alpha_i$$

(a_i = komplex szám)A tér DIMENZIÓJA a bázisfüggvények száma

$$\mathcal{B} : \{\alpha_i\}_{i=1}^{\infty} \leftarrow (!)$$

A $\mathcal{H}$ egy "végtelen dimenziójú" Euklideszi tér $\equiv$ HILBERT tér
(!) VIZSGÁZAT

Következmények:

$$\langle \varphi | \varphi \rangle = \left\langle \sum_i a_i \alpha_i \left| \sum_j a_j \alpha_j \right. \right\rangle = \sum_i \sum_j a_i^* a_j \underbrace{\langle \alpha_i | \alpha_j \rangle}_{\delta_{ij}} = \sum_i |a_i|^2 = 1$$



$$\sum_{i=1}^{\infty} |a_i|^2 = 1$$

Az a_i skálár komponensek meghatározása:

$$\langle \alpha_i | \varphi \rangle = \left\langle \alpha_i \left| \sum_j a_j \alpha_j \right. \right\rangle = \sum_j a_j \underbrace{\langle \alpha_i | \alpha_j \rangle}_{\delta_{ij}} = a_i \rightarrow \boxed{a_i = \langle \alpha_i | \varphi \rangle}$$

A $\mathcal{H}$ (függvény) tér bázisa "bármely" ($\hat{A}, \hat{B}, \hat{C}, \dots$) operátor sajátfüggvény rendszere lehet:

$$\hat{A} \alpha_i = A_i \alpha_i \rightarrow \mathcal{B} : \{\alpha_i\}_1^{\infty} \rightarrow \varphi = \sum_i a_i \alpha_i \rightarrow a_i = \langle \alpha_i | \varphi \rangle$$

$$\hat{B} \beta_i = B_i \beta_i \rightarrow \mathcal{B} : \{\beta_i\}_1^{\infty} \rightarrow \varphi = \sum_i b_i \beta_i \rightarrow b_i = \langle \beta_i | \varphi \rangle$$

$$\hat{C} \gamma_i = C_i \gamma_i \rightarrow \text{stb.}$$

Bázistranszformációk $\rightarrow$ Matrixok

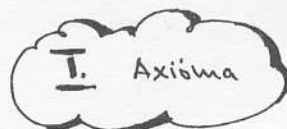
FIZIKA:

$$\text{Elektron állapot} \rightarrow \varphi \in \mathcal{H}$$



$$\text{"szuperpozíció elve"} : \varphi = c_1 \varphi_1 + c_2 \varphi_2$$

↑ ↑ ↑
lehetséges állapotok



1.2.2. Operátorok felcserélési törvényei (cserelődiciók)

$$\hat{x} = x.$$

$$\hat{p}_x = \frac{\hbar}{j} \frac{\partial}{\partial x}$$

$$\hat{p}_x (\hat{x} \psi) \neq \hat{x} (\hat{p}_x \psi) \rightarrow \underbrace{[\hat{p}_x \hat{x} - \hat{x} \hat{p}_x]}_{[\hat{p}_x, \hat{x}] \text{ jelölés}} \psi = ?$$

Általában:

$$[\hat{A}, \hat{B}] \equiv \hat{A} \cdot \hat{B} - \hat{B} \cdot \hat{A}$$

(kommutátor)

$$\underbrace{[\hat{p}_x, \hat{x}]}_{\psi + x \frac{\partial \psi}{\partial x}} \psi = \frac{\hbar}{j} \left(\underbrace{\frac{\partial}{\partial x} x \psi}_{\psi + x \frac{\partial \psi}{\partial x}} - x \frac{\partial \psi}{\partial x} \right) = \frac{\hbar}{j} \cdot \psi$$

Axióma II.

$$[\hat{p}_x, \hat{x}] = \frac{\hbar}{j}$$

$$[\hat{p}_y, \hat{y}] = \frac{\hbar}{j}$$

$$[\hat{p}_z, \hat{z}] = \frac{\hbar}{j}$$

az operátorok nem cserélhetők fel

↓
FIZIKAI TARTALMA → MÉRÉS

$$[\hat{p}_x, \hat{p}_y] = 0$$

$$[\hat{p}_y, \hat{p}_z] = 0$$

$$[\hat{p}_z, \hat{p}_x] = 0$$

↑
az operátorok felcserélhetők

$$[\hat{x}, \hat{y}] = 0$$

$$[\hat{y}, \hat{z}] = 0$$

$$[\hat{z}, \hat{x}] = 0$$

$$[\hat{p}_x, \hat{y}] = 0$$

∴ stb

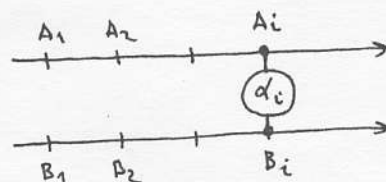
38

A felcserélési törvények (csererelációk) és a sajátfüggvények (nem degenerált esetben) kapcsolata

$$[\hat{A}, \hat{B}] = 0$$

$$\hat{A} \alpha_i = A_i \alpha_i$$

$$\hat{B} \beta_i = B_i \beta_i$$



$$\hat{B}(\hat{A} \alpha_i) = A_i \hat{B} \alpha_i$$

$$\hat{A}(\hat{B} \alpha_i) = A_i (\hat{B} \alpha_i)$$

$$C \cdot \alpha_i$$

$$C \cdot \alpha_i$$

(kell, hogy legyen)

$$\hat{B} \alpha_i = C \alpha_i \leftrightarrow \hat{B} \beta_i = B_i \beta_i$$

Általában tehát

$$\{\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_i, \dots\} \equiv \{\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_i, \dots\}$$

"azonos" sajátfüggvény rendszerek

Az általában előforduló esetek:

Pe: $[\hat{p}_x, \hat{y}] = 0 \xrightarrow{\text{ált.}} [\hat{A}(x), \hat{B}(y)] = 0$

$$\hat{A} \alpha_i(x) = A_i \alpha_i(x)$$

$$\hat{B} \beta_i(y) = B_i \beta_i(y)$$

$$\varphi_i(x, y) \equiv \alpha_i(x) \cdot \beta_i(y)$$

$$\hat{A} \varphi_i = A_i \varphi_i$$

$$\hat{B} \varphi_i = B_i \varphi_i$$

azonos sajátfüggvények

Pe: $[\hat{p}_x, \hat{w}_k(x)] = 0 \xrightarrow{\text{ált.}} [\hat{A}, f(\hat{A})] = 0$

$$\uparrow$$

$$\frac{1}{2m} \hat{p}_x^2$$

$$\hat{A} \alpha_i = A_i \alpha_i \quad | \cdot \hat{A}$$

$$\hat{A} \hat{A} \alpha_i = A_i \hat{A} \alpha_i$$

$$\hat{A}^2 \alpha_i = A_i^2 \alpha_i \quad | \cdot \hat{A}$$

$\vdots$

$$\hat{A}^n \alpha_i = A_i^n \alpha_i$$

$\vdots$

$$\sum_n a_n \hat{A}^n \alpha_i = \sum_n a_n \cdot A_i^n \cdot \alpha_i$$

$$\underline{f(\hat{A}) \alpha_i = f(A_i) \cdot \alpha_i}$$

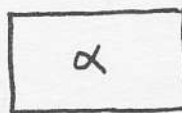
$$f(\hat{A}) \equiv \sum_n a_n \cdot \hat{A}^n$$

1.2.3. A kvantummechanikai méréselmélet alapjai.

$\Psi(F,t)$ fizikai jelentése $\rightarrow |\Psi|^2 dV$
 VALÓSZÍNŰSÉG $\rightarrow \bar{j} = \frac{\hbar}{2mi} (\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*)$

MÉRÉS

jelölés:

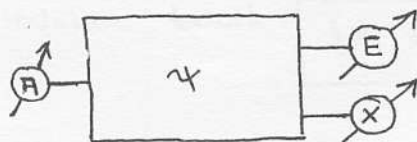


"RENDSZER"

pl: egy elektron
amelyik α
állapotban van

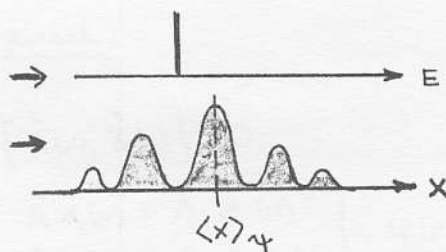
"MÉRŐHŰSZER"

(adott
dinamikai
változó
mérésére
szolgáló
berendezés)



III. Axióma

$$\hat{H}\Psi = E\Psi \rightarrow$$

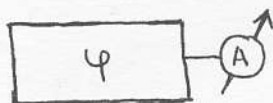
BORN $|\Psi|^2 dx$ 

$$\left\{ \begin{aligned} \langle x \rangle_\Psi &= \int_{-\infty}^{+\infty} x |\Psi|^2 dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \hat{x} \Psi^* \Psi dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* \hat{x} \Psi dx \\ \langle E \rangle_\Psi &= E \rightarrow \hat{H}\Psi = E\Psi \rightarrow \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* \hat{H} \Psi dx = E \underbrace{\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* \Psi dx}_1 \end{aligned} \right.$$

$$\downarrow \text{azaz}$$

$$\langle E \rangle_\Psi = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* \hat{H} \Psi dx = \langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle$$

↓ ÁLTALÁNOSÍTÁS



$$\langle A \rangle_\Psi = \langle \Psi | \hat{A} | \Psi \rangle$$

IV. Axióma

- I. $\{\text{állapotok}\} \rightarrow \{\alpha, \beta, \gamma, \dots, \varphi, \dots\} \equiv \mathcal{H}$
- II. $\{\text{dinamikai változók}\} \rightarrow \{\hat{A}, \hat{B}, \dots, \hat{H}, \dots\}$
 $[\hat{p}_x, \hat{x}] = \frac{\hbar}{i}, \dots$
 $\hat{F} = F(\hat{p}_x, \hat{x}, \dots)$
- III. $\hat{F} \varphi_i = F_i \varphi_i \quad (i=1,2,3,\dots)$
- IV. $\langle F \rangle_\gamma = \langle \gamma | \hat{F} | \gamma \rangle \quad \gamma \in \mathcal{H}$
- V. $\hat{H} \Psi = -\frac{\hbar}{i} \dot{\Psi}$

Részletezve:

I. axióma: Minden lehetséges (elektron) állapothoz a $\mathcal{H}$ Hilbert tér egy elemét rendeljük.

II. axióma: Minden dinamikai változóhoz egy önadjungált operátort rendelünk. Az alapváltozókhoz (hely és impulzus komponensek, ...) rendelt operátorok ki kell, hogy elégítsék az u.u. Heisenberg-féle cserovelációkat.

III. axióma: Bármely dinamikai változóhoz rendelt operátor sajátértékei a dinamikai változó MÉRHETŐ értékeit adják, azaz

$$\hat{F} \varphi_i = F_i \varphi_i \rightarrow \{F_1, F_2, F_3, \dots, F_i, \dots\}$$

IV. axióma: Egy dinamikai változó mérésekor a mérés VÁRHATÓ ÉRTÉKE [tetszőleges (elektron) állapotban történő mérés esetén] az alábbi skalár szorzattal határozható meg:

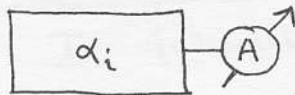
$$\langle \hat{F} \rangle_\gamma = \langle \gamma | \hat{F} | \gamma \rangle$$

V. axióma: Az időtől függő (nem stacionárius) állapotokat az időtől függő SCHRÖDINGER egyenlet határozza meg:

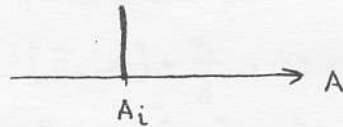
$$\hat{H} \Psi = -\frac{\hbar}{i} \dot{\Psi}$$

MÉRÉS a kvantummechanikában:

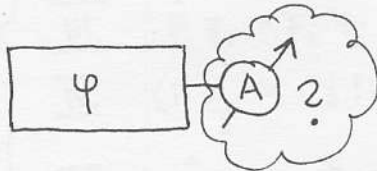
- mérés "SAJÁT ÁLLAPOTBAN":



$$\hat{A}\alpha_i = A_i\alpha_i \quad (\text{III. Axióma})$$



- mérés (nem saját állapotban)



(III. Axióma)

$$\text{IV. Axióma: } \langle A \rangle_\psi = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle$$

$$\text{III. Axióma: } \hat{A}\alpha_i = A_i\alpha_i \quad (i=1,2,3,\dots) \quad \psi \neq \alpha_i$$

$$\mathcal{B}: \{\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \dots, \alpha_i, \dots\}$$

$$\text{I. Axióma: } \psi = \sum_i a_i \alpha_i \quad \rightarrow \quad \langle \psi | \psi \rangle = \sum_i |a_i|^2 = 1$$

$$\begin{aligned} \text{IV. Axióma: } \langle A \rangle_\psi &= \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle = \left\langle \sum_i a_i \alpha_i \left| \hat{A} \right| \sum_j a_j \alpha_j \right\rangle = \\ &= \sum_i \sum_j a_i^* a_j \underbrace{\langle \alpha_i | \hat{A} | \alpha_j \rangle}_{A_j \delta_{ij}} = \\ &= \sum_i \sum_j a_i^* a_j A_j \underbrace{\langle \alpha_i | \alpha_j \rangle}_{\delta_{ij}} = \sum_{i=1}^{\infty} |a_i|^2 \cdot A_i \end{aligned}$$

azaz

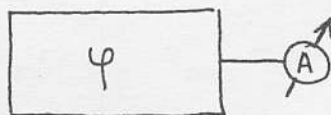
$$\boxed{\begin{aligned} \langle A \rangle_\psi &= \sum_{i=1}^{\infty} |a_i|^2 \cdot A_i \\ \sum_{i=1}^{\infty} |a_i|^2 &= 1 \end{aligned}}$$

↓
ÉRTELMEZÉS

VALÓSZÍNŰSÉG-
SZÁMÍTÁS

Fogalmak:

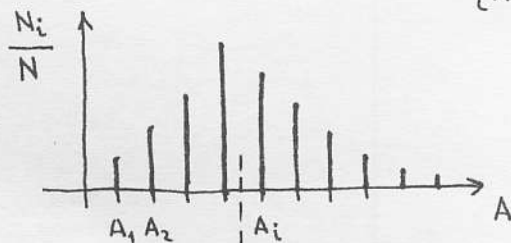
- elemi mérés
- mérés



MÉRÉS $\equiv$ N db elemi mérés



$\{A_1, A_2, A_3, \dots, A_i, \dots\}$
(III. Axióma)

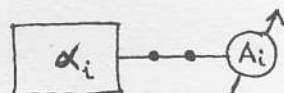
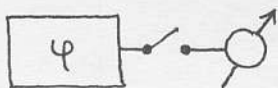


$$\langle A \rangle_\psi = \sum_{i=1}^{\infty} \frac{N_i}{N} A_i \rightarrow \sum_{i=1}^{\infty} |a_i|^2 A_i$$

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{N_i}{N} = |a_i|^2 = \mathcal{P}(A_i)$$

egy elemi mérés előtt

→ egy elemi mérés után



(III. Axióma)

Tehát

$$|a_i|^2 = |\langle \psi | \alpha_i \rangle|^2$$

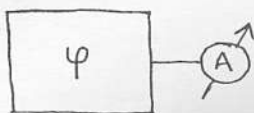


$$\boxed{\mathcal{P}(\psi \rightarrow \alpha_i) = |\langle \psi | \alpha_i \rangle|^2}$$

1.2.4. A koordináta és az impulzus kvantummechanikai tárgyalása

Kérdés:

IV. Axióma : $\langle x \rangle_\varphi = \langle \varphi | \hat{x} | \varphi \rangle \xrightarrow{?} |\varphi|^2 dx$ BORN



$A_1 \ A_2 \ A_3 \ \dots \ A_i \ \rightarrow A$

diszkrét spektrum

$$\langle A \rangle_\varphi = \langle \varphi | \hat{A} | \varphi \rangle$$

A B bázis meghatározása:

$$\hat{A} \alpha_i = A_i \cdot \alpha_i$$

részletesen kiírva:

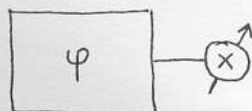
$$\hat{A} \alpha_i(x) = A_i \cdot \alpha_i(x)$$

$\uparrow$ azonosító $\uparrow$ változó

$$\mathcal{B} : \{ \alpha_i(x) \}_{i=1}^{\infty}$$

$$\varphi(x) = \sum_{i=1}^{\infty} a_i \alpha_i(x)$$

$$\begin{aligned} \langle A \rangle_\varphi &= \sum_{i=1}^{\infty} |a_i|^2 A_i = \\ &= \sum_{i=1}^{\infty} \underbrace{|\langle \alpha_i | \varphi \rangle|^2}_{P(A_i)} A_i \end{aligned}$$



$x' \rightarrow x$

$(-\infty < x' < +\infty)$

folytonos spektrum

$$\langle x \rangle_\varphi = \langle \varphi | \hat{x} | \varphi \rangle$$

$$\hat{x} \chi = x' \cdot \chi$$

$$\hat{x} \chi(x) = x' \cdot \chi(x)$$

$$\hat{x} = x \cdot$$

$$x \cdot \chi(x, x') = x' \cdot \chi(x, x')$$

$\uparrow$ változó $\uparrow$ azonosító

$$\mathcal{B} : \{ \chi(x, x') \}_{x'=-\infty}^{+\infty}$$

$$\varphi(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} a(x') \chi(x, x') dx'$$

$$\begin{aligned} \langle x \rangle_\varphi &= \int_{-\infty}^{+\infty} |a(x')|^2 x' dx' = \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \underbrace{|\langle \chi(x, x') | \varphi(x) \rangle|^2}_{P(x')} x' dx' \end{aligned}$$

$$\chi(x, x') = ?$$

44

Meg kell oldani $\hat{x}$ sajátérték feladatot :

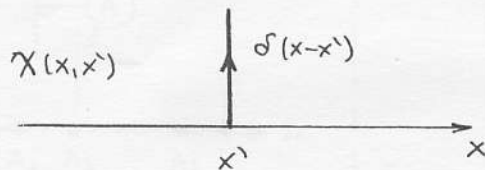
$$\hat{x} \chi(x, x') = x' \cdot \chi(x, x')$$

$$x \cdot \chi(x, x') = x' \cdot \chi(x, x')$$

$$(x - x') \cdot \chi(x, x') = 0$$

norma:
$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\chi(x, x')|^2 dx = 1$$

Nem precíz, de "jó"
(DİRAC)

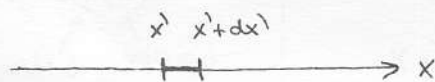


azaz

$$\langle \chi(x, x') | \varphi(x) \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \chi^*(x, x') \varphi(x) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x - x') \varphi(x) dx = \varphi(x')$$

Tehát

$$P(x') = |\langle \chi(x, x') | \varphi(x) \rangle|^2 = |\varphi(x')|^2$$



$$P(x') dx' = |\varphi(x')|^2 dx' \quad (\text{BORN})$$

Annak a valószínűsége, hogy
a részecske x helykoordinátájának
a mérési eredménye $(x', x' + dx')$
tartományba esik.



azaz : a részecske $(x', x' + dx')$ tartományban van

Az impulzus

$$\hat{p}_x \psi = p_x \cdot \psi$$

$$\frac{\hbar}{j} \frac{\partial \psi}{\partial x} = p_x \cdot \psi$$

$$\frac{\partial \psi}{\partial x} = j \underbrace{\frac{p_x}{\hbar}}_{\equiv k_x} \psi$$

$$\rightarrow \underbrace{\psi(x) = A \cdot e^{j k_x \cdot x}}_{\text{sajátfüggvény}}$$

$$\underbrace{p_x = \hbar k_x}_{\text{sajátérték}}$$

(Ugyanígy történik a számítás $\hat{p}_y$ és $\hat{p}_z$ esetén is.)

$$[\hat{p}_x, \hat{p}_y] = 0$$

$$[\hat{p}_y, \hat{p}_z] = 0$$

$$[\hat{p}_z, \hat{p}_x] = 0$$

A szimultán sajátfüggvények (1.2.2. -ben tanultak alapján)

$$\boxed{\begin{aligned} \Phi(\vec{r}) &= A \cdot e^{j \vec{k} \cdot \vec{r}} \\ \vec{p} &= \hbar \vec{k} \end{aligned}}$$

$$\rightarrow A e^{j(k_x x + k_y y + k_z z)}$$

(de BROGLIE) a síkhullám az impulzus operátor sajátfüggvénye ($\equiv$ sajátállapota)

azaz:

$$\left. \begin{aligned} \hat{p}_x \Phi &= p_x \Phi \\ \hat{p}_y \Phi &= p_y \Phi \\ \hat{p}_z \Phi &= p_z \Phi \end{aligned} \right\}$$

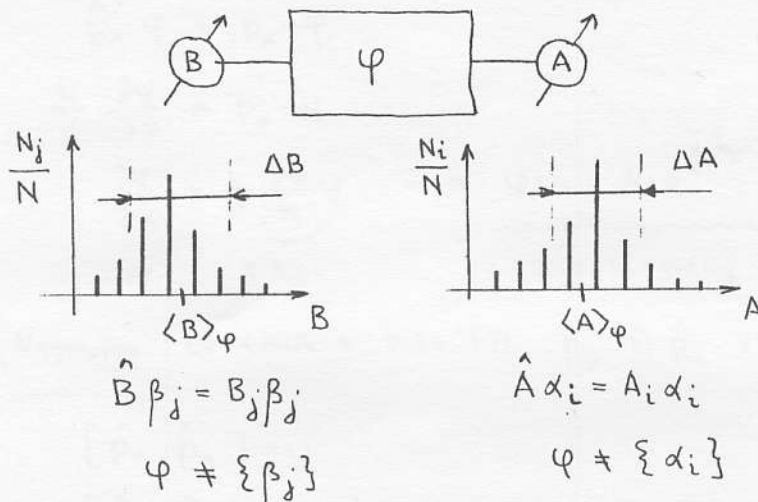
Feladat:

Tekintsük $\hat{p}_x$ operátor két különböző sajátértékéhez tartozó sajátfüggvényét

$$\hat{p}_x \psi_1 = p_1 \psi_1$$

$$\hat{p}_x \psi_2 = p_2 \psi_2$$

számítsa ki : $\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle$ skálár szorzatot !



$$\begin{cases} \hat{\Delta A} \equiv \hat{A} - \langle A \rangle \rightarrow \hat{\Delta A}^+ = \hat{\Delta A} \rightarrow \Delta A^2 \equiv \langle \varphi | \hat{\Delta A}^2 | \varphi \rangle \rightarrow \Delta A \\ \hat{\Delta B} \equiv \hat{B} - \langle B \rangle \rightarrow \hat{\Delta B}^+ = \hat{\Delta B} \rightarrow \Delta B^2 \equiv \langle \varphi | \hat{\Delta B}^2 | \varphi \rangle \rightarrow \Delta B \end{cases}$$

$$\begin{cases} [\hat{A}, \hat{B}] = \hat{C} \equiv j \hat{D} & \hat{D}^+ = \hat{D} \quad (\text{Feladat}) \\ [\hat{\Delta A}, \hat{\Delta B}] = [\hat{A}, \hat{B}] & (\text{Feladat}) \end{cases}$$

Matematika:

$$\begin{cases} \hat{G} \equiv g \cdot \hat{\Delta A} + j \hat{\Delta B} & (g \text{ valós szám}) \\ \hat{G}^+ = g \hat{\Delta A} - j \hat{\Delta B} & (\text{feladat}) \end{cases}$$

$$\langle \hat{G} \varphi | \hat{G} \varphi \rangle \equiv \mathcal{I}(g) \geq 0 \quad (\text{a norma definíciója miatt})$$

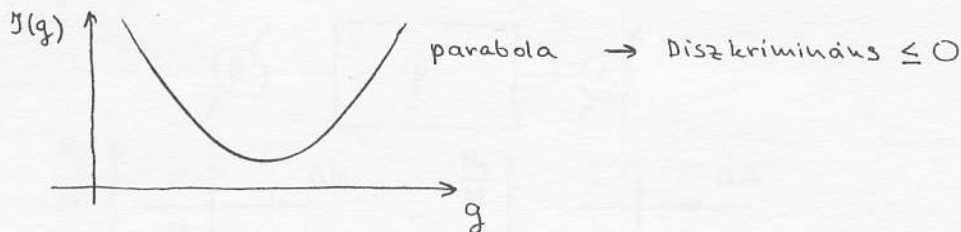
$$\mathcal{I}(g) = \langle \varphi | \hat{G}^+ \hat{G} | \varphi \rangle$$

$$\begin{aligned} \hat{G}^+ \hat{G} &= (g \hat{\Delta A} - j \hat{\Delta B})(g \hat{\Delta A} + j \hat{\Delta B}) = \\ &= g^2 \hat{\Delta A}^2 + jg (\hat{\Delta A} \hat{\Delta B} - \hat{\Delta B} \hat{\Delta A}) + \hat{\Delta B}^2 \\ &\quad \underbrace{[\hat{\Delta A}, \hat{\Delta B}] = j \hat{D}} \end{aligned}$$

$$\mathcal{I}(g) = g^2 \underbrace{\langle \varphi | \hat{\Delta A}^2 | \varphi \rangle}_{\equiv \Delta A^2} + \underbrace{\langle \varphi | \hat{\Delta B}^2 | \varphi \rangle}_{\equiv \Delta B^2} - g \underbrace{\langle \varphi | \hat{D} | \varphi \rangle}_{\langle D \rangle}$$

47

$$\mathcal{J}(g) = g^2 \Delta A^2 - g \langle D \rangle + \Delta B^2 \geq 0$$



$$\langle D \rangle^2 - 4 \Delta A^2 \Delta B^2 \leq 0$$

$$\Delta A^2 \Delta B^2 \geq \frac{1}{4} \langle D \rangle^2$$

$$\Delta A \cdot \Delta B \geq \frac{1}{2} |\langle D \rangle|$$

$$\Delta A \cdot \Delta B \geq \frac{1}{2} |\langle \psi | [\hat{A}, \hat{B}] \psi \rangle|$$

Heisenberg féle határozatlansági reláció

Példa:

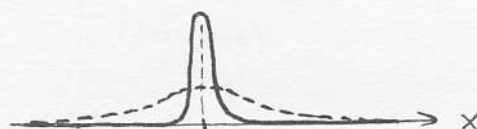
$$\left. \begin{array}{l} \hat{A} \equiv \hat{p}_x \\ \hat{B} \equiv \hat{x} \end{array} \right\} [\hat{A}, \hat{B}] \equiv [\hat{p}_x, \hat{x}] = -\frac{\hbar}{i}$$

$$\Delta p_x \cdot \Delta x \geq \frac{\hbar}{2}$$

$$\Delta p_x \cdot \Delta p_y \geq 0$$

$$\Delta x \cdot \Delta y \geq 0$$

⋮

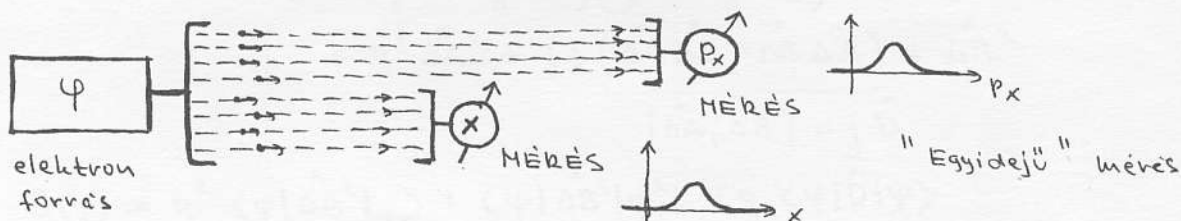


Nem létezik olyan állapot



amely esetén : $\Delta p_x \cdot \Delta x < \frac{\hbar}{2}$

Értelmezés a MÉRÉS alapján:



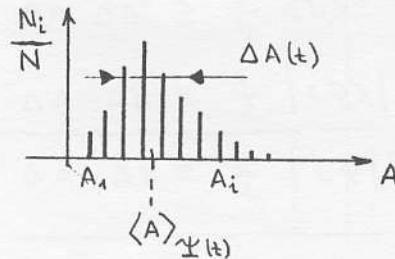
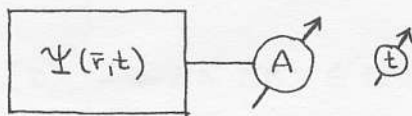
- INTERPRETÁCIÓK:
- "kettős természet" (klasszikus szemlélet)
 - a mérés mint beavatkozás
 - mérőműszer egy makroszkópikus eszköz
 - rejtett paraméterek (BELL 1968)

1.2.6. A klasszikus mechanika és a kvantummechanika kapcsolata

1.2.6.1. Az EHRENFEST tétel

Mérés nem stacionárius (időfüggő) állapotban

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



$\hat{A}$ nem tartalmazza a t idő (paramétert) $\equiv$ "időfüggetlen"

$$\frac{d}{dt} \langle A \rangle_{\Psi(t)} = \frac{d}{dt} \langle \Psi | \hat{A} | \Psi \rangle = \langle \dot{\Psi} | \hat{A} | \Psi \rangle + \langle \Psi | \hat{A} | \dot{\Psi} \rangle$$

$$(pe:) \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \hat{A} \Psi dV \rightarrow$$

$$\begin{cases} \hat{H} \Psi = -\frac{\hbar}{j} \dot{\Psi} & \rightarrow \dot{\Psi} = -\frac{j}{\hbar} \hat{H} \Psi \\ \hat{H} \Psi^* = +\frac{\hbar}{j} \dot{\Psi}^* & \rightarrow \dot{\Psi}^* = +\frac{j}{\hbar} \hat{H} \Psi^* \end{cases} \quad \uparrow \text{(beírva)}$$

Adódik, hogy:

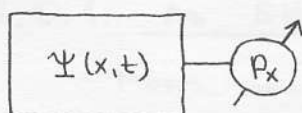
$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle A \rangle_{\Psi(t)} &= +\frac{j}{\hbar} \langle \hat{H} \Psi | \hat{A} \Psi \rangle - \frac{j}{\hbar} \langle \Psi | \hat{A} \hat{H} \Psi \rangle = \\ &= \frac{j}{\hbar} \langle \Psi | \hat{H} \hat{A} \Psi \rangle - \frac{j}{\hbar} \langle \Psi | \hat{A} \hat{H} \Psi \rangle = \\ &= \frac{j}{\hbar} \langle \Psi | (\hat{H} \hat{A} - \hat{A} \hat{H}) \Psi \rangle \\ &\quad [\hat{H}, \hat{A}] \text{ (kommutátor)} \end{aligned}$$

$$\boxed{\frac{d}{dt} \langle A \rangle_{\Psi(t)} = \frac{j}{\hbar} \langle \Psi | [\hat{H}, \hat{A}] | \Psi \rangle} \quad \text{EHRENFEST tétel}$$

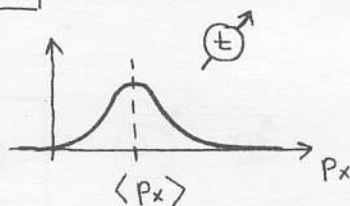
1.2.6.2. A klasszikus mechanika mozgásegyenlete

(Newton II. axióma)

(1 dim)



$$\hat{H}\Psi = -\frac{\hbar}{j} \dot{\Psi}, \quad \hat{H} \equiv \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \hat{V}(x)$$



EHRENFEST tetele:

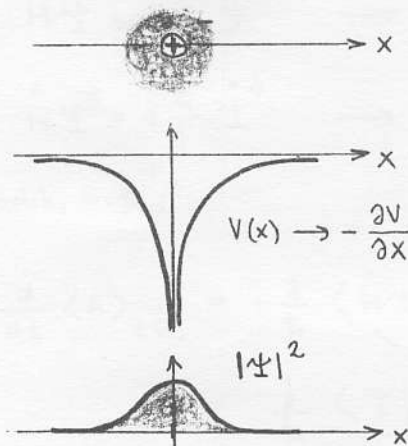
$$\frac{d}{dt} \langle p_x \rangle = \frac{j}{\hbar} \langle \Psi | [\hat{H}, \hat{p}_x] | \Psi \rangle$$

$$[\hat{H}, \hat{p}_x] \Psi = \underbrace{\left[\frac{\hat{p}_x^2}{2m}, \hat{p}_x \right]}_{\emptyset} \Psi + [\hat{V}, \hat{p}_x] \Psi = \frac{\hbar}{j} \left(\underbrace{v \cdot \frac{\partial \Psi}{\partial x}}_{-V \frac{\partial \Psi}{\partial x}} - \underbrace{\frac{\partial}{\partial x} v \cdot \Psi}_{-\Psi \frac{\partial v}{\partial x}} \right)$$

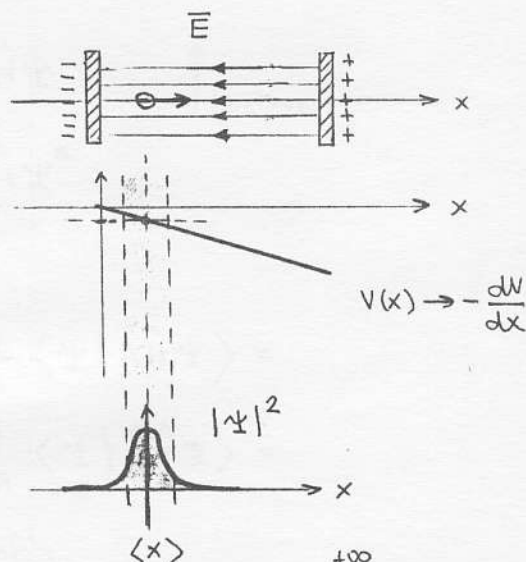
azaz

$$\frac{d}{dt} \langle p_x \rangle = \langle \Psi | \left(-\frac{\partial v}{\partial x} \right) | \Psi \rangle$$

kétfele lehetőség van:



$$\frac{d}{dt} \langle p_x \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \left(-\frac{\partial v}{\partial x} \right) |\Psi(x)|^2 dx$$

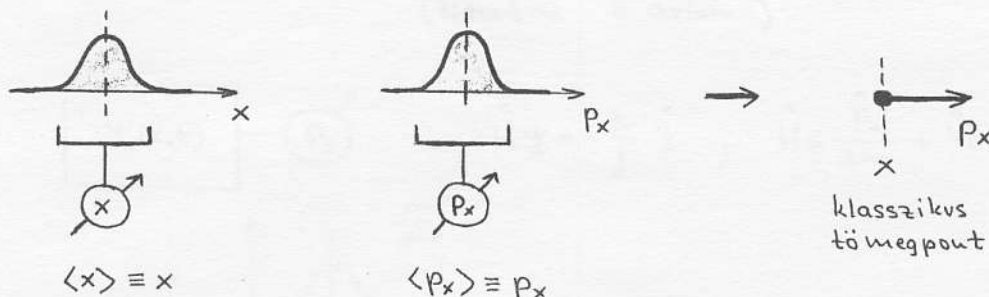
↑
SCHRÖDINGER
egyenletből↓
A KVANTUMMECHANIKÁT
KELL használni

$$\frac{d}{dt} \langle p_x \rangle \approx \left[-\frac{\partial v}{\partial x} \right]_{\langle x \rangle} \cdot \underbrace{\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi|^2 dx}_1$$

$$\frac{d}{dt} \langle p_x \rangle \approx \left[-\frac{\partial v}{\partial x} \right]_{\langle x \rangle} \quad (\text{Newton 2.})$$

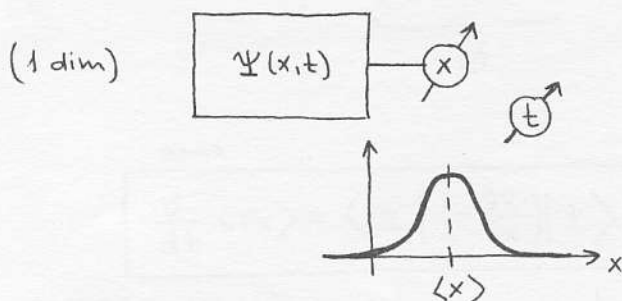
A KLASSZIKUS MECHANIKÁT
LEHET alkalmazni

A "tömegpont" fogalom kialakulásának magyarázata:



Egy klasszikus (makroszkópikus) mérés mindig nagyon nagy számú kvantummechanikai elemi mérés sokasága ($N \sim 10^{23}$). A klasszikus mérőműszer ezen elemi mérések átlagát jeleníti meg a mért adatként.

A sebesség



$$\hat{H}\Psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi, \quad \hat{H} \equiv \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + V(x)$$

EHRENFEST tétel:

$$\frac{d}{dt} \langle x \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle \Psi | [\hat{H}, \hat{x}] | \Psi \rangle$$

$$\begin{aligned} [\hat{H}, \hat{x}] \Psi &= \left[\frac{\hat{p}_x^2}{2m}, \hat{x} \right] \Psi + \left[\hat{V}(x), \hat{x} \right] \Psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{\partial^2}{\partial x^2}, x \right] \Psi = \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} x \Psi - x \Psi'' \right) = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(2 \Psi' + \underbrace{x \Psi'' - x \Psi''} \right) \end{aligned}$$

azaz

$$\frac{d}{dt} \langle x \rangle = \frac{i}{\hbar} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \right) \cdot 2 \langle \Psi | \Psi' \rangle = \frac{1}{m} \cdot \frac{\hbar}{i} \langle \Psi | \frac{\partial \Psi}{\partial x} \rangle = \frac{1}{m} \langle \Psi | \hat{p}_x | \Psi \rangle$$

$$\frac{d}{dt} \langle x \rangle = \frac{1}{m} \langle p_x \rangle$$

A munka tétel ($\rightarrow$ klasszikus mechanika)

$$\frac{d}{dt} \langle W_k \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle \Psi | [\hat{H}, \hat{W}_k] | \Psi \rangle = \dots$$

$$\downarrow \quad \frac{dW_k}{dt} = \vec{F} \cdot \vec{v}$$

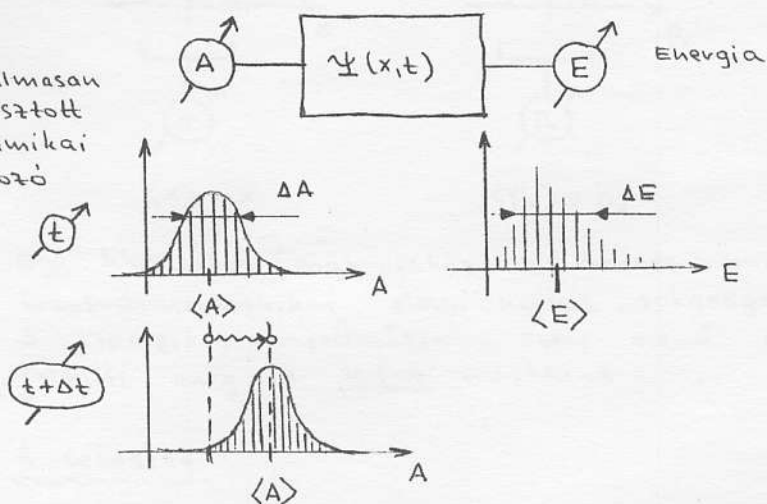
(Feladat)

$$\left[-\frac{\partial V}{\partial x} \right]_{\langle x \rangle} \cdot \frac{1}{m} \langle p_x \rangle = \frac{d}{dt} \langle W_k \rangle$$

$\downarrow$
(szilárdtestfizika)

1.2.6.3. Az energia és az idő közötti határozatlansági reláció

Egy alkalmasan választott dinamikai változó



EHRENFEST tétel:

$$\frac{d}{dt} \langle E \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle \Psi | [\hat{H}, \hat{H}] \Psi \rangle = 0 \rightarrow \langle E \rangle = \text{állandó}$$

$$\frac{d}{dt} \langle A \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle \Psi | [\hat{H}, \hat{A}] \Psi \rangle$$

HEISENBERG határozatlansági reláció:

$$\Delta A \cdot \Delta E \geq \frac{1}{2} \left| \langle \Psi | [\hat{H}, \hat{A}] \Psi \rangle \right|$$

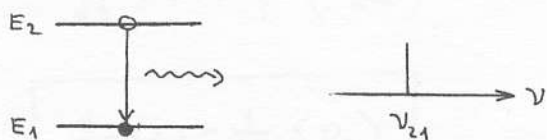
$$\left. \begin{array}{l} \frac{d}{dt} \langle A \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle \Psi | [\hat{H}, \hat{A}] \Psi \rangle \\ \Delta A \cdot \Delta E \geq \frac{1}{2} \left| \langle \Psi | [\hat{H}, \hat{A}] \Psi \rangle \right| \end{array} \right\} \rightarrow \Delta A \cdot \Delta E \geq \frac{1}{2} \left| \hbar \frac{d}{dt} \langle A \rangle \right|$$

Tehát:

$$\underbrace{\frac{\Delta A}{\left| \frac{d}{dt} \langle A \rangle \right|}}_{\equiv \Delta t} \cdot \Delta E \geq \frac{\hbar}{2} \rightarrow \boxed{\Delta E \cdot \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}}$$

$\equiv \Delta t$ MÉRHETŐ mennyiség: A rendszerben lejátszó változásokat jellemzi (karakterisztikus időtartam)
(ÓRA)

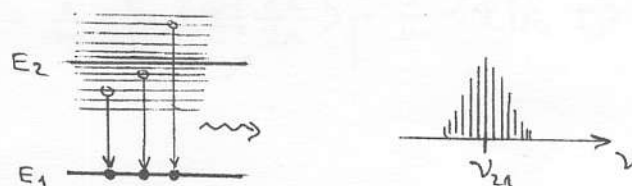
Példa: (BOHR atom)



(statikus modell)

$$\Delta t \rightarrow \infty$$

$$\Delta E_2 = 0 \rightarrow \text{éles spektrum vonal.}$$



(A valóság dinamikus)

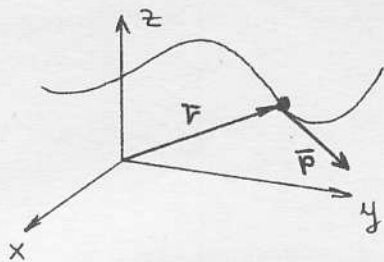
$$\Delta t = \text{véges}$$

$$\Delta E_2 = \text{véges} \rightarrow \text{a spektrum vonal "kiszélesedik"}$$

DINAMIKUS MODELL

Δt miért? véges?

KVANTUMELEKTRODINAMIKA

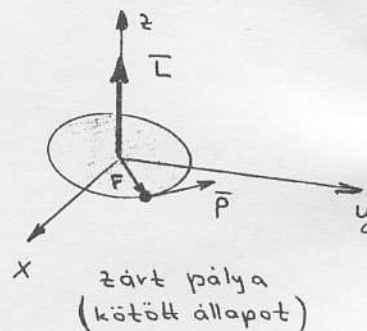
1.3. A perdület és a mágneses momentum1.3.1. A pályaperdületKlasszikus mechanika:

$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$$

$$L_x = \dots$$

$$L_y = \dots$$

$$L_z = x p_y - y p_x$$

Kvantummechanika:

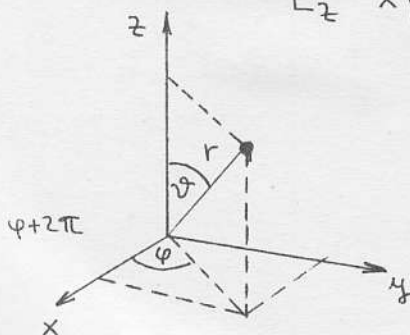
(II. Axióma)

$$\hat{L}_x = \dots$$

$$\hat{L}_y = \dots$$

$$\hat{L}_z = \hat{x} \hat{p}_y - \hat{y} \hat{p}_x = \frac{\hbar}{j} \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) \rightarrow$$

$$\hat{L}_z = \frac{\hbar}{j} \frac{\partial}{\partial \varphi}$$



Bizonyítás:

$$x = r \cdot \sin \vartheta \cdot \cos \varphi$$

$$y = r \cdot \sin \vartheta \cdot \sin \varphi$$

$$z = r \cdot \cos \vartheta$$

$$\Phi(x, y, z) = \Phi(x(\varphi), y(\varphi)) = \Phi(\varphi)$$

$$\frac{\partial \Phi}{\partial \varphi} = \frac{\partial \Phi}{\partial x} \underbrace{\frac{\partial x}{\partial \varphi}}_{-y} + \frac{\partial \Phi}{\partial y} \underbrace{\frac{\partial y}{\partial \varphi}}_x =$$

(III. Axióma)

$$\hat{L}_z \Phi = L_z \Phi$$

$$\frac{\hbar}{j} \frac{\partial}{\partial \varphi} \Phi = L_z \Phi \rightarrow \Phi = A \cdot e^{j \frac{L_z}{\hbar} \varphi} \quad (\text{matematikai megoldás})$$

(I. Axióma)

 $\Phi \in \mathfrak{R} \rightarrow \text{regularitás: folytonos } \checkmark$
 $\text{négyzetesen integrálható}$
 egyértékű

$$\langle \Phi | \Phi \rangle = |A|^2 2\pi = 1 \rightarrow A = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}$$

$$\Phi(\varphi + 2\pi) = \Phi(\varphi) \rightarrow e^{j \frac{L_z}{\hbar} \varphi} \cdot \underbrace{e^{j \frac{L_z}{\hbar} 2\pi}}_1 = e^{j \frac{L_z}{\hbar} \varphi}$$

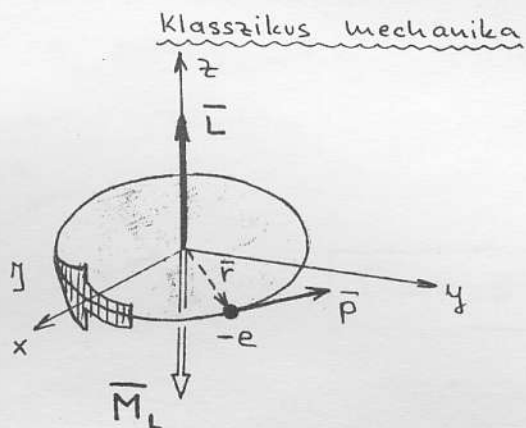
$$L_z = \hbar m_e$$

$$(m_e = 0 \pm 1 \pm 2 \pm \dots)$$

(MÁGNESES kvantumszám)

$$\frac{L_z}{\hbar} \equiv m_e = 0 \pm 1 \pm 2 \pm 3 \pm \dots$$

1.3.2. A (zárt) pályamozgás mágneses momentuma



$$\vec{L} (0,0,L_z)$$

$$\vec{M}_L (0,0,M_z)$$

$$L_z = r \cdot p = r \cdot m \cdot v$$

$$M_z = \gamma \cdot r^2 \pi$$

$$\gamma = \frac{dQ}{dt} = -\frac{e}{T} = -\frac{e}{\frac{2\pi r}{v}} = -\frac{ev}{2\pi r}$$

$$M_z = -\frac{ev}{2\pi r} \cdot r^2 \pi = -\frac{evr}{2} = -\frac{e}{2m} m \cdot v \cdot r = -\frac{e}{2m} L_z$$

$$M_z = -\frac{e}{2m} L_z \rightarrow \vec{M}_L = -\frac{e}{2m} \vec{L}$$

Kvantummechanika:

(II. Axióma) $\hat{M}_x, \hat{M}_y, \hat{M}_z \rightarrow \hat{M}_z = -\frac{e}{2m} \hat{L}_z$

(III. Axióma) $\hat{M}_z \Phi = M_z \Phi$

$$-\frac{e}{2m} \hat{L}_z \Phi = M_z \Phi$$

$$\underbrace{\hat{L}_z \Phi}_{L_z \Phi}$$

$$M_z = -\frac{e}{2m} L_z = -\frac{e\hbar}{2m} m_e$$

$\equiv \mu_B$ (BOHR magneton :
a mágneses
dipólmomentum
kvantuma)

$$M_z = -\mu_B \cdot m_e$$

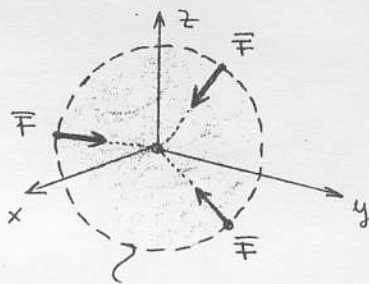
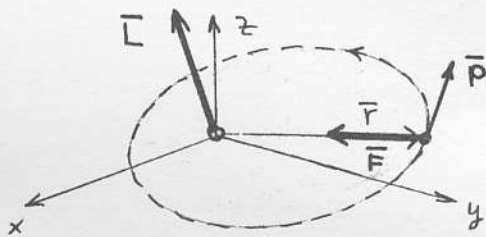
$$(m_e = 0 \pm 1 \pm 2 \pm 3 \pm \dots)$$

$$\Phi = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{jm_e\varphi}$$

$$\mu_B = 9,27 \cdot 10^{-24} \text{ Am}^2$$

1.3.3. Mozgás centrális erőterben1.3.3.1. A pályaperdület meghatározása

Klasszikus mechanika:

 $V(F) = \text{állandó}$ 

erő:

$$\vec{F}(\vec{r}) = F(r) \frac{\vec{r}}{r} \rightarrow V(\vec{r}) = V(r)$$

↓ pl:

$$V(r) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Q \cdot (-e)}{r^2}$$

$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p} \quad \left| \frac{d}{dt} \right.$$

$$\frac{d\vec{L}}{dt} = \underbrace{\dot{\vec{r}} \times \vec{p}}_{\emptyset} + \vec{r} \times \dot{\vec{p}} = \vec{r} \times \underbrace{\vec{F}}_{\text{forgatónyomaték}}$$

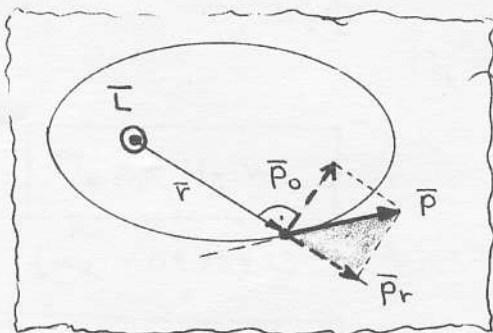
Centrális erőterben:

$$\dot{\vec{L}} = \vec{r} \times \vec{F} = \frac{F}{r} \underbrace{\vec{r} \times \vec{r}}_{\emptyset} \rightarrow \boxed{\vec{L} = \text{áll}}$$

Konzervatív rendszerben

$$\boxed{E = \text{áll}}$$

$$\text{Mivel } \vec{L} = \text{állandó} \rightarrow \vec{r} \times \vec{p} = m \cdot \vec{r} \times \dot{\vec{r}} = m \cdot \vec{r} \times \frac{d\vec{r}}{dt} = \text{állandó}$$

 $\vec{r} \times d\vec{r}$ (iránya állandó)
↓
síkmozgás


a pálya síkje

$$\vec{p} = \vec{p}_0 + \vec{p}_r$$

$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p} = \vec{r} \times \vec{p}_0 + \underbrace{\vec{r} \times \vec{p}_r}_{\emptyset}$$

$$L = r \cdot p_0$$

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(r) = \frac{p_r^2 + p_0^2}{2m} + V(r) = \frac{p_r^2}{2m} + \frac{p_0^2}{2m} + V(r) =$$

$$H = \frac{p_r^2}{2m} + \underbrace{\frac{L^2}{2mr^2}}_{\equiv V_{\text{eff}}(r)} + V(r) = E$$

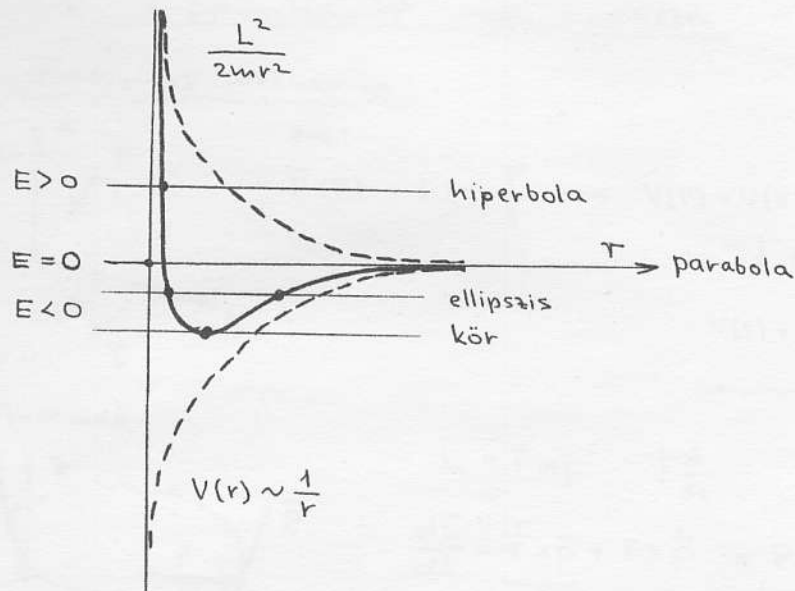
 $\equiv V_{\text{eff}}(r)$
($L^2 = \text{állandó}$)

$$H = \frac{p_r^2}{2m} + V_{\text{eff}}(r)$$

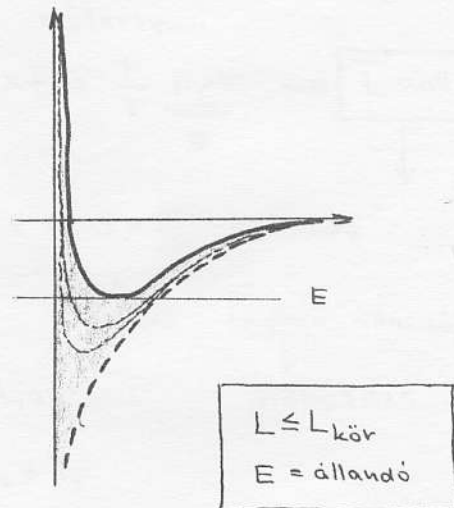
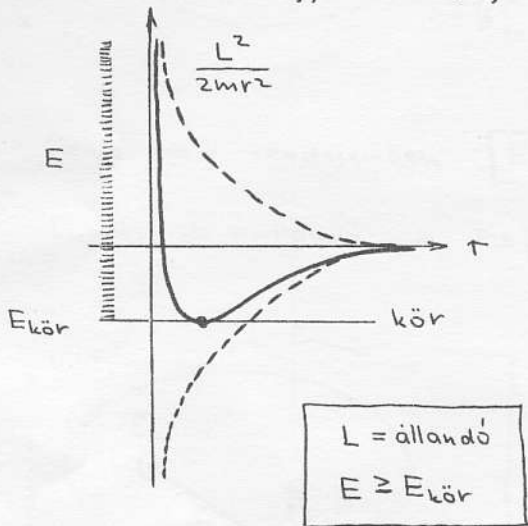
$$V_{\text{eff}}(r) = \frac{L^2}{2mr^2} + V(r)$$

(centrifugális potenciál)

Centrális erőterben mozgó részecske pályájának jellemzése



Fontos egyenlőtlenségek:



Kvantummechanika:

Klasszikus mechanika
Hamilton függvény

Kvantummechanika
Hamilton operátor

$$H = \frac{1}{2m} (p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) + V(x, y, z) \rightarrow \hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_{x,y,z} + V(x, y, z)$$

(Descartes)
(polár)

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_{r,\vartheta,\varphi} + V(r)$$

$$H = \frac{1}{2m} p_r^2 + \frac{1}{2mr^2} L^2 + V(r) \rightarrow \hat{H} = \frac{1}{2m} \hat{p}_r^2 + \frac{1}{2mr^2} \hat{L}^2 + V(r) \quad \left. \vphantom{\hat{H}} \right\} \equiv$$

Matematika:

$$\Delta_{r,\vartheta,\varphi} \equiv \Delta_r + \frac{1}{r^2} \Delta_{\vartheta,\varphi}$$

$$\Delta_r \equiv \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right)$$

$$\Delta_{\vartheta,\varphi} \equiv \underbrace{\frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} \right)}_{\equiv \Delta_{\vartheta}} + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}$$

Tehát a $\hat{H}$ operátor polárkoordinátákkal felírva:

$$\left. \begin{aligned} \hat{H} &= -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_r - \frac{\hbar^2}{2mr^2} \Delta_{\vartheta,\varphi} + V(r) \\ \hat{H} &= \frac{1}{2m} \hat{p}_r^2 + \frac{1}{2mr^2} \hat{L}^2 + V(r) \end{aligned} \right\}$$

$$\downarrow$$

$$\hat{p}_r^2 = -\hbar^2 \Delta_r$$

$$\boxed{\hat{L}^2 = -\hbar^2 \Delta_{\vartheta,\varphi}} \rightarrow \hat{L}^2 = -\hbar^2 \Delta_{\vartheta} + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \hat{L}_z^2$$

cserévelések:

$$\left. \begin{aligned} [\hat{H}, \hat{L}^2] &= 0 \\ [\hat{L}^2, \hat{L}_z] &= 0 \\ [\hat{H}, \hat{L}_z] &= 0 \end{aligned} \right\} \rightarrow \left. \begin{aligned} \hat{H} \Psi &= E \Psi \\ \hat{L}^2 \Psi &= L^2 \Psi \\ \hat{L}_z \Phi &= L_z \Phi \end{aligned} \right\} \quad (1.2.2)$$

$$\Psi(r, \vartheta, \varphi) = R(r) Y(\vartheta, \varphi) = R(r) \underbrace{\Theta(\vartheta) \Phi(\varphi)}_{\equiv Y(\vartheta, \varphi)}$$

A perdület sajátérték egyenlet megoldása:

$$\left. \begin{aligned} \hat{L}^2 Y &= L^2 Y \\ \hat{L}_z \Phi &= L_z \Phi \end{aligned} \right\} Y(\vartheta, \varphi) = \Theta(\vartheta) \cdot \Phi(\varphi)$$

$$\begin{aligned} \left(-\hbar^2 \Delta_{\vartheta} + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \hat{L}_z^2 \right) \Theta \Phi &= L^2 \Theta \Phi \\ -\hbar^2 \Phi \Delta_{\vartheta} \Theta + \underbrace{\frac{\Theta}{\sin^2 \vartheta} \hat{L}_z^2 \Phi}_{L_z^2 \Phi} &= L^2 \Theta \Phi \quad \left| \cdot \frac{1}{\Phi} \right. \end{aligned}$$

$$-\hbar^2 \Delta_{\vartheta} \Theta + \frac{L_z^2}{\sin^2 \vartheta} \Theta = L^2 \Theta$$

$$\Delta_{\vartheta} \Theta + \underbrace{\left(\frac{L^2}{\hbar^2} - \frac{L_z^2}{\hbar^2} \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \right)}_{\substack{\equiv A \\ \text{(jelölés)}}} \Theta = 0 \quad \leftarrow \begin{cases} \text{Ismeretes:} \\ L_z = \hbar m_l \\ m_l = 0 \pm 1 \pm 2 \pm \dots \end{cases}$$

$$\Delta_{\vartheta} \Theta + \left(A - \frac{m_l^2}{\sin^2 \vartheta} \right) \Theta = 0$$

megoldása
polinom módszerrel

$$\rightarrow \begin{cases} \Theta(\vartheta) = P_l^{m_l}(\cos \vartheta) & \text{(LEGENDRE)} \\ A = l(l+1) & l = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (\text{neve: mellék kvantum szám}) \\ m_l = 0 \pm 1 \pm 2 \pm \dots \pm l \end{cases}$$

Kapjuk tehát:

$$\begin{aligned} Y(\vartheta, \varphi) &= P_l^{m_l}(\cos \vartheta) \cdot e^{jm_l \varphi} \\ L^2 &= \hbar^2 l(l+1) & l &= 0, 1, 2, 3, \dots \\ L_z &= \hbar m_l & m_l &= 0, \pm 1, \pm 2, \dots \pm l \end{aligned}$$

neve:
GÖMBFÜGGVÉNY

A perdület komponensek közötti cserévelációk:

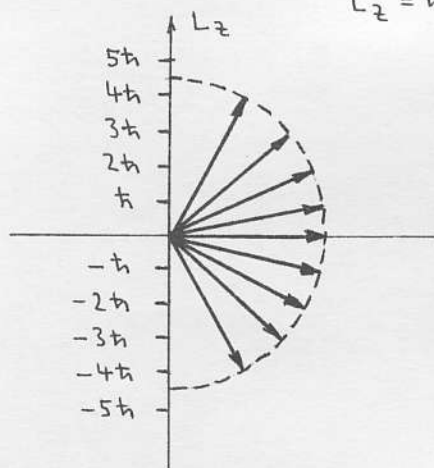
$$\begin{aligned} [\hat{L}_y, \hat{L}_z] &= -\frac{\hbar}{j} \hat{L}_x \\ [\hat{L}_z, \hat{L}_x] &= -\frac{\hbar}{j} \hat{L}_y \\ [\hat{L}_x, \hat{L}_y] &= -\frac{\hbar}{j} \hat{L}_z \end{aligned}$$

MÉRÉS (határozatlansági
velációk)

A pályaperidület kvantálásának szemléltetése:

$$L = \hbar \sqrt{\ell(\ell+1)}$$

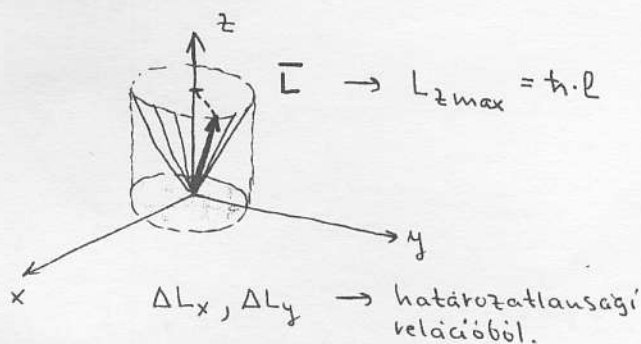
$$L_z = \hbar m_\ell \quad (m_\ell = 0 \pm 1 \pm 2 \pm \dots \pm \ell)$$



pl: $\ell = 4$

$$L = \hbar \sqrt{4 \cdot 5}$$

$$m_\ell = 0 \pm 1 \pm 2 \pm 3 \pm 4$$



A pályamozgásból származó mágneses momentum:

$$\vec{M}_L = -\frac{e}{2m} \vec{L}$$

$$\hat{M}_L^2 = \left(\frac{e}{2m}\right)^2 \hat{L}^2$$

$$\hat{M}_z = -\frac{e}{2m} \hat{L}_z$$

$$\rightarrow \begin{cases} M_L = \mu_B \sqrt{\ell(\ell+1)} \\ M_z = \mu_B \cdot m_\ell \end{cases}$$

$$\ell = 0, 1, 2, 3, \dots$$

$$m_\ell = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \pm \ell$$

1.3.3.2. A sugár irányú (radiális) mozgás leírása

Centrális erőter: $V(\vec{r}) = V(r)$ (1.3.3.1)

$$\left. \begin{aligned} \hat{H}\Psi &= E\Psi \\ \hat{L}^2\Psi &= L^2\Psi \end{aligned} \right\} \Psi(r, \vartheta, \varphi) = R(r) \cdot Y(\vartheta, \varphi)$$

$$\left(\frac{1}{2m} \hat{p}_r^2 + \frac{1}{2mr^2} \hat{L}^2 + V(r) \right) R \cdot Y = E \cdot R \cdot Y$$

$$Y \cdot \frac{1}{2m} \hat{p}_r^2 R + R \frac{1}{2mr^2} \underbrace{\hat{L}^2 \cdot Y}_{L^2 Y} + V \cdot R \cdot Y = E \cdot R \cdot Y \quad \left| \cdot \frac{1}{Y} \right.$$

$$\left[\frac{1}{2m} \hat{p}_r^2 + \left(\frac{L^2}{2mr^2} + V(r) \right) \right] R = E \cdot R$$

$V_{\text{eff}}(r)$

$$L^2 = \hbar^2 \ell(\ell+1)$$

$$\ell = 0, 1, 2, 3, \dots$$

Láttuk, hogy:

$$\hat{p}_r \equiv -\hbar^2 \Delta_r$$

$$\Delta_r \equiv \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right)$$

matematika:

$$\Delta_r R = \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) = \frac{2}{r} R' + R'' \quad \left. \vphantom{\Delta_r R} \right\} \rightarrow \underline{P'' = r \cdot \Delta_r R}$$

$$\text{legyen: } P(r) \equiv r \cdot R(r) \rightarrow P'' = 2R' + rR''$$

Tehát:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_r R + V_{\text{eff}} \cdot R = E \cdot R \quad | \cdot r$$

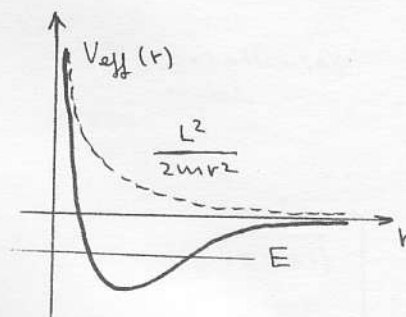
$$-\frac{\hbar^2}{2m} \underbrace{r \Delta_r R}_{P''} + V_{\text{eff}} \cdot \underbrace{r R}_{P} = E \cdot \underbrace{r R}_{P}$$

azaz

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} + V_{\text{eff}}(r) \right) P = E P$$

$$V_{\text{eff}}(r) = \frac{L^2}{2mr^2} + V(r)$$

$$L^2 = \hbar^2 l(l+1) \quad l=0,1,2,\dots$$



Tetszőleges centrális erőterben mozgó részecske állapota

$$\Psi(F) = \Psi(r, \vartheta, \varphi) = R(r) \cdot P_l^{m_l}(\cos \vartheta) \cdot e^{jm_l \varphi}$$

$$L = \hbar \sqrt{l(l+1)} \quad l=0,1,2,\dots$$

$$L_z = \hbar m_l \quad m_l = 0 \pm 1 \pm 2 \pm \dots \pm l$$

$$V(r) \rightarrow E, R(r)$$

legfontosabb feladatok:

$$V(r) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Q(-e)}{r} \quad (\text{elektron az atomban})$$

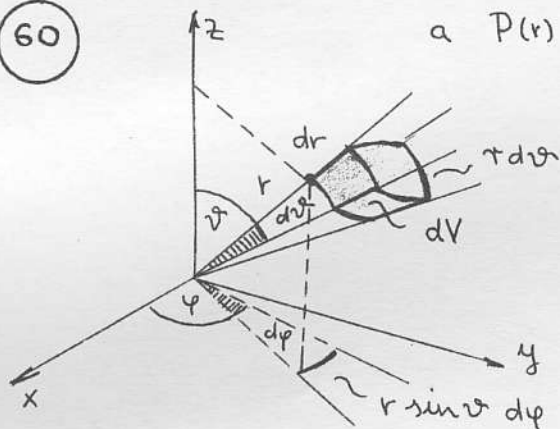
$$(\text{Feladat}) \quad \left\{ \begin{array}{l} V(r) = \frac{1}{2} m \omega^2 r^2 \quad (\text{térbeli harmonikus oszcillátor}) \end{array} \right.$$

$$V(r) = \begin{cases} 0 & r < r_0 \\ V_0 & r \geq r_0 \end{cases} \quad (\text{gömb alakú potenciál völgy} \downarrow \text{doboz})$$

a $P(r)$ fizikai jelentése

az elemi térfogat:

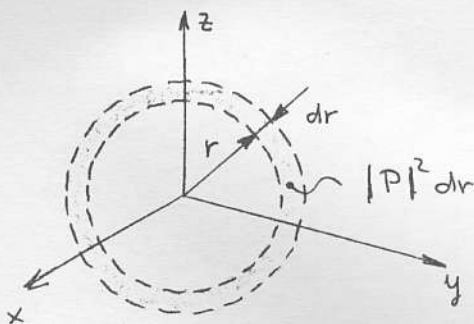
$$dV = r^2 \sin \vartheta \, d\vartheta \, d\varphi \, dr$$



$$|\psi|^2 dV = \underbrace{|rR|^2}_{(r)} dr \underbrace{|Y|^2}_{(\vartheta, \varphi)} \sin \vartheta \, d\vartheta \, d\varphi$$

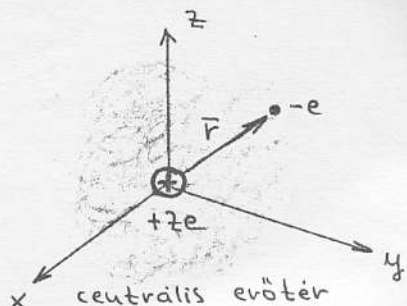
$$|\psi|^2 dV \rightarrow \underbrace{|P|^2}_{\infty} dr \cdot \underbrace{\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} |Y|^2 \sin \vartheta \, d\vartheta}_{\text{állandó} \equiv 1}$$

$$\int_0^{\infty} |P|^2 dr = 1$$



$|P|^2 dr$ valószínűséggel található a részecske az r sugarú dr vastagságú gömbhéjban $\rightarrow$ a "centrumból r távolságra van"

1.3.3.3. A hidrogén szerű ion (a hidrogén atom)



$$V(r) = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{1}{r} \quad (\text{COULOMB potenciál})$$

$$Z = 1 \quad (\text{a hidrogén atom})$$

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

$$\psi(r, \vartheta, \varphi) = R(r) Y(\vartheta, \varphi)$$

Gömbfüggvény (ℓ, m_ℓ)

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} + \underbrace{\left(\frac{L^2}{2mr^2} - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r} \right)}_{V_{\text{eff}}(r)} \right] P = EP$$

Megoldása:
polinom módszerrel

$$\begin{aligned} L^2 &= \hbar^2 \ell(\ell+1) \\ \ell &= 0, 1, 2, 3, 4, \dots \end{aligned}$$

$$\left\{ E_n = \text{állandó}, \quad \begin{aligned} L &\leq L_{\text{max}} \\ \ell &\leq (n-1) \end{aligned} \right\} \leftarrow \text{FIZIKA}$$

$$\left\{ \begin{aligned} P_{n,\ell}(r) & \quad (\text{LAGUERRE}) \\ E_n &= -Z^2 \frac{E_0}{n^2} \\ n &= 1, 2, 3, \dots \quad \text{Fő kvantum szám} \\ \ell &= 0, 1, 2, 3, 4, \dots (n-1) \end{aligned} \right.$$

61

A teljes megoldás hidrogénsterű ion esetén :

$$\psi(r, \vartheta, \varphi) = \frac{1}{r} P_{n,\ell}(r) \cdot P_{\ell}^{m_{\ell}}(\cos \vartheta) \cdot e^{jm_{\ell}\varphi}$$

$$E_n = -Z^2 \frac{E_0}{n^2} \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

$$L = \hbar \sqrt{\ell(\ell+1)} \quad \ell = 0, 1, 2, \dots, (n-1)$$

$$L_z = \hbar m_{\ell} \quad m_{\ell} = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm \ell$$

Fő kvantumszám

MELLÉK ~

MÁGNESES ~

 $E_0 = 13,6 \text{ eV}$ (a Hidrogén atom ionizációs energiája) $Z = 1$ (Hidrogén atom esetén)

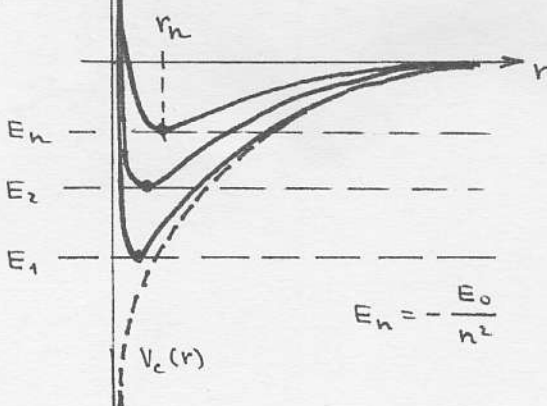
A BOHR modell és a SCHRÖDINGER modell összehasonlítása (H atom)

BOHR

$$V_{\text{eff}}(r) = \frac{L^2}{2mr^2} + V_c(r)$$

$$L = n \cdot \hbar$$

$$n = 1, 2, 3, \dots$$

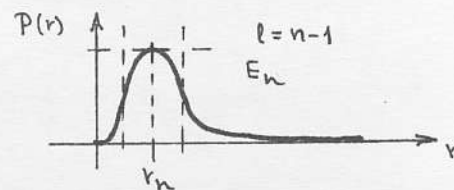
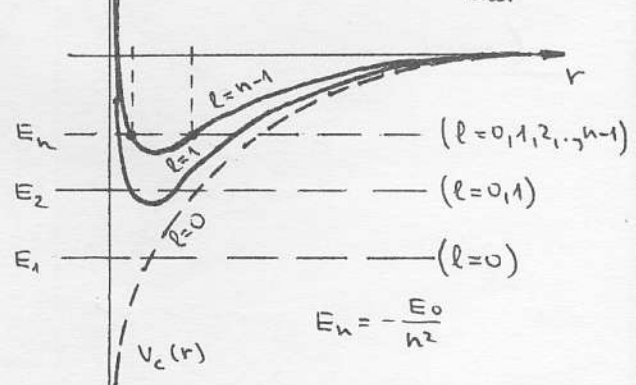


SCHRÖDINGER

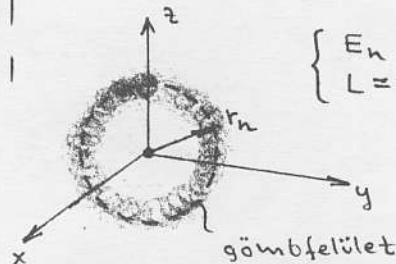
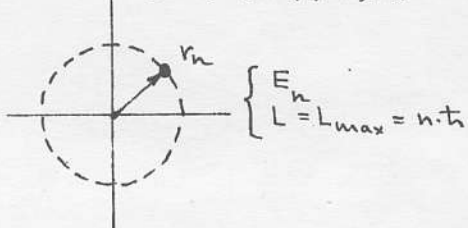
$$V_{\text{eff}}(r) = \frac{L^2}{2mr^2} + V_c(r)$$

$$L = \hbar \sqrt{\ell(\ell+1)} \leq \hbar \sqrt{n(n-1)} < n\hbar$$

L_{max}



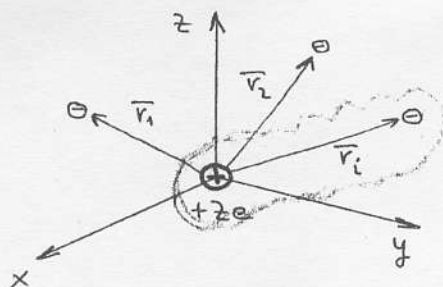
BOHR (kör) pályák



$$\begin{cases} E_n \\ L = L_{\text{max}} = \hbar \sqrt{n(n-1)} \end{cases}$$

[Feladatok]

1.3.3.4. Az atomok elektronstruktúrája

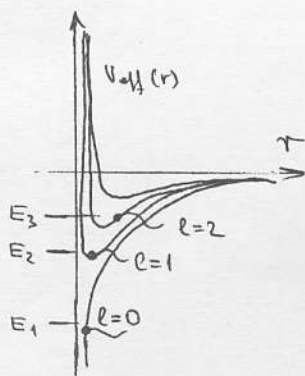


$$i=1,2,3,\dots,Z$$

Az elektronok közötti kölcsönhatást elhanyagoljuk!

$\Psi(\vec{r}_i)$ H szerű ion állapot

$$\hat{H}\Psi = E_n\Psi$$



$$\Psi_{n,l,m_l} = R_{n,l}(r) P_l^{m_l}(\cos\vartheta) e^{jm_l\varphi}$$

$$E_n = -Z^2 \frac{E_0}{n^2} \quad n=1,2,3,\dots$$

$$L = \hbar \sqrt{l(l+1)} \quad l=0,1,2,\dots,(n-1)$$

$$L_z = \hbar m_l \quad m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$$

$H\hat{E} \rightarrow$

degeneráció

$$d = 2 \sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = 2n^2$$

n=4	0 ⊗	-1	0	+1					
n=3	0 ● x	-1 x x	0 x x	+1 x x	-2	-1	0	+1	+2
n=2	0 ● ●	-1 ● ●	0 ● ●	+1 ● ●					
n=1	0 ● ●								
	s l=0	ALHÉZ p l=1			(2l+1) db ALHÉZ d l=2				

PAULI
elv

Pl: Na: $(1s)^2 (2s)^2 (2p)^6 (3s)$ ($Z=11$)

$Z=2$

He: $(1s)^2$

$Z=10$

Ne: $(1s)^2 (2s)^2 (2p)^6$

$Z=18$

Ar: $(1s)^2 (2s)^2 (2p)^6 (3s)^2 (3p)^6$

$Z=19$

K: $[Ar](4s)$

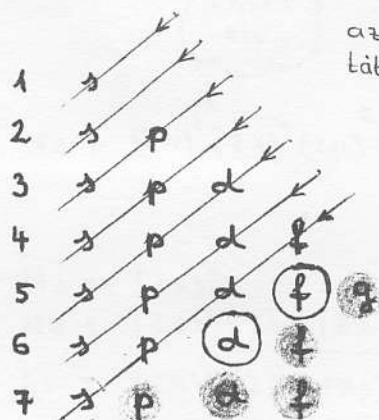
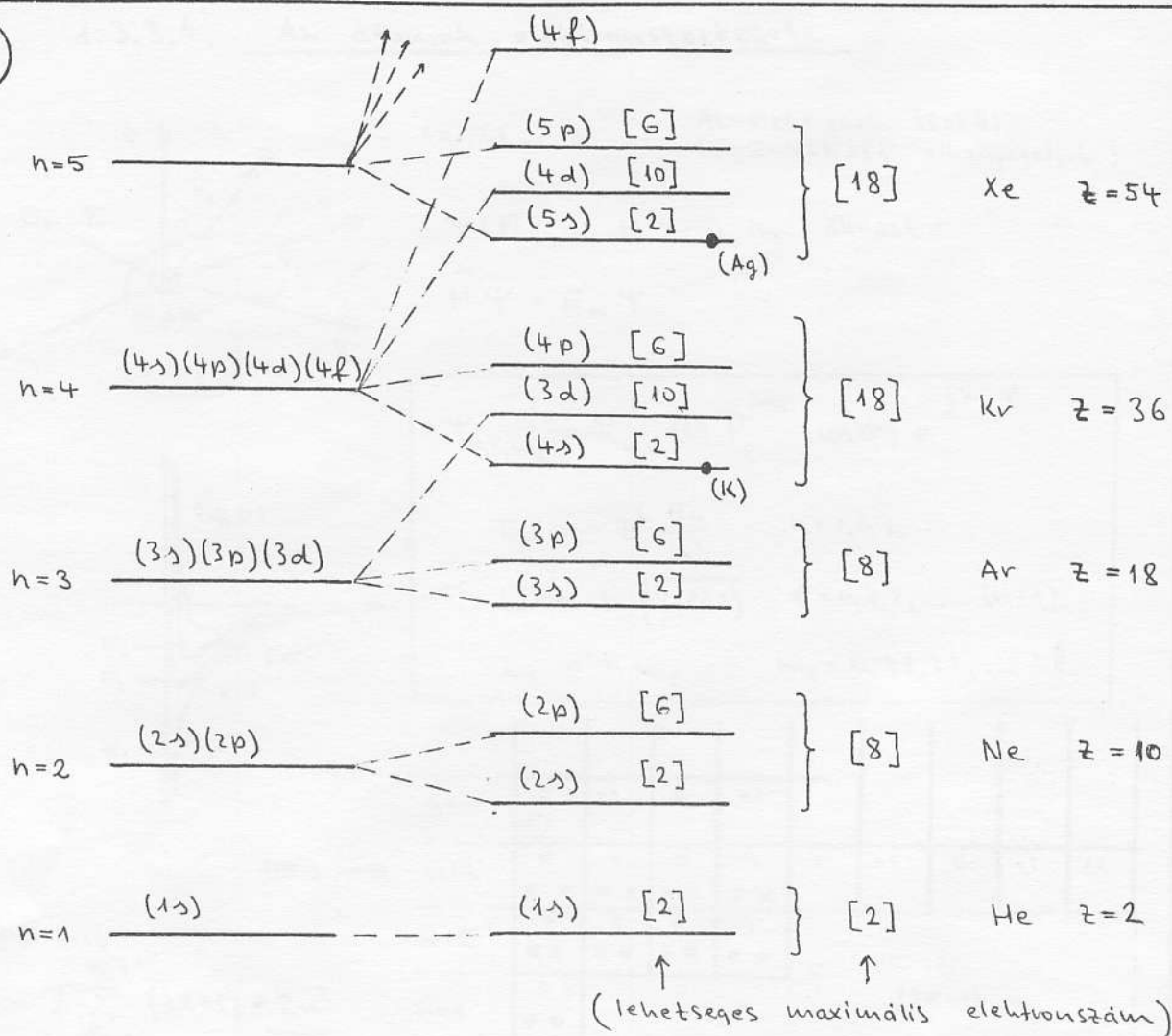
$Z=36$

Kr: $[Ar](3d)^{10} (4s)^2 (4p)^6$

$\rightarrow (3d \text{ helyett!})$

az elektronok közötti
kölcsönhatás nem
elhanyagolható el.

↓
Miért ilyen a nemesgázok
elektronstruktúrája (?)



az alhéjak betöltési sorrendjét megadó táblázat.

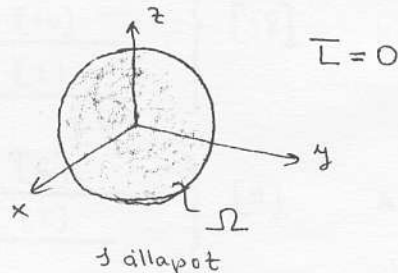
1.3.3.5. Az állapotfüggvények (atompályák) grafikus ábrázolása

3 állapotok:

$$\left. \begin{matrix} n \\ l=0 \\ m_l=0 \end{matrix} \right\} P_0^0(\cos\vartheta) = \text{állandó} \left\{ \begin{matrix} \psi_{n,0,0} = R_{n,0}(r) \\ \text{gömbszimmetrikus} \end{matrix} \right.$$

Ábrázolás:

$$\int_{\Omega} |\psi_{n,0,0}|^2 d\Omega \approx 0,9$$



6 állapotok:

$$\left. \begin{matrix} n \\ l=1 \\ m_l=0, \pm 1 \end{matrix} \right\} P_1^{m_l}(\cos\vartheta) \begin{cases} P_1^0 = \cos\vartheta \\ P_1^1 = \sin\vartheta \end{cases}$$

$$\psi_{n,1,-1} = R_{n,1}(r) \cdot \sin\vartheta \cdot e^{-j\varphi}$$

$$\psi_{n,1,0} = R_{n,1}(r) \cos\vartheta$$

$$\psi_{n,1,1} = R_{n,1}(r) \sin\vartheta \cdot e^{+j\varphi}$$

látható, hogy: $\hat{L}^2 = -\hbar^2 \Delta_{\vartheta} + \frac{1}{\sin^2\vartheta} \hat{L}_z^2$

$$\left\{ \begin{matrix} \hat{L}^2 Y = L^2 Y \\ \hat{L}_z^2 \Phi = L_z^2 \Phi \end{matrix} \right. \rightarrow \left\{ \begin{matrix} \Phi = e^{\pm j m_l \varphi} \\ L_z^2 = \hbar^2 m_l^2 \end{matrix} \right\} \text{ degenerált állapot}$$

lineáris kombinációval ($m_l = \pm 1$ esetén)

$$\{ e^{-j\varphi}, e^{+j\varphi} \} \rightarrow \{ \sin\varphi, \cos\varphi \}$$

(Feladat: bizonyítás)

Legyen

$$\psi_{n,1,-1} = R_{n,1}(r) \sin\vartheta \cdot \cos\varphi$$

$$\psi_{n,1,0} = R_{n,1}(r) \cos\vartheta$$

$$\psi_{n,1,1} = R_{n,1}(r) \sin\vartheta \sin\varphi$$

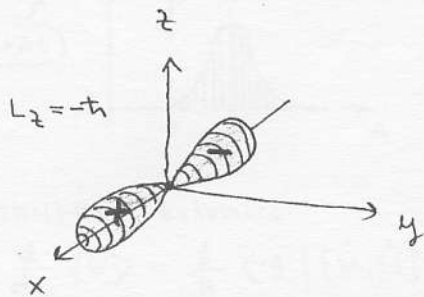
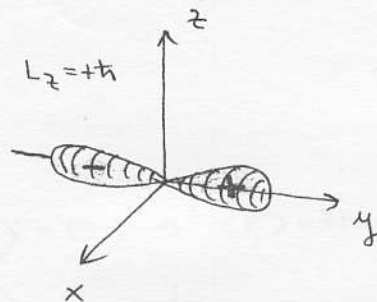
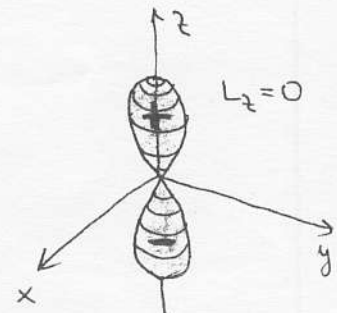
Polar (gömbi) koordináták definíciója

$$x = r \sin\vartheta \cos\varphi$$

$$y = r \sin\vartheta \sin\varphi$$

$$z = r \cos\vartheta$$

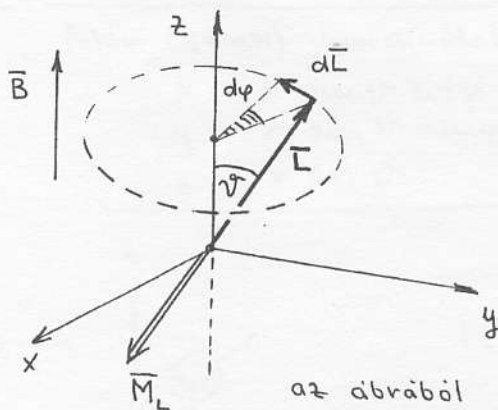
$$\begin{aligned} \psi_{n,1,-1} &= R_{n,1} \frac{x}{r} \\ \psi_{n,1,0} &= R_{n,1} \frac{z}{r} \\ \psi_{n,1,1} &= R_{n,1} \frac{y}{r} \end{aligned}$$


 $\psi_{n,1,-1} \rightarrow p_x \text{ állapot}$

 $\psi_{n,1,1} \rightarrow p_y \text{ állapot}$

 $\psi_{n,1,0} \rightarrow p_z \text{ állapot}$

1.4. Atomok mágneses térben

1.4.1. A mágneses tér hatása a pályamozgásból származó mágneses momentumra

Klasszikus mechanika:



$$\vec{M}_L = -\frac{e}{2m} \vec{L}$$

$$\dot{\vec{L}} = \vec{M}_L \times \vec{B} \quad (\text{forgató nyomaték})$$

$$\frac{d\vec{L}}{dt} = -\frac{e}{2m} \vec{L} \times \vec{B} \rightarrow \boxed{d\vec{L} \perp \vec{L}}$$

↓
precesszió

az ábrából : $dL = L \sin \vartheta d\varphi$
 a mozgásegyenletből: $dL = M_L \cdot B \cdot \sin \vartheta \cdot dt$

$$L \sin \vartheta d\varphi = M_L \cdot B \cdot \sin \vartheta dt$$

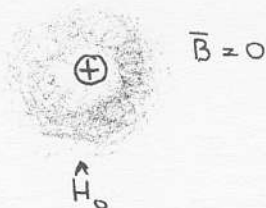
a precesszió szögsebessége: $\frac{d\varphi}{dt} = \frac{M_L \cdot B}{L} \equiv \omega_L$

LARMOR körfrekvencia :

$$\boxed{\omega_L = \frac{eB}{2m}}$$

Kvantummechanika:

hidrogén
atom



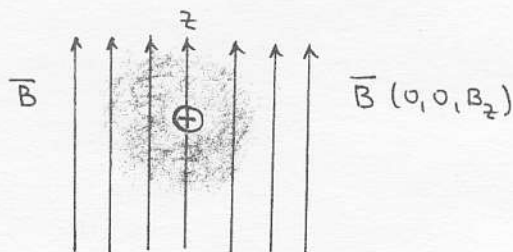
$\vec{B} = 0$

$\hat{H}_0$

$$\hat{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(r)$$

$$\hat{H}_0 \psi_n = E_n \psi_n$$

$$\begin{cases} \psi_n = R \cdot \Theta \cdot e^{jm_e \varphi} \\ E_n = -\frac{E_0}{n^2} \end{cases}$$



$\vec{B} (0, 0, B_z)$

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{W}_m$$

$$\hat{W}_m \equiv -\hat{M}_z B = +\frac{eB}{2m} \hat{L}_z = \omega_L \cdot \hat{L}_z$$

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \omega_L \hat{L}_z$$

állítás:

$$\hat{H} \psi_n = E_n \psi_n$$

$$\uparrow$$

$$R \cdot \Theta \cdot e^{jm_e \varphi}$$

67

igazolás:

$$(\hat{H}_0 + \omega_L \hat{L}_z) \psi_n = \epsilon_n \psi_n$$

$$\hat{H}_0 \psi_n + \omega_L \hat{L}_z \psi_n = \epsilon_n \psi_n$$

$$\underbrace{\hat{H}_0 \psi_n}_{E_n \psi_n}$$

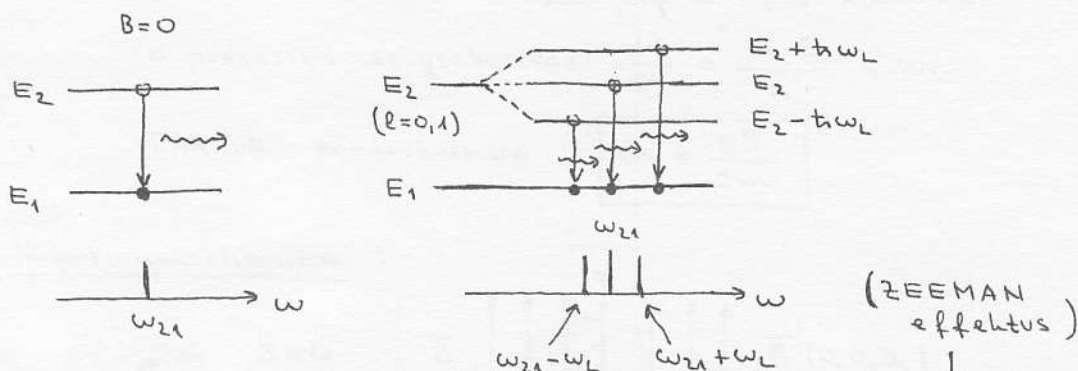
$$\underbrace{\omega_L \hat{L}_z \psi_n}_{\frac{\omega_L \hbar}{j} R \cdot \theta \cdot \frac{\partial}{\partial \varphi} e^{j m_e \varphi}} = \omega_L \hbar m_e \cdot \psi_n$$

azaz

$$\boxed{\epsilon_n = E_n + \hbar \omega_L \cdot m_e} \quad (m_e = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l)$$

A külső mágneses tér hatására az energiaszintek felhasadnak

Kísérleti ellenőrzés:



A valóságban a helyzet bonyolultabb, mert még más effektusok is fellepnek.

1.4.2. Az elektron saját mágneses momentuma és az elektronspin

$Z=47$ Ag atom elektronszerkezete:

$$(1s)^2 (2s)^2 (2p)^6 (3s)^2 (3p)^6 (3d)^{10} (4s)^2 (4p)^6 (4d)^{10} \begin{cases} (4f) & (l=3) & m_e = 0 \pm 1 \pm 2 \pm 3 \\ (5s) & (l=0) & m_e = 0 \end{cases}$$

(vegyérték elektron)



47. elektron

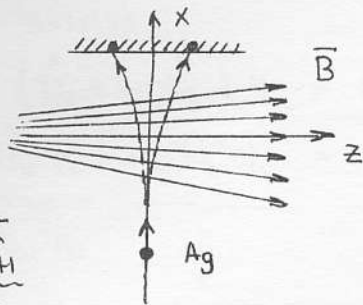
atomtörzs (lezárt héjak)

az atom mágneses momentuma

Ag

$$M_{Ag} = \underbrace{M_t}_{\emptyset \text{ (atomtörzs)}} + M_{47} = \mu_m \cdot m_e = \begin{cases} 0 & (5s) \\ (0, \pm 1, \pm 2, \pm 3) \cdot \mu_B & (4f) \end{cases}$$

STERN-
GERLACH
kísérlet



Az Ag atom nyáláb két részre hasadt

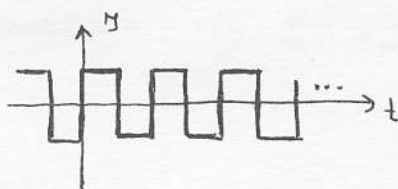
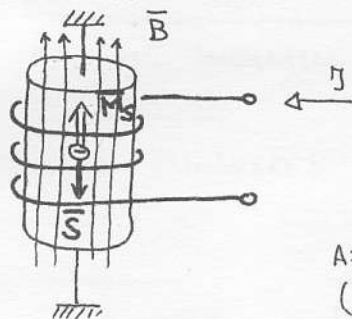
A mérés eredménye:

$$M_{Ag} = \pm \mu_B$$

A mérés értelmezése: az elektronnak (a mozgásától függetlenül) van egy u.n. saját mágneses momentuma.

$$M_{Sz} = \pm \mu_B$$

EINSTEIN-DE HAAS kísérlet



Az elektronnak van saját perdülete is: (neve: spin)

$$S_z = \pm \frac{\hbar}{2}$$

A mérésekből adódik tehát:

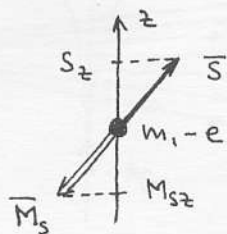
pályamozgás : $M_z = -\frac{e}{2m} L_z \rightarrow \frac{M_z}{L_z} = -\frac{e}{2m}$

saját : $\left. \begin{array}{l} M_{Sz} = \pm \mu_B \\ S_z = \pm \frac{\hbar}{2} \end{array} \right\} \rightarrow \frac{M_{Sz}}{S_z} = -\frac{e}{m} \quad (?)$

Következtetés : Az elektron spinje és saját mágneses momentuma nem magyarázható semmiféle klasszikus dinamikával

Spin olyan dinamikai változó, amelynek nincsen klasszikus megfelelője
(Axióma 2 $\rightarrow$ mit kell tenni?)

elméleti modell (ek)



Pályamozgásból adódó $\bar{L}, \bar{M}_L$	Saját (belső) $\bar{S}, \bar{M}_S$
$L^2 = \hbar^2 l(l+1)$ $L_z = \hbar m_l$ $m_l: \underbrace{-l \dots \dots +l}_{(2l+1) \text{ db}}$ $M_L = \text{all. } L_z$ $M_L = -\frac{e}{2m} g_l \cdot L_z$ $g_l = 1$ $M_L = -\frac{e}{2m} g_l \cdot \hbar m_l$ $\underbrace{-\mu_B \cdot g_l \cdot m_l}_1$	$S^2 = \hbar^2 s(s+1)$ $S_z = \hbar m_s$ $m_s: \underbrace{-s \dots \dots +s}_{(2s+1) \text{ db}}$ $M_S = \text{all. } S_z$ $M_S = -\frac{e}{2m} g_s \cdot S_z$ $g_s = ?$ $M_S = -\frac{e}{2m} g_s \cdot \hbar m_s$ $\underbrace{-\mu_B \cdot g_s \cdot m_s}$

Az elméleti modell "működése"

STERN-GERLACH
KÍSÉLET
($\pm \mu_B$)



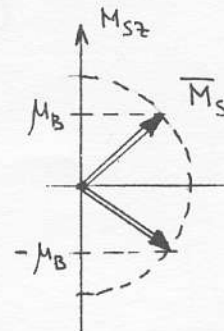
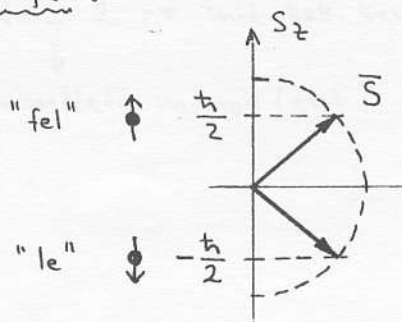
STERN-GERLACH ($\pm \mu_B$)

EINSTEIN-DE HAAS ($\mp \frac{\hbar}{2}$)

$$(S.G.) \begin{cases} M_{Sz} = \pm \mu_B \rightarrow g_s \cdot m_s = \pm 1 \\ 2s+1 = 2 \rightarrow s = \frac{1}{2} \rightarrow m_s = \pm \frac{1}{2} \end{cases} \rightarrow g_s = 2 \rightarrow \underline{S_z = \mp \frac{\hbar}{2}} \quad (E.H.)$$

A spin "vektor" modellje:

$$\begin{cases} S^2 = \hbar^2 \frac{1}{2} \cdot \frac{3}{2} \\ \downarrow \\ S = \frac{\sqrt{3}}{2} \hbar \\ M_s = \sqrt{3} \mu_B \end{cases}$$



1.4.3. A spin-pálya kölcsönhatás

$$S = \frac{\sqrt{3}}{2} \hbar$$

(a spin nagysága nem mérhető)

$$\hat{S}_z \chi = S_z \chi$$

(formális sajátérték egyenlet)

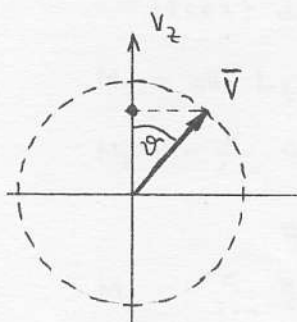
$$\hat{S}_z \alpha = \frac{\hbar}{2} \alpha$$

$$\hat{S}_z \beta = -\frac{\hbar}{2} \beta$$

$$\rightarrow \text{azaz } \chi_{m_s} = \begin{cases} \chi_{\frac{1}{2}} \equiv \alpha \\ \chi_{-\frac{1}{2}} \equiv \beta \end{cases}$$

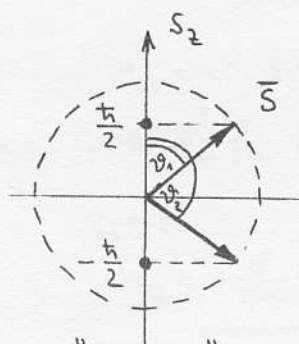
(két sajátfüggvényből álló tér!)

Formálisan bevezethető : ξ u.n. spin változó
 $\chi(\xi)$ u.n. spin függvény

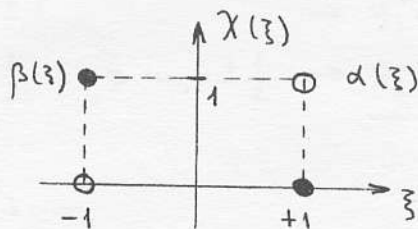
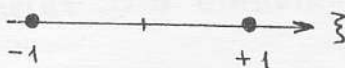


vektor

$$0 \leq \vartheta < \pi$$



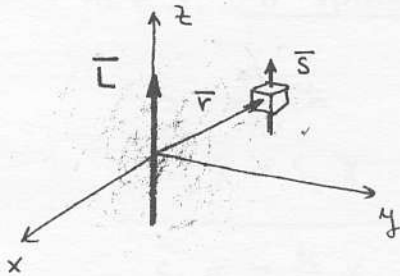
"spinor"

ABSZTRAKCIÓ

(olyan furcsa, hogy
nem is fogjuk használni)

71

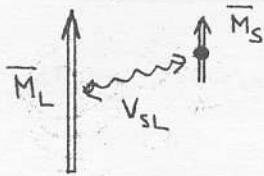
Az elektron-állapotok leírása



pl: $V(r) = -\frac{ze^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r}$ (COULOMB tér)

Egy elektronállapot (neve: SPIN-PÁLYA)

$$\underbrace{\phi_{n,l,m_l,m_s}}_{\text{kvantum-számok}}(\underbrace{\vec{r}, \zeta}_{\text{változók}})$$



$$\phi_{n,l,m_l,m_l+\frac{1}{2}}(\vec{r}, \zeta) \neq \phi_{n,l,m_l,m_l-\frac{1}{2}}(\vec{r}, \zeta)$$

Az "elektronfelhő" függ az elektron spinjétől
↓
SPIN-PÁLYA kölcsönhatás

$$V_{SL} \sim -\vec{M}_L \cdot \vec{M}_S \sim -\vec{L} \cdot \vec{S}$$

$$V_{SL} = -a \vec{L} \cdot \vec{S}$$

Az elkövetkezőkben a spin-pálya kölcsönhatást elhanyagoljuk

$$\phi_{n,l,m_l,m_s}(\vec{r}, \zeta) = \underbrace{\psi_{n,l,m_l}(\vec{r})}_{\substack{\text{pálya állapot} \\ \downarrow \\ \text{általában} \\ \psi(\vec{r})}} \cdot \underbrace{\chi_{m_s}(\zeta)}_{\substack{\text{spin állapot:} \\ \alpha(\zeta) \\ \beta(\zeta)}}$$

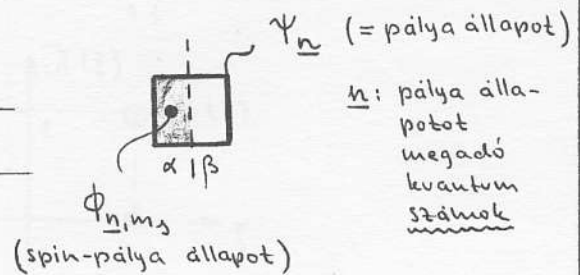
PAULI elv :

Egy spin-pálya állapotban legfeljebb egy elektron lehet

Atomok elektron szerkezete

n=3					
n=2	↑↓	↑	↑	↑	
n=1	↑↓				
	l=0		l=1		

(Hund szabály)

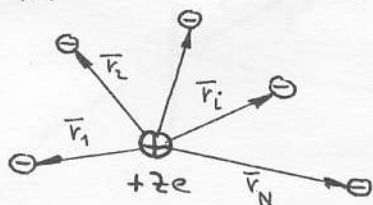


Feladat : (Al, Si, P)

1.5. Sok (azonos) részecskéből álló rendszer vizsgálata

1.5.1. A $\hat{H}$ operátor és az állapotfüggvény

pe:

Klasszikus mechanika:

$$\{\vec{r}_i, \vec{p}_i\}_{i=1}^N \quad (\text{alapmennyiségek})$$

A Hamilton függvény:

$$H = \sum_{i=1}^N \left(\frac{p_i^2}{2m} - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_i} \right) + \underbrace{\frac{1}{2} \sum_{i \neq j}^N \sum_{j=1}^N \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |\vec{r}_i - \vec{r}_j|}}_{\text{elektronok közötti kölcsönhatás (Coulomb)}}$$

Kvantummechanika:

(II. Axióma:)

$$\left\{ \hat{x}_i, \hat{y}_i, \hat{z}_i, \hat{p}_{xi}, \hat{p}_{yi}, \hat{p}_{zi} \right\}_{i=1}^N$$

$\downarrow$ x_i $\downarrow$ $\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_i}$

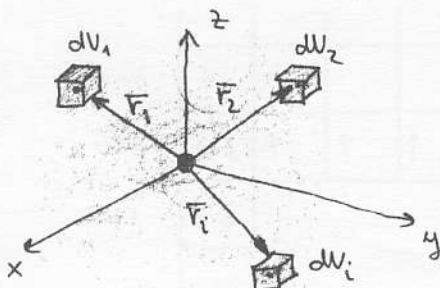
$$\hat{H} = \sum_{i=1}^N \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_i - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_i} \right\} + \underbrace{\frac{1}{2} \sum_{i \neq j}^N \sum_{j=1}^N \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |\vec{r}_i - \vec{r}_j|}}_{\text{(spin-pálya kölcsönhatást elhanyagoljuk)}}$$

$\downarrow$ $\frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_i^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_i^2}$

(III. Axióma) A rendszer összenergiája

$$\hat{H} \Psi = E \Psi \rightarrow \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) \neq \psi_1(\vec{r}_1) \cdot \psi_2(\vec{r}_2) \dots \psi_N(\vec{r}_N)$$

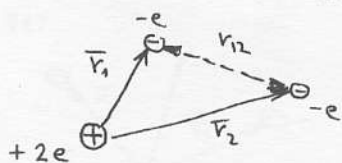
A megoldása matematikailag nagyon bonyolult

↓
közelítések kellene↓
egy-részecske közelítésA Ψ állapotfüggvény fizikai tartalma:

$$|\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3, \dots, \vec{r}_N)|^2 dV_1 dV_2 dV_3 \dots dV_N$$

1.5.2 A HARTREE közelítés és az SCF módszer

Példa modell: He atom ($Z=2, N=2$)



Csak a pályá-állapotokkal foglalkozunk.
A spin-pálya kölcsönhatást elhanyagoljuk.

$$\hat{H} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_1 + V_c(r_1) \right] + \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_2 + V_c(r_2) \right] + \underbrace{\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}}_{\substack{\text{kölcsönhatás} \\ \equiv W(r_{12})}}$$

$\uparrow$ $\frac{2e^2}{4\pi\epsilon_0 r_1}$ $\uparrow$

$\equiv \hat{H}_0$ (a kölcsönhatás mentes elektronrendszer Hamilton operátora)

A feladat:

$$\hat{H} \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = E \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \rightarrow \text{megoldása nagyon bonyolult}$$

Durva közelítés: Az elektronok közötti kölcsönhatást elhanyagoljuk: $W(r_{12}) \cong 0$

$$\hat{H}_0 \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = E_0 \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$$

Szeparálható megoldás: $\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \psi_i(\vec{r}_1) \cdot \psi_j(\vec{r}_2)$

jelölési megállapodás:

$\psi_i(\vec{r}_k)$
 $\uparrow$ az állapotfüggvény azonosítója $\nwarrow$ az elektron azonosítója

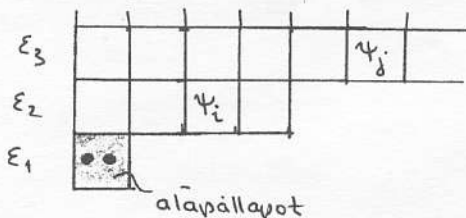
Adódik a következő (Feladat: bizonyítás)

$$\left. \begin{aligned} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_1 + V_c(r_1) \right] \psi_i(\vec{r}_1) &= \epsilon_i \psi_i(\vec{r}_1) \\ \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_2 + V_c(r_2) \right] \psi_j(\vec{r}_2) &= \epsilon_j \psi_j(\vec{r}_2) \end{aligned} \right\} \begin{array}{l} \text{Két független} \\ \text{egyenlet.} \\ \text{Matematikai alakjuk} \\ \text{pontosan ugyanolyan.} \end{array}$$

↓
Matematikailag ez ekvivalens egy egyenlettel

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V_c(\vec{r}) \right] \psi(\vec{r}) = \epsilon \psi(\vec{r})$$

Megoldások:



Az alapállapot:

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \psi_1(\vec{r}_1) \psi_1(\vec{r}_2)$$

$$E = 2\epsilon_1$$

A Hartree közelítés:

megoldandó a: $\hat{H} \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = E \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$

$$E = \langle \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) | \hat{H} | \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \rangle = E_{\text{mért}}$$

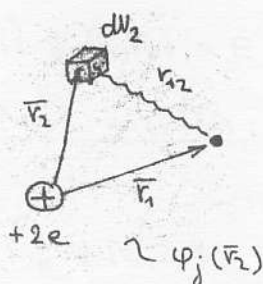
közelítés:

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \approx \tilde{\Psi}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \equiv \varphi_i(\vec{r}_1) \varphi_j(\vec{r}_2)$$

$$\tilde{E} = \underbrace{\langle \tilde{\Psi}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) | \hat{H} | \tilde{\Psi}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \rangle}_{?} \rightarrow E_{\text{mért}}$$

legyen:

$$\left. \begin{aligned} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_1 + V_c(r_1) + U_2(\vec{r}_1) \right] \varphi_i(\vec{r}_1) &= \tilde{E}_i \varphi_i(\vec{r}_1) \\ \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_2 + V_c(r_2) + U_1(\vec{r}_2) \right] \varphi_j(\vec{r}_2) &= \tilde{E}_j \varphi_j(\vec{r}_2) \end{aligned} \right\} \text{csatolt} \\ \text{egyenletek}$$



↑
az elektronok közötti kölcsönhatást
veszi (közelítőleg!) figyelembe.

↓
HARTREE javaslata a következő volt:

$$U_2(\vec{r}_1) = \int_{\infty} \frac{e^2 |\varphi_j(\vec{r}_2)|^2}{4\pi\epsilon_0 |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} dV_2$$

$$g_j(\vec{r}_2) \equiv -e |\varphi_j(\vec{r}_2)|^2 \quad (\text{a második elektron mint töltésfelhő})$$

Adódik tehát:

$$\left. \begin{aligned} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_1 + V_c(r_1) + \int \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} |\varphi_j(\vec{r}_2)|^2 dV_2 \right] \cdot \varphi_i(\vec{r}_1) &= \tilde{E}_i \varphi_i(\vec{r}_1) \\ \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_2 + V_c(r_2) + \int \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} |\varphi_i(\vec{r}_1)|^2 dV_1 \right] \cdot \varphi_j(\vec{r}_2) &= \tilde{E}_j \varphi_j(\vec{r}_2) \end{aligned} \right\}$$

csatolt integro-differenciál egyenlet rendszer.

SCF (Self Consistent Field) megoldásokat keresünk.

Megoldás módszere: iteráció (Ha konvergál $\rightarrow$ sokszor NEM)

$$0: \varphi_j(\vec{r}_2)^{(0)} \rightarrow \varphi_i(\vec{r}_1)^{(0)}$$

$$1: \varphi_j(\vec{r}_2)^{(1)} \rightarrow \varphi_i(\vec{r}_1)^{(1)}$$

$$2: \varphi_j(\vec{r}_2)^{(2)} \rightarrow \varphi_i(\vec{r}_1)^{(2)}$$

$$\downarrow \text{stb...} \quad \text{SCF ha} \quad \left\{ \begin{aligned} \varphi_j^{(n)} &\approx \varphi_j^{(n+1)} \\ \varphi_i^{(n)} &\approx \varphi_i^{(n+1)} \end{aligned} \right\}$$

75

Általában : N db elektronból álló rendszer esetén

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_i + V_c(r_i) + \sum_{\substack{j=1 \\ (j \neq i)}}^N \int \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |\vec{r}_i - \vec{r}_j|} |\varphi_j(\vec{r}_j)|^2 dV_j \right] \varphi_i(\vec{r}_i) = \epsilon_i \varphi_i(\vec{r}_i) \quad (i=1,2,3,4,\dots,N)$$

$$\sum_{\substack{j=1 \\ (j \neq i)}}^N U_j(\vec{r}_i)$$

KÖZELÍTÉS

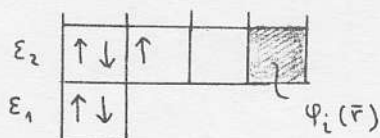
$$\equiv U(\vec{r}_i)$$

minden elektróra pontosan ugyanolyan alakú kifejezés (valójában N db teljesen egyforma egyenletünk van)

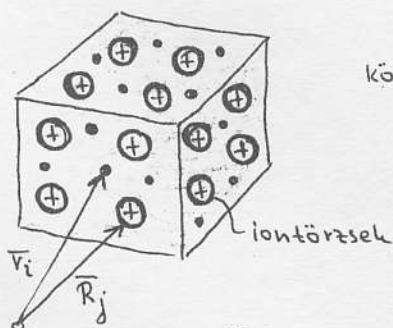
Így csak egyetlen egyenlet maradt

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V_c(r) + U(\vec{r}) \right] \varphi_i(\vec{r}) = \epsilon_i \varphi_i(\vec{r})$$

$\equiv V(\vec{r})$ (u.n. modell potenciál, ettől függ a közelítés jósága!)



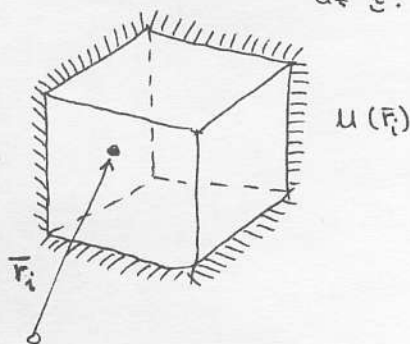
Példa (a szilárdtestfizikában használt egyszernű fémmmodell)

az i . elektron

$$(i=1,2,3,\dots,N \approx 6 \cdot 10^{23})$$

N db (vegyérték) elektróból áll a rendszer

KÖZELÍTÉS



$$\sum_{j=1}^N V_c(\vec{r}_i; \vec{r}_j) + \sum_{\substack{j=1 \\ (j \neq i)}}^N U_j(\vec{r}_i) \equiv U(\vec{r}_i)$$

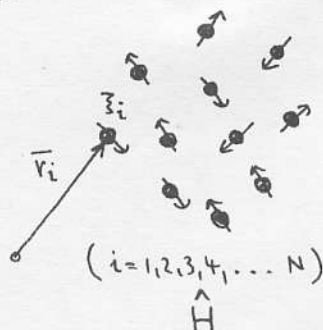
az iontörzsek hatása

a többi elektron hatása

potenciál doboz

↓
SOMMERFELD
fémmmodell

1.5.3. A PAULI elv



N db azonos részecskéből álló rendszer.

A rendszer energiája:

$$\hat{H}\Phi = E\Phi$$

$$\Phi(\bar{x}_1, \bar{x}_2, \bar{x}_3, \dots, \bar{x}_i, \dots, \bar{x}_N)$$

$$\bar{x}_i \equiv (\bar{r}_i, \bar{z}_i)$$

A részecskék NEM KÜLÖNBÖZTETHETŐK MEG:

$$\left| \Phi(\dots \bar{x}_i \dots \bar{x}_j \dots) \right|^2 = \left| \Phi(\dots \bar{x}_j \dots \bar{x}_i \dots) \right|^2$$

Tehát

$$\Phi(\dots \bar{x}_i \dots \bar{x}_j \dots) = c \cdot \Phi(\dots \bar{x}_j \dots \bar{x}_i \dots) = \underbrace{c \cdot c}_{c^2=1} \cdot \Phi(\dots \bar{x}_i \dots \bar{x}_j \dots)$$

$$c^2=1 \Rightarrow \boxed{c=\pm 1}$$

PAULI elv (áttalánosítva!)

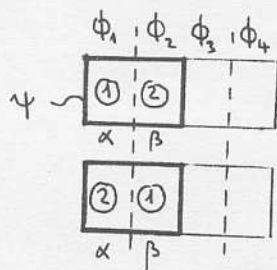
$$c = \begin{cases} -1 & \text{feles spinű részecskék} \rightarrow \text{fermionok} \rightarrow \text{FERMI-DIRAC stat.} \\ +1 & \text{egész spinű részecskék} \rightarrow \text{bozonok} \rightarrow \text{BOSE-EINSTEIN stat.} \end{cases}$$

Következmények

1. Fermionrendszer (pl $N=2$, elektronok $S_z = \pm \frac{\hbar}{2}$)

$$\Phi(\bar{x}_1, \bar{x}_2) \approx \tilde{\Phi}(\bar{x}_1, \bar{x}_2) = \phi_1(\bar{x}_1)\phi_2(\bar{x}_2) \neq \phi_1(\bar{x}_2)\phi_2(\bar{x}_1) = -\tilde{\Phi}(\bar{x}_2, \bar{x}_1)$$

(Ez így NEM jó)



$$\tilde{\Phi}(\bar{x}_1, \bar{x}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\phi_1(\bar{x}_1)\phi_2(\bar{x}_2) - \phi_1(\bar{x}_2)\phi_2(\bar{x}_1) \right] =$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} \phi_1(\bar{x}_1) & \phi_1(\bar{x}_2) \\ \phi_2(\bar{x}_1) & \phi_2(\bar{x}_2) \end{vmatrix}$$

Áttalánosítás $\downarrow$

$$\tilde{\Phi}(\bar{x}_1, \bar{x}_2, \dots, \bar{x}_N) \equiv \frac{1}{N!}$$

(u.n. determináns
hullámfüggvény)

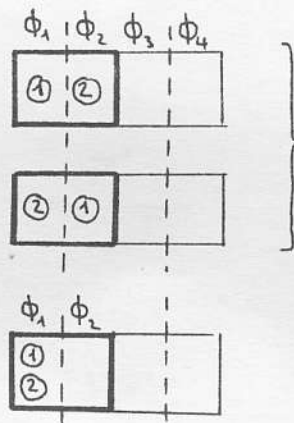
$$\begin{vmatrix} \phi_1(\bar{x}_1) & \phi_1(\bar{x}_2) & \dots & \phi_1(\bar{x}_N) \\ \phi_2(\bar{x}_1) & \phi_2(\bar{x}_2) & \dots & \phi_2(\bar{x}_N) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \phi_N(\bar{x}_1) & \phi_N(\bar{x}_2) & \dots & \phi_N(\bar{x}_N) \end{vmatrix} \quad \begin{matrix} \circlearrowleft \\ \circlearrowright \end{matrix} \quad \begin{matrix} \circlearrowleft \\ \circlearrowright \end{matrix}$$

(-1)

Tehát: csak egy részecske lehet ugyanabban a spin-pálya állapotban.

2. Bozonrendszer (pl: $N=2$)

$$\Phi(\bar{x}_1, \bar{x}_2) \approx \tilde{\Phi}(\bar{x}_1, \bar{x}_2) = \underbrace{\phi_1(\bar{x}_1)\phi_2(\bar{x}_2) \neq \phi_1(\bar{x}_2)\phi_2(\bar{x}_1)}_{(\text{Ez így NEM jó!})} = \tilde{\Phi}(\bar{x}_2, \bar{x}_1)$$



$$\tilde{\Phi}(\bar{x}_1, \bar{x}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\phi_1(\bar{x}_1)\phi_2(\bar{x}_2) + \phi_1(\bar{x}_2)\phi_2(\bar{x}_1)]$$

DE LEHET az alábbi is !

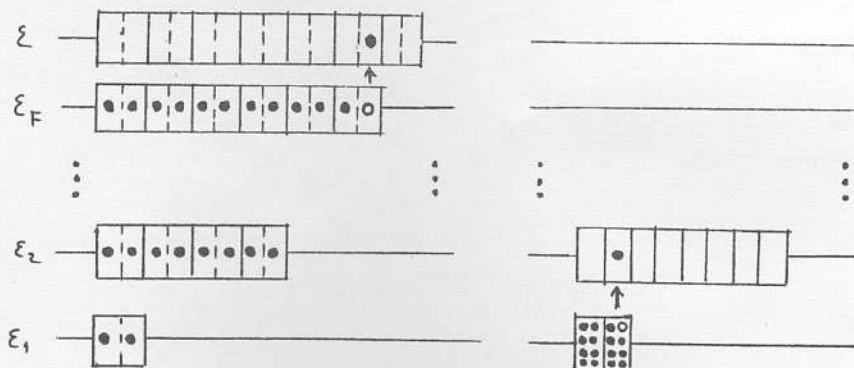
$$\tilde{\Phi}(\bar{x}_1, \bar{x}_2) = \phi_1(\bar{x}_1)\phi_1(\bar{x}_2) = \tilde{\Phi}(\bar{x}_2, \bar{x}_1)$$

Tehát egynél több részecske is lehet ugyanabban a spin-pályán

↓ Általánosítás

$$\tilde{\Phi}(\bar{x}_1, \bar{x}_2, \dots, \bar{x}_N) = \underbrace{C \sum \hat{O}}_{\text{}} (\phi_{i_1}(\bar{x}_1)\phi_{i_2}(\bar{x}_2) \dots \phi_{i_N}(\bar{x}_N))$$

Fermion és bozon rendszer alapállapotainak az összehasonlítása:

Alapállapot ($T=0$)↓
gejlesztés

ELTÉRŐ MAKROSZKÓPIKUS VISELKEDÉS → MÉRÉSSSEL ellenőrizhető!

↓

Nagyszámú részecske esetén ($N \approx 6 \cdot 10^{23}$)

Statisztikus módszerek kellenek → Kvantumstatistikák

1.5.4. Kvantumstatistikák

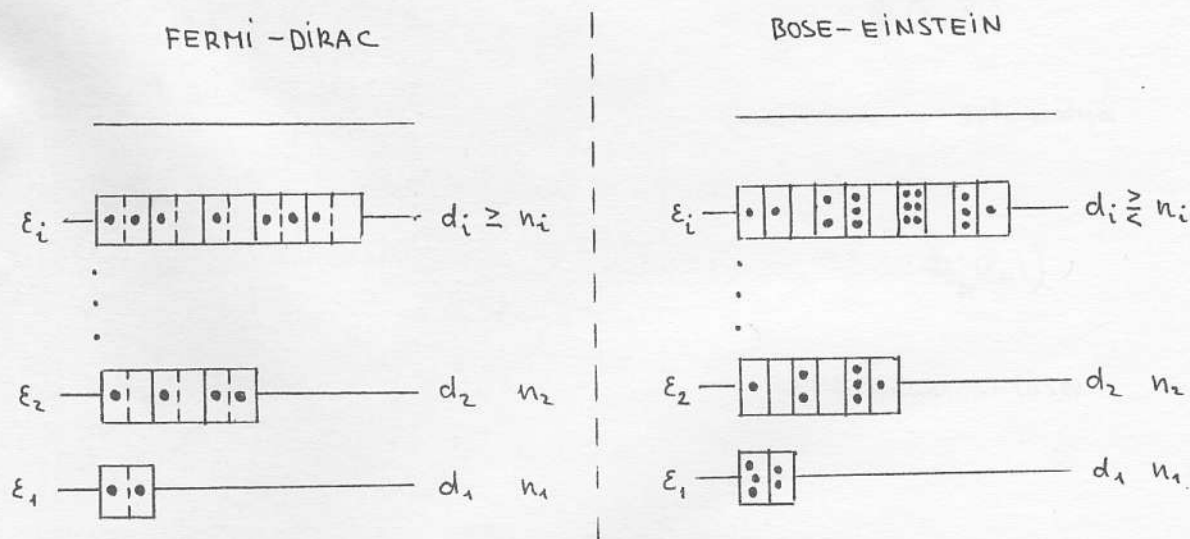
N db részecskéből álló rendszer : $\begin{cases} \text{bozonok} \\ \text{fermionok} \end{cases}$

$$\Phi(\bar{x}_1, \bar{x}_2, \dots, \bar{x}_i, \dots, \bar{x}_j, \dots, \bar{x}_N) = \pm \Phi(\bar{x}_1, \bar{x}_2, \dots, \bar{x}_j, \dots, \bar{x}_i, \dots, \bar{x}_N)$$

Egy-részecske közelítés

$$\Phi(\bar{x}_1, \bar{x}_2, \dots, \bar{x}_i, \dots, \bar{x}_N) \cong \underbrace{C \sum \hat{O}}_{\text{egy-részecske állapotok}} (\underbrace{\phi_{i_1}(x_1) \cdot \phi_{i_2}(x_2) \dots \phi_{i_N}(x_N)}_{\text{egy-részecske állapotok}})$$

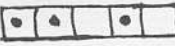
$N \gg 1 \rightarrow$ statisztikai módszerek.

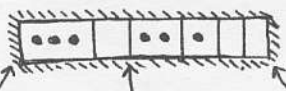


Termodinamikai állapot (T) $\rightarrow$ makroállapot : $\{n_1, n_2, n_3, \dots, n_i, \dots\}$
 $\downarrow$
 mikroállapot
 termodinamikai valószínűség : W

$$W(n_1, n_2, n_3, \dots, n_i, \dots) = \begin{cases} \prod_i \binom{d_i}{n_i} = \prod_i \frac{d_i!}{n_i! (d_i - n_i)!} & \text{(F-D)} \\ \prod_i \frac{(d_i + n_i - 1)!}{n_i! (d_i - 1)!} \approx \prod_i \frac{(d_i + n_i)!}{n_i! d_i!} & \text{(B-E)} \end{cases}$$

Magyarázat: kombinatorikai modell:

(F-D)  $\binom{d_i}{n_i}$

(B-E) 
 rögzített fal mozgatható fal rögzített fal

a mozgatható falak száma : $(d_i - 1)$

Feladat:

$$X / (\underbrace{n_1, n_2, \dots, n_i, \dots}_2) = \max ; \text{ feltéve, hogy: } \sum_i n_i = N$$

$$\sum_i \varepsilon_i n_i = E$$

Megolais :

Feltételes szélsőérték feladat $\rightarrow$ közönséges szélsőérték feladat
LAGRANGE (módszer)

$$W(\dots n_i \dots) \rightarrow S = k \cdot \ln W \rightarrow S = \ln W$$

$$\left. \begin{aligned} \sum_i n_i &= N & \rightarrow & N - \sum_i n_i = 0 \\ \sum_i \varepsilon_i n_i &= E & \rightarrow & E - \sum_i \varepsilon_i n_i = 0 \end{aligned} \right\} \text{ mellékfeltételek}$$

$$K(n_1, n_2, \dots, n_i, \dots) \equiv S + \underset{\substack{\uparrow \\ \text{kesőbb meghatározható}}}{\alpha} (N - \sum_i n_i) + \underset{\substack{\uparrow \\ \text{állandók}}}{\beta} (E - \sum_i \epsilon_i n_i)$$

$$\boxed{\frac{\partial K}{\partial u_i} = 0} \quad (u_i) \text{ közöséges (feltétel nélküli) szélső érték}$$

$$\frac{\partial K}{\partial n_i} = \frac{\partial}{\partial n_i} \ln W + \alpha(\phi - 1) + \beta(\phi - \varepsilon_i) = \underbrace{\frac{\partial}{\partial n_i} \ln W}_{(\text{B-E}) \text{ vagy } (\text{F-D})} - \alpha - \beta \varepsilon_i = 0$$

$$\ln W = \begin{cases} \sum_i \ln d_i! + \sum_i [-\ln(d_i - n_i)! - \ln n_i!] & (F-D) \\ \sum_i [\ln(d_i + n_i)! - \ln n_i!] - \sum_i \ln d_i! & (B-E) \end{cases}$$

STIRLING közelítés (matematika) : $\ln x! \approx x \ln x - x$ ha $x \gg 1$
($n_i \gg 1$ általában, ha $N \gg 1$)

$$\ln W \approx \begin{cases} \sum_i \left\{ -(d_i - u_i) \ln(d_i - u_i) + (d_i - u_i) - u_i \ln u_i + u_i \right\} + \sum_i \ln d_i! & \text{(F-D)} \\ \sum_i \left\{ (d_i + u_i) \ln(d_i + u_i) - (d_i + u_i) - u_i \ln u_i + u_i \right\} - \sum_i \ln d_i! & \text{(B-E)} \end{cases}$$

azaz

$$\ln W \approx \begin{cases} \sum_i \left\{ -(d_i - u_i) \ln (d_i - u_i) - u_i \ln u_i \right\} & + \text{allando} & (F-D) \\ \sum_i \left\{ (d_i + u_i) \ln (d_i + u_i) - u_i \ln u_i \right\} & + \text{allando} & (B-E) \end{cases}$$

80

$$\frac{\partial \ln W}{\partial n_i} = \begin{cases} \left[+\ln(d_i - n_i) - \frac{(d_i - n_i)}{(d_i - n_i)}(-1) - \ln n_i - \frac{n_i}{n_i} \right] & \text{(F-D)} \\ \left[+\ln(d_i + n_i) + \frac{(d_i + n_i)}{(d_i + n_i)} - \ln n_i - \frac{n_i}{n_i} \right] & \text{(B-E)} \end{cases}$$

$$\frac{\partial \ln W}{\partial n_i} = \begin{cases} \ln\left(\frac{d_i}{n_i} - 1\right) & \text{(F-D)} \\ \ln\left(\frac{d_i}{n_i} + 1\right) & \text{(B-E)} \end{cases} = \ln\left(\frac{d_i}{n_i} \mp 1\right)$$

Tehát

$$\frac{\partial K}{\partial n_i} = \ln\left(\frac{d_i}{n_i} \mp 1\right) - \alpha - \beta \varepsilon_i = 0$$

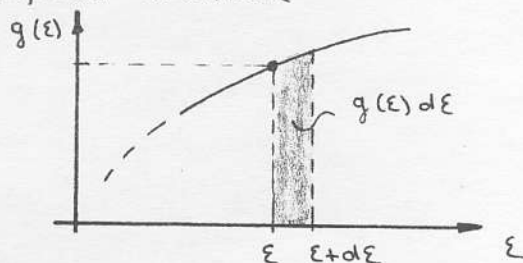
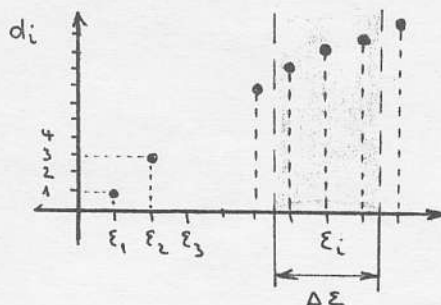
$$\frac{d_i}{n_i} \mp 1 = e^{\alpha + \beta \varepsilon_i}$$

$$\frac{d_i}{n_i} = e^{\alpha + \beta \varepsilon_i} \pm 1$$

$$n_i = \frac{d_i}{e^{\alpha + \beta \varepsilon_i} \pm 1} \equiv d_i \cdot \underbrace{f(\varepsilon_i; \alpha, \beta)}_{\text{elosztásfüggvény}}$$

$$\sigma = \begin{cases} +1 & \text{FERMI-DIRAC} \\ 0 & \text{MAXWELL-BOLTZMANN (!)} \\ -1 & \text{BOSE-EINSTEIN} \end{cases}$$

$N \gg 1$ esetén a Heves u.n. kvázifolytonos közelítésre



d_i ($\equiv$ degeneráció azaz a spin-pálya állapotok száma)



$g(\varepsilon)$ ($\equiv$ az állapotsűrűség)

$$\rightarrow g(\varepsilon) \equiv d_s \cdot \mathcal{N}(\varepsilon)$$

$\underbrace{\hspace{1cm}}_{\text{spin állapotok száma}} \cdot \underbrace{\hspace{1cm}}_{\text{pálya állapot sűrűség}}$

Tehát:

kvantált energiaszintek $\rightarrow$ (kvázi) folytonos energiaszintek

$$d_i \rightarrow g(\epsilon) d\epsilon$$

$$n_i \rightarrow n(\epsilon) d\epsilon$$

$$\epsilon_i \rightarrow \epsilon$$

$$n_i = d_i f(\epsilon_i; \alpha, \beta) \rightarrow n(\epsilon) d\epsilon = g(\epsilon) \cdot f(\epsilon; \alpha, \beta) d\epsilon$$

$$n(\epsilon) = g(\epsilon) \frac{1}{e^{\alpha + \beta \epsilon} + \sigma}$$

 β meghatározása:

$$\sum_i \epsilon_i n_i = E \quad (= \text{állandó})$$

$$E = E(T) \rightarrow \beta = \beta(T) \quad f(\epsilon) \rightarrow f^{\text{M.B.}}(\epsilon) \quad (\text{ha } \epsilon \gg \epsilon_1)$$

$$f(\epsilon) = \frac{1}{e^{\alpha + \beta \epsilon} + \sigma} \rightarrow \underbrace{e^{-\alpha - \beta \epsilon}} = f^{\text{M.B.}}(\epsilon) = \text{all.} \cdot \underbrace{e^{-\frac{\epsilon}{kT}}}$$

$$\boxed{\beta = \frac{1}{kT}}$$

 α meghatározása:

$$\sum_i n_i = N \rightarrow \int n(\epsilon) d\epsilon = \int \underbrace{g(\epsilon)}_{\text{ismerni kell!}} f(\epsilon; T, \alpha) d\epsilon = N = \text{állandó}$$

$$\alpha \equiv -\frac{\mu}{kT} \quad (\mu \text{ u.n. kémiai potenciál} \rightarrow \text{termodinamika})$$

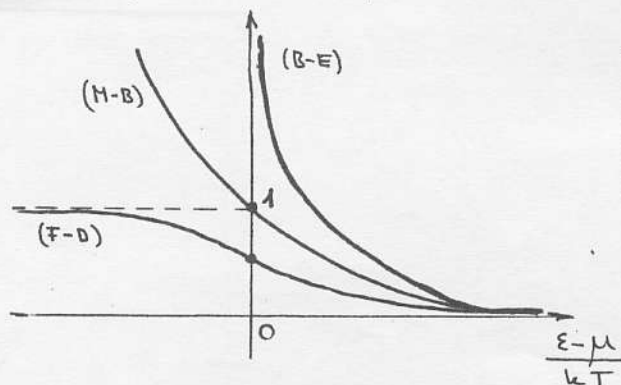
$$\boxed{N = \text{állandó} \rightarrow \mu}$$

Tehát:

$$\boxed{f(\epsilon, T) = \frac{1}{e^{\frac{\epsilon - \mu}{kT} + \sigma}}}$$

$$\sigma = \begin{cases} +1 & \text{FERMI-DIRAC} \\ 0 & \text{MAXWELL-BOLTZMANN} \\ -1 & \text{BOSE-EINSTEIN} \end{cases}$$

Szemléltetése közös ábrán

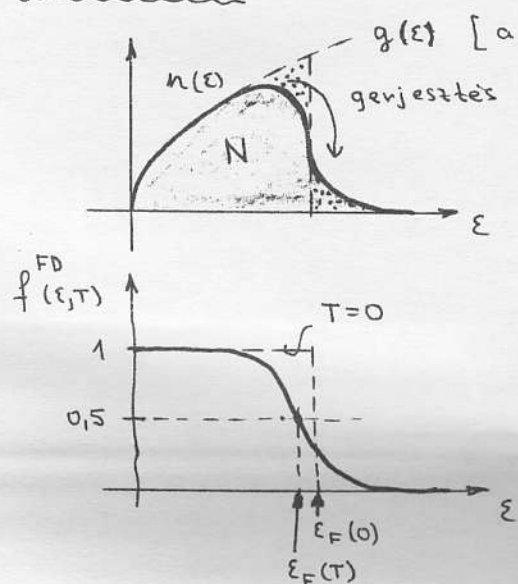


$$\boxed{n(\epsilon) = g(\epsilon) \frac{1}{e^{\frac{\epsilon - \mu}{kT} + \sigma}}}$$

A végtelenek energiaszerinti eloszlás függvénye

A μ kémiai potenciál meghatározása:

FERMI-DIRAC statisztika esetén:



$$\mu(T) \equiv \varepsilon_F(T) \quad (\text{heve: FERMI energia})$$

$$n(\varepsilon) = g(\varepsilon) \cdot f^{FD}(\varepsilon, T)$$

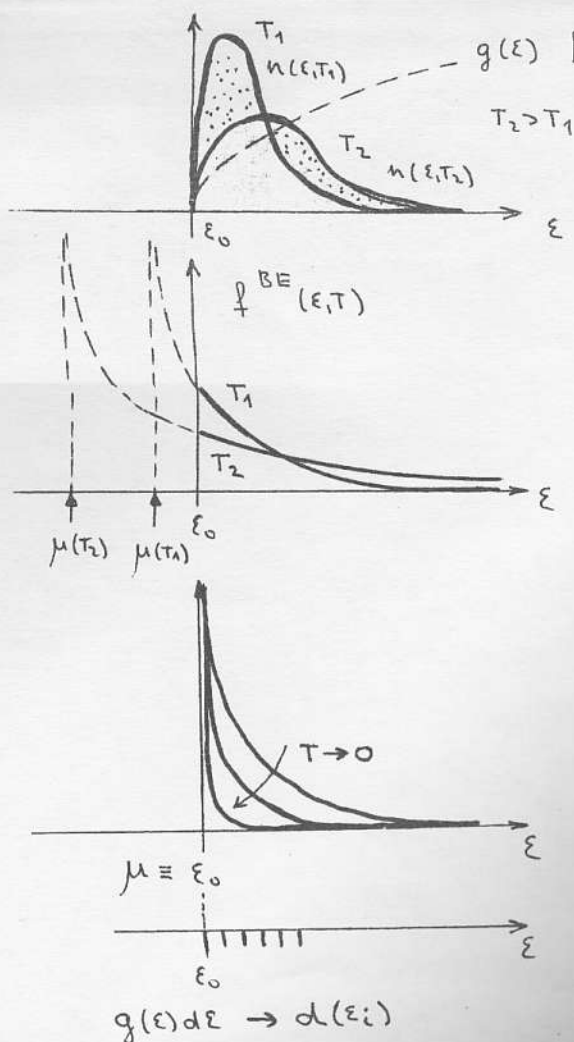
$$N = \int_0^{\infty} n(\varepsilon) d\varepsilon = \int_0^{\infty} g(\varepsilon) \cdot f^{FD}(\varepsilon, T) d\varepsilon =$$

$N = \text{állandó!}$

$\downarrow$

$\varepsilon_F(T)$

BOSE-EINSTEIN statisztika esetén:

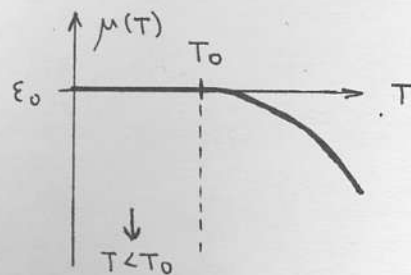


$$n(\varepsilon) = g(\varepsilon) \cdot f^{BE}(\varepsilon, T)$$

$$N = \int_0^{\infty} g(\varepsilon) f^{BE}(\varepsilon, T) d\varepsilon = \text{állandó}$$

$\rightarrow \mu(T)$

$$f^{BE} \geq 0 \quad \text{ha} \quad \mu(T) \leq \varepsilon_0$$



$$N = N_0(T) + N_g(T) = \text{állandó}$$

$\downarrow$

$T < T_0$

$\downarrow$

MODELL: A bozonok száma változik
[$N = N(T)$]

Elektromágneses
hullámok

FOTONOK

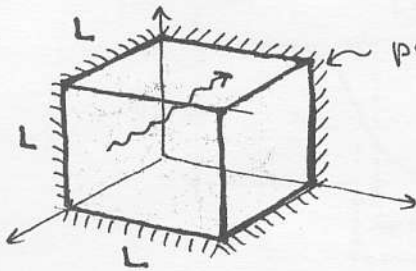
Rugalmas közegben
fellépő hullámok

FONONOK

KLASSZIKUS
FIZIKAKVANTUM
FIZIKA

BOZONOK

Modell:

peremfeltételek $\rightarrow$ állóhullámok $\rightarrow$ módusok

$$\vec{k} (k_x, k_y, k_z)$$

$$\omega = ck \quad \text{diszperziós reláció}$$

$$c = \frac{\omega}{k} = \frac{d\omega}{dk}$$

$$\Psi(\vec{r}) = A \cdot \underbrace{\sin\left(n_x \frac{\pi}{L} x\right)}_{\equiv k_x} \underbrace{\sin\left(n_y \frac{\pi}{L} y\right)}_{\equiv k_y} \underbrace{\sin\left(n_z \frac{\pi}{L} z\right)}_{\equiv k_z}$$

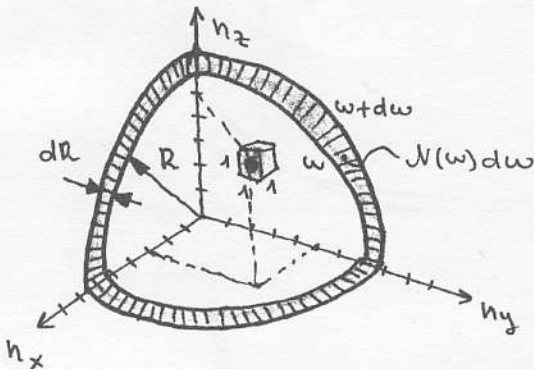
$$\omega^2 = c^2 (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)$$

$$\omega^2 = c^2 \frac{\pi^2}{L^2} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2)$$

$$\text{módus} \Rightarrow (n_x, n_y, n_z)$$

módussűrűség ($\equiv$ állapotsűrűség)

$$g(\omega) = d_p \cdot \mathcal{N}(\omega)$$

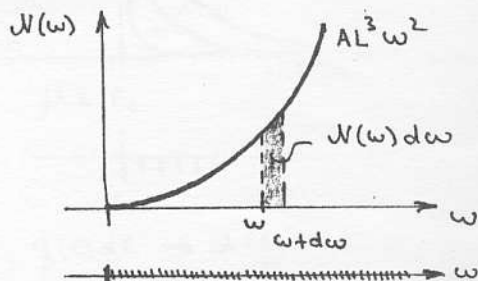
↑ térbeli állapotsűrűség
polarizációk száma

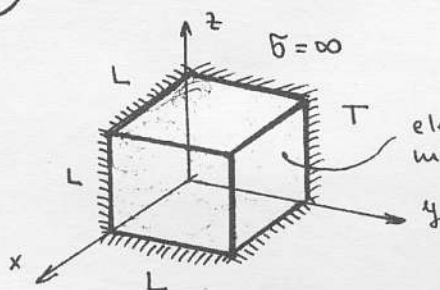
$$n_x^2 + n_y^2 + n_z^2 = \frac{L^2}{c^2 \pi^2} \omega^2 \equiv R^2$$

$$dR = \frac{L}{c\pi} d\omega$$

$$\mathcal{N}(\omega) d\omega = \frac{1}{8} 4\pi R^2 dR = \frac{\pi^2}{2} \frac{L^2 \omega^2}{c^2 \pi^2} \cdot \frac{L}{c\pi} d\omega = A \cdot L^3 \omega^2 d\omega$$

$$\mathcal{N}(\omega) = A \cdot L^3 \cdot \omega^2$$





elektromágneses
mező ($\vec{E}, \vec{B}$)

→ állóhullámok → módusok

az ω frekvenciájú módusok
száma:

$$g(\omega) d\omega = \underbrace{d_p \cdot N(\omega) d\omega}_{2 \cdot A L^3 \omega^2}$$

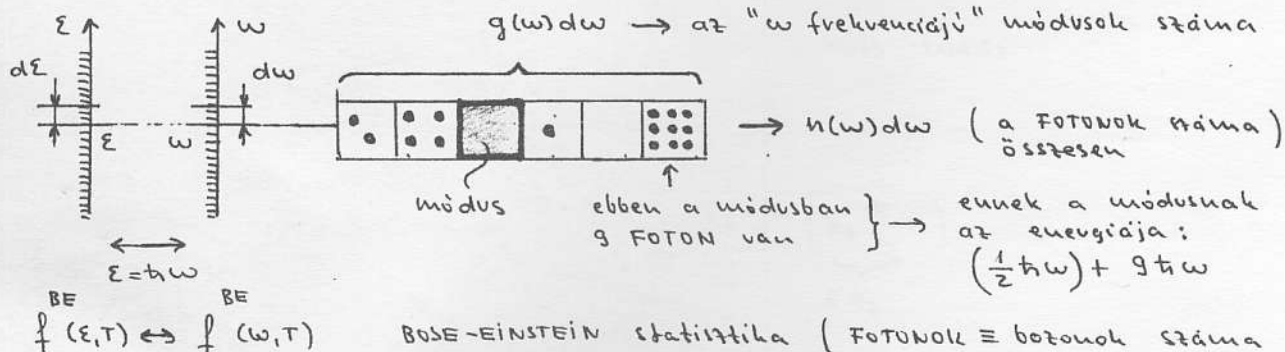
Egy ω frekvenciájú módus energiája:

Modell

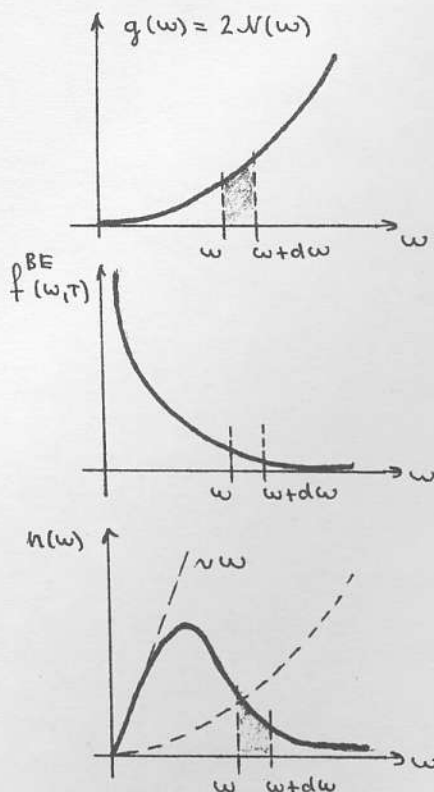
$$\varepsilon_{\text{mod}} = \underbrace{\frac{1}{2} \hbar \omega}_{\text{nullaponti energia}} + \underbrace{n \cdot \hbar \omega}_{\text{FOTON}} \quad (n=0,1,2,\dots)$$

FOTON $\equiv$ "energia adag (kvantum)"

Egy ω frekvenciájú módus " n (db) FOTONT tartalmaz"



BOSE-EINSTEIN statisztika (FOTONOK $\equiv$ bozonok száma változik: $\mu \equiv 0$, a nullaponti energiától eltekintünk)



Az összenergia:

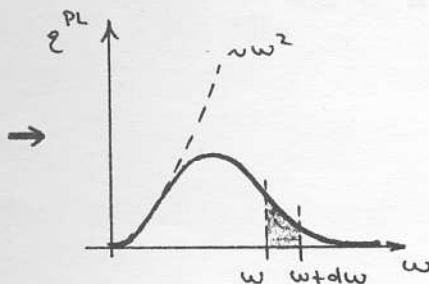
$$E = \int_0^\infty (\hbar \omega) \cdot n(\omega) d\omega = \int_0^\infty (\hbar \omega) \cdot g(\omega) f^{\text{BE}}(\omega, T) d\omega =$$

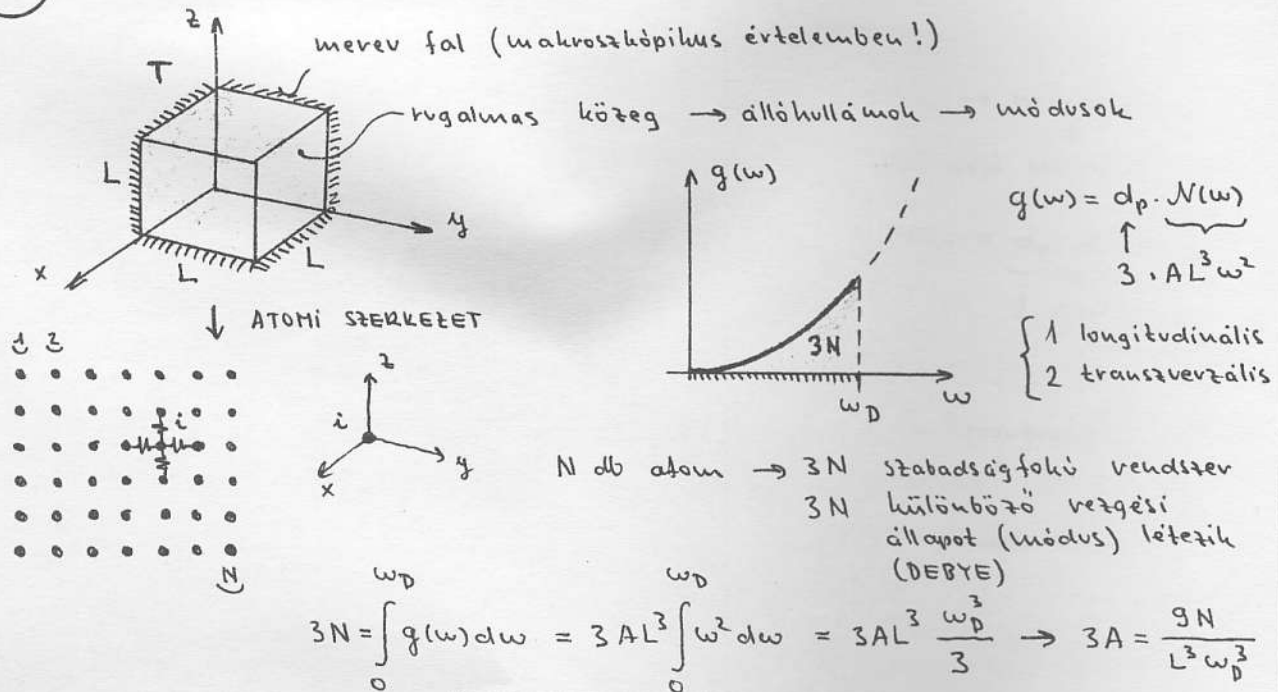
$$= \int_0^\infty \hbar \omega \cdot 2AL^3 \omega^2 \cdot \frac{1}{e^{\frac{\hbar \omega}{kT}} - 1} d\omega \equiv L^3 \int_0^\infty g(\omega) d\omega$$

azaz

$$g(\omega) = 2A \frac{\hbar \omega^3}{e^{\frac{\hbar \omega}{kT}} - 1} \sim \xi^{\text{PL}}(\omega) \quad (\text{PLANCK})$$

↓
Fekete test
(hőmérsékleti)
sugárzása.



1.5.5.2. Fonongáz

Tehát:

$$g(\omega) = \begin{cases} \frac{9N}{L^3 \omega_D^3} \omega^2 & \text{ha } \omega \leq \omega_D \\ 0 & \text{ha } \omega > \omega_D \end{cases}$$

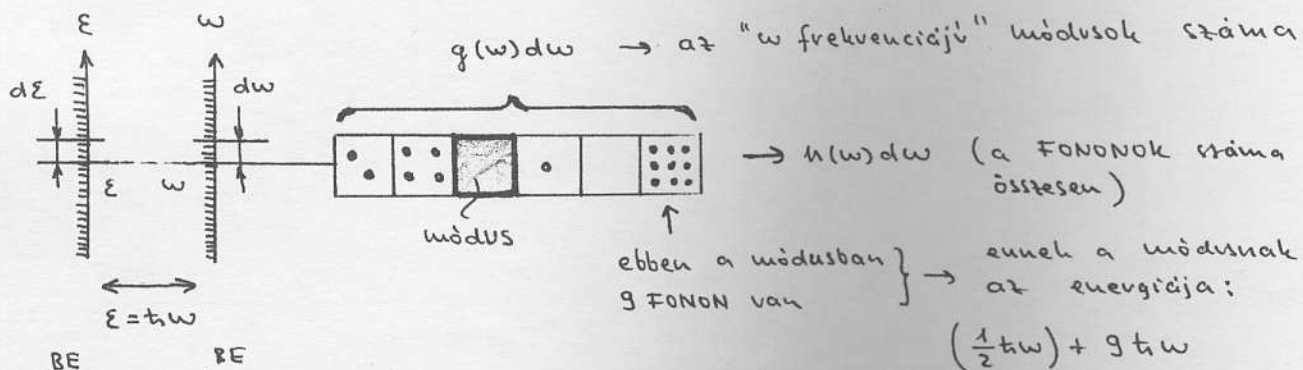
Kvantummechanika

kvantálás:

Egy ω frekvenciájú módus energiája:

Modell

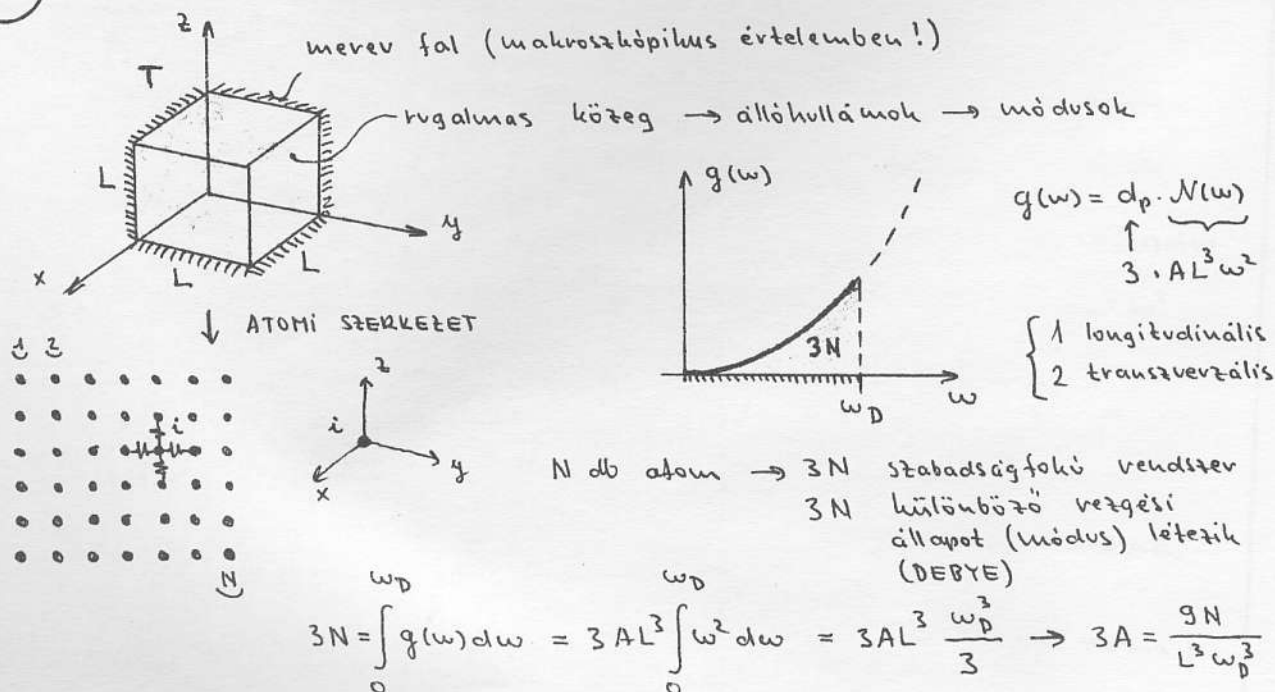
$$\epsilon_{\text{mod}} = \underbrace{\frac{1}{2} \hbar \omega}_{\text{nullaponti energia}} + n \cdot \hbar \omega \quad (n=0,1,2,3,\dots)$$

"FONON" $\equiv$ "energia adag (kvantum)"Egy ω frekvenciájú módus " n (db) "FONONT" tartalmaz"

$$f(\epsilon, T) \leftrightarrow f(\omega, T)$$

BOSE-EINSTEIN statisztika:

(FONONOK $\equiv$ bozonok száma változik: $\mu \equiv 0$;
 a nullaponti energiától eltekintünk)

1.5.5.2. Fonongáz

Tehát:

$$g(\omega) = \begin{cases} \frac{9N}{L^3 \omega_D^3} \omega^2 & \text{ha } \omega \leq \omega_D \\ 0 & \text{ha } \omega > \omega_D \end{cases}$$

Kvantummechanika

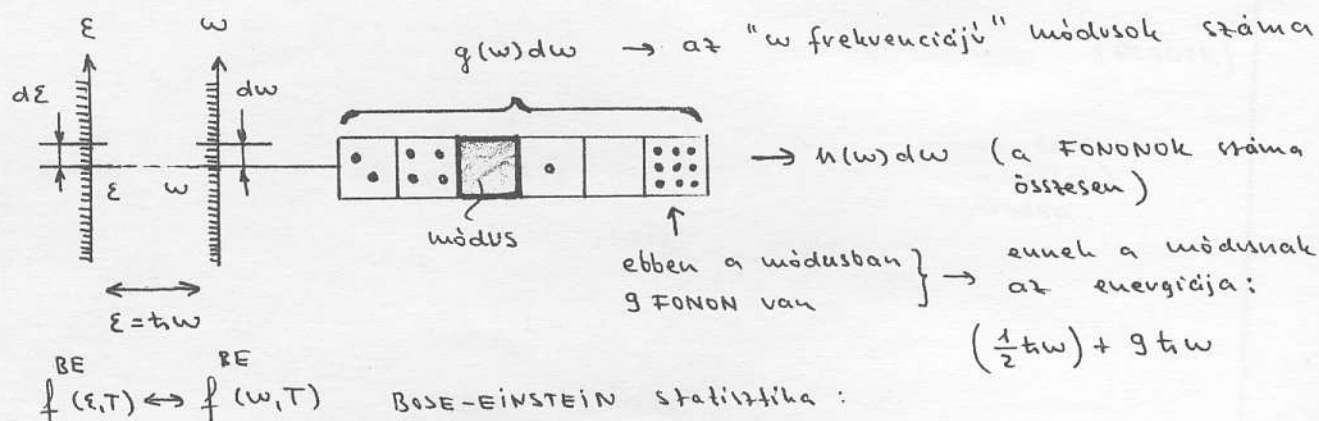
kvantálás:

Egy ω frekvenciájú módus energiája:

Modell

$$\epsilon_{\text{mod}} = \underbrace{\frac{1}{2} \hbar \omega}_{\text{nullaponti energia}} + n \cdot \hbar \omega \quad (n=0, 1, 2, 3, \dots)$$

"FONON" $\equiv$ "energia adag (kvantum)"

Egy ω frekvenciájú módus " n (db)" FONONT tartalmaz

A rendszer összenergiája:

$$\begin{aligned}
 E_R &= \int_0^{\infty} (\hbar\omega) n(\omega) d\omega = \int_0^{\infty} (\hbar\omega) \cdot g(\omega) f^{BE}(\omega, T) d\omega = \\
 &= \int_0^{\omega_D} \hbar\omega \left(9N \frac{\omega^2}{\omega_D^3} \right) \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1} d\omega = 9N \frac{\hbar}{\omega_D^3} \underbrace{\int_0^{\omega_D} \frac{\omega^3}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1} d\omega}_Z
 \end{aligned}$$

matematika:

$$x \equiv \frac{\hbar\omega}{kT} \rightarrow dx = \frac{\hbar}{kT} d\omega$$

$$x_D \equiv \frac{\hbar\omega_D}{kT} \rightarrow \boxed{\hbar\omega_D \equiv k\theta_D} \quad \theta_D: \text{DEBYE hőmérséklet}$$

$$E_R = 9N \frac{\hbar}{\omega_D^3} \left(\frac{kT}{\hbar} \right)^4 \cdot \int_0^{\frac{\theta_D}{T}} \frac{x^3}{e^x - 1} dx$$

A rendszer teljes (vezgési) energiája így függ a hőmérséklettől.

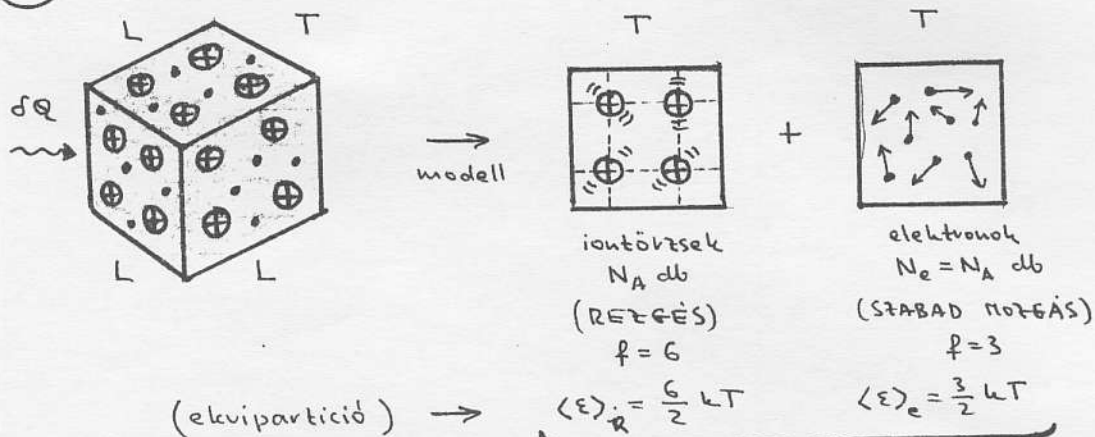
Legyen

$$T \ll \theta_D \quad \text{azért} \quad \frac{\theta_D}{T} \rightarrow \infty$$

$$\begin{aligned}
 E_R(T) &= \underbrace{9NkT}_{\substack{\uparrow \\ \text{mólnyi mennyiség} \\ \text{esetén} \\ R=Nk}} \left(\frac{T}{\theta_D} \right)^3 \cdot \underbrace{\int_0^{\infty} \frac{x^3}{e^x - 1} dx}_{\frac{\pi^4}{15}} \rightarrow E_R(T) \approx 3RT \left(\frac{T}{\theta_D} \right)^3 \cdot \frac{\pi^4}{5} \\
 &\quad \text{ha } T \ll \theta_D
 \end{aligned}$$

Jellegetes θ_D adatok:

	Pb	Ag	Zn	Cu	Al	C
θ_D [K]	88	215	308	345	398	1850



A rendszer energiája: $E = N_A \langle \epsilon \rangle_R + N_e \langle \epsilon \rangle_e = N_A kT \left(3 + \frac{3}{2}\right) = RT \left(3 + \frac{3}{2}\right)$

A fajhő (mólaris hőkapacitás) fogalma

$\delta Q \rightarrow dU \equiv dE$

$\delta W = p dV$

$m = M$
(mólyi mennyiség)

T dT

$\delta Q = dE + p dV \quad | \quad dV = 0$

$\delta Q = c_v M dT$

$dE = c_v M dT \equiv C_v dT \rightarrow$

$C_v = \left[\frac{dE}{dT} \right]_V$

A klasszikus fizikai modell:

$E = RT \left(3 + \frac{3}{2}\right) \rightarrow C_v = \left(3 + \frac{3}{2}\right) R$

MÉRÉS: $C_v = 3R$ $T \approx 300K$

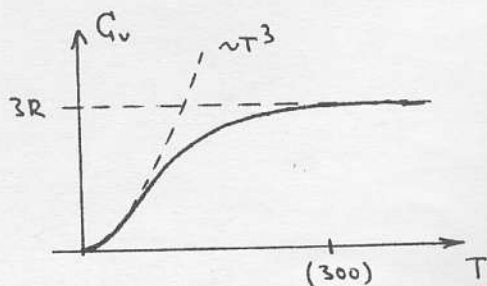
DULONG PETIT törvény

A kvantummechanikai modell esetén:

$C_v = C_{vR} + C_{vE}$

$C_{vR} = \frac{dE_R}{dT} = \begin{cases} 3R \frac{4\pi^4}{5} \left(\frac{T}{\theta_D}\right)^3 & [ha \quad T \ll \theta_D] \end{cases}$

$f^{BE} \rightarrow f^{MB}$ (ekvipartíció tétele) $E_R = 3RT$ $[T \gg \theta_D]$



MÉRÉS

$C_v \approx C_{vR} = 3R \cdot F(T) \Rightarrow \begin{cases} \sim \left(\frac{T}{\theta_D}\right)^3 & T \ll \theta_D \\ = 3R & T \gg \theta_D \end{cases}$

$C_{vE} \approx 0$

$\rightarrow$ szabad elektrongát fajhője

(?)

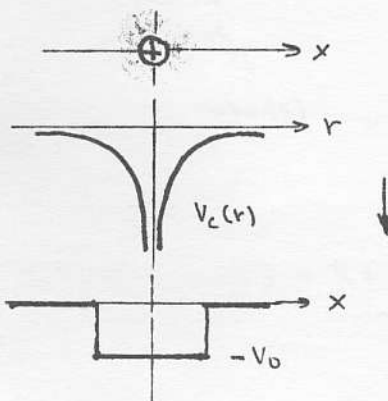
1.6. A kovalens kémiai kötés

1.6.1. A molekulapályák

1.6.1.1. Egydimenziós modell

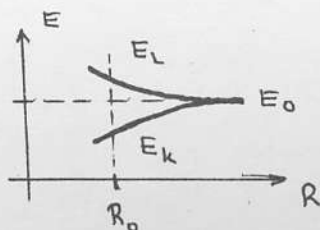
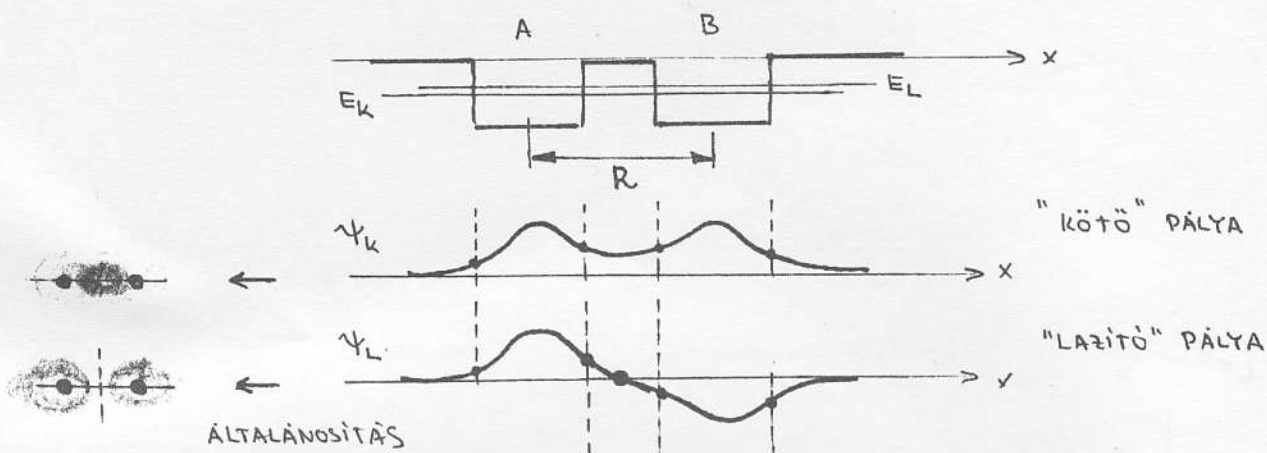
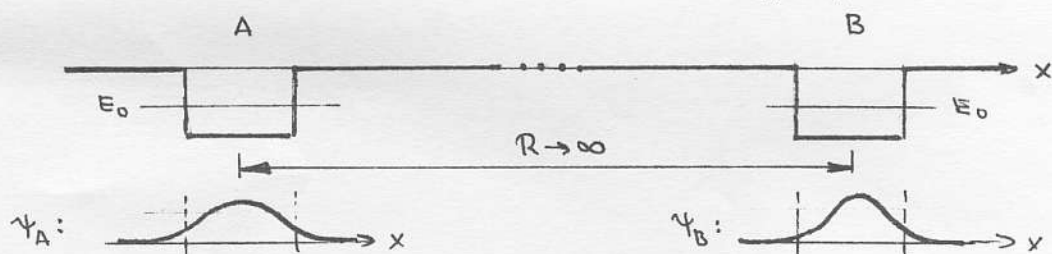
Kettős potenciálvölgy kvalitatív tárgyalása

A MODELL definiálása:



egydimenziós potenciál völgy:

Egyetlen elektron kettős potenciál völgyben:



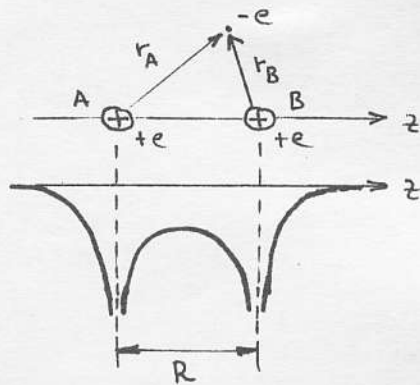
közelítő számolás:

$$\psi_L \approx \psi_A - \psi_B$$

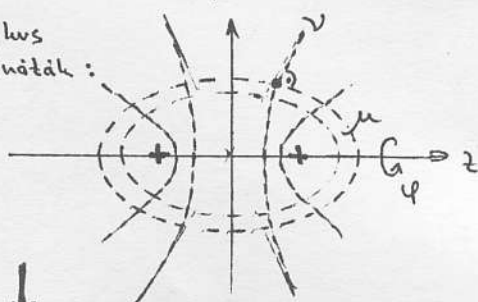
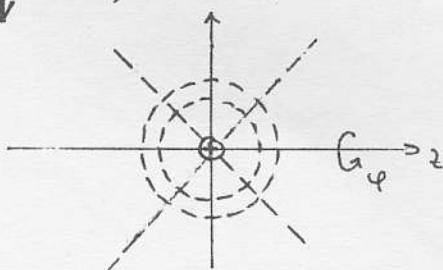
$$\psi_k \approx \psi_A + \psi_B$$

ÁLTALÁNOSÍTÁS:

↓ atompályák
↓ molekulapályák

1.6.1.2. A hidrogénmolekula ion (H_2^+)

elliptikus koordináták:

 $R \rightarrow 0$ 

$$\hat{H} = \underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta - V_c(r_A) - V_c(r_B) + V_c(r)}_{\equiv \hat{H}_0}$$

$$V_c(r) \equiv \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r}$$

Az elektron állapotok {molekulapályák}

$$\hat{H}_0 \psi = E_0 \psi \quad \psi(\vec{r})$$

$$\left. \begin{aligned} \nu &\equiv \frac{r_A + r_B}{2} \\ \mu &\equiv \frac{r_A - r_B}{2} \\ \varphi \end{aligned} \right\} \rightarrow \psi(\nu, \mu, \varphi)$$

Egzaktil megoldható (separálás)

$$\psi(\nu, \mu, \varphi) = N(\nu) \cdot M(\mu) \cdot \Phi(\varphi)$$

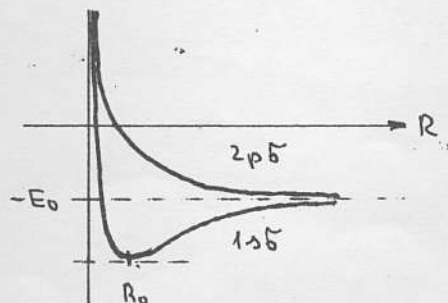
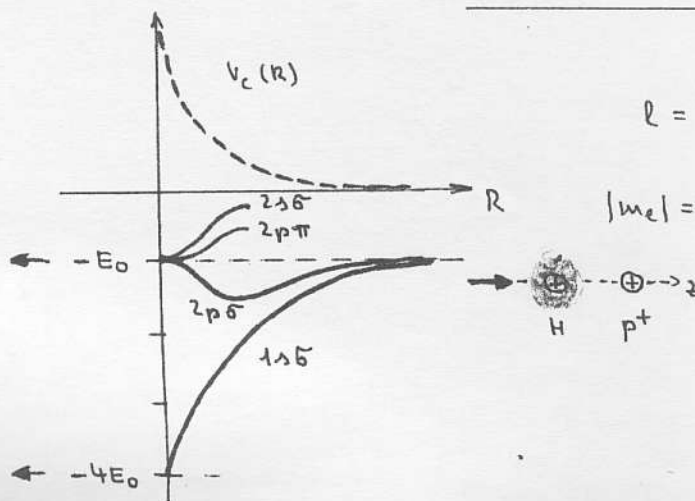
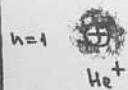
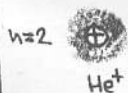
$$\left\{ \begin{aligned} n &= 1, 2, 3, \dots \\ l &= 0, 1, 2, 3, \dots \\ m_l &= 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l \end{aligned} \right. \rightarrow L_z$$

JELÖLÉSEK:

$$l = \left\{ \begin{aligned} 0, 1, 2, \dots \\ 1, p, d, \dots \end{aligned} \right\}$$

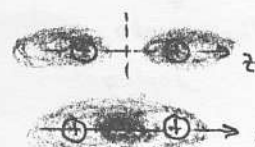
$$|m_l| = \left\{ \begin{aligned} 0, 1, 2, \dots \\ s, p, d, \dots \end{aligned} \right\}$$

$$\left\{ \begin{aligned} 1s \\ 2s \\ 2p \\ 2p\pi \\ \vdots \end{aligned} \right.$$

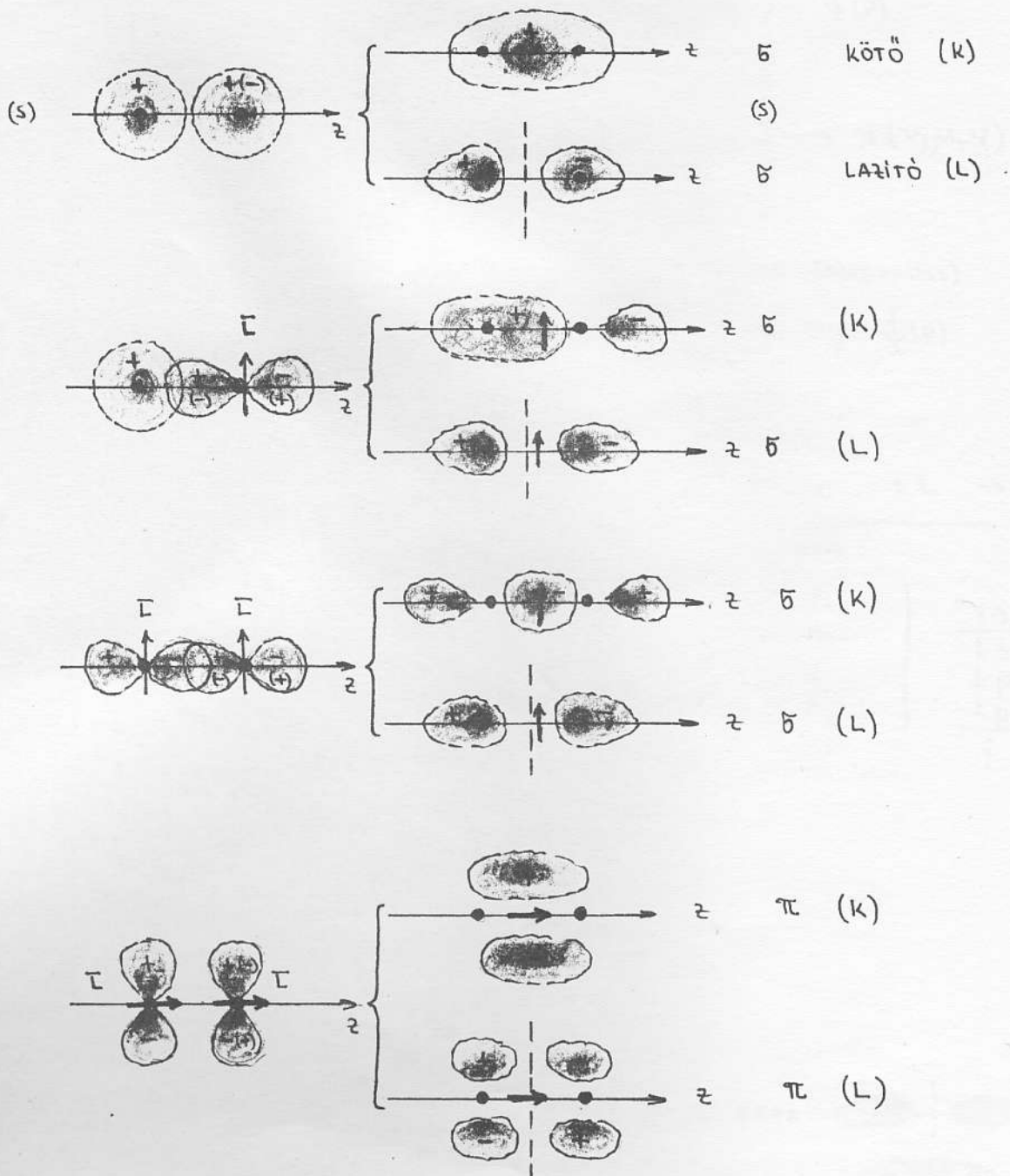
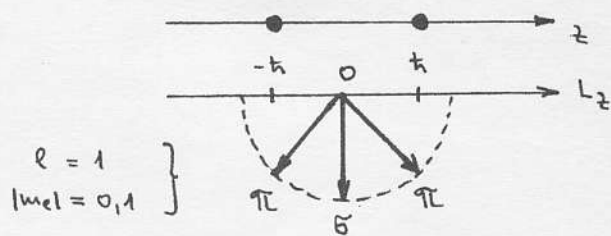


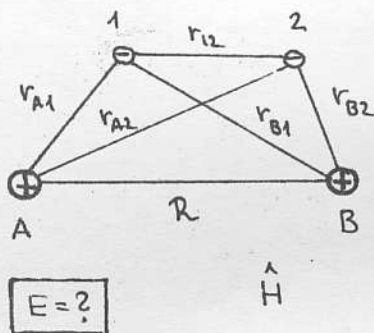
→ LAZÍTÓ PÁLYA:

→ KÖTŐ PÁLYA:



1.6.2. A molekulapályák felépítése atompályákból



1.6.3. A hidrogénmolekula (H_2)

Coulomb kölcsönhatások:

$$V_c(r) = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{1}{r}$$

$$\hat{H}\Phi(\bar{x}_1, \bar{x}_2) = E\Phi(\bar{x}_1, \bar{x}_2)$$

$$\bar{x}_i \equiv (\bar{r}_i, \bar{z}_i)$$

$$\Phi(\bar{x}_1, \bar{x}_2) = -\Phi(\bar{x}_2, \bar{x}_1)$$

$$\hat{H} = \underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_1 - V_c(r_{A1}) - V_c(r_{B1})}_{\equiv \hat{H}_0(1)} - \underbrace{\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_2 - V_c(r_{A2}) - V_c(r_{B2})}_{\equiv \hat{H}_0(2)} + \underbrace{V_c(r_{12})}_{\text{elektronok közötti kölcsönhatás}} + \underbrace{V_c(R)}_{\text{protonok közötti kölcsönhatás}}$$

$\uparrow$ (H_2^+)
 $\uparrow$ (H_2^+)

Durva közelítés: az elektronok nem hatnak egymásra $V_c(r_{12}) \approx 0$

$$\left[\hat{H}_0(1) + \hat{H}_0(2) + V_c(R) \right] \Phi(\bar{x}_1, \bar{x}_2) = E\Phi(\bar{x}_1, \bar{x}_2)$$

spin-pálya kölcsönhatást $\rightarrow \Phi(\bar{x}_1, \bar{x}_2) = \Psi(\bar{r}_1, \bar{r}_2) \cdot \chi(\bar{z}_1, \bar{z}_2)$
elhanyagoljuk

$$\Phi_a(\bar{x}_1, \bar{x}_2) = \begin{cases} \Psi_a(\bar{r}_1, \bar{r}_2) \cdot \chi_s(\bar{z}_1, \bar{z}_2) & \uparrow\uparrow \\ \Psi_s(\bar{r}_1, \bar{r}_2) \cdot \chi_a(\bar{z}_1, \bar{z}_2) & \uparrow\downarrow \end{cases}$$

A sajátérték egyenlet szeparálható

$$\left[\hat{H}_0(1) + \hat{H}_0(2) \right] \Psi_s(\bar{r}_1, \bar{r}_2) = \underbrace{(E - V_c(R))}_{\equiv E'} \cdot \underbrace{\Psi_s(\bar{r}_1, \bar{r}_2)}_{\Psi_k(\bar{r}_1) \Psi_k(\bar{r}_2)}$$

$$\Psi_k(\bar{r}_1) \Psi_k(\bar{r}_2) \rightarrow \underline{E' = \min}$$

Az elektronok közötti kölcsönhatás (közelítő) figyelembevétele (pl: Hartree)

$$E \approx \langle \Psi_s(\bar{r}_1, \bar{r}_2) | \hat{H} | \Psi_s(\bar{r}_1, \bar{r}_2) \rangle$$

$$\uparrow$$

$$\Psi_k(\bar{r}_1) \Psi_k(\bar{r}_2) \rightarrow \text{SCF megoldások!}$$

EGYÉB MÓDSZEREK

KVANTUMKÉMIA