



FIZIKA
(KVANTUMMECHANIKA)

Előadás vázlat és munkafüzet villamosmérnök hallgatók számára

írta.
Orosz László

ELŐSZÓ

Ez a jegyzet a Fizika tantárgy előadási vázлата

Tartalmazza az előadáson elhangzó tananyagot. Azzal a céllal készült, hogy a Hallgató mentesüljön a tábláról való gépies és fásasztó másolás alól. Figyelmét így elsősorban az elhangzó magyarázó szövegre tudja összpontosítani, és annak lényegét leírni. Így (és CSAK ÍGY) lesz teljes az előadásra kerülő tananyag. Ezért felhívjuk a Hallgató figyelmét az előadáson való részvétel fontosságára. Magyarázat nélkül ugyanis a jegyzet tartalma (éppen mert nagyon tömör vázlat) csupán csak matematikai szimbólumok és képletek valamint ábrák érthetetlen halmaza marad.

Az előadás gondolatmenete alapvető célkitűzésünkhöz igazodik. Ez pedig az, hogy a mikrofizikai szinten lejátszódó, a klasszikus fizikai szemlélet számára meghökkentően furcsa jelenségek, néhány alapelv és tétel (Axioma) elfogadása után megérthetők legyenek. Módszerünk az, hogy az éppen vizsgált jelenség lényeges elemeit még tartalmazó, de végletekig leegyszerűsített modellt alkotunk, amely matematikailag viszonylag könnyen követhető azaz végigszámolható. Az így kapott eredmények (bár közelítések) mégis meggyőznek minket arról, hogy fizikai ismereteink a világról jól rendezettek és logikusan egymásra épülő rendszert alkotnak. Az egyszerű modellek által kapott eredmények könnyedén általánosíthatók majd reális (bonyolultabb) esetekre. Így elkerülhetők lesznek azok a szokásos matematikai nehézségek, amellyel az adott területen aktívan dolgozó fizikus társadalom szakmai szinten birkózik. Egy mérnök számára elég a fizikai jelenségek megértése, ezt azonban egyszerű modellszámolások nélkül nem lehet elérni. Ugyanis a nem szakmabeliek könnyen félreértik azokat a fizikai képeket amelyeket a fizikusok

használnak akkor amikor egymással "beszélgetnek". A természettudós képekben gondolkozik és beszél, de képletekkel (absztrakt matematikai formákkal) számol. A kép és képlet szoros kapcsolatban van egymással, mondhatnánk, hogy a (fizikai) képek a használt egyenletek (matematikai modellek, képletek) verbális megjelenési formái. Ha valaki csak a képet ismeri (pl. népszerűsítő irodalomból) akkor azt könnyen félreértheti, elsődlegesnek veszi, szószerint értelmezi. Manapság ez igen gyakran tapasztalható, amikor úgymond "elnyomott, zseniális, önjelölt magántudósok" saját zavaros elképzeléseik hitelesítésére használják fel ezeket a modern fizikában szinte közmegegyezésen alapuló szemléletes képeket. Vagy éppen a modern fizika tudománya elleni érvek között szerepel ezen képekkel való vitatkozás.

Kétségtelen tény, hogy a világegyetem egészéhez képest keveset, nagyon keveset tudunk. De elődeinkhez képest ismereteinek sokkal tágabbak és mélyrehatóbbak:" a világon bárhol és bármikor végzett tudományos tevékenység tekintélyes hányada éppen most zajlik, vagy legalábbis emlékezetünkben még élénken élő multban ment végbe... a valaha is élt tudósoknak 80-90%-a ma is él és dolgozik" (Derek de Solla Price: Kis tudomány - Nagy tudomány).

A napjainkban (társadalmi okok miatt) terjedő és virágzó áltudományok ellen egyetlen fegyver a józan ész és a természettudományos ismereteink bővítése. Hisszük, hogy a világ végső soron megérthető (bár teljesen sohasem fogjuk megérteni!)

Nehezen, sok fáradsággal, kerülő utakon, de végülis letisztult, adekvát (=megfelelően hű)ismeretek birtokába jutunk. Ezen tudásunk gyakorlati alkalmazása az a mérnöki munka, amely igazolja ismeretünket. Ez a megismerési és alkotási folyamat végig fogja kísérni az emberi civilizációt a fejlődése során. Ezért fontos, az, hogy a XXI. század mérnöke helyes, modern fizikai szemlélettel tekintszen a világra.

Reméljük azt, hogy a Hallgató az előadássorozatot végére megérti és jól

érti meg az alapvető kvantummechanikai jelenségeket. Helyes fizikai világgépet alakít ki Magának, amely kellő alapot nyújt ahhoz, hogy szakmai tevékenysége során majdan használt egyre modernebb mikroelektronikai eszközök működési elveivel tisztába lehessen, azokat megértse netán aktívan is fejlessze. Hiszen pl. a számítógépek (amelyek ma már döntően meghatározzák mindennapi életünket is) nem léteznének akkor, ha nem ismernénk azokat a kvantum-effektusokat, amelyek a félvezető alkatrészekben lezajló jelenségek, fizikai alapjait jelentik.

Ehhez a tanulási folyamathoz kívánunk sok sikert. A feladat nem könnyű, de mégéri. Végezetül álljon itt egy két jó tanács:

- Rendszeresen járjon előadásra és jegyzetelje a magyarázó szöveget!
- Ha valamit nem ért nézzen utána vagy kérdezzen!
- A feladatokat lehetőleg önállóan próbálja megoldani!
- A kiadott kérdésekre adandó válaszokat folyamatosan dolgozza ki! Ez lefedi az egész tananyagot.
- Tudatosan törekedjen arra, hogy kialakítson önmagában egy modern fizikai szemléletet! Ez talán a legnehezebb, de egyben a legfontosabb is. A matematika csak eszköz gondolataink precíz és kvantitatív kifejtésére.

Jó tanulást

Orosz László

TARTALOM

Bevezetés (klasszikus fizikai kiegészítés)	1
<u>1. KVANTUMMECHANIKA</u>	
Bevezető (történeti áttekintés)	4
1.1. Hullámmechanika	
1.1.1. A Schrödinger egyenlet és a hullámfüggvény	9
1.1.2. A hullámfüggvény matematikai tulajdonságai	14
1.1.3. Egyszerű példák kötött állapotra	
1.1.3.1. Potenciál völgy	16
1.1.3.2. Potenciál doboz	17
1.1.3.3. Harmónikus lineáris oszcillátor	21
1.1.4. Nem kötött állapotok tárgyalása	
1.1.4.1. A valószínűségi áramsűrűség	26
1.1.4.2. Áthaladás potenciálgáton	28
1.1.4.3. Áthaladás potenciálgáton, potenciálvölgyön	31
1.2. A kvantummechanika axiomatikus felépítése	
1.2.1. A kvantummechanika matematikai eszközei	33
1.2.2. Operátorok felcserélési törvényei	37
1.2.3. A kvantummechanikai méréselmélet alapjai	39
1.2.4. A koordináta és az impulzus kvantummechanikai tárgyalása	43
1.2.5. A határozatlansági reláció	46
1.2.6. A klasszikus mechanika és a kvantummechanika kapcsolata	
1.2.6.1. Az Ehrenfest tétel	48
1.2.6.2. A klasszikus mechanika mozgásegyenlete	49
1.2.6.3. Az energia és az idő közötti határozatlansági reláció	51

1.3. A perdület és a mágneses momentum	
1.3.1. A pályaperdület	52
1.3.2. A (zárt) pályamozgás mágneses momentuma	53
1.3.3. Mozgás centrális erőterben	
1.3.3.1. A pályaperdület meghatározása	54
1.3.3.2. A sugár irányú (radiális) mozgás leírása	58
1.3.3.3. A hidrodén szerű ion	60
1.3.3.4. Az atomok elektronszerkezete	62
1.3.3.5. Az állapotfüggvények (atompályák) grafikus ábrázolása	64
1.4. Atomok mágneses térben	
1.4.1. A mágneses tér hatása a pályamozból származó mágneses momentumra	66
1.4.2. Az elektron saját mágneses momentuma és az elektronspin	67
1.4.3. A spinpálya kölcsönhatása	70
1.5. Sok (azonos) részecskéből álló rendszer vizsgálata	
1.5.1. Az energia operátor és az állapotfüggvény	72
1.5.2. A Hartree közelítés és az SCF módszer	74
1.5.3. A Pauli elv	76
1.5.4. Kvantumstatisztikák	78
1.5.5. Bozonokból álló rendszer	83
1.5.5.1. Fotongáz	84
1.5.5.2. Fonongáz	85
1.6. A kovalens kémiai kötés	
1.6.1. A molekulapályák	
1.6.1.1. Egydimenziós modell	88
1.6.1.2. A hidrogémolekula ion	89
1.6.2. A molekulapályák felépítése atompályákból	90
1.6.3. A hidrogénmolekula	91

2. SZILÁRDTESTFIZIKA

2.1. A fémek szabadelektron elmélete	
2.1.1. A Sohherfeld fémmodell	1
2.1.2. A szabadelektron modell alkalmazásai	
2.1.2.1. A szabad elektrongáz fajhője	4
2.1.2.2. A kontantk potenciál	5
2.2. Szilárdtestek energiasáv elmélete	
2.2.1. A periódikus potenciálú tér egydimenziós modellje	5
2.2.2. Az energiasávok és az atomi energiaszintek kapcsolata	10
2.2.3. Az energiasávok és a szabad elektrongáz kapcsolata	13
2.3. Az effektív tömeg közelítései	
2.3.1. Az effektív tömeg fogalma	14
2.3.2. Szilárd testek sávszerkezete és az elektromos vezetési tulajdonságok kapcsolata	17
2.4. Pozitív töltéshordozók szilárd testekben: a "lyukak"	
2.4.1. A Hall effektus	18
2.4.2. A lyukak	18
2.5. Az elektromos vezetés fizikai alapjai szilárd testekben, Az Ohm törvény	
2.5.1. A relaxációs idő közelítés	21
2.5.2. A vezetőképesség számítása	24
2.6. Szilárd testek háromdimenziós modellje	
2.6.1. Ideális kristályok leírása	26
2.6.2. Az elektronállapotok számítása	28
2.6.3. A sávszerkezet (diszperziós reláció)	30
2.6.4. Az elektronok dinamikája	32
2.6.5. Az állapotsűrűség	34

2.7. Félvezetők általános tulajdonságai	
2.7.1. A Fermi szint meghatározása szerkezeti félvezetők esetén	35
2.7.2. A fajlagos vezetőképesség számítása szerkezeti félvezetők 37 esetén	
2.7.3. Adalékolt félvezetők	38
2.7.4. A p-n átmenet	42
2.8. Félvezető kristályok	
2.8.1. Általános tulajdonságok	43
2.8.2. A szilícium sávszerkezete	46
2.8.3. A germánium sávszerkezete	47
2.8.4. A Gallium-Arzenid kristály	48
2.9. Szilárd testek optikai tulajdonságai és a sávszerkezet	49
2.10. Mikrostrukturák: A jövő elektronikája	50

TÁRGYMUTATÓ

A

adalékolt félvezető
adjungált operátor
akceptor atom
alagút effektus
alhéj
állapotsűrűség
antiszimmetrikus hullám függvény
atomtörzs
axiómák

B

Balmer formula
bázis atomok
bázis függvények
Bloch állapot
Bloch tétel
Bohr atom
Bohr magneton
Bohr-Sommerfeld kvantálás
Boltzmann egyenlet
Born
Born-Kármán határfeltétel
Bose-Einstein statisztika
Bozonok
Bravais cella
Brillouin zóna

C

centrifugális potenciál
Compton effektus

CS

csererelációk
csomópontok
csoportsebesség

D

Davisson-Germer kísérlet
De Broglie hullámok
Debye hőmérséklet
degenerált állapot
determináns hullámfüggvény
dinamikai változók
Dirac delta
direkt átmenet
donor adalékolás

E

effektív potenciál
effektív tömeg
egyrészecske közelítés
Ehrenfest tétel
Einstein-De Haas kísérlet
elektongáz fajhője
elektronszerkezet
elemi cella
elliptikus koordináták

F

fajlagos vezetőképesség
Fermi-Dirac statisztika
Fermi energia
Fermi hőmérséklet
fermionok

folytonos spektrum
fonon
Fowler-Nordheim formula
foton
Franck-Hertz kísérlet
fő kvantumszám

G

Ga-As
Gamow formula
Ge
Goudsmit-Uhlenbech elmélet
gömbfüggvény
gyémánt kristály
Gunn effektus

H

Hall állandó
Hall effektus
harmónikus lineáris oszcillátor
Hartree
határozatlansági reláció
Heisenberg
héj
Hermite polinom
heterostruktura
hibrid pálya
hideg emiszió
hidrogén molekula (ion)
hidrogén szerű ion
Hilbert tér
hullámcsomag

I

idő mérése
indirekt átmenet

K

kémiai potenciál
klasszikus visszafordulási pont
kontakt potenciál
kontinuitási egyenlet
kovalens kötés
kötő pálya
kötött állapot
kristály rendszerek
kvantált Hall effektus
kvantum számok
kvantum völgy

L

Laguerre polinom
Laplace operátor
Larmor frekvencia
Lazító pálya
LCAO módszer
Legendre polinom
lyuk

M

mágneses kvantum szám
mágneses momentum
makro állapot
Maxwell-Boltzmann statisztika
mellék kvantumszám
mérés kevert/saját állapotban
mikroállapot

Miller index
modell potenciál

modus

molekula-pálya

molhő

mozgékonyosság

munka tétele

N

négyszögletes potenciálgát

nem kötött állapot

n-típusú félvezető

O

Ohm törvény

operátor

operátor algebra

ortogonalitás

ortonormált rendszer

önadjungált operátor

P

Pauli elv

pályaperdület

pályaperdület kvantálása

pályaperület operátora

periódikus potenciál

Planck féle sugárzási törvény

polár koordináták

polinon módszer

pont (csoport) szimmetria

potenciál doboz

potenciál gát

potenciál völgy

p-n átmenet

primitív cella

p-típusú félvezető

R

rácstípusok

radiális differenciál egyenlet

reciprok bázis

reciprok rács

regularitási feltételek

relaxációs idő

rezonáns alagút effektus

Rutnerford féle atommodell

Rutnerford féle kísérlet

S

saját mágneses momentum

sávátfedés

Schrödinger egyenlet

SCF módszer

sebesség

Si

Skalár szorzat

Sommerfeld modell

Spin

Spin függvény

Spin kvantumszám

Spin-pálya állapot

Spin-pálya kölcsönhatás

Spin változó

Stern-Gerlach kísérlet

SZ

szabad elektrongáz
szeparálás
szerkezeti félvezető
szimmetrikus hullámfüggvény

T

termodinamikai valószínűség
tiltott sáv
transzlációs szimmetria
transzmissziós tényező

Ü

üresrács modell

V

Valószínűségi áramsűrűség
vegyérték elektron
vegyérték sáv
vezetési sáv

W

Wigner-Seitz cella

Z

Zeemann-effektus