

# Elektromágneses hullámok

## Az elektromágneses sugárzás rádióhullámú tartományára miért ad jó leírást a klasszikus fizika?

Mert a Planck-féle sugárzási törvény

$$u(\nu, T) = \frac{8\pi}{c^3} \frac{h\nu^3}{\exp\left(\frac{h\nu}{k_B T}\right) - 1}$$

kis frekvenciákon (rádióhullámok frekvenciatartománya) értelmezve a Rayleigh-Jeans törvényre egyszerűsödik, miszerint

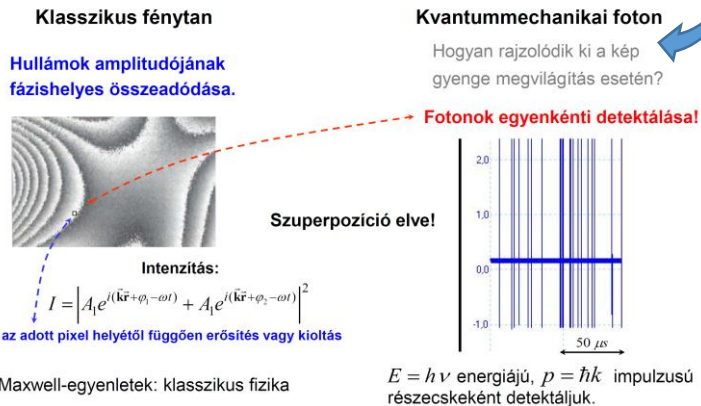
$$u(\nu, T) = \frac{8\pi}{c^3} k_B \nu^2 T.$$

Ami kis frekvenciákon (nagy hullámhosszon) megegyezik a tapasztalati értékekkel.

Ez azért van, mert a rádióhullámhoz hasonló "alacsony" frekvenciákon a  $h \cdot f$  energiakvantum olyan kicsi, hogy az energia folytonosnak tekinthető.

(nagyságrendileg: 1GHz mikrohullám  $10^{-15} \cdot 10^9 = 10^{-6}$  eV, látható fénynél  $10^{-15} \cdot 10^{15} = 1$  eV)

A fény klasszikus fizikai leírásának helyességét bizonyítja az interferenciakép kialakulása: a hullámok fázishelyes összeadásából számolt intenzitást detektáljuk. A Maxwell-egyenletek pontosan adják meg a CCD kamerával rögzített kép egy-egy pixelén detektált jel erősségét. A CCD kamera működése a kvantummechanikai fotoemissziós jelenségen alapul. Gyenge megvilágítás esetén egy adott pixelen az elektronokat egyenként érkező fotonok lökik ki. A detektált töltést a látszólag véletlenszerűen érkező fotonok becsapódásával kilökött elektronok adják. Minden egyes foton csak egy elektront lök ki, a pixel jele ezek összegéből épül fel. Amelyik pixelen nagyobb a jel oda gyakrabban érkeznek fotonok, ahol pedig kisebb, oda ritkábban.



Mivel kialakult képpont erőssége arányos a fény intenzitásával ( $I = |A|^2$ ), levonhatjuk azt a következtetést, hogy a fotonok detektálási valószínűsége arányos az elektromágneses hullám amplitúdójának négyzetével. Ez a valószínűségi értelmezés úgy kapcsolja össze a klasszikus fizikát és a kvantummechanikát, hogy mindkét leírás érvényes marad.

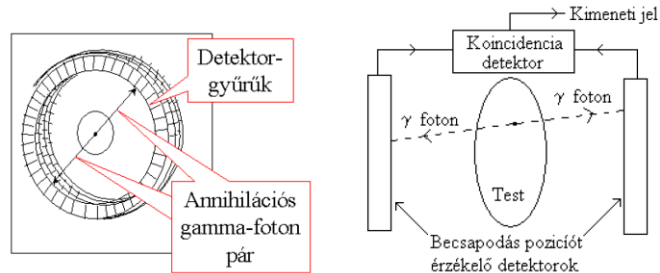
A kiszemelt pixelen a **foton detektálásának valószínűségét** az interferencia eredményeképp kapott **eredő hullám intenzitása** adja meg.

## Ismertesse a Pozitron Emissziós Tomográf (PET) működési elvét!

Non-invazív eljárás, melynek segítségével 3D-s képet nyerhetünk a test egy adott területéről. A pozitron emissziós tomográfia működése azon alapul, hogy pozitront sugárzó izotópokkal jelölt molekulák segítségével képes a szervezet biokémiai folyamatait ábrázolni. A vizsgált szervbe pozitron kibocsátással bomló radioaktív izotópot tartalmazó molekulát juttatnak.

A szervezetbe juttatott marker anyag szöveti eloszlását a PET kamera (egy gyűrű alakú detektor) segítségével lehet detektálni a pozitron-kibocsátást kísérő gamma-sugárzás észlelésén keresztül.

Az izotóp bomlik -> pozitron -> elektronnal találkozik -> foton pár Gyűrű alakú foton detektor -> a bomló atom helyzete kiszámítható



## A hőmérsékleti sugárzás mely tartományában elkerülhetetlen a kvantummechanikai leírás?

Kis frekvenciákon elkerülhetetlen, azért mert minden harmonikus oszcillátor, így az üregbeli elektromágneses sugárzás módusai is, csak meghatározott diszkrét adagokban (kvantumokban) tudnak energiát felvenni vagy leadni. E kvantumok nagysága  $h \cdot \nu$ , ahol  $\nu$  a módus frekvenciája és  $h$  a Planck állandó. Ha adott hőmérsékleten az ekvipartíció tételének megfelelő  $k_B \cdot T$  energia kisebb, mint egy módus frekvenciájához tartozó  $h \cdot \nu$  energiakvantum, akkor az a módus nem veszi fel az ekvipartíció tétele szerint rá jutó energiát. Vagyis adott hőmérsékleten csak azokat a módusokat kell összeszámolnunk, amelyekre  $h \cdot \nu < h \cdot \nu_{\max} = k_B \cdot T$ . A térfogategységre vonatkoztatott energiasűrűséget ekkor a Planck-féle sugárzási törvény adja meg.

## Mi a lézersugárzás kialakulásának feltétele?

Lézerműködés feltétele: Megvalósítása:

- **Populáció inverzió:** Alkalmos erősítőközeg + pumpálás  
A lézer, mint oszcillátor működéséhez az erősítésen kívül visszacsatolásra is szükség van, amit tükröző felületek biztosítanak. Az erősítéshez az kell, hogy az indukált emisszió folyamataiból több legyen, mint az abszorpcióból. Ez az átmeneti mátrixelemek hermitikus szimmetriája miatt (időtüközési szimmetria) csak úgy lehetséges, ha a gerjesztett atomok többen vannak, mint az alapállapotúak. Hogy ezt a „populáció-inverzióknak” nevezett állapotot megvalósítsuk, ahhoz a rendszert folyamatosan „pumpálni” kell gerjesztett állapotai felé.
- **Indukált emisszió:** Optikai erősítéshez.
- **Visszacsatolás:** Optikai rezonátorral.  
A rezonátor egyrészt elősegíti, hogy a foton nyaláb többször áthaladva a lézeraktív anyagon az indukált emisszióval „felerősödjön”, másrészt növeli a fény koherenciáját.

### Tipikus feladatok

Becsülje meg, hogy 700 lux (~1W/m<sup>2</sup>) LED megvilágításkor másodpercenként hány foton halad át egy 1 cm<sup>2</sup>-es felületen. (1 lux = 1 lumen/m<sup>2</sup>, 700 lux ~ egy szobán belüli jó megvilágítás)

$$c = 3 \times 10^8 \frac{m}{s}$$

$$h = 6.6 \times 10^{-34} J \cdot s$$

$$1 eV = 1.6 \times 10^{-19} J$$

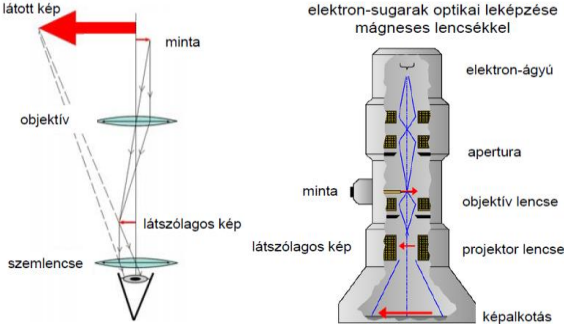
$$\lambda \approx 600 \text{ nm} \quad \nu = \frac{c}{\lambda} = \frac{E}{h} \quad h\nu \approx 2 \text{ eV} \quad \rightarrow \quad 1J \approx 10^{19} \text{ foton} \quad \rightarrow$$

$$\frac{1 \text{ W}}{m^2} \approx 10^{15} \frac{\text{foton}}{cm^2}$$

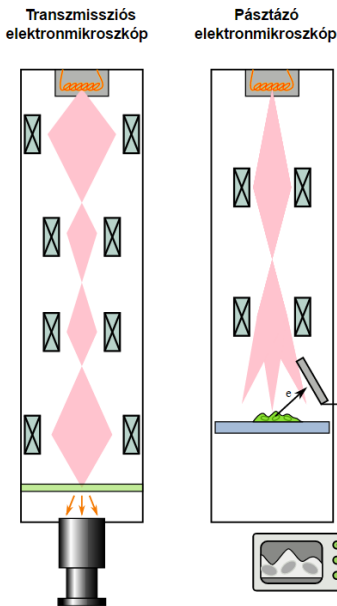
# Elektronok hullámtermészete

## Ismertesse az elektronmikroszkóppal történő képalkotás legfontosabb elemeit (TEM és SEM)!

**TEM:** A transzmissziós elektronmikroszkóp az átvilágított ultra vékony minta képét a geometriai optika szabályai szerint vetíti le a mikroszkóp ernyőjére (CCD kamera vagy szcintillációs detektor). Az elektronsugarak útját a Lorentz-erőt alkalmazó mágneses lencsék szabályozzák. A fókuszponthoz közeli minta akár a nanométeres mérettartományban lehet.



**SEM:** A pásztázó elektronmikroszkóp, olyan elektronoptikai eszköz, amely a vizsgált tárgy felszínének meghatározott területét irányított vékony elektronnyalábbal pontos minta szerint végigpásztázza, az elektronsugár és a tárgy kölcsönhatásából származó jeleket erre alkalmas detektorokkal érzékeli, és ezeket megfelelően feldolgozva, az elektronsugár mozgásával szinkronizálva képileg kijelzi. Mivel az elektronsugár és a tárgy kölcsönhatásaként számos, az anyag adott felületére jellemző típusú jel keletkezik, lehetővé válik a minta különböző tulajdonságainak képszerű megjelenítése, vagy a vizsgált anyag tulajdonságainak, a vizsgálati terület helyének – képileg is azonosítható – meghatározása.

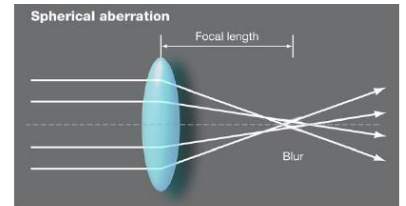


## Mi határozza meg az elektronmikroszkópos képek felbontását?

A leképezés felbontását az **alkalmazott nyaláb hullámhossza** határozza meg, ami akár 50.000-szer kisebb is lehet (~0.1 Angström), mint a látható fény hullámhossza (~500 nm). Pásztázó elektronmikroszkóp esetén elektronnyalábbal történő pásztázás során a visszaszórt elektronokat, másodlagos **elektronokat**, a keltett **röntgen sugárzást** vagy **fényt** detektáljuk, így itt a felbontás 1-5 nm körüli.

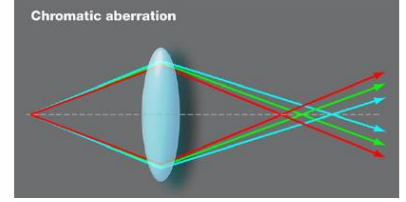
### Szférikus aberráció:

A lencse optikai tengelyétől nagyobb távolságra beeső párhuzamos nyalábokat a lencse különböző fókusz távolsággal képezi le. A lencse széléin megváltozik a törési szög.

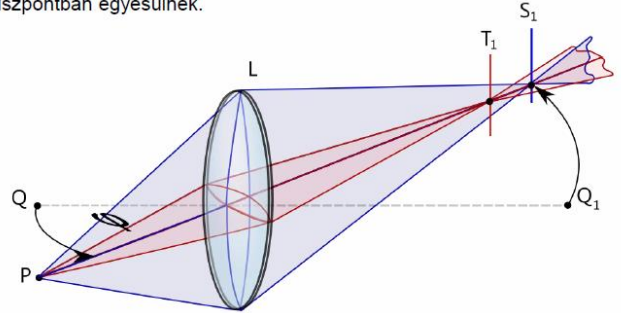


### Kromatikus aberráció:

A lencsére azonos pontba érkező, de különböző hullámhosszú nyalábokat a lencse különböző fókusz távolsággal képezi le. Oka az lencse törésmutatójának függése a hullámhosszról.



**Asztigmatizmus:** A lencse optikai útra merőleges két tengelye mentén a fókuszpontok eltérnek. A viszonylag távol elhelyezkedő tárgypontból kiinduló függőlegesen haladó nyalábok és a vízszintesen haladó nyalábok eltérő fókuszpontban egyesülnek.



## Ismertesse a kristályszerkezet elektron-diffrakcióval történő meghatározásakor lejátszódó interferenciajelenséget, és vezesse le a diffrakció Bragg-feltételét!

### Milyen következtetés vonható le a hullámszám-vektor irányának megváltozásából?

A diffrakciós felvételtől következtetni lehet a kristály szerkezetére. Az atomok helyzetére párhuzamos síkok fektethetők. Az ilyen síksíkokat a síkok normálisa (**n**) és a síkok távolsága (**d**) jellemez. A modell feltételezte, hogy a Röntgen-sugarak a fénytan szabályai szerint verődnek vissza a kristálsíkokról: a ráeső sugarak egy részét a síkok visszatükrözik, és az egymás mögötti síkokról visszaverődő hullámok interferenciája hozza létre a detektoron megjelenő fényfoltokat.

a konstruktív interferencia feltétele:

$$2d \sin \theta = m\lambda$$

$$\sin \theta = \frac{\lambda}{2d}$$

**Bragg feltétel**  
( $m = 1$  elsőrendű interferencia)

**A kristálsíkok távolságának és normálisának ismeretében a szerkezet könnyen rekonstruálható.**

bejövő hullám:  $e^{i(\vec{k}\vec{r}-\omega t)}$

kimenő hullám:  $e^{i(\vec{k}'\vec{r}-\omega t)}$

$\Delta\vec{k} = \vec{k}' - \vec{k}$

$\Delta\vec{k} \parallel \vec{n}$

merőleges a kristálsíkra

$$|\Delta\vec{k}| = 2|\vec{k}|\sin \theta \quad \lambda = \frac{2\pi}{|\vec{k}|}$$

$$|\Delta\vec{k}| = 2 \frac{2\pi}{\lambda} \frac{\lambda}{2d} = \frac{2\pi}{d}$$

$$\Delta\vec{k} = \frac{2\pi}{d} \vec{n}$$

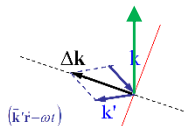
Az erősítést eredményező konstruktív interferencia feltétele, hogy a szomszédos síkokról visszaverődő nyalábok közti útkülönbség a hullámhossz egész számú többszöröse legyen. A kristálsíkok iránya azonban sokféleképpen választható, ennek megfelelően egy kristályról több irányban is kaphatunk szórt nyalábot. A visszaverődés eredményét a bejövő Röntgen-nyaláb terjedését leíró hullámszám-vektor irányának megváltozásával lehet leírni ( $\Delta\vec{k}$ ). A fenti egyszerű geometriai számolás ezt az irányváltást összekapcsolja a kristálsíkok paramétereivel.

## Hogyan készül és milyen speciális tulajdonsággal rendelkezik a „dark-field image”?

A képkötés diffraktált nyalábbal (egy Bragg-csúcs kiválasztása apertúrával), csak az adott orientálású kristálysíkok szórának.

A egykristályon végzett szórás kísérlet közvetlen információt ad a kristály szimmetriájáról és orientációjáról. Az elektronmikroszkóp lencserendszerével a mintára párhuzamos sugarakból álló nyalábot vetítve a kristálysíkokon tükröződő nyalábok interferenciája éppen olyan diffrakciós képet alkot, mint amivel az elektromágneses hullámoknál találkoztunk.

A diffrakciós kép egy pontjában megfigyelt erősítés a bejövő és kimenő hullámszám-vektor különbségére merőleges kristálysíkoktól származik.



Ha egy apertúra megfelelő pozicionálásával csak ezt a nyalábot engedjük tovább, majd további lencsék beillesztésével ezt alkalmazzuk az optikai képkötésre, akkor egy polikristályos mintáról készült felvételen csak azok a részek láthatók, amelyek az azonos orientációjú kristallithoz tartoznak. A diffrakció és a képkötés együttes alkalmazásával ilyen módon előállított kép a „dark field image”. Az egykristályon szóródó monokromatikus nyaláb esetén a diffrakció feltétele nehezen teljesíthető, és ekkor is csak néhány jól meghatározott irányban terjed tovább a szórt nyaláb, a tér többi része sötét marad. Ebben a „sötét tér”-ben kell megtalálni a képkötéshez használt egyetlen nyalábot, innen származik a „dark field image” kifejezés.

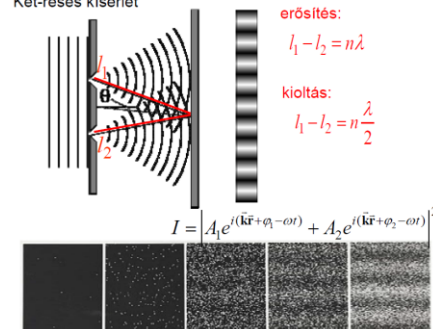
## Az elektronok interferenciáját mutató két-réses kísérlet példáján keresztül ismertesse a szuperpozíció elvét, és a Born-féle valószínűségi értelmezést!

### Részecskék interferenciája

A hullámok amplitúdója összeadódik, az eredő intenzitást detektáljuk.

Az  $E = \frac{p^2}{2m}$  energiájú részecskéhez  $\vec{k} = \frac{\vec{p}}{\hbar}$  hullámszám-vektort, és  $\lambda = \frac{h}{|\vec{p}|} = \frac{h}{\sqrt{2mE}}$  hullámhosszat rendelünk.

Két-réses kísérlet



erősítés:  
 $l_1 - l_2 = n\lambda$   
kioltás:  
 $l_1 - l_2 = n\frac{\lambda}{2}$

elektron  $\lambda(\text{Å}) = \frac{12}{\sqrt{E(\text{eV})}}$   
Davisson-Garmer (Nobel-díj 1927)

neutron  $\lambda(\text{Å}) = \frac{0.28}{\sqrt{E(\text{eV})}}$   
mára rutinszerű (pl. Csillebércen)

fullerén  $\lambda(\text{Å}) = \frac{0.011}{\sqrt{E(\text{eV})}}$



Az interferenciásíkok kirajzolódása a részecskék detektorba történő „becsapódásából”.

### Valószínűségi értelmezés:

- Az interferenciakép kirajzolja a hullámegyenletekből számolt intenzitást, a kép azonban véletlen felvillanásokból áll össze.
- A kísérlet egyetlen elektronnal is működik: mint „hullám” interferál, de „részecskéként” detektálódik (ebben a kísérletben).

**Max Born:** a hullámfüggvény intenzitása a részecske megtalálási valószínűségét adja meg, detektálása véletlenszerű.

A részecskék hullámszerű terjedését a  $\Psi(\mathbf{r}, t)$  hullámfüggvény írja le, a detektorok által mért intenzitást a  $|\Psi|^2$  határozza meg. Annak a valószínűsége, hogy a részecske az  $\mathbf{r}$  pozíció körüli  $d^3\mathbf{r}$  térfogatban legyen:

$$|\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 d^3\mathbf{r} \quad (\text{Born-féle})$$

valószínűségi-sűrűség függvény

## Schrödinger-egyenlet

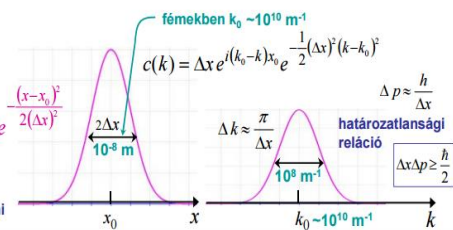
### Mi a kapcsolat az impulzus-, illetve a hely-sajátállapotot leíró függvény és a hullámcsomagként előállított szuperpozíció szélessége között?

#### „Lokalizált” elektron

Szuperpozícióval előállított lokalizált állapot:

$$\psi(x) = \int c(k) e^{ikx} dk = e^{ik_0 x} e^{-\frac{(x-x_0)^2}{2(\Delta x)^2}}$$

Egyszerre nem lehet a helyet és az impulzust is pontosan meghatározni



A hullámcsomag valós térbeli alakjából inverz Fourier-transzformációval megkereshető, hogy a szuperponált állapotban milyen súllyal szerepelnek a különböző hullámszámú komponensek. A Gauss-függvény Fourier transformáltja is Gauss-függvény, a félérték szélességeik egymással fordítottan arányosak. A hullámcsomag valós térbeli szélessége a helymeghatározás bizonytalansága, s mivel kikeveréséhez használt síkhullámok egy szélességű intervallumból származnak, ehhez egy impulzusbizonytalanság tartozik. Minél keskenyebb térbeli tartományba szeretnénk lokalizálni a részecskét, annál bizonytalanabb az impulzusa. Fordítva is igaz: minél pontosabb az impulzus, annál bizonytalanabb a hely meghatározása.

### A Schrödinger-egyenlet alakjából matematikai tulajdonságok következnek a hullámfüggvényre vonatkozóan?

Schrödinger-egyenlet → hullámfüggvények tulajdonságai  $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi + V(\vec{r}) \psi$

$\psi(\vec{r})$  folytonos és folytonosan deriválható – véges potenciál (deriváltja is folytonos, különben  $\Delta \psi(\vec{r})$  divergálna, amit  $V(\vec{r})$  nem tud kompenzálni)

$\psi(\vec{r})$  négyzetesen integrálható, azaz normálható.

#### Max Born

Az anyaghullámok intenzitása:  $|\Psi(\vec{r}, t)|^2$  valószínűség-sűrűség függvény

Annak a valószínűsége, hogy a részecske az  $\vec{r}$  pozíció  $d^3\vec{r}$  tartományában legyen:  $|\Psi(\vec{r}, t)|^2 d^3\vec{r}$

A részecske valahol mindig megtalálható → normalizálás:  $\int |\Psi(\vec{r}, t)|^2 d^3\vec{r} = 1$

#### Kontinuitási egyenlet

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi|^2 = i\hbar \frac{\partial^2}{\partial t^2} (\Psi^* \Psi) = i\hbar \left( \Psi^* \frac{\partial}{\partial t} \Psi + \Psi \frac{\partial}{\partial t} \Psi^* \right)$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m} (\Psi^* \Delta \Psi - \Psi \Delta \Psi^*)$$

a megtalálási valószínűség időbeli változása  $\frac{\partial}{\partial t} |\Psi|^2 = -\nabla \cdot \vec{j}$  anyagmegmaradás egyenlete

$\vec{j} = -\frac{i\hbar}{2m} (\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*)$  valószínűségi áramsűrűség

Laplace  $\nabla^2$   $\nabla$   $\vec{j}$   $\nabla$   $\Psi$

Ha az elektron mozog, akkor a sűrűsége időben változik, az elektron "áramlik". A tér egyes pontjaiban milyen erősséggel és irányban áramlik az elektron, jellemezhető a hullámfüggvény segítségével.

$$\int_V \text{div } \vec{j} d^3\vec{r} = \int_F \vec{j} d^2\vec{r}$$

A differenciális formula integrálása egy zárt térfogatelemre:

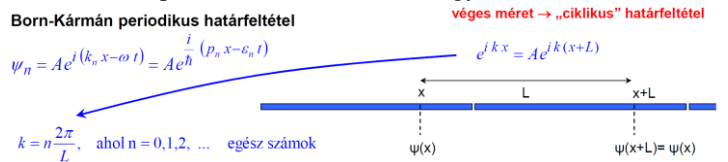
$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V |\Psi(\vec{r})|^2 d^3\vec{r} = -\int_V \nabla \cdot \vec{j} d^3\vec{r} = -\int_F \vec{j} d^2\vec{r}$$

azaz a V térfogatelembe időegység alatt beáramló „sűrűség” éppen a  $\vec{j}$  vektormezőnek a V térfogatot lezáró felületre vett felületi integrálja.

Az áramlási teret jellemző  $\vec{j} = -\frac{i\hbar}{2m} (\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*)$  mennyiség szokásos elnevezése valószínűségi áramsűrűség.

**Ismertesse a Born-Kármán határfeltételt és mutassa meg, hogy milyen következménnyel jár hullámszámok lehetséges értékeire vonatkozóan.**

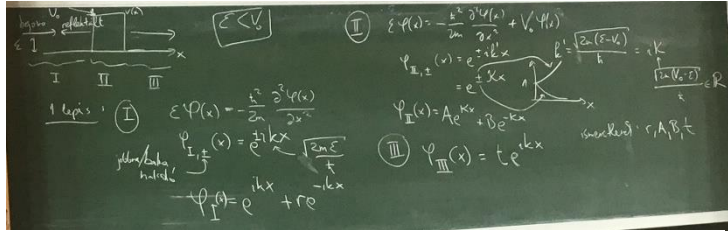
Tekintsünk egy L hosszú dobozba zárt elektront periodikus határfeltételekkel. Az elektron hullámfüggvénye ilyenkor Fourier sorba fejthető, ami megfelel annak, hogy a hullámfüggvényt kifejtjük az impulzus teljes ortonormált sajátfüggvény-rendszerén. Az impulzus várhatóértéke kifejezhető a kifejtési együtthatókkal, azaz ebben a speciális esetben a Fourier-együtthatókkal.



**Hogyan változik az alagútáram a távolság függvényében? Mi ennek a szerepe az pásztázó alagútmikroszkóp működésében?**

Egy 3D mozgatószakra alkalmas piezoelektromos henger segítségével egy hegyes tű előre meghatározott pályán mozog. A minta és a tű közötti alagútáram exponenciálisan változik a távolság függvényében (állandó feszültségű meghajtás). Egy kis különbség is magas áramváltozást okoz. Az XY irányú „pásztázás” közben Z irányú távolságot az alagútáramra történő visszacsatolás határozza meg: a konstans alagútáram állandó távolságot jelent (a 0.1-5nm tartományban). A Z-irányú visszacsatoló piezofeszültség XY függése a minta felületi topográfiáját adja meg atomi felbontással.

**Egy d szélességű, V\_0 magasságú potenciálgát felett egy energiájú részecske halad át. Írja fel a Schrödinger-egyenlet megoldásait a különböző tartományokban, továbbá azt a négy határfeltételi egyenletet, aminek a megoldása megadja a transzmisszió mértékét!**



**Példa: alagúteffektus potenciálgátán**

Schrödinger egyenlet a szabad részben:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \varphi(x) = E \varphi(x)$$

A potenciálgát belsejében a Schrödinger egyenlet:

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \varphi(x) = (E - V_0) \varphi(x)$$

Határfeltételek folytonosság

$$1 + r = A + B$$

folytonos deriválhatóság

$$ik(1-r) = \kappa(-A+B)$$

komplex amplitúdók

$$ikte^{ikd} = \kappa(-Ae^{-\kappa d} + Be^{\kappa d})$$

Schrödinger egyenlet a szabad részben:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \varphi(x) = E \varphi(x)$$

Megoldás: lecsengő hullám (mindkét irányban)

$$Ae^{-\kappa x} + Be^{\kappa x} \quad \text{ahol} \quad \kappa = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(V_0 - E)}$$

A transzmittált hullám amplitúdójából számolt átjutási valószínűség:

$$|T|^2 = \left( 1 + \frac{V_0^2}{4E(V_0 - E)} \sin^2(\kappa d) \right)^{-1}$$

$\kappa d \gg 1$  határeset:

$$|T|^2 = \frac{16E(V_0 - E)}{V_0^2} e^{-2\kappa d}$$

exponenciális lecsengés

**Operátorok alkalmazása**

**Írja fel a harmonikus oszcillátor Hamilton-operátorát, és adja meg a gerjesztési spektrumát!**

Harmonikus oszcillátor - az energia-spektrum számolása a felcserélési relációk segítségével

Hamilton-operátor:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2} k \hat{x}^2 = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} \hat{x}^2, \quad \text{ahol} \quad \omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$$

keltő- és eltüntető operátorok

$$\hat{H} = \hbar\omega \left( \hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2} \right) = \hbar\omega \left( \hat{N} + \frac{1}{2} \right), \quad \text{ahol} \quad \hat{a}^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left( \hat{x} - \frac{i}{m\omega} \hat{p} \right)$$

$$\hat{a} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left( \hat{x} + \frac{i}{m\omega} \hat{p} \right) \quad \text{és} \quad \hat{N} = \hat{a}^\dagger \hat{a}$$

kvantumszám operátor

A  $[\hat{p}, \hat{x}] = \frac{\hbar}{i}$  felcserélési relációból következik, hogy  $[\hat{a}^\dagger, \hat{a}] = 1$ , melynek segítségével meghatározhatók a kvantumszám operátor sajátértékei:

az  $\hat{N} \varphi_n = n \varphi_n$  sajátérték egyenlet megoldásai az  $n$  pozitív egész számok.

A harmonikus oszcillátor gerjesztési spektruma:

$$\hat{H} \varphi_n = \varepsilon_n \varphi_n, \quad \varepsilon_n = \hbar\omega \left( n + \frac{1}{2} \right)$$

**Adja meg egy  $\hat{A}$  operátorral leírt fizikai mennyiség várható értékét a  $\Psi(r)$  hullámfüggvénnyel leírt kvantumállapotban a hullámfüggvényt tartalmazó integrál segítségével!**

$$\hat{A} \varphi_n = a_n \varphi_n$$

$$\psi(x) = \sum_n c_n \varphi_n(x) \quad c_n = \int \varphi_n^*(x) \psi(x) dx$$

az  $a_n$  sajátérték detektálási valószínűsége

$$|c_n|^2 = \left| \int \varphi_n^*(x) \psi(x) dx \right|^2$$

az  $\hat{A}$  operátorral leírt fizikai mennyiség átlagértéke a  $\psi$  hullámfüggvénnyel leírt állapotban

$$\langle \hat{A} \rangle_\psi = \sum_n |c_n|^2 a_n = \int \psi^*(x) \hat{A} \psi(x) dx$$

**Milyen kapcsolatokat állapít meg az Ehrenfest-tétel a kvantummechanikai és a klasszikus fizikai mozgás-egyenletek között?**

- időinvariancia → energia megmaradás
- forgási szimmetria → impulzusmomentum megmaradás
- eltolási szimmetria → impulzus megmaradás

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{p} \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle [\hat{V}(x), \hat{p}] \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle \left( V(x) \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} - \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} V(x) \right) \rangle = \langle -\frac{\partial V(x)}{\partial x} \rangle = \langle F \rangle$$

impulzus kvantummechanikai átlagának időderiváltja = erő kvantummechanikai átlagával

Hasonló levezetés a hely várható-értékének változására:

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{x} \rangle = \frac{1}{\hbar} \langle [\hat{p}^2, \hat{x}] \rangle = \frac{1}{2m} \langle \left( \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial}{\partial x} \hat{x} - \hat{x} \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial}{\partial x} \right) \rangle = \frac{1}{m} \langle \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \rangle = \left\langle \frac{\hat{p}}{m} \right\rangle$$

impulzus kvantummechanikai átlaga = tömeg • a hely várható értékének deriváltja

Az algebrai egyenletrendszer megoldása részletesen: „haladó” kvantummechanika kivonat a honlapon

# Írja fel az impulzumomentum z-komponensét leíró operátor alakját polárkoordináták segítségével, és oldja meg a sajátérték egyenletét!

Az impulzumomentum-operátor z-komponense koordináta-rendszer-transzformáció (hengerkoordináta rendszer)

$$\hat{L}_z = (\hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}})_z = \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x = \frac{\hbar}{i} \left( x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi}$$

$$x = r \cos \varphi$$

$$y = r \sin \varphi$$

$$\frac{\partial}{\partial \varphi} f(x, y) = \frac{\partial f}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial \varphi} + \frac{\partial f}{\partial y} \frac{\partial y}{\partial \varphi} = -r \sin \varphi \frac{\partial f}{\partial x} + r \cos \varphi \frac{\partial f}{\partial y} = \left( -y \frac{\partial}{\partial x} + x \frac{\partial}{\partial y} \right) f(x, y)$$

Impulzumomentum sajátérték egyenlete:

$$\hat{L}_z \psi = \lambda_z \psi$$

egész szám  
 egyértékű függvény:  $\psi(\varphi) = \psi(\varphi + m \cdot 2\pi)$   
 $2\pi$  szerint periódikus kitevő

Ezt illik tudni!

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi} \psi(\varphi) = \lambda_z \psi(\varphi) \xrightarrow{\text{megoldás}} \psi(\varphi) = A e^{i \lambda_z \varphi / \hbar} \rightarrow \frac{\lambda_z}{\hbar} = m \rightarrow \lambda_z = m \hbar$$

Bohr-feltétel!

## Kristályok szerkezete, dinamikája

Mutassa meg, hogy lapcentrálalt köbös rácshoz tartozó reciprok-rács tércentrálalt köbös szerkezetű!

$$\underline{\mathbf{A}} = \frac{d}{2} \begin{pmatrix} -1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 \end{pmatrix}$$

tércentrálalt köbös rács

$$\underline{\mathbf{B}} = \frac{2\pi}{d} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

lapcentrálalt köbös rács

Vezesse le, hogyan képi le a rugalmas szórás kísérlet a rácsot reciprok-rácsra ( $\Delta \mathbf{k} = \mathbf{G}$ )!

<p>Rács: a bázisvektorok által definiált szerkezet</p> $\underline{\mathbf{A}} = (\mathbf{a}_1 \ \mathbf{a}_2 \ \mathbf{a}_3) = \begin{pmatrix} a_{1x} & a_{2x} & a_{3x} \\ a_{1y} & a_{2y} & a_{3y} \\ a_{1z} & a_{2z} & a_{3z} \end{pmatrix}$ <p>Rácsvektorok:</p> $\mathbf{R}_n = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 + n_3 \mathbf{a}_3 = \sum_{j=1}^3 n_j \mathbf{a}_j = \underline{\mathbf{A}} \mathbf{n}$	<p>Reciprok rács: az <math>\underline{\mathbf{A}}</math> inverze által definiált rács</p> $\underline{\mathbf{B}} = 2\pi \underline{\mathbf{A}}^{-1} = \begin{pmatrix} \mathbf{b}_1 \\ \mathbf{b}_2 \\ \mathbf{b}_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_{1x} & b_{1y} & b_{1z} \\ b_{2x} & b_{2y} & b_{2z} \\ b_{3x} & b_{3y} & b_{3z} \end{pmatrix}$ <p>A reciprok rács rácsvektorai:</p> $\mathbf{G}_h = h_1 \mathbf{b}_1 + h_2 \mathbf{b}_2 + h_3 \mathbf{b}_3 = \sum_{j=1}^3 h_j \mathbf{b}_j = \underline{\mathbf{h}} \underline{\mathbf{B}}$
--	--

<p>Rugalmas szórás kristályon</p> <p>polikristály</p> $2d \sin \vartheta = m \lambda$	<p>Interferencia térben periódikus kristálysíkokon</p> <p>Bragg feltétel</p> $2d \sin \vartheta = m \lambda$ $\sin \vartheta = \frac{\lambda}{2d}$
---	--

$$\Delta \mathbf{k} = \mathbf{k}' - \mathbf{k}$$

$$|\Delta \mathbf{k}| = 2|\mathbf{k}| \sin \vartheta \quad \lambda = \frac{2\pi}{|\mathbf{k}|}$$

merőleges a kristálysíkra

$$|\Delta \mathbf{k}| = 2 \frac{2\pi}{\lambda} \frac{\lambda}{2d} = \frac{2\pi}{d}$$

$$\Delta \mathbf{k} = \frac{2\pi}{d} \hat{\mathbf{n}} = \underline{\mathbf{G}} \text{ reciprok rácsvektor}$$

A kristálysíkok távolságának és normálisának ismeretében a szerkezet könnyen rekonstruálható: a rács előáll a reciprok rács inverz transzformációjával

# Egy magyarázó ábra segítségével ismertesse a konstruktív interferencia teljesülésére vonatkozó Ewald-szerkesztési eljárást!

Szórás kísérletek

Elmélet: a szórt nyaláb intenzitása

$$I(\Delta \mathbf{k}) = N^2 \sum_{\mathbf{G}} |S(\Delta \mathbf{k})|^2 \delta_{\Delta \mathbf{k}, \mathbf{G}}$$

$$S(\mathbf{G}) = \sum_{\alpha} e^{i \mathbf{G} \cdot \mathbf{r}_{\alpha}} f_{\alpha}(\mathbf{G})$$

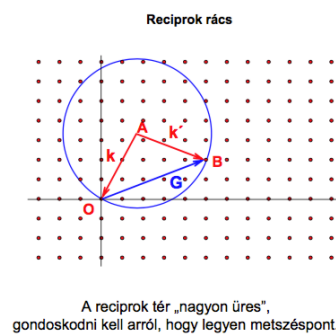
Ewald-szerkesztés

A konstruktív interferencia feltétele:  $\Delta \mathbf{k}' = \mathbf{k}' - \mathbf{k} = \mathbf{G}$

Vegyük fel a beeső nyaláb  $\mathbf{k}$  hullámszám-vektorát úgy, hogy a reciprok rács egy tetszőleges rácspontjába mutasson (O).

A  $\mathbf{k}$  vektor kezdőpontja körül egy  $|\mathbf{k}| = 2\pi/\lambda$  kört (gömböt) rajzolunk.

Akkor történik szórás, ha ez a kör (gömb) keresztül megy a reciprok rács egy másik pontján (pl.  $\mathbf{B}$ -n), amit az origóval a  $\mathbf{G}$  vektor köt össze.



Ismertesse a Neumann-elvet! Milyen megszorítást jelent egy  $\underline{\mathbf{C}}$  mátrix-szal leírt szimmetriaművelet a fizikai mennyiségeket leíró  $\underline{\boldsymbol{\sigma}}$  tenzorra!

Neumann-elv

Ha egy rendszer rendelkezik valamilyen szimmetriával, akkor a vektorkapcsolatokat leíró tenzorok is rendelkeznek ezzel.

Legyen  $\underline{\mathbf{j}} = \underline{\boldsymbol{\sigma}} \underline{\mathbf{E}}$ . Forgatás hatására  $\underline{\mathbf{j}} \rightarrow \underline{\mathbf{C}} \underline{\mathbf{j}}$  és  $\underline{\mathbf{E}} \rightarrow \underline{\mathbf{C}} \underline{\mathbf{E}}$ .

Az elfordított kristály önmagába megy át, azaz továbbra is igaz, hogy  $\underline{\mathbf{C}} \underline{\mathbf{j}} = \underline{\boldsymbol{\sigma}} \underline{\mathbf{C}} \underline{\mathbf{E}}$ .

$$\underline{\boldsymbol{\sigma}} = \underline{\mathbf{C}}^{-1} \underline{\boldsymbol{\sigma}} \underline{\mathbf{C}}$$

$$\underline{\mathbf{j}} = \underline{\mathbf{C}}^{-1} \underline{\boldsymbol{\sigma}} \underline{\mathbf{C}} \underline{\mathbf{E}}$$