

Részecskék hullámtermészete

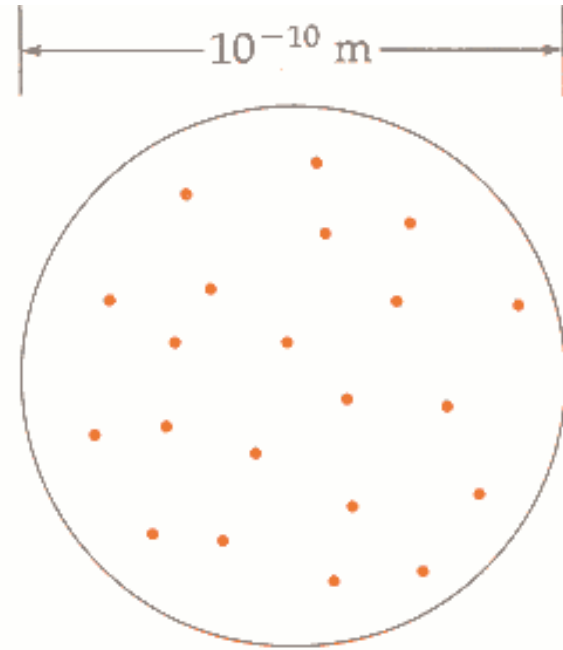
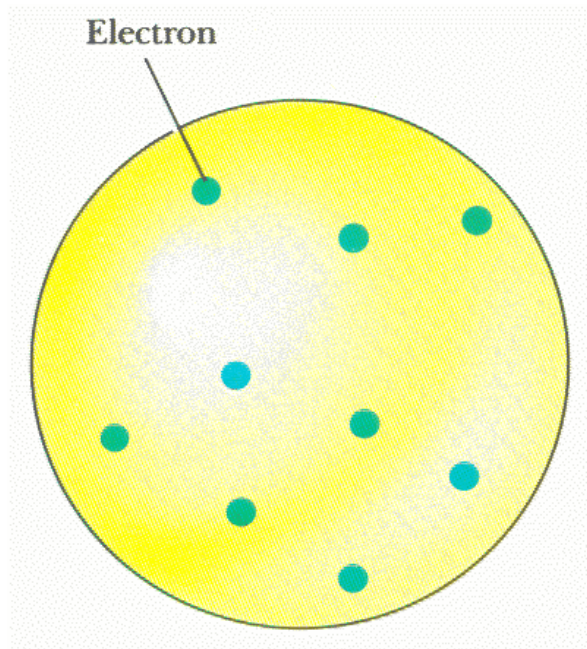
Bevezetés

A sugárzás és az „anyag” egyaránt mutat részecskejellegű és hullámjellegű tulajdonságokat.

Atommodellek

A Thomson modell

J.J. Thomson 1898



(a) Thomson's "plum pudding" model, with electrons embedded in a sphere of positively charged fluid.

A negatív töltésű elektronok pozitív töltésű folyadékba vannak beágyazva. Különböző rezgéseket végeznek, (a klasszikus elmélet szerint) az adott frekvenciákon sugárzást bocsátanak ki.

A Rutherford model

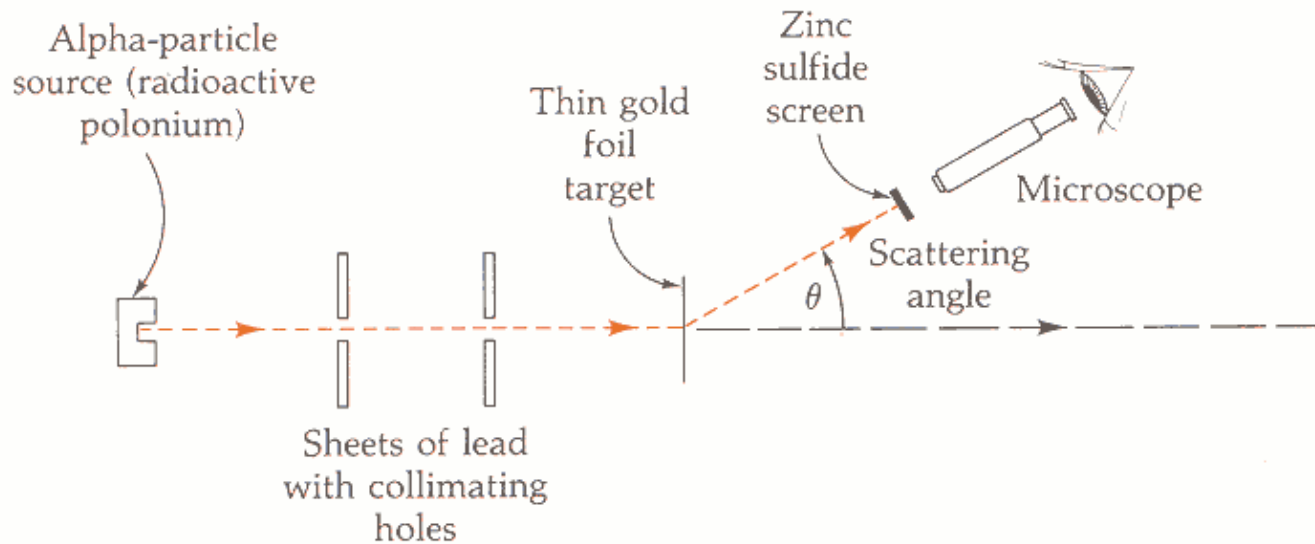


FIGURE 43-3

The Rutherford alpha-scattering experiment. The zinc sulfide detector can be moved to record scattering at various angles. The apparatus is placed within an evacuated chamber.

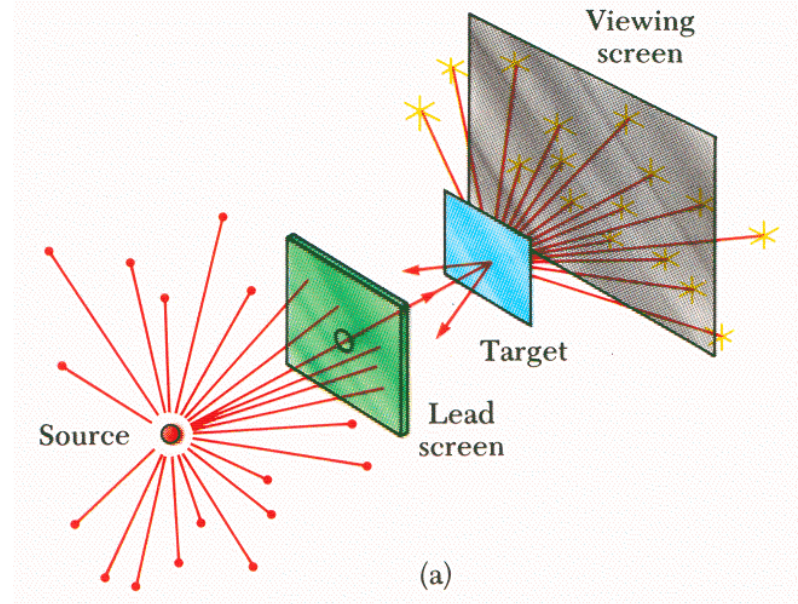
Ernest Rutherford (1911)

Alfa részecskék szórásának vizsgálata vékony (néhány száz atomréteg) arany fólián. Ezáltal az egyes atomok okozta szórást lehet megfigyelni.

Az alfa részecske energiája néhány millió eV, tömege kb. 8000-szer nagyobb az elektronnál.

Visszaszórt alfa részecskéket is észleltek! Nagyszögű szórást csak nagy erők okozhatnak

Az atom nagy tömegű pozitív töltése egy 10^{-14} m sugarú térrészben található. Ez az **atommag**.



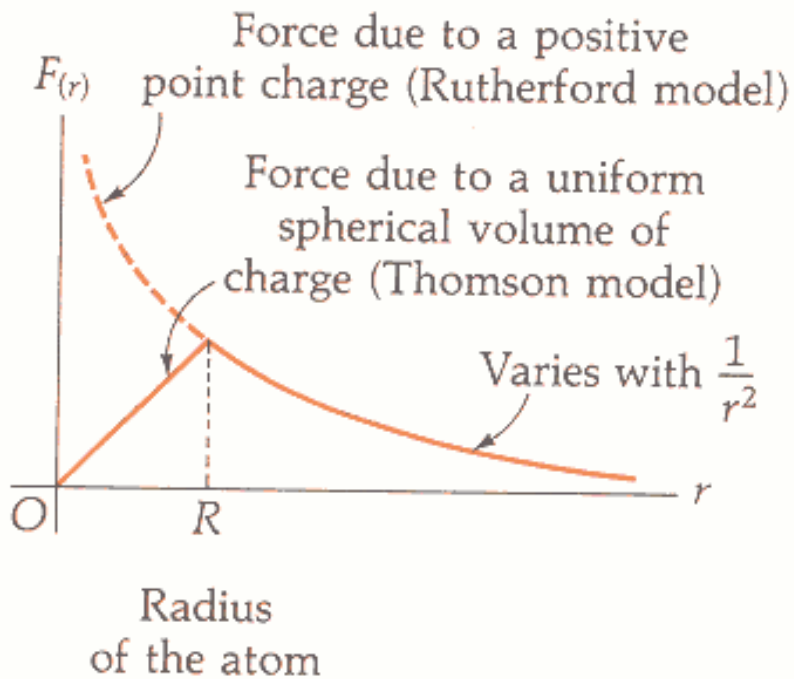
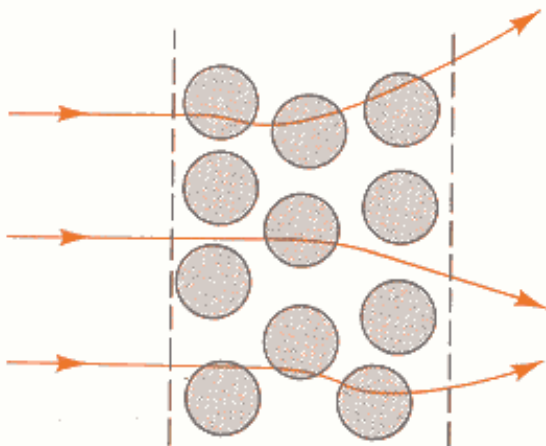


FIGURE 43-4

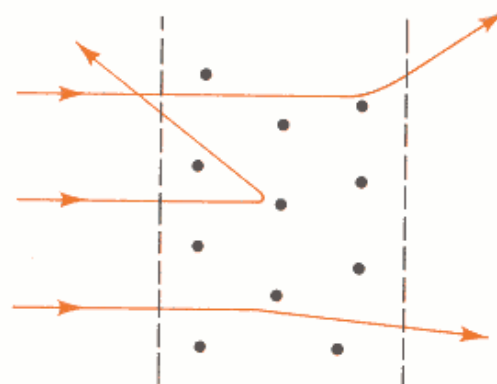
The force on an alpha particle due to a positive charge in two different configurations: a point charge and a uniform spherical volume of charge. (See Figure 25-16, Chapter 25.)

Homogén töltéeloszlású gömb és pontszerű töltés által az alfa részecskére ható erő.

Alfa részecskék szóródása aranyfólián



- (a) According to the Thomson model, multiple scattering could occur if the alpha particle penetrates more than one atom. (The scattering is greatly exaggerated.)

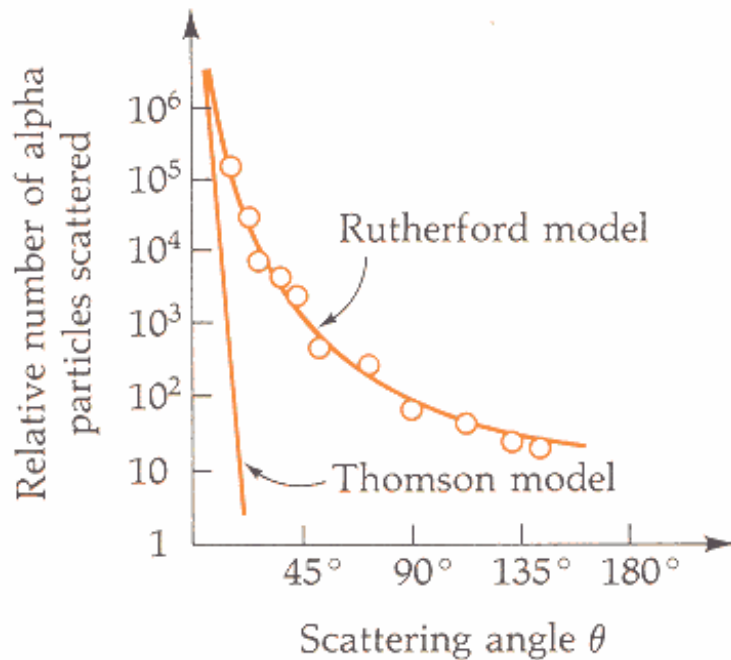


- (b) According to the Rutherford model, a single close encounter with a nucleus could produce a large-angle scattering.

FIGURE 43-5

Scattering of alpha particles by a thin foil. The target foil is typically several hundred atoms thick.

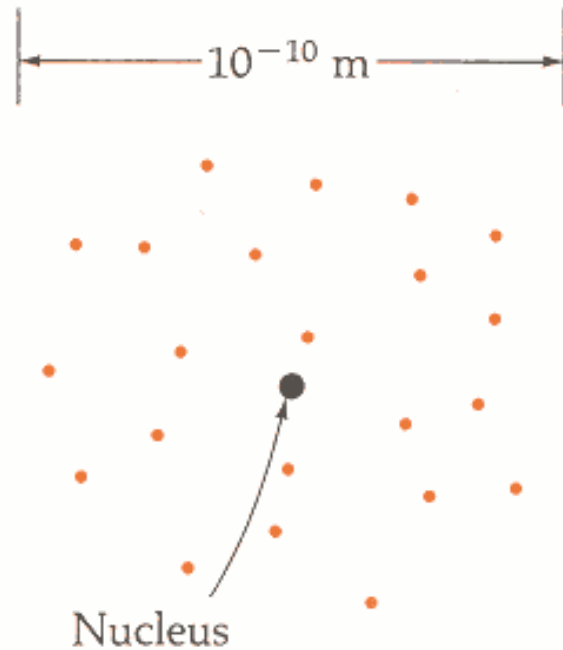
Alfa részecskék szóródása aranyfólián



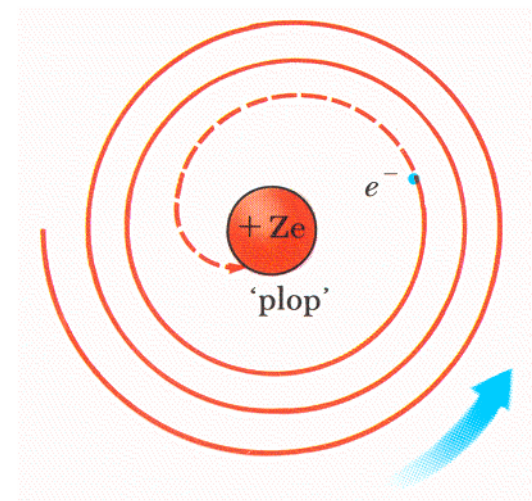
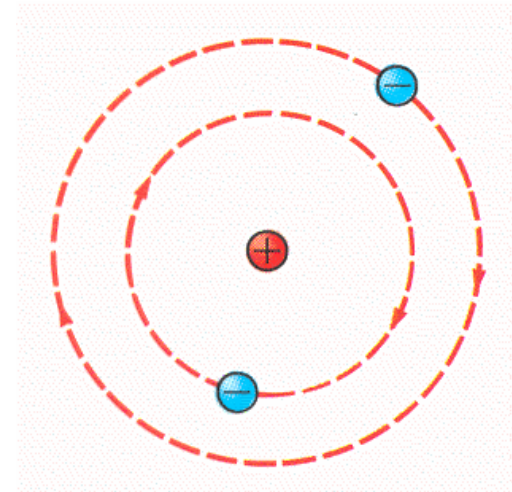
Hans Geiger,
Ernest Marsden

FIGURE 43-6
Typical data by Geiger and Marsden for the scattering of alpha particles by gold foils. The solid lines are theoretical curves based on the Thomson and Rutherford models.

A Rutherford modell



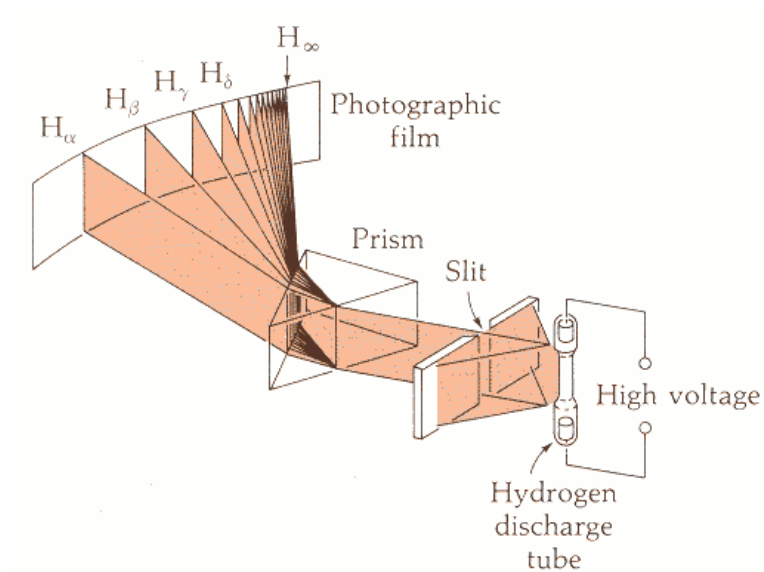
(b) Rutherford's nuclear model, with all the positive charge (and most of the mass) concentrated in a very small region at the center. Electrons surround the nucleus in an unknown way.



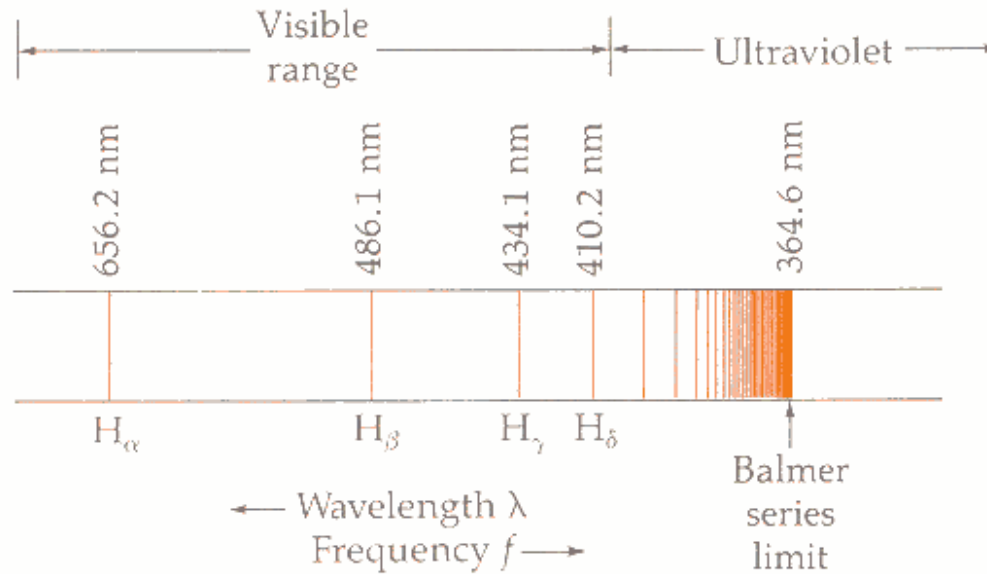
A gyorsuló töltés sugároz

A Bohr modell

A H-atom emissziós spektruma



(a) A prism spectrometer. Light from the hydrogen discharge tube is refracted by the prism to form the line spectrum on the photographic film.



(b) The Balmer series is a group of an infinite number of spectral lines whose spacings regularly converge toward the short-wavelength limit of 364.6 nm.

A hidrogén emissziós színeképének Balmer sorozata. A vonalak a 364.6 nm hullámhossznál torlódik.

J. Balmer *empirikus* képlete

A H atom látható spektrumvonalainak hullámhosszai

$$\lambda = (364.56 \text{ nm}) \left(\frac{n^2}{n^2 - 2^2} \right) \quad (n = 3, 4, 5, \dots)$$

$$\frac{1}{\lambda} = R_H \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad R_H \text{ a Rydberg állandó}$$

A frekvenciák

$$f = \frac{c}{\lambda} = cR_H \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right)$$

A H atom emissziós spektruma

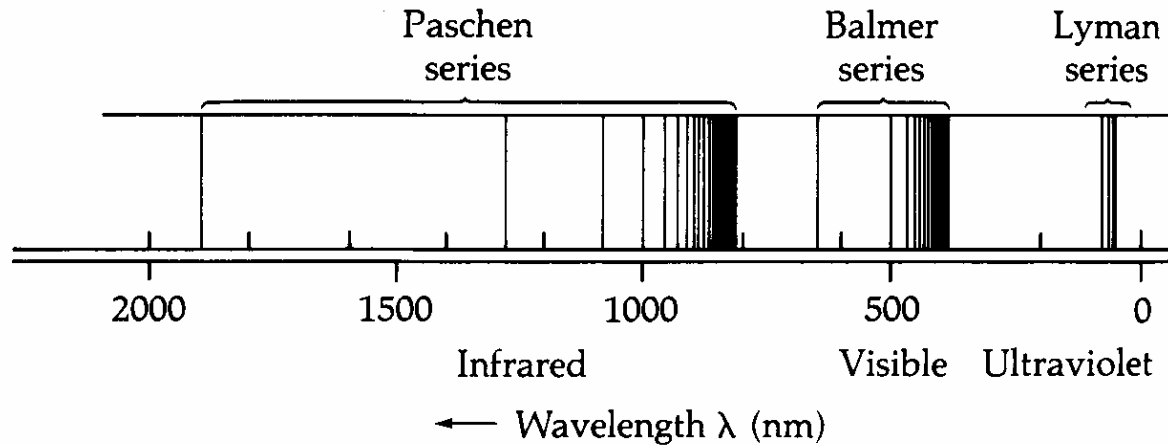


FIGURE 43-1

When hydrogen gas is heated by having an electrical current pass through it, the gas emits light consisting of a series of spectral lines called a *bright-line spectrum*, or an *emission spectrum* (indicated here by dark lines).

A H atom spektrumának vonalai

$$\frac{1}{\lambda} = R_H \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right)$$

$$f_{mn} = \frac{c}{\lambda} = cR_H \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right)$$

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

Lyman sorozat

$$m = 2 \quad n = 3, 4, \dots$$

Balmer sorozat

$$m = 3 \quad n = 4, 5, \dots$$

Paschen sorozat

$$m = 4 \quad n = 5, 6, \dots$$

Brackett sorozat

$$m = 5 \quad n = 6, 7, \dots$$

Pfund sorozat

A Bohr posztulátumok

Niels Bohr 1913

(1) Az elektron a proton körül körpályán mozog a klasszikus fizika törvényei szerint. (A centripetális erőt a Coulomb-féle vonzóerő szolgáltatja)

(2) Az klasszikus elmélettel szemben elektronok csak bizonyos *megengedett* sugarú pályákon mozoghatnak. Ezeken a pályákon az elektron energiája állandó, ezeken a pályákon az elektron *stacionárius állapotban* van.

(3) A megengedett pályák azok, melyeken az elektronok mrv impulzusnyomatéka (perdülete)

$$mvr_n = n\hbar \quad (n = 1, 2, 3, \dots) \quad \hbar = (h / 2\pi)$$

(4) Az atom akkor bocsát ki (vagy nyel el) elektromágneses hullámokat, amikor „átugrik” egyik állapotból a másikba. A kibocsátott (vagy elnyelt) foton energiája a két állapot energiája közötti különbséggel egyenlő:

Bohr-féle frekvenciafeltétel

$$E_{kezdeti} - E_{végső} = hf \quad \text{emisszió}$$

$$E_{végső} - E_{kezdeti} = hf \quad \text{abszorpció}$$

A Bohr elmélet a klasszikus fizika és kvantumfizika sajátos keveréke. Az elektron a klasszikus mechanika szerint mozog, a klasszikus fizikával ellentétben azonban nem sugároz.

A megengedett sugarú és energiájú állapotok meghatározása

$$\sum F = ma$$

$$\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{(Ze)(e)}{r^2} = m \left(\frac{v^2}{r} \right)$$

$$mvr_n = n\hbar$$

$$r_n = \frac{\epsilon_0 h^2 n^2}{\pi m Z e^2} \quad (n = 1, 2, 3, 4, \dots)$$

$$Z = 1 \quad r_n = (0.0529 \text{ nm}) n^2$$

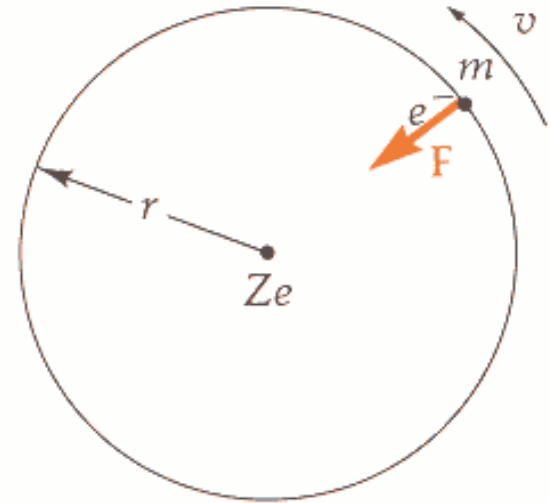


FIGURE 43-8

The Bohr model for a one-electron atom. The electron of charge $-e$ travels in a circular orbit around a fixed nucleus of charge Ze . The Coulomb force \mathbf{F} is the centripetal force on the electron.

$$E = U + K$$

$$U(\infty) = 0$$

$$U = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{(Ze)(e)}{r}$$

$$E = \frac{1}{2}mv^2 - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{(Ze)(e)}{r}$$

A HIDROGÉN ATOM ENERGIASZINTJEI

$$Z = 1$$

$$E_n = -\frac{mZ^2e^4}{8\epsilon_0^2h^2n^2} \quad (n = 1, 2, 3, 4, \dots)$$

$$E_n = -\frac{13.6 \text{ eV}}{n^2}$$

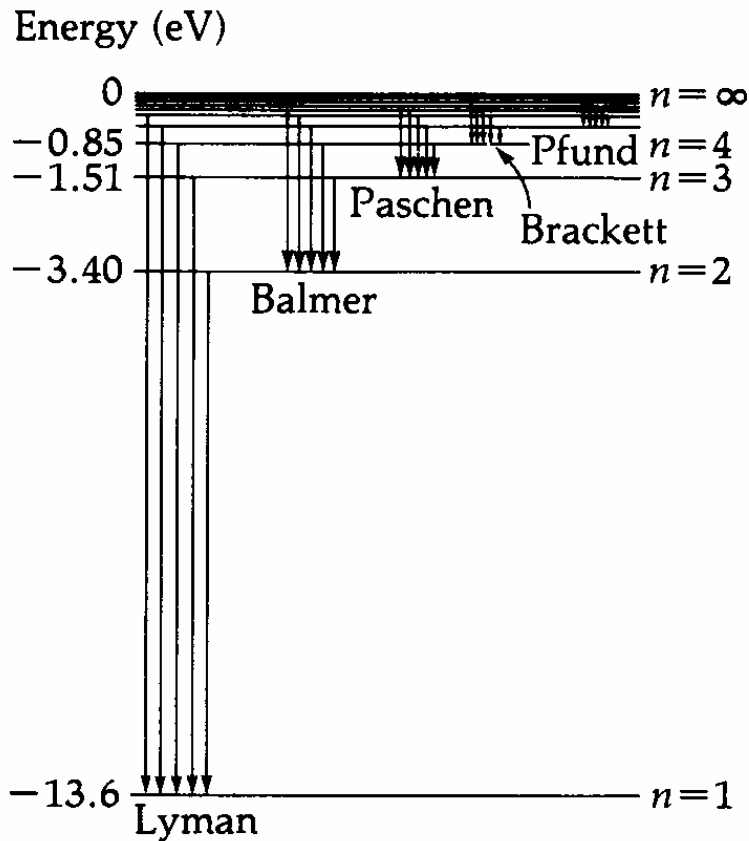
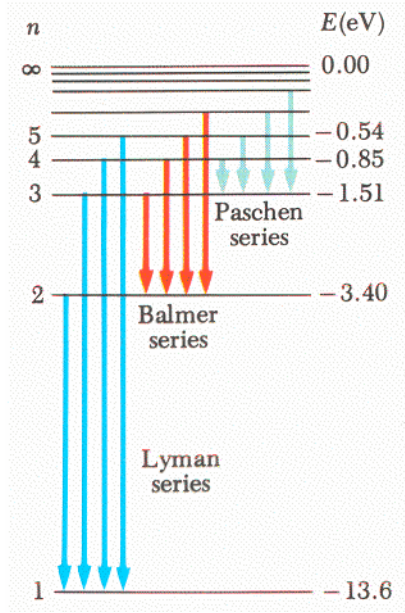
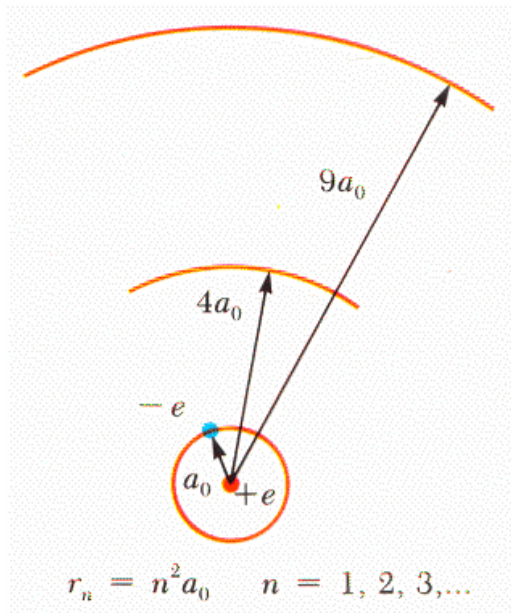
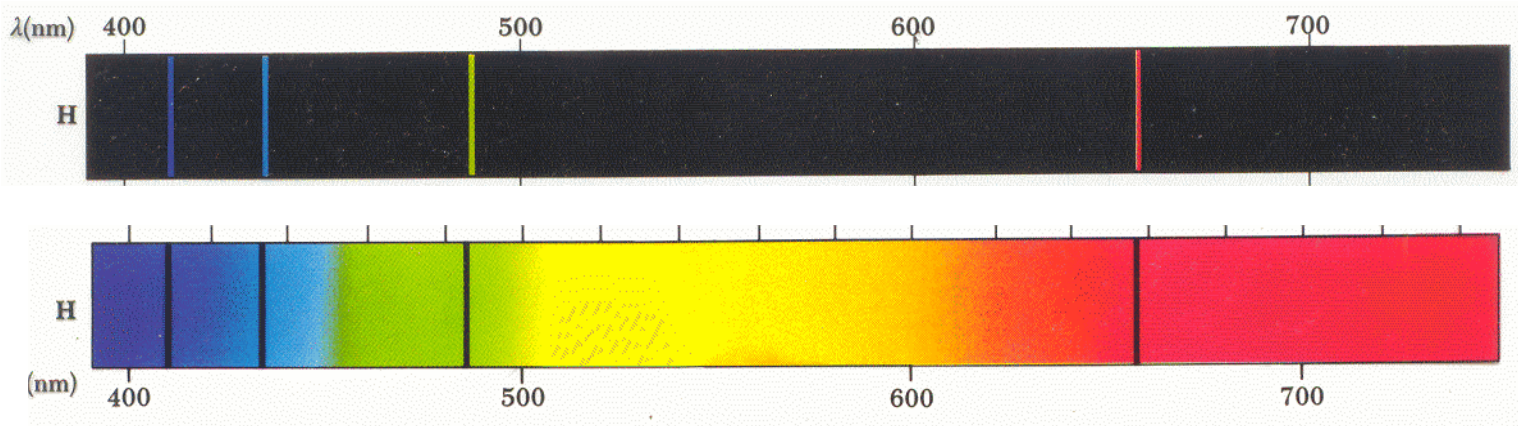


FIGURE 43-10

Energy states of a hydrogen atom. Between the levels $n = 4$ and $n = \infty$, there are an infinite number of energy levels. Transitions from higher to lower energy states result in emission of radiation of energy hf . The names of the experimenters who investigated the different spectral series are shown. Only a portion of the Balmer series is in the visible range of wavelengths.

A H atom emissziós és abszorpciós spektruma



A korrespondencia elv

A klasszikus és az új elmélet közötti kapcsolat

Körpályán mozgó elektron által kibocsátott sugárzás frekvenciája a keringés frekvenciája

$$f_0 = \frac{me^4}{4\varepsilon_0^2 h^3 n^3} \quad (Z = 1)$$

A Bohr elméletben a szomszédos energiaszintek közti átmenet során kibocsátott sugárzás frekvenciája

$$hf = E_{\text{végső}} - E_{\text{kezdeti}}$$

$$hf = E_{\text{végső}} - E_{\text{kezdeti}}$$

$$hf = \frac{me^4}{8\varepsilon_0^2 h^2} \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{(n+1)^2} \right)$$

$$\left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{(n+1)^2} \right) = \left(\frac{n^2 + 2n + 1 - n^2}{n^2(n+1)^2} \right) = \left(\frac{2n + 1}{n^2(n+1)^2} \right)$$

Ha n igen nagy, határátmenetben

$$\lim_{n \gg 1} \left(\frac{2n + 1}{n^2(n+1)^2} \right) = \frac{2}{n^3}$$

Így a kisugárzott frekvencia

$$f = \frac{me^4}{4\varepsilon_0^2 h^3 n^3}$$

Nagy n esetén a kvantumelméleti kifejezés megegyezik a klasszikussal.

A de Broglie hullámok

Louis de Broglie 1924

Hipotézise: A hullám-részecske kettősség nemcsak a sugárzásra, hanem az anyagi részecskékre is vonatkozik.

Az elektromágneses sugárzás fotonjainak impulzusa $p = \frac{h}{\lambda}$

Minden $p=mv$ impulzusú részecskéhez hozzárendelhető egy hullám

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

A p impulzusú részecske
DE BROGLIE
HULLÁMHOSSZA

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

Mi hullámzik?

de Broglie: anyaghullám, fázishullám,
vezérhullám

Ésszerű magyarázat a Bohr-féle kvantumfeltételre:

Stacionárius állapot, állóhullám

Stacionárius állapotban a körpálya kerületén a
hullámhossz egészszámú többszöröse férhet el:

$$2\pi r_n = n\lambda \quad \lambda = \frac{h}{mv}$$

$$mvr_n = n\left(\frac{h}{2\pi}\right)$$

Egyetlen elektron különböző részeinek
interferenciájáról van szó !

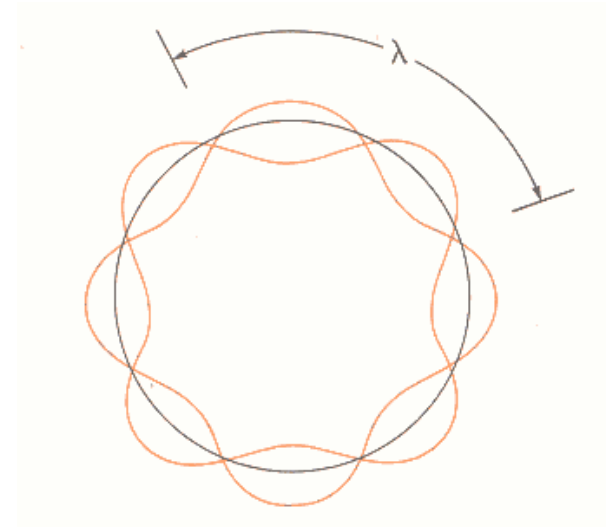


FIGURE 43-12

De Broglie waves for the orbiting electron in the Bohr model for hydrogen form a standing-wave pattern. The distance between adjacent nodes is $\lambda/2$. This illustration is for the energy state $n = 4$.

A Davidson-Germer kísérlet

Clinton Davidson és Lester Germer (1925-27), G.P. Thomson

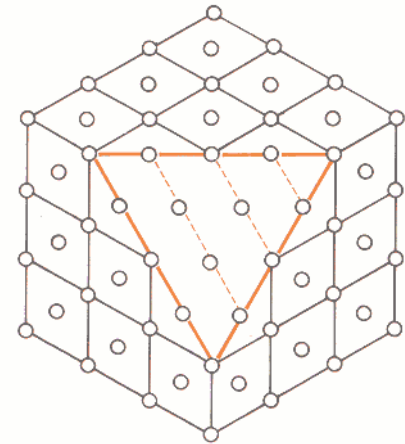
Anyaghullámok kísérleti kimutatása elektron-szórás-kísérlettel.

A Ni lapcentrálalt köbös (FCC) kristály.

Ni egykristály (1,1,1) sík, atomsorok távolsága

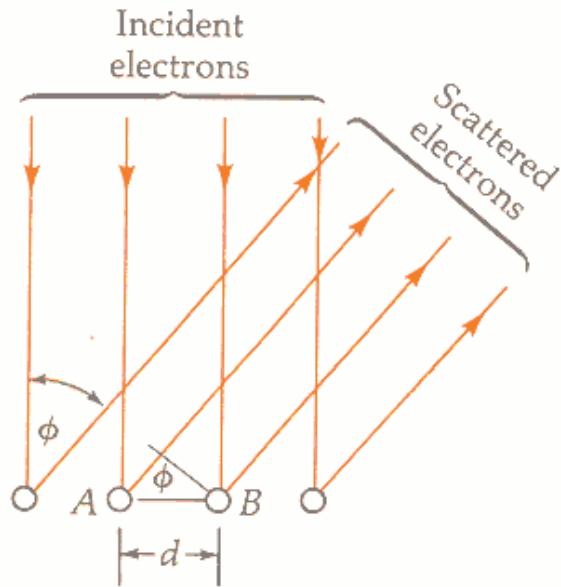
$$d = 0.21579 \text{ nm}$$

A beeső elektronok ezeken az atomsorokon szóródva hozzák létre az interferenciaképet. A kis energiájú elektronok nem hatolnak be jelentős mélységbe a kristályba. Az elektronok a fémkristály *felületéről* kitüntetett irányokban szóródnak.



27 cellából álló Ni kristály, egyik csúcsa le van vágva

Tekintsük azokat az elektronokat, melyek a metszősíkra merőlegesen esnek be és Φ szög alatt szóródnak.



Erősítés feltétele

$$d \sin \phi = m \lambda \quad (m = 1, 2, 3, \dots)$$

m a szórás rendje

d az atomsorok közötti távolság

Az elektront V feszültséggel gyorsítva

$$\frac{1}{2} m v^2 = e V$$

$$v = \sqrt{\frac{2eV}{m}}$$

Ni egykristály (1,1,1) síkjának
oldalnézete

Az elektron impulzusa

$$p = mv = m\sqrt{\frac{2eV}{m}} = \sqrt{2meV}$$

Az elektron de Broglie hullámhossza

$$\lambda = \frac{h}{p} = \left(\frac{h}{\sqrt{2me}} \right) \frac{1}{\sqrt{V}}$$

Az elektronok (nem relativisztikus)
DE BROGLIE HULLÁMHOSSZA

$$\lambda = \frac{1.226 \text{ nm}}{\sqrt{V}}$$

V voltban van megadva

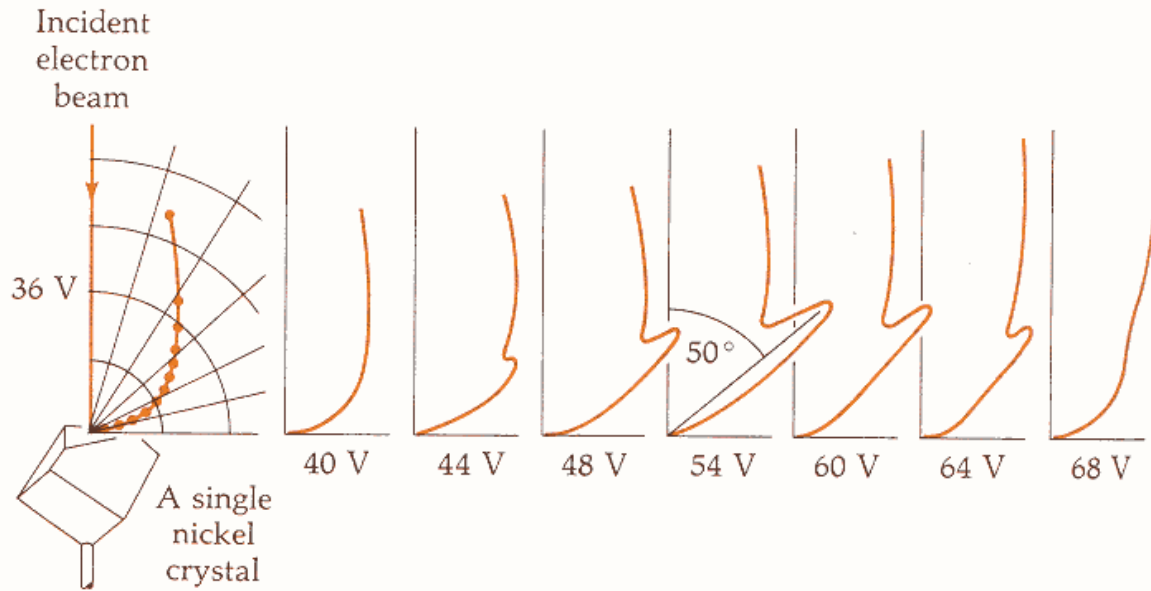
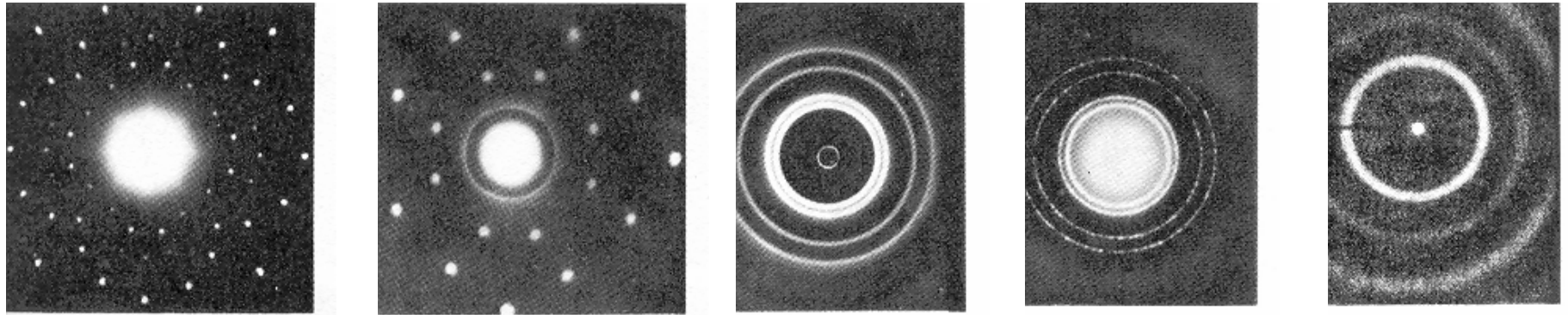


FIGURE 43-13

The scattering of electrons in a Davisson–Germer experiment. Each plot is a polar graph for the number of scattered electrons as a function of angle. Several different values of the accelerating voltage are shown.

$$\phi = 50^\circ \quad V = 54 \text{ V} \quad \lambda = 0.167 \text{ nm}$$

$$m=1 \quad \lambda = d \sin \phi = (0.21579 \text{ nm}) \sin 50^\circ = 0.165 \text{ nm}$$



(a) X-rays on NaCl

(b) Neutrons on NaCl

(c) 0.071-nm x-rays

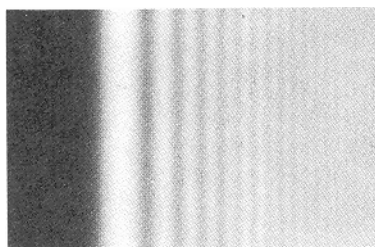
(d) 600-eV electrons

(e) 0.057-eV neutrons

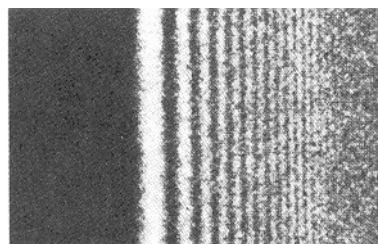
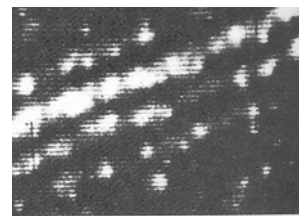
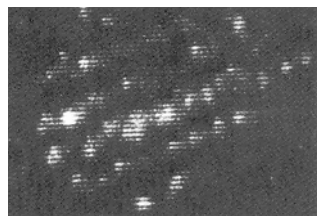
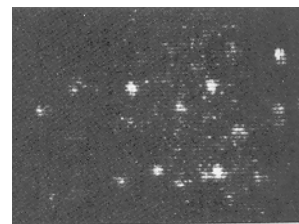
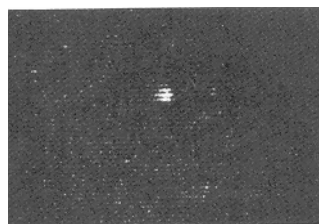
FIGURE 43-16

Diffraction patterns produced by electromagnetic waves and by particles. (a) and (b): Laue-spot patterns demonstrate the wave nature of

photons and of neutrons. (c), (d), and (e): Diffraction rings produced by scattering from polycrystalline metal samples.



(a) Visible light



(b) Electrons

FIGURE 43-17

Fringes formed in the shadow of a straightedge by visible light and by electrons. In (b), the fringes were recorded with the aid of an electron microscope. (c) An interference pattern

produced by electrons is the sum of many independent events. As the number of events increases, the pattern becomes more distinct.

Látható fény és elektronok elhajlása él mellett

A hullámmechanika

Werner Heisenberg 1925 mátrixmechanika

Erwin Schrödinger 1926 hullámmechanika

P.A. Dirac, Neumann János kvantummechanika

Paul A. Dirac relativisztikus kvantummechanika, pozitron létezésének megjósolása

A Schrödinger egyenlet és a hullámfüggvény (1D)

szabadon mozgó tömegpont (az U potenciális energia állandó) \mathbf{p}, E

síkhullám \mathbf{k}, ω

$$1D \quad \Psi_0(x, t) = A \exp i(kx - \omega t) \quad k = \frac{2\pi}{\lambda} \quad \omega = \frac{2\pi}{T}$$

Nem-relativisztikus részecskék

$$K = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{p^2}{2m} \quad U = U_0 \quad E = K + U_0 = \frac{p^2}{2m} + U_0$$

$$p = \sqrt{2m(E - U_0)}$$

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2m(E - U_0)}}$$

$$\frac{p^2}{2m} + U_0 = E$$

$$E = \hbar\omega \quad \mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$$

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + U_0 = \hbar\omega$$

$$\frac{\partial \Psi_0}{\partial x} = ik\Psi_0 \quad \frac{\partial^2 \Psi_0}{\partial x^2} = -k^2\Psi_0 \quad k^2 = -\frac{1}{\Psi_0} \frac{\partial^2 \Psi_0}{\partial x^2}$$

$$\frac{\partial \Psi_0}{\partial t} = -i\omega\Psi_0 \quad \omega = -\frac{1}{i} \frac{1}{\Psi_0} \frac{\partial \Psi_0}{\partial t}$$

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + U_0 = \hbar\omega$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\Psi_0} \left(\frac{\partial^2 \Psi_0}{\partial x^2} \right) + U_0 = -\frac{\hbar}{i} \frac{1}{\Psi_0} \frac{\partial \Psi_0}{\partial t}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2 \Psi_0}{\partial x^2} \right) + U_0 \Psi_0 = -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Psi_0}{\partial t}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2 \Psi_0}{\partial x^2} \right) + U_0 \Psi_0 = -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Psi_0}{\partial t}$$

Általánosítás

$$U_0 \rightarrow U(x, t)$$

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

IDŐFÜGGŐ SCHRÖDINGER
EGYENLET

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} \right) + U(x, t) \Psi(x, t) = -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t}$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x, t) \right] \Psi(x, t) = -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t}$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x,t) \right] \Psi(x,t) = -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t}$$

Vezessünk be egy új matematikai szimbólumot

HAMILTON
OPERÁTOR

$$\hat{H} \equiv -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x,t)$$

Matematikai műveletek (operációk) sorozata az operátor.

IDŐFÜGGŐ SCHRÖDINGER
EGYENLET

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

Lineáris másodrendű parciális differenciálegyenlet \rightarrow érvényes a **szuperpozíció** elve: az egyenlet megoldásainak lineáris kombinációja is megoldás.

Időfüggő Schrödinger egyenlet szeparálása

Konzervatív rendszernél E =állandó

$$U(x, t) \rightarrow U(x)$$

$$\Psi(x, t) = \psi(x)\theta(t)$$

szeparálható alakban írható

$$\hat{H}\Psi = -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Psi}{\partial t} \rightarrow \theta \hat{H}\psi = -\frac{\hbar}{i} \psi \frac{d\theta}{dt} \quad \dot{\theta} \equiv \frac{d\theta}{dt}$$

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

Az egyenlet bal oldala a koordinátától függ, jobb oldala az időtől. Az egyenlőség minden helyen és időben úgy állhat fenn, hogy mindkét oldal állandó.

$$\frac{\hat{H}\psi}{\psi} = -\frac{\hbar \dot{\theta}}{i \theta} \equiv E$$

$$-\frac{\hbar \dot{\theta}}{i \theta} = E \rightarrow \theta(t) = \theta_0 e^{-i\frac{E}{\hbar}t} \quad \theta_0 = 1$$

$$\theta(t) = e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$$

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

IDŐFÜGGETLEN
SCHRÖDINGER EGYENLET

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

A HULLÁMFÜGGVÉNY
(ÁLLAPOTFÜGGVÉNY)

$$\Psi(x, t) = \psi(x) e^{-i\frac{E}{\hbar}t} = \psi(x) e^{-i\omega t}$$

$$\Psi(x, t) = \psi(x)e^{-i\frac{E}{\hbar}t} = \psi(x)e^{-i\omega t}$$

$\Psi(x, t)$ komplex függvény, neve állapotfüggvény vagy hullámfüggvény

$\psi(x)$ sajátfüggvény

$\hat{H}\psi = E\psi$ sajátérték-egyenlet

Az állapotfüggvény *reguláris függvény*, azaz:

- folytonos
- véges (négyzetesen integrálható)
- egyértékű

A hullámfüggvény fizikai értelmezése

Max Born (1926) $|\Psi(x,t)|^2 dx$ tartózkodási valószínűség

annak a valószínűsége, hogy a részecske az x és $x+dx$ tartományban található.

„Anyaghullám” nincsen !!!

$$|\Psi(x,t)|^2 = \Psi^*(x,t)\Psi(x,t) \quad \text{valószínűségi sűrűség}$$

Konzervatív rendszer esetén $U = U(x) \quad \Psi(x,t) = \psi(x)e^{-i\omega t}$

$$|\Psi(x,t)|^2 = |\psi(x)|^2 \quad \text{A megtalálási valószínűség nem függ az időtől.}$$

A részecske valahol van, az egész térre számított tartózkodási valószínűség 1.

NORMA

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x)|^2 dx = 1$$

3D

az állapotegyenlet

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + U(x, y, z, t) \right] \Psi(x, y, z, t) = -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Psi(x, y, z, t)}{\partial t}$$

$$\hat{H}\Psi(\vec{r}, t) = -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t}$$

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

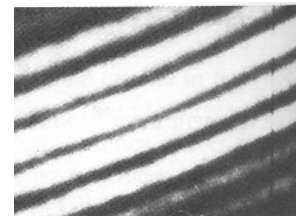
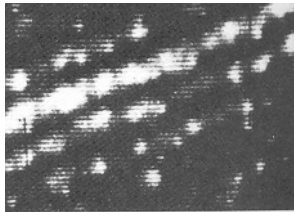
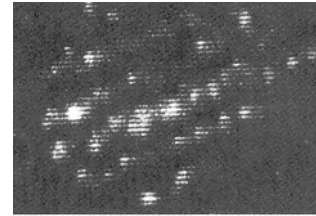
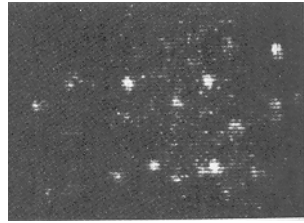
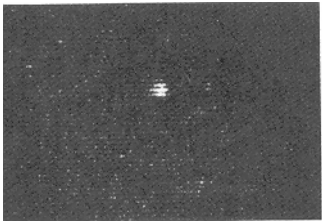
annak a valószínűsége, hogy a részecske a V és $V+dV$ tartományban található

A részecske valahol van, az egész térre számított tartózkodási valószínűség 1.

NORMA

$$\int |\Psi|^2 dV = 1$$

az egész térre



Az elektronok által létrehozott interferenciakép sok független esemény összege. Az események számának növelésével a az interferenciakép mintázata egyre kifejezettebbé válik.

Az elektron megtalálási valószínűsége, és így az interferenciakép mintázata is független az időtől.

Kötött állapotok

A hullámfüggvény matematikai tulajdonságai (1D).

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

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + U(x)\psi(x) = E\psi(x)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1$$

A $\psi(x)$ sajátfüggvényt tetszőleges egységnyi abszolút értékű komplex számmal megszorozva ugyanahhoz a sajátértékhez tartozó sajátfüggvényt kapunk:

$$\phi(x) = e^{i\alpha}\psi(x) \quad \int_{-\infty}^{\infty} |\phi(x)|^2 dx = 1$$

Dobozba zárt részecske (potenciáldoboz)

0 és D között a potenciális energia zérus, egyébként végtelen. A sajátérték egyenlet:

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

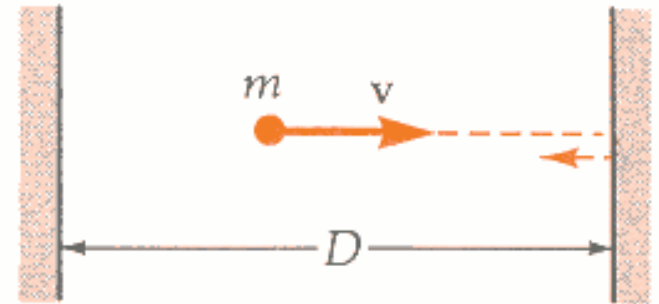
$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = -\frac{2m}{\hbar^2} E\psi(x)$$

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = -k^2\psi(x)$$

matematikai megoldás:

végtelen potenciálugrás a falaknál \Rightarrow

$$\psi(0) = 0 + B = 0 \rightarrow B = 0$$



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

$$\psi(x) = A \sin kx + B \cos kx$$

$$\psi(0) = 0 \quad \psi(D) = 0$$

$$\psi(D) = A \sin kD = 0$$

$$kD = n\pi \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots \quad \text{matematikai megoldás}$$

$$k = \frac{\pi}{D} n \rightarrow$$

$$E_n = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mD^2} n^2$$

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

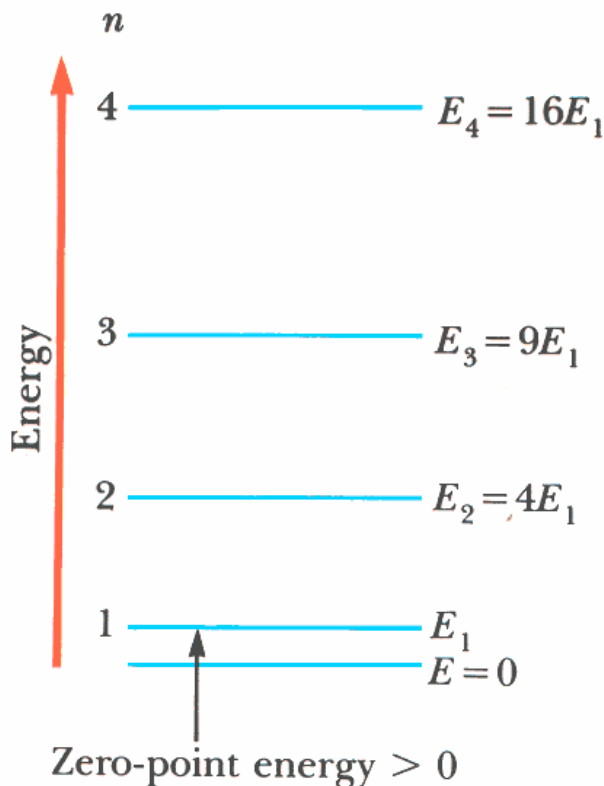
fizikai megoldás!

$$\psi(x) = A \sin \frac{n\pi}{D} x$$

$$\int_0^D |\psi|^2 dx = 1 \quad \text{a sajátfüggvény normálása}$$

$$\int_0^D A^2 \sin^2 \left(\frac{n\pi x}{D} \right) dx = 1 \Rightarrow A = \sqrt{\frac{2}{D}}$$

$$\psi(x) = \sqrt{\frac{2}{D}} \sin \frac{n\pi}{D} x \quad n = 1, 2, 3, \dots$$



A sajátfüggvények

$$\psi(x) = \sqrt{\frac{2}{D}} \sin \frac{n\pi}{D} x \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

A valószínűségi sűrűség függvény

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

$$P(x) = \left(\frac{2}{D}\right) \sin^2\left(\frac{n\pi x}{D}\right)$$

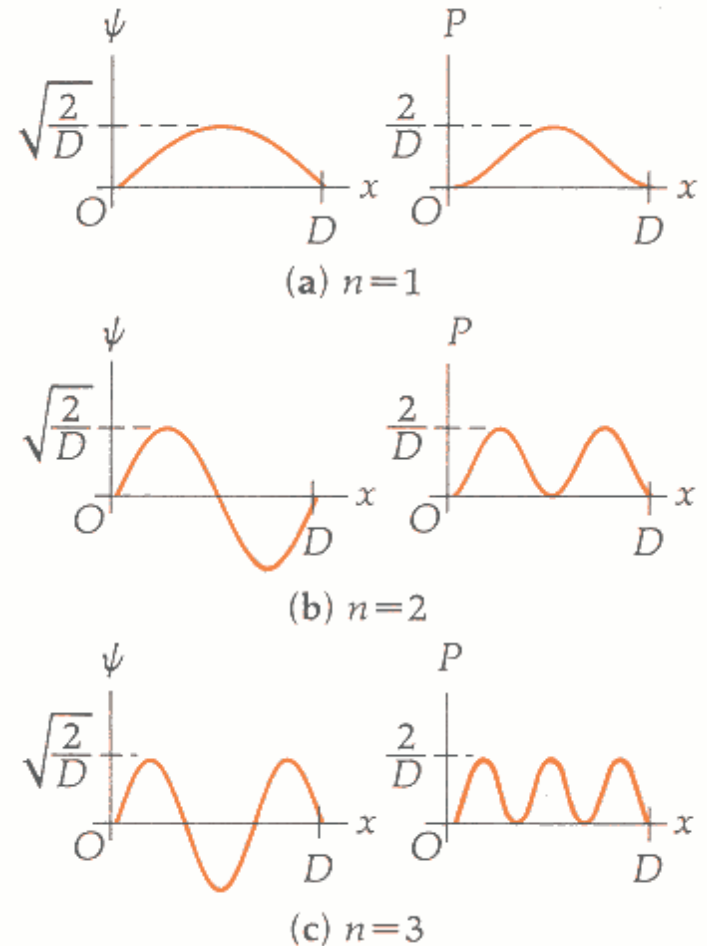
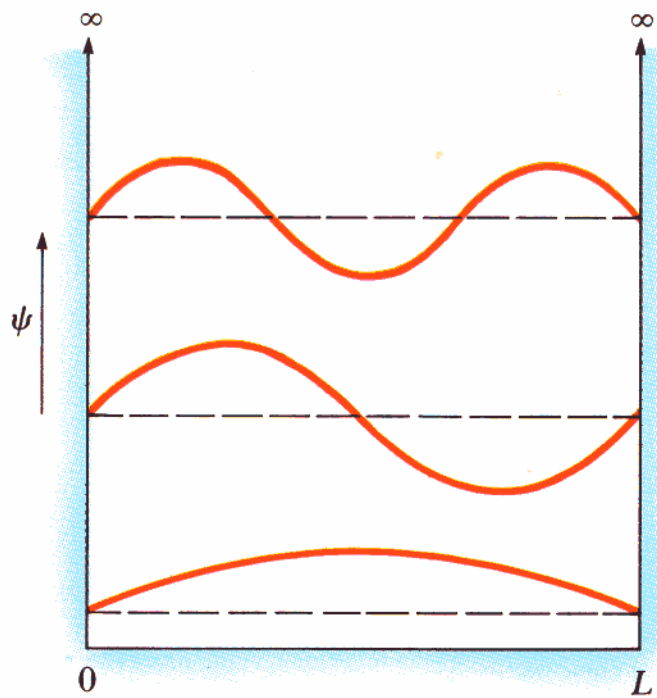
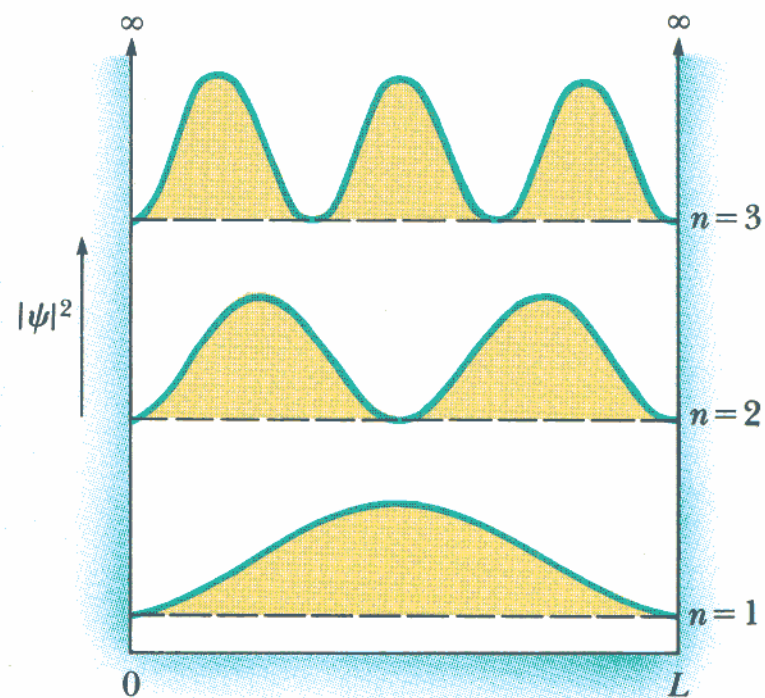


FIGURE 43-19

The first three quantum states for an electron confined to one-dimensional motion between rigid walls a distance D apart.

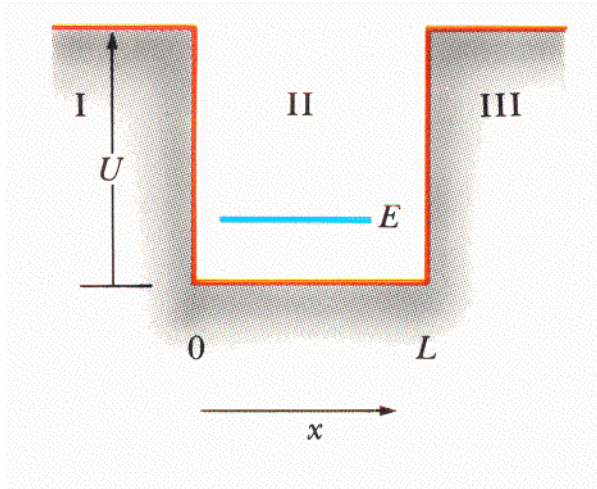


(a)



(b)

Potenciálvölgy



$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi_I(x)}{dx^2} + U\psi_I(x) = E\psi_I(x)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi_{II}(x)}{dx^2} = E\psi_{II}(x)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi_{III}(x)}{dx^2} + U\psi_{III}(x) = E\psi_{III}(x)$$

$$\psi_I(0) = \psi_{II}(0)$$

a hullámfüggvény folytonos

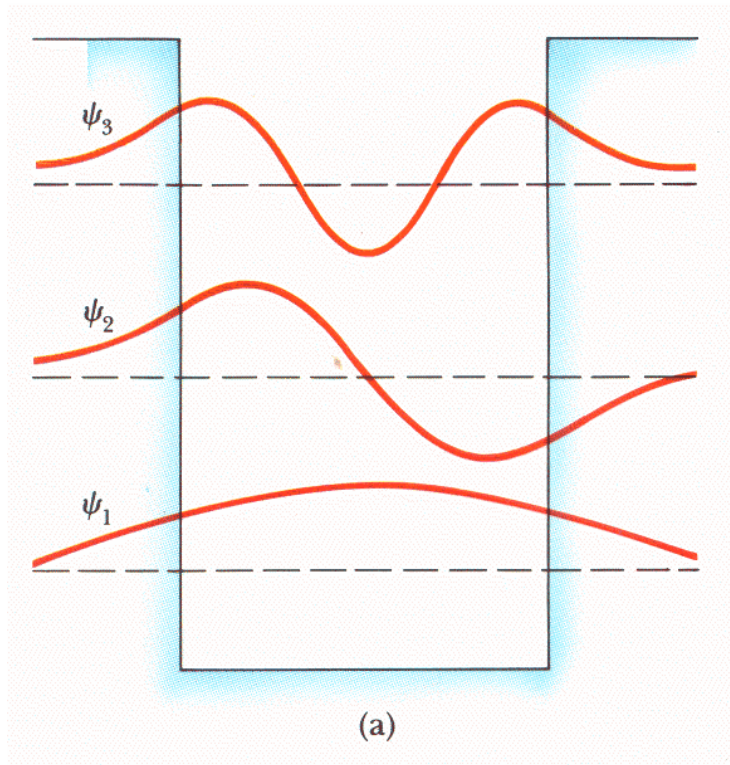
$$\frac{\partial\psi_I}{\partial x} \Big|_{x=0} = \frac{\partial\psi_{II}}{\partial x} \Big|_{x=0}$$

véges potenciálugrásnál a sajátfüggvény koordináta szerinti deriváltja is folytonos

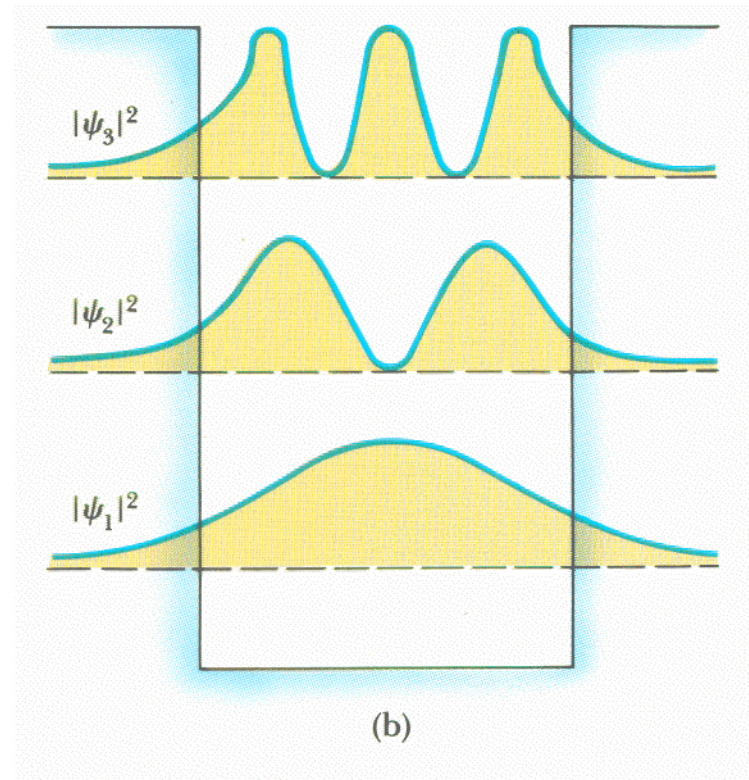
$$\psi_{II}(L) = \psi_{III}(L)$$

$$\frac{\partial\psi_{II}}{\partial x} \Big|_{x=L} = \frac{\partial\psi_{III}}{\partial x} \Big|_{x=L}$$

A sajátfüggvények



A $P(x)$ valószínűségi sűrűség függvények



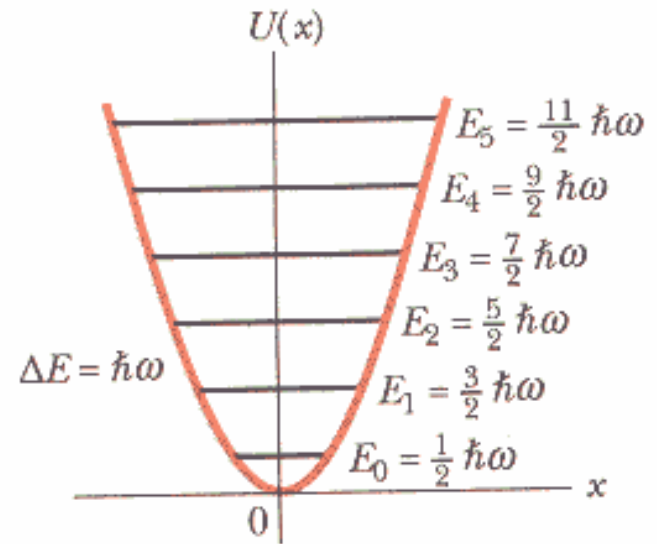
Harmonikus lineáris oszcillátor

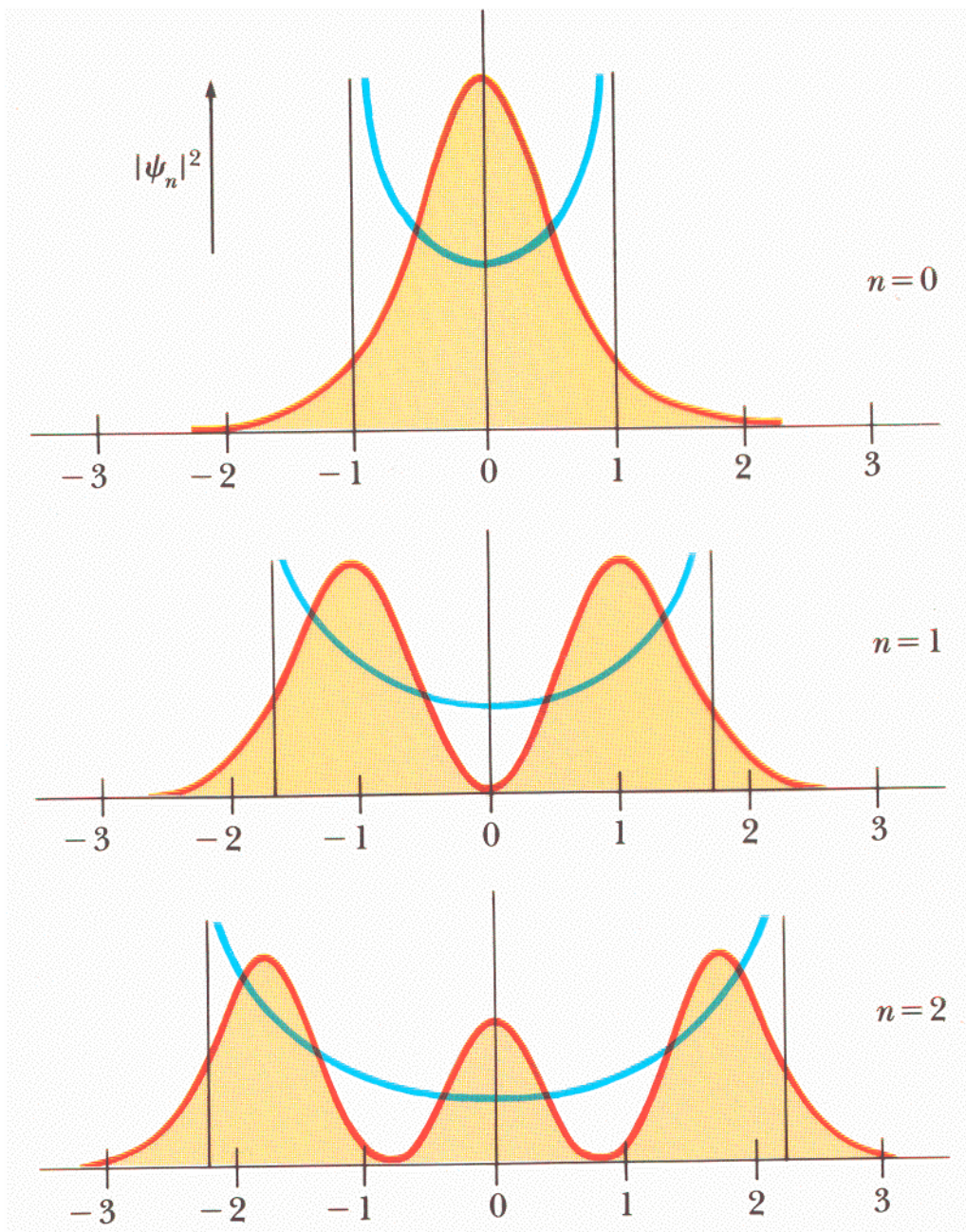
$$U = \frac{1}{2} kx^2 \quad k = m\omega^2$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + U(x)\psi(x) = E\psi(x)$$

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

$$E_0 = \frac{\hbar\omega}{2} \quad \text{zéruspont-energia}$$

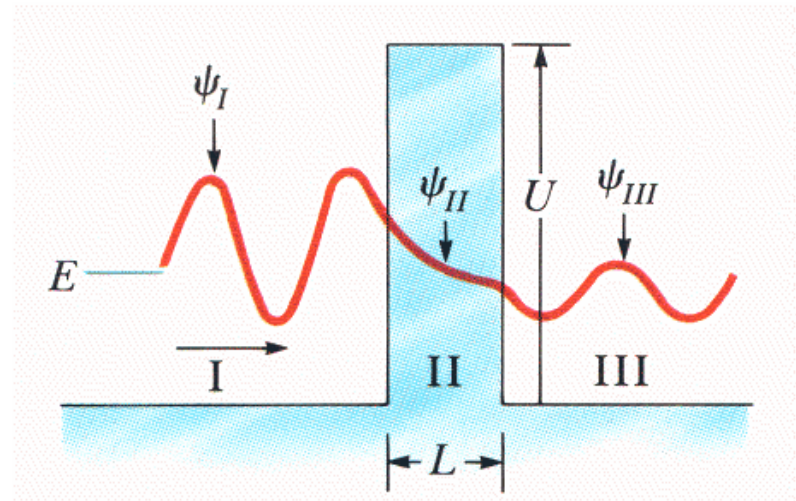




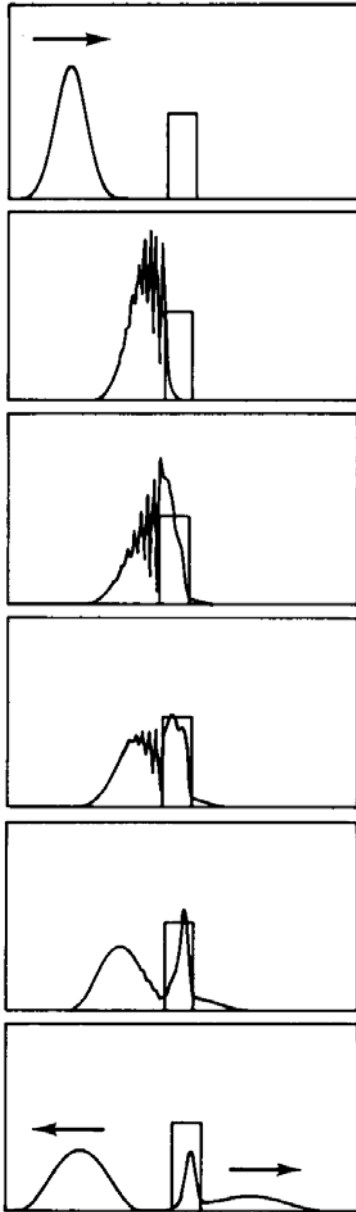
Nagy kvantumszámok esetén a valószínűségi sűrűség függvény a klasszikus valószínűségi sűrűség függvényhez (kék vonal) tart.

Az alagúteffektus

Véges vastagságú potenciálgát esetén a hullámfüggvény értéke a potenciálgát másik oldalán kicsi, de nem zérus.



Véges valószínűsége van annak, hogy a részecske áthalad a potenciálgáton.



Hullámcsomag szóródásának számítása négyszögletes potenciálgáton az 1D időfüggő Schrödinger egyenlet numerikus megoldásával.

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x,t) \right] \Psi(x,t) = -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t}$$

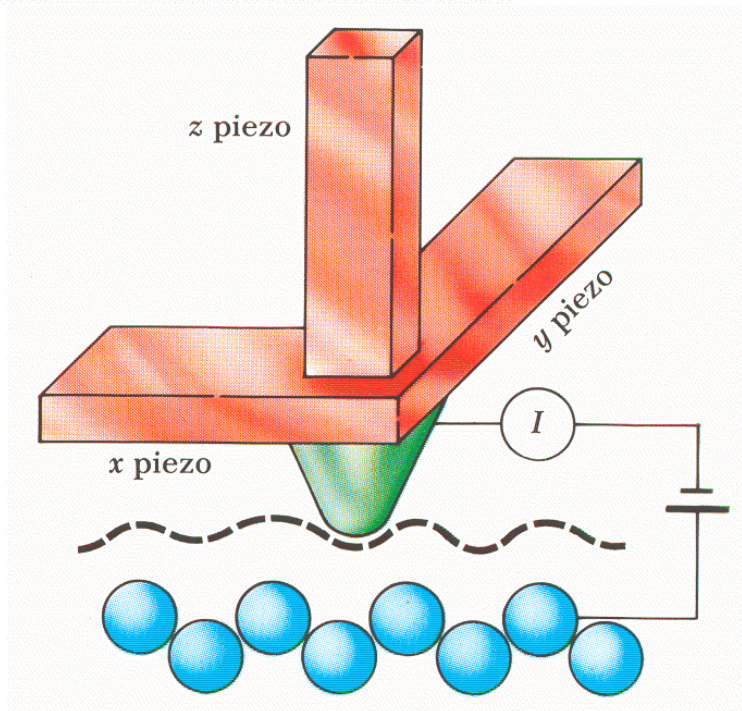
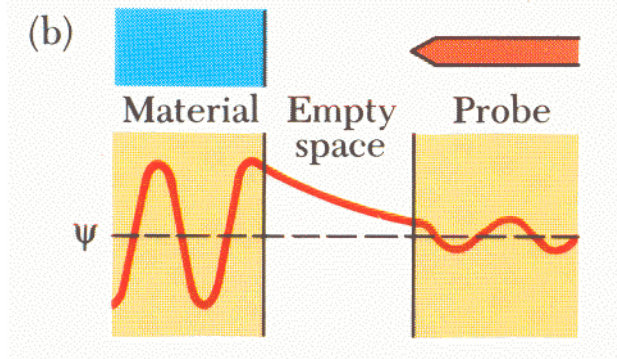
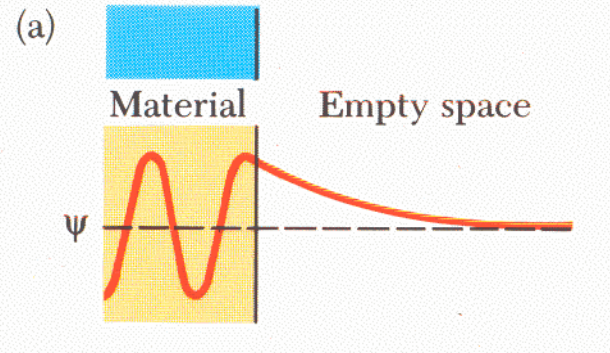
FIGURE 43-20

Frames from a computer-animated film of the probability density function $|\psi|^2$ for a particle approaching a rectangular potential barrier with not quite enough energy (classically) to pass through the barrier. After the impact, however, two “wave packets” of probability travel away on either side of the barrier, showing that there is a finite chance that the particle has tunneled through the classically forbidden region. This does not mean that the particle splits into two parts; the fact that $|\psi|^2$ is finite to the right of the barrier only means that the *chances of finding it there* after the impact are finite, not zero as classical physics predicts. (From the film by A. Goldberg, H. M. Schey, and J. L. Schwartz, “Scattering in One Dimension,” described in *American Journal of Physics* **35**, 177 (1967).]

A hullámcsomag egyik része visszaverődik, másik része áthalad a potenciálgáton.

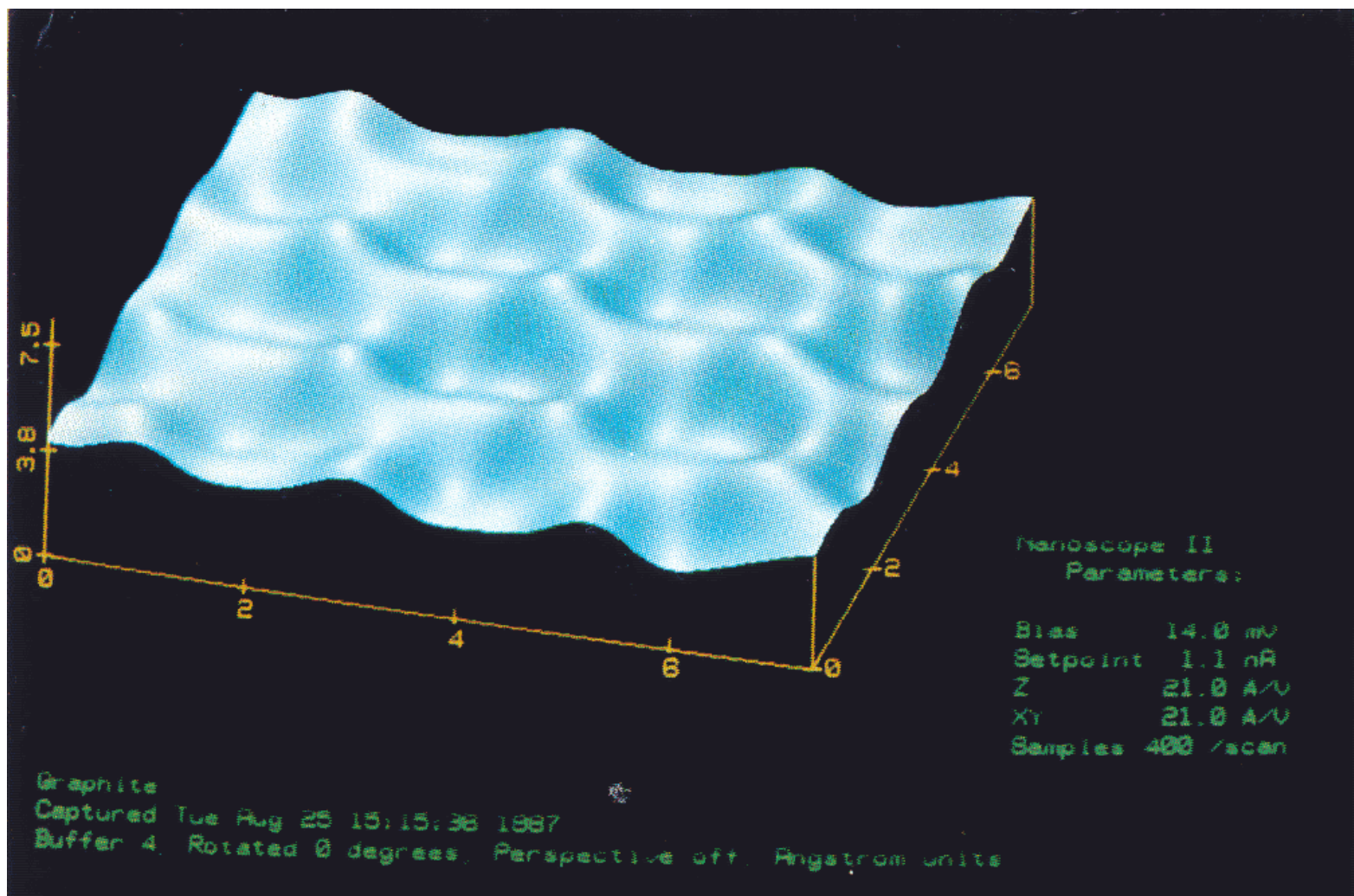
Nem a részecske hasad két részre, hanem az ütközés után nullától különböző lesz a részecskének a potenciálgát jobb oldalán való tartózkodási valószínűsége.

Pásztázó alagútmikroszkóp (STM)



A piezoelektromos kristály mérete változik rá adott feszültség függvényében.

Az alagútáramot állandó értéken tartva letapogatjuk a felületet.



Grafit kristály felülete

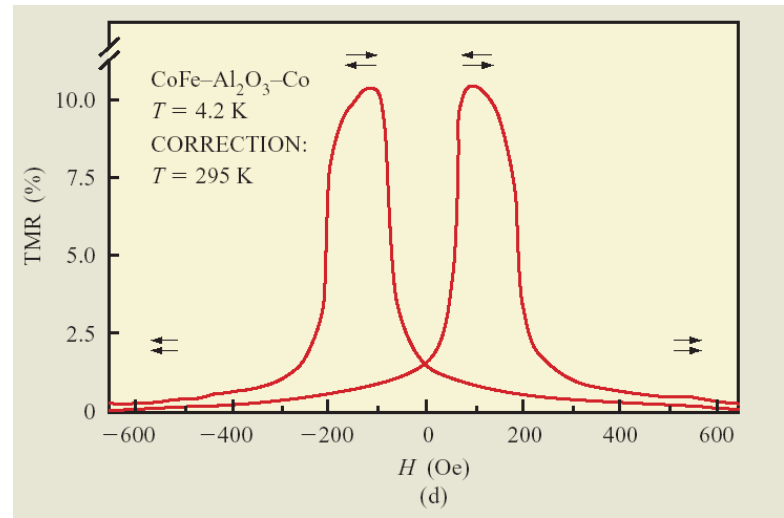
Alagút mágneses ellenállás

Az **alagút mágneses ellenállás** effektus (**TMR**) akkor lép fel, ha **két ferromágneses réteg** között vékony (kb. 1 nm) **szigetelő réteg** van.

Az alagút áram, és így az ellenállás változik a két mágneses réteg relatív orientációjának függvényében.

Az ellenállás nagyobb anti-parallel esetben.

Szobahőmérsékletű TMR

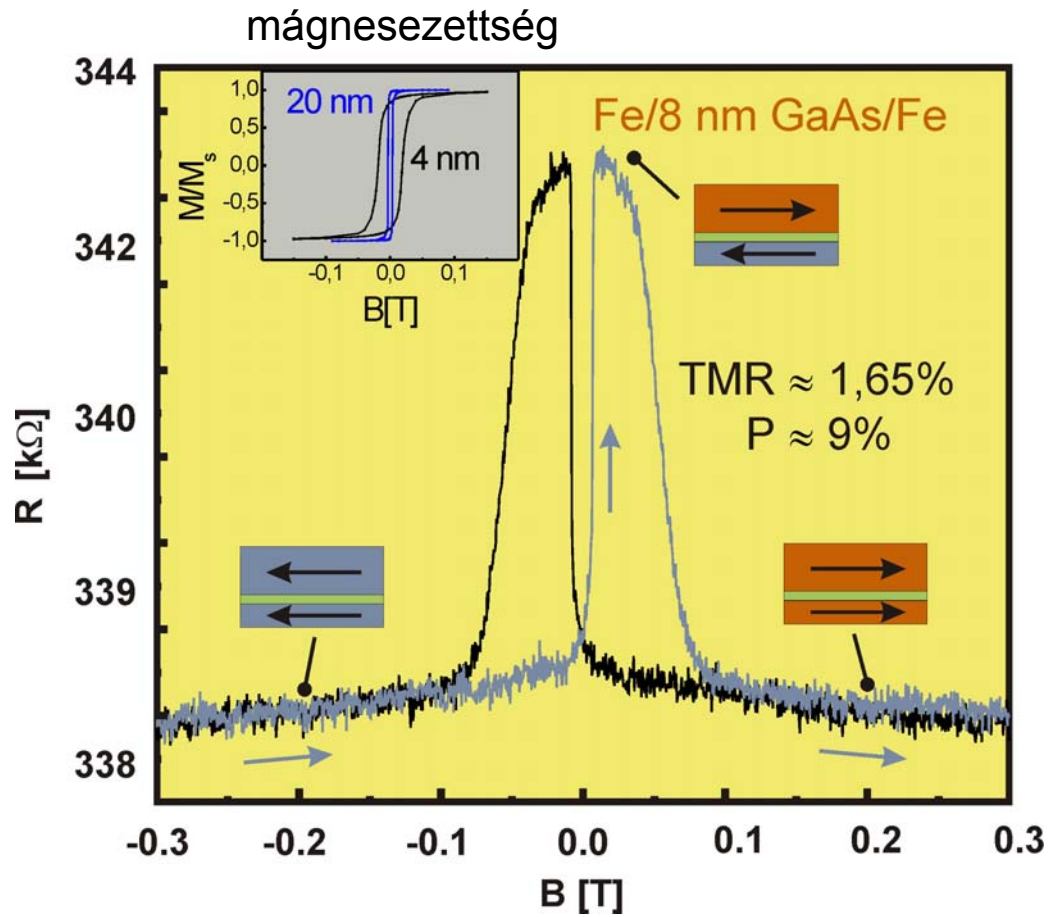


J. S. Moodera et al. "Large Magnetoresistance at Room Temperature in Ferromagnetic Thin Film Tunnel Junctions", Phys. Rev. Lett. 74 pp. 3273–3276) (1995)

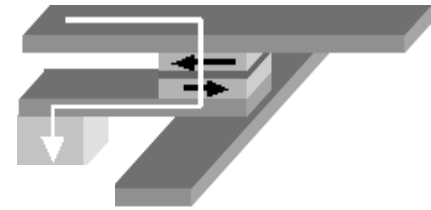
Alkalmazás:

- HDD olvasó fej szenzora (2005)
- mágneses RAM (MRAM) (2000)

TMR



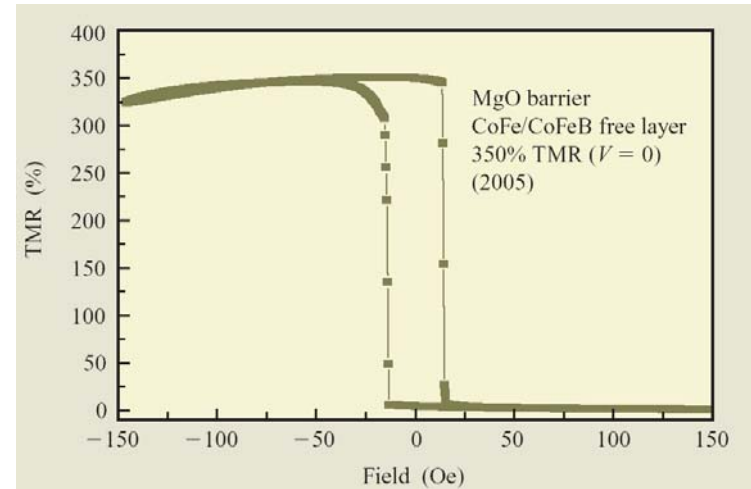
TMR spin szelep



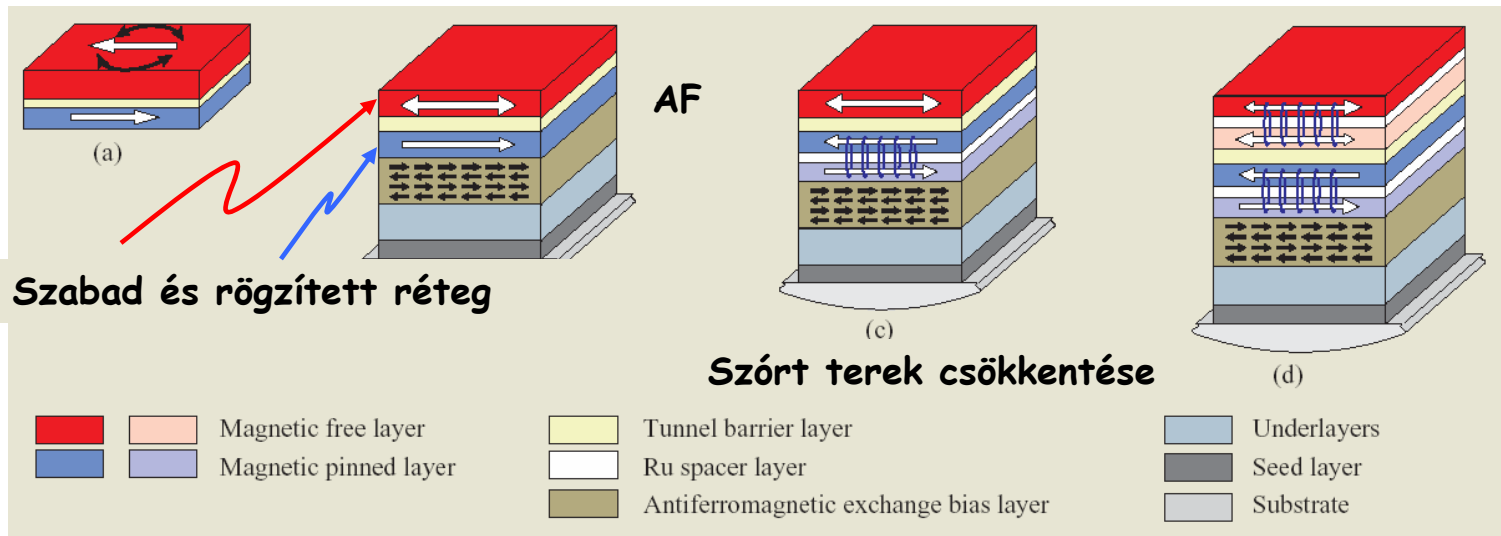
TMR spin szelep szenzor

- a „szabad” réteg
- szigetelő
- rögzített réteg
- anti-ferromágneses réteg
- további rétegek a szórt terek csökkentése céljából

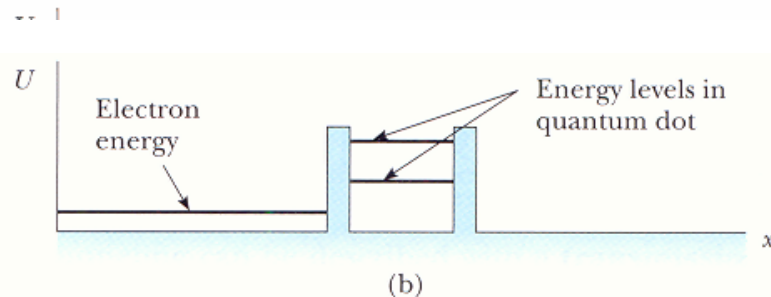
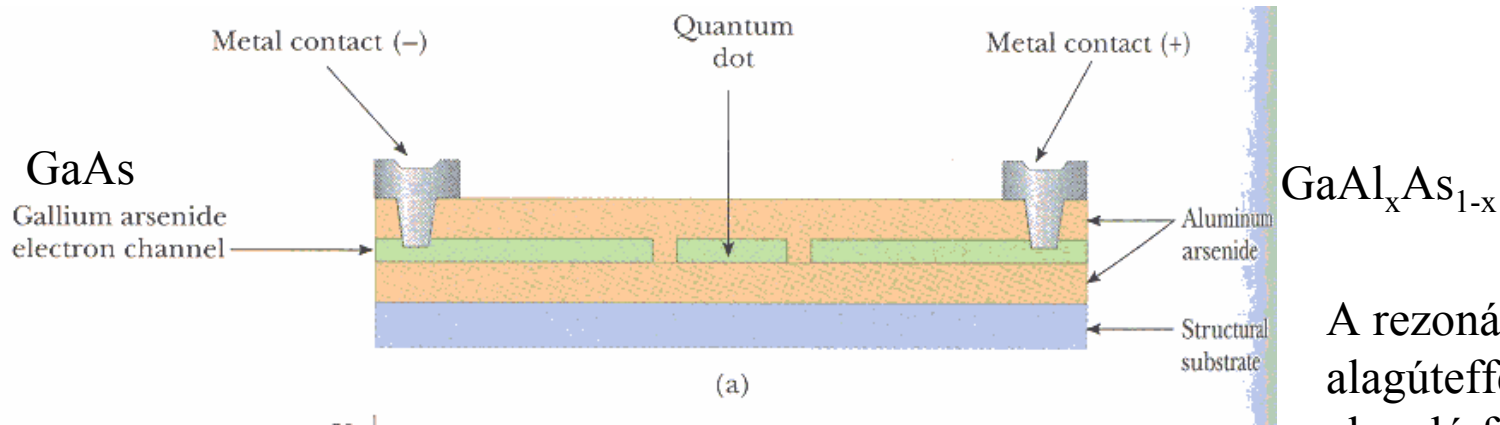
Jelenlegi TMR arány > 300 %



A TMR jel igen/nem állapota



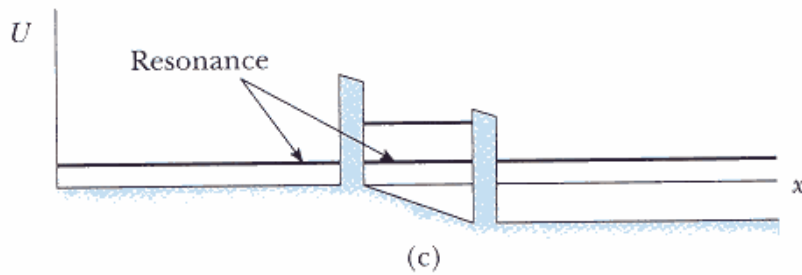
Rezonáns alagút effektuson alapuló eszközök



A rezonáns alagúteffektuson alapuló félvezető eszköz felépítése.

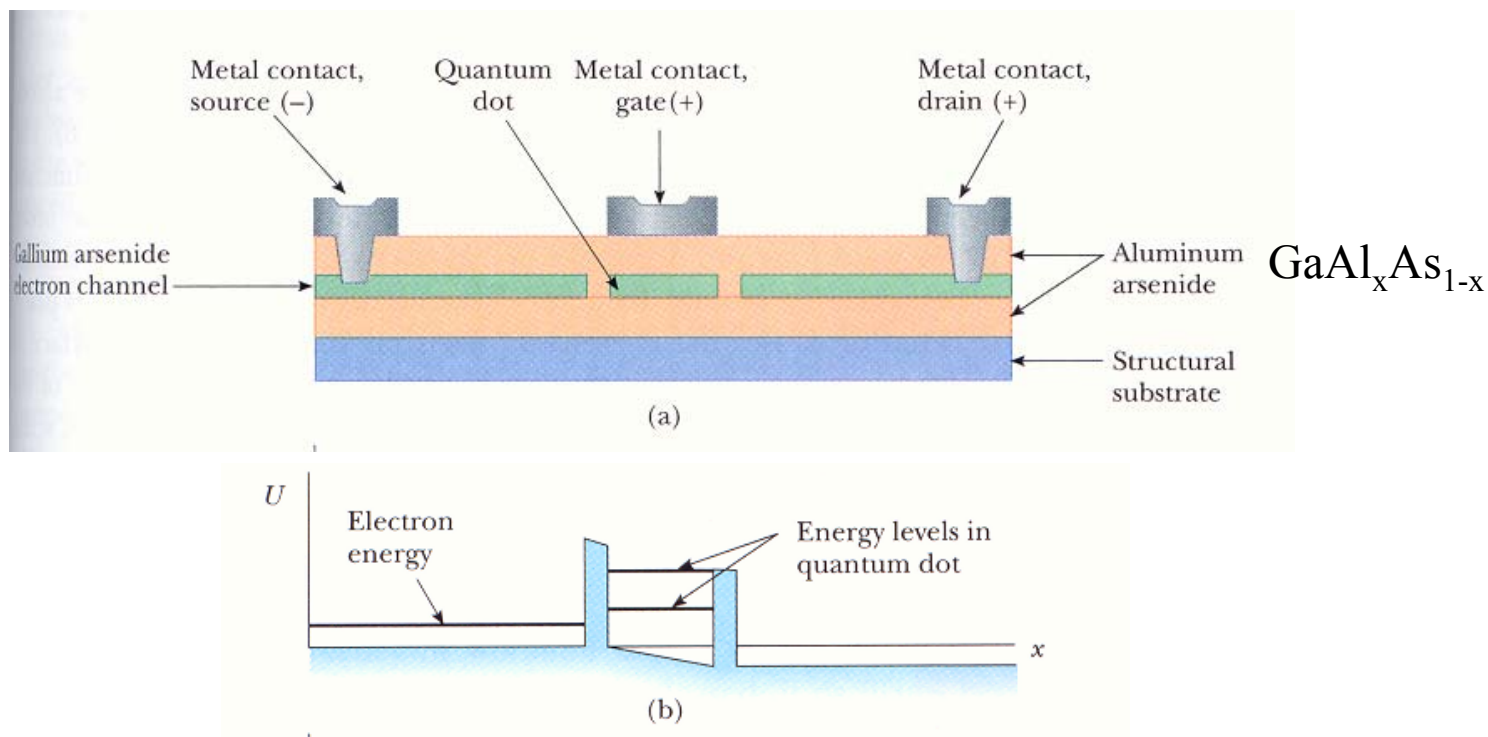
zérus feszültség

A potenciális energia diagramon a kettős potenciálgát a kvantum pont falainak felel meg. Elektronok haladnak a GaAs félvezetőben jobbra és (balról) elérik a kvantum pont potenciálgátját. Ha az eszközre nincs feszültség kapcsolva, a kvantum pont egyik kvantált energiaszintje sem egyezik meg (rezonáns) a bejövő elektron energiájával, nem folyik áram.

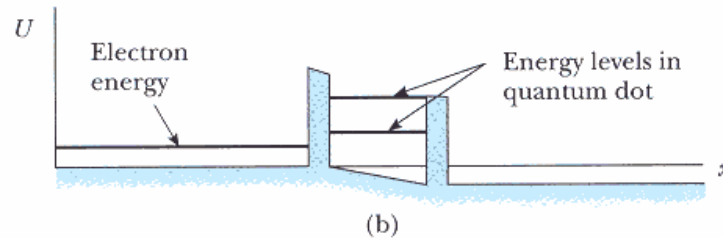


Ha megfelelő feszültséget kapcsolunk az eszközre, a potenciális energia görbe megváltozásával az egyik energiaszint rezonanciába kerül a bejövő elektron energiájával. Az elektronok a potenciálgáton alagúteffektussal áthaladva áramot hoznak létre.

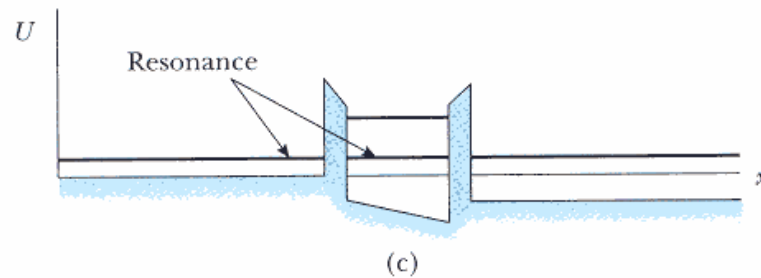
Rezonáns alagút tranzisztor



Ha az eszközhöz egy gate elektródát adunk, rezonáns alagút tranzisztorra alakul. Elektronok haladnak a GaAs félvezetőben jobbra és (balról) eléri a kvantum pont potenciálgátját. Ha az eszközre kis feszültség van kapcsolva, a kvantum pont egyik kvantált energiaszintje sem egyezik meg (rezonáns) a bejövő elektron energiájával, nem folyik áram.



Ha feszültséget kapcsolunk a gate elektródára, a potenciál lecsökken és ezzel együtt a kvantált energiaszintek is. A gate feszültség kis változásaira a kvantált energiaszint a bejövő elektron energiával rezonanciába kerül, vagy onnan kikerül, és az eszköz áramában (és a belső ellenálláson eső feszültségben) nagy változásokat okoz.



A Heisenberg-féle határozatlansági relációk

\hat{p}_x az impulzus x komponensének operátora

\hat{x} az x koordináta operátora

Nem felcserélhetők !!!

A HEISENBERG-FÉLE FELCSERÉLÉSI RELÁCIÓK

$$\hat{p}_x \hat{x} - \hat{x} \hat{p}_x = \frac{\hbar}{i} \quad [\hat{p}_x, \hat{x}] = \frac{\hbar}{i}$$

$$\hat{p}_y \hat{y} - \hat{y} \hat{p}_y = \frac{\hbar}{i} \quad [\hat{p}_y, \hat{y}] = \frac{\hbar}{i}$$

$$\hat{p}_z \hat{z} - \hat{z} \hat{p}_z = \frac{\hbar}{i} \quad [\hat{p}_z, \hat{z}] = \frac{\hbar}{i}$$

$$\text{De} \quad [\hat{p}_x, \hat{y}] = 0 \quad [\hat{p}_x, \hat{z}] = 0 \quad [\hat{p}_y, \hat{x}] = 0 \quad [\hat{p}_y, \hat{z}] = 0 \quad [\hat{p}_z, \hat{x}] = 0 \quad [\hat{p}_z, \hat{y}] = 0$$

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

Mérés a kvantummechanikában

Sajátállapotban a rendszer állapotfüggvénye valamelyik sajátfüggvénnyel egyezik meg.

Minden **elemi mérés** eredménye a fizikai mennyiséget reprezentáló operátor **valamelyik sajátértéke**.

Mérés sajátállapotban: a mérés eredménye a fizikai mennyiséget reprezentáló operátornak a kérdéses állapothoz tartozó sajátértéke.

A **kevert állapot** sajátállapotok lineáris szuperpozíciója.

Mérés kevert állapotban: nem sajátállapotban minden elemi mérés a fizikai mennyiséget reprezentáló operátor valamelyik sajátértékével egyenlő. Azt azonban, hogy a különböző sajátértékek közül melyik lesz az elemi mérés eredménye, nem lehet megmondani. Azt azonban ki tudjuk kiszámítani, hogy mi a valószínűsége az adott sajátérték mérésének.

A kevert állapotban lévő rendszeren végzett elemi mérés során a rendszer sajátállapotba kerül.

Ugyanazon kevert állapotban lévő rendszereken végzett elemi mérések összessége egy hisztogramot eredményez. Sok azonos, kevert állapotban lévő rendszeren végzett mérés esetén az egyes sajátértékek relatív gyakorisága a kérdéses sajátérték mérésének valószínűségéhez tart. Az eloszlásnak van átlagértéke (várható értéke) és szórása.

Legyen $2N$ db. azonos állapotban lévő rendszer, a felén (N rendszeren) mérjük meg az A fizikai mennyiséget

$$\text{szórás} \quad \Delta A = \sqrt{\int_V \Psi^* (\hat{A} - \langle A \rangle)^2 \Psi dV}$$

$$\text{átlagérték} \quad \langle A \rangle = \int_V \Psi^* \hat{A} \Psi dV$$

a másik felén (N rendszeren) mérjük meg a B fizikai mennyiséget

$$\text{szórás} \quad \Delta B = \sqrt{\int_V \Psi^* (\hat{B} - \langle B \rangle)^2 \Psi dV}$$

$$\text{átlagérték} \quad \langle B \rangle = \int_V \Psi^* \hat{B} \Psi dV$$

Ha két fizikai mennyiség **operátora nem felcserélhető**, akkor a két mennyiség **szórásának a szorzata nem lehet tetszőlegesen kicsi. Elvi korlát van a szórások szorzatára. Nem létezik a természetben olyan állapot, melyben ezen a két fizikai mennyiség szórásának szorzata zérus.**

A HEISENBERG-FÉLE
HATÁROZATLANSÁGI
RELÁCIÓ ÁLTALÁNOS
ALAKJA

$$\Delta A \cdot \Delta B \geq \frac{1}{2} \left| \int_V \psi^* [\hat{A}, \hat{B}] \psi dV \right|$$

Schrödinger reprezentáció

$$\hat{p}_x = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \quad \hat{x} = x \cdot$$

$$\hat{p}_y = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y} \quad \hat{y} = y \cdot$$

$$\hat{p}_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z} \quad \hat{z} = z \cdot$$

A koordináta és a megfelelő impulzus-komponens mérése

A HEISENBERG-FÉLE
HATÁROZATLANSÁGI
RELÁCIÓK

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

$$\Delta p_y \Delta y \geq \frac{\hbar}{2}$$

$$\Delta p_z \Delta z \geq \frac{\hbar}{2}$$

$$\Delta p_x \Delta y \geq 0$$

$$\Delta p_x \Delta z \geq 0$$

$$\Delta p_y \Delta x \geq 0$$

$$\Delta p_y \Delta z \geq 0$$

$$\Delta p_z \Delta x \geq 0$$

$$\Delta p_z \Delta y \geq 0$$

Impulzusmomentum (perdület) z komponense

$$\hat{L}_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \phi} \quad \hat{\phi} = \phi.$$

$$\hat{L}_z \hat{\phi} - \hat{\phi} \hat{L}_z = \frac{\hbar}{i}$$

A HEISENBERG-FÉLE
HATÁROZATLANSÁGI
RELÁCIÓ

$$\Delta L_z \Delta \phi \geq \frac{\hbar}{2}$$

Mérés időtől függő állapotban

A HEISENBERG-FÉLE
HATÁROZATLANSÁGI
RELÁCIÓ

$$\Delta E \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}$$

ΔE az adott állapot energiájának szórása

Δt az energiaállapot élettartama

természetes vonalszélesség

A megfigyelések eredményeit a klasszikus fizika nyelvén fogalmazzuk meg. De a klasszikus fizika fogalmai nem mindig illeszkednek jól a mikrovilághoz.

„A Heisenberg-féle határozatlansági relációk úgyszólván útjelző táblák, melyek azt mondják: Eddig és nem tovább használhatók a klasszikus változók (bizonyos párjai). Ezen a határon túl már nem megfelelőek. A nem megfelelő kérdésekre valószínűségi eloszlás lesz a válasz.”

A megfelelő kérdésekre a kvantummechanika éles, pontos választ ad.

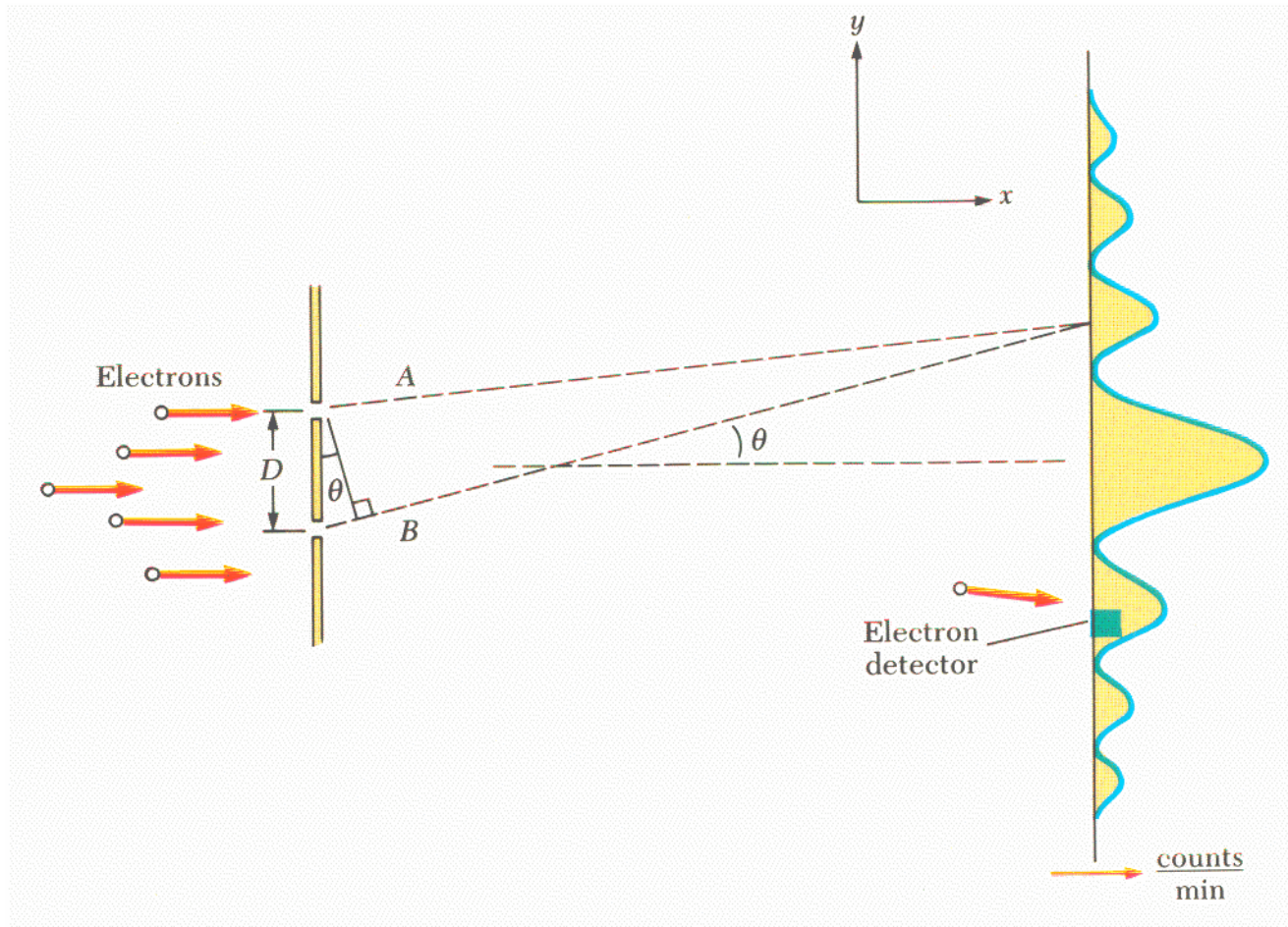
A komplementaritási elv

A mikrovilág objektumai **sem nem részecskék, sem nem hullámok**, bár egyes esetekben az egyik, más esetekben a másik jellegük domborodik ki.

A BOHR-FÉLE
KOMPLEMENTARITÁSI
ELV

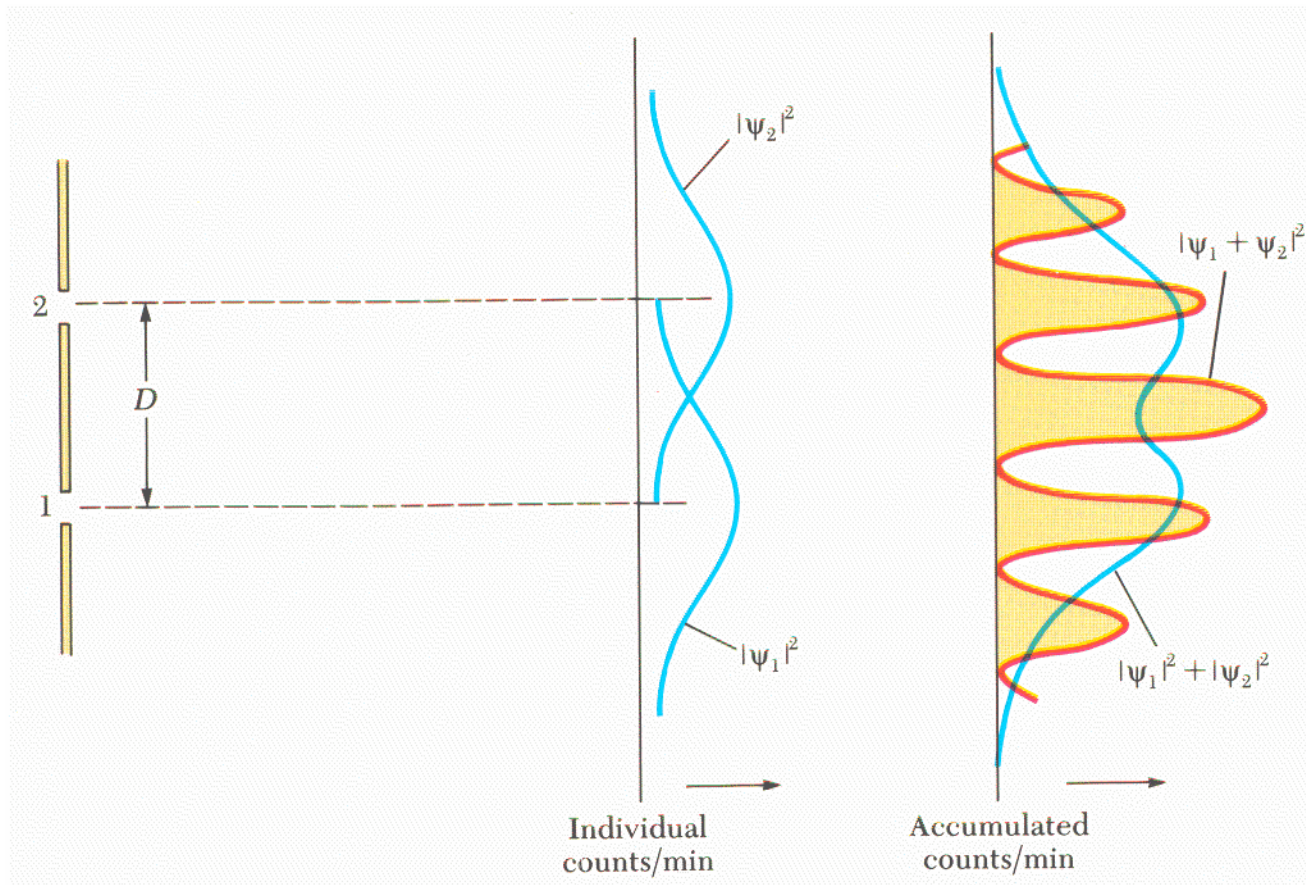
Niels Bohr (1928)

A kvantumos jelenségek körében a hullám és részecske tulajdonságok egymást kiegészítik. Bár az egyik leírási mód eleve kizárja a másik egyidejű (szimultán) használatát, a teljes megértéshez mindkettőre szükség van.



Kétréses interferencia kísérlet elektronokkal

Kétréses interferencia kísérlet elektronokkal



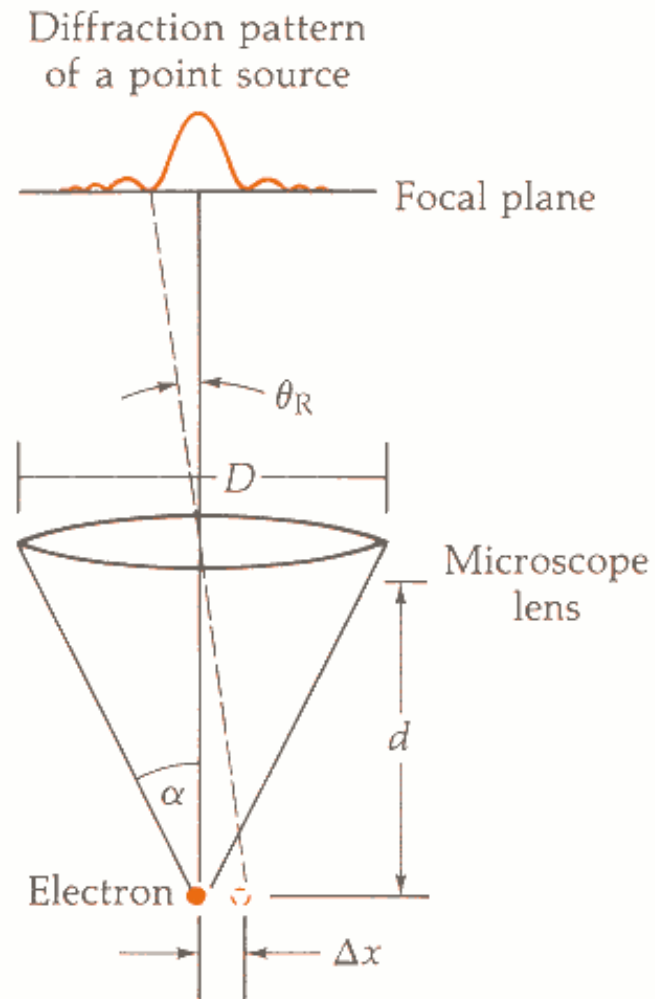


FIGURE 43-22

Observing the position of an electron with a microscope. The central peak of the diffraction pattern is within $\pm \theta_R$ of the axis.