++

©OROSZ L: ” Kvantummechanika és szilárdtestfizika
Előadás vázlat és munkafüzet szöveges kiegészítése ”
MSC villamosmérnök hallgatók számára
Frissítve:2010

++

B E K Ö S Z Ö N T Ő

Tisztelt Kollegák !

Üdvözölöm Önöket abból az alkalomból, hogy az eddigi sikeres tanulmányi eredményeik következtében elkezdhetik a **FizikaC3. tantárgy** tanulását.

Bevezetőként néhány gondolatot szeretnék közölni Önökkel, melyek remélhetőleg könnyítenek a kezdeti nehézségeken azáltal, hogy segítenek lerombolni bizonyos előítéleteket. Nem titkolt célom az, hogy felhívjam az Önök figyelmét a tantárgy jellegéből fakadó kétségtelenül meglévő **nehézségekre**, amelyek ugyanakkor a "kihívás" izgalmát jelentik és így egyúttal a tantárgy "szépségét" is adják. Mindezen információk segítenek elhelyezni ezt a tantárgyat egyrészt a mérnökké válás, másrészt az általános, modern természettudományos műveltségünk kialakításának a folyamatában. Ez az út kétségtelenül sok munkával, szellemi fáradozással jár. A **sikeres végeredmény** azonban mindenért kárpótolja majd Önöket.

Az érzékszerveink által érzékelt és az agyunkban leképzett klasszikus fizikai világ fogalmai a megszokott, változatlan formában használhatatlanok az atomi skálán lezajló fizikai folyamatok megértésében.

Ezért a Fizikában egy valódi szellemi "forradalom" zajlott le a XX. század első harmadában. A "paradigma váltás" ténylegesen megtörtént. Mindez reflektálódik a klasszikus fizikai szemléletünkben is. Ezért ma már a természettudós teljesen másképpen látja a világot, mint a száz évvel ezelőtt élt kollegája. Széttekintve a mindennapokban tapasztalhatjuk azt, hogy egy átlagos középfokú műveltséggel rendelkező ember fizikai szemlélete jó esetben is a XIX. század közepének megfelelő szinten van. Az a hatalmas technikai fejlődés, amely az elmúlt másfél száz évben végbement (a gőzgépektől a számítógép vezérelt űrhajókig és atomreaktorokig, a postakocsitól a mobiltelefonig) egyértelműen a kvantummechanika megszületésének a következtében volt lehetséges. Elmondhatjuk tehát, hogy a **kvantummechanika** mint kezdetben "tiszta elméleti tudomány" olyan gyakorlati eredmények sokaságát produkálta, amelyek a technikai fejlődést alapvetően befolyásolták. Mindez átformálta mindennapjainkat is és így a "Kvantummechanika" a XX. századi civilizációnk és így egyéni **életünk szerves részévé** vált akár tudatában vagyunk ennek, akár nem. A XXI. században dolgozó és alkotó mérnöknek valamilyen szinten igenis ismernie kell ezt, a klasszikus szemléletünk számára idegen és furcsa, sokszor igen meghökkentő elméletet. A FizikaC3 tantárgynak éppen ez a feladata.

Ezt teljesíteni egyáltalán nem könnyű és mindezzel tisztában vannak a tantárgy előadói is. A kitűzött úton azonban Önöknek is végig kell menni ! Ez **kemény szellemi munkát** jelent, de ugyanakkor **intellektuális örömöt** is nyújt. Remélhetőleg átélik majd Önök is a Természetre való "rácsodálkozás" felemelő érzését. Megérzik a kvantummechanikában rejlő lenyűgöző szellemi teljesítményt amely képes arra, hogy az Univerzum végtelennek tűnő bonyolultságában valamiféle rendet és szerkezetet fedezzen fel. Mindez természetesen csak gondolkodásunknak egy **magasabb absztrakciós szintjén** lehetséges. Tehát a használt fogalmakat Önöknek pontosan meg kell ismerniük. Azokat be kell építeniük a gondolkodásukba és ezáltal egy modern természettudományos szemléletet kell, hogy kialakítsanak önmagukban. Ezt **mindenkinek önmagának kell elvégeznie.**

Ehhez mi megadunk **minden segítséget**: előadást, írásos anyagokat, ajánlott irodalmat, szóbeli konzultációt. De a munka java része Önökre hárul! Az előadáson hallottakon eltöprengeni, az olvasottakon rágódni, a minimálisan szükséges információkat memorizálni csak Önök tudják**. Ezt Önök helyett senki sem végezheti el!** De a végeredményt: a Siker és a Tudás örömét sem veheti el senki!

Másképpen látni a dolgokat mint azok a felszínen látszanak, bepillantani a hétköznapi szemléletünk függönye mögé az ember egyik alapvető pszichikai igénye. Ez az Ősi Szellemi Kíváncsiság az amely civilizációnk egyik hajtó motorja volt évezredeken át. Sajnos ezt lovagolják meg az áltudományok hangos profétái is. Ugyancsak erre alapoznak azok a “szellemi” szélhámosok is, akik a létünk értelmét feszegető gyötrő kérdéseinkre, megnyugtatóan egyszerű válaszokat ígérnek. Cserében a vágyott “lelki nyugalmunkért” csupán csak “válaszkeresés örök szellemi nyugtalanságát” rabolják el tőlünk. “Mert a létben legnagyobb csalás az Ember, aki él és megkérdezheti: Miért?” (Váci Mihály)

Nos első pillanatra a kvantummechanika kijelentései (is) eléggé misztikusnak tűnnek. De a kvantummechanika megérthető, ellenőrizhető, alkalmazható és objektivitása a mai mérnöki gyakorlatban az elektronikus alkatrészek előállítása során minden nap tapasztalható.

Talán bízni lehet abban, hogy mindez igen vonzóvá teszi ezt a tantárgyat az Önök számára is!

A tantárgy főleg **szemléletében** nyújt merőben **újat**. A használt matematikai apparátus lényegében megmarad az Önök által már megismert klasszikus analízis és lineáris algebra keretei között. A nehézség inkább abban van, hogy a klasszikus fizikai szemlélet számára szokatlan kijelentéseinket az egzakt matematika nyelvén kell megfogalmazni. Ez megkívánja a matematikai jelrendszer rutinos ismeretét és annak "könnyed" használatát. Ennek a készségnek a kialakításához pedig állandó gyakorlás és nem kevés idő kell. Erre nem elég a vizsgára való felkészülés néhány napja!

Ezért nagyon ajánlatos az előadások rendszeres látogatása.

Az egyszeri vizsgaalkalommal nyújtott pillanatnyi teljesítmény sokszor nem tükrözi a tananyagban való jártasság megbízhatóságát és a megszerzett tudás elmélyültségét. Erre csak a tananyaggal való rendszeres foglalkozás alapján lehet valamelyest következtetni. Még ha ez foglalkozás csak az előadások idejére korlátozódik is. Ezért azok a hallgatók, akik az előadásokat rendszeresen látogatják előnyben vannak az előadásokon részt nem vevő kollegáikkal szemben. Ezek a hallgatók a tananyagot könnyebb értik meg és a megszerzett tudásuk is mélyebben beépül a gondolkodásukba. Ezt természetesen csak az elkövetkező évek igazolhatják, ugyanakkor a tudás szintjét a vizsga idején kell megmérnünk. Az elmondottak alapján kézenfekvő az, hogy az előadásokon rendszeresen és vélhetően aktívan részt vevő hallgatók formális előnyhöz is jussanak. Ezért minden előadáson kiosztásra kerül egy nyomtatott névsor, amelyet az előadáson megjelent hallgatók aláírnak. Hangsúlyozni kell, hogy itt valóban ALÁÍRÁSRÓL van szó. Tehát az okiratokon is használt egyéni kézjegyről, amelynek más által történt használata, enyhén fogalmazva, nem illendő (bizonyos esetekben pedig HAMISÍTÁSnak tekinthető, annak minden erkölcsi és jogi következményével!)

A jelenlegi Kari szabályoknak megfelelően a tantárgyat több független előadó fogja tanítani. A tantárgy jellegéből fakad, hogy az előzőekben vázolt, kitűzött cél elérésére nem csak egyetlen mód van. Ugyanahhoz az eredményhez sokféle gondolatmenettel és tantárgyi felépítéssel is el lehet jutni. A téma univerzalitása és természetfilozófiai sokszínűsége miatt az előadások nem nélkülözhetik az előadó egyéni szemléletét, érdeklődését és intellektuális kötődéseit. Az előadó "egyéni szellemi szabadsága" azonban a törzsanyagot nem érinti. A különböző kurzusok a további szakmai előrehaladás szempontjából ekvivalensek egymással. Szeretnénk azt is elérni, hogy a hallgató félévvégi érdemjegye lehetőleg ne függjön attól, hogy az illető melyik kurzus előadásait hallgatta. Azaz azonos relatív teljesítmény azonos osztályzatot jelentsen. Ezért az előadók ügyelni fognak arra, hogy a ZH-osztályzatok átlaga a kurzusokban közel egyenlők legyenek.

Az oktatás minőségének a megfelelő szinten tartása érdekében az egyes kurzusok hallgatói létszámát korlátoznunk kell. Természetesen egyedi, **különleges esetekben** az érdekelt előadók közösen engedélyt adhatnak az átjelentkezésre. Ekkor, ha az indokoltnak látszik, a hallgató egy közös beszélgetésre behívható, ahol a hallgató elmondhatja az átjelentkezésére vonatkozó indokait.

Reméljük, hogy örömüket lelik majd a tárgy tanulásában és megsejtik a Világ egységének és harmóniájának filozófiai mélységeit. Mindezek mellett olyan praktikus ismeretek birtokába is jutnak, amelyek elkísérik Önöket mérnöki pályafutásuk során és megmentik Önöket hamis elméleteken alapuló hamis nézetek zsákutcáitól.

Ehhez kívánok erőt, kitartást és szellemi örömöt !

OROSZ LÁSZLÓ előadásához készült egy
"Előadás vázlat és munkafüzet"
is.

Ennek az a célja, hogy az előadást látogató hallgatót **megkímélje** a megértéshez szükséges hosszadalmas matematikai levezetések gépies másolásától. Reményeink szerint így az előadáson jobban lehet majd koncentrálni a fizikai gondolatok és modellek **megértésére.** Az otthoni felkészülést segíti az, hogy a hallgató hozzáférhet a magyarázó szöveg rövidített, de a lényeget tartalmazó írásos változatához is. Ez a **számítógép hálózaton keresztül** történik.

Végül felhívjuk a Tisztelt Olvasó figyelmét a következőkre :

A file–okban található szöveg, mint szellemi termék, ugyanazon szerzői jogvédelem alá esik, mint bármely más jegyzet, vagy tankönyv. Ez azt jelenti, hogy a file–ok tartalma csak egyénileg használható fel. Annak (vagy bármely részletének) a sokszorosítása, terjesztése csak a szerző engedélyével lehetséges.

BEVEZETŐ MESE ÉS BÖLCSELKEDÉS A VILÁGRÓL ÉS A RÓLA VALÓ ISMERETEINKRŐL

" One of the principal objects of theoretical research in any point of knowledge is to find the point of view from which the subject appears in its greatest simplicity "
J.W.GIBBS

Egyszer, nagyon régen, egy fiatal, igen ambiciózus császár került a távoli Napkeleti Birodalom trónjára. Az ifjú császár udvarába rendelte tudósait és megparancsolta nekik, hogy gyűjtsék össze azokat a könyveket egy könyvtárba, amelyekben a Világ összes tudása megtalálható.
A tudósok 20 éven át dolgoztak szorgalmasan, amíg kialakították a "Minden Tudás Könyvtárát".

A Császár megszemlélte azt és rájött arra, hogy bokros uralkodói teendői miatt nem igen lesz elegendő ideje arra, hogy azt a rengeteg sok könyvet áttanulmányozza. Ezért arra utasította tudósait, hogy próbálják meg a lényeget egyetlen könyvbe összefoglalni. A tudósok újabb 20 éven át keményen dolgoztak, mire megszületett a kívánt egykötetes mű. A Császár azonban addigra már jócskán megöregedett és belátta, hogy bizony néki már nem lesz ereje még ennek az egy könyvnek az elolvasására sem. Kiadta tehát az utasítást, foglalják össze egyetlen mondatba a könyv lényegét. Újabb 20 évi kemény munka következett, de végül is megszületett "A MONDAT", amely a világról szóló ismereteket foglalta össze.

A Császár ekkor már nagyon öreg volt és ágyában fekve, türelmesen várta a halált.
A Főtudós elébe állt és kimondta a kért mondatot:

- A VILÁG BONYOLULT!

A Császár mélyet sóhajtott és minden erejét összeszedve halkan csak ennyit motyogott:

- És egy kissé bővebben?

A Főtudós elgondolkozott, majd pár perc múlva megszólalt:

- A Világ NAGYON bonyolult!

A Főtudósnak úgy rémlett, mintha a Császár halovány arcán a belenyugvó kiábrándultság fáradt mosolya suhant volna át. De lehet az is, hogy mindez csak a trónterembe beszűrődő fény játéka volt.

Még kívánt volna valami megnyugtatót mondani, szeretett uralkodójának, de mire megtalálta a megfelelő szavakat és mire azt kimondhatta volna, a nagy Császár szép csöndesen átlépett az örökkévalóság időtlenségébe.

Eddig szól a mese.
De vajon milyen bíztató szavakat mondhatott volna egyáltalán a buzgó Főtudósunk?

Talán arra gondolt, hogy a Világ valóban mérhetetlenül bonyolult ugyan, de úgy tűnik, hogy fokozatosan megismerhető! Bár valójában sosem fogjuk megismerni, hiszen az Emberiség léte múló epizód csupán a Földtörténet évmilliárdos időskáláján.

A mesebeli Főtudósunk természetesen nem ismerhette Albert Einsteint. De bizonyára egyetértett volna a XX. század egyik legzseniálisabb természettudósával aki azt mondta egyik híressé vált aforizmájában, hogy:

"A Világban az a legérthetetlenebb, hogy megérthető."

Mindezekből a tanulság talán csak annyi, hogy:

a.) A Világ kiábrándítóan és véghetetlenül bonyolult ugyan, de a "megismerésének a célja" valódi emberi cél és a "megértés öröme" valódi öröm.
b.) **Óvakodjunk azoktól, akik egyszerű magyarázatokat ígérnek!** Mert lehet ugyan, hogy saját kicsinységünk felismerésétől menekülve szívesen elfogadjuk ezeket, de az

önbecsapásunk, e nemesnek gondolt Hazugság (bármilyen szép is legyen az) előbb vagy utóbb a fejünkre omlik majd.

A Természet nem kegyelmez!

Rossz döntéseinkért a felelősség csak minket terhelhet!

E L Ő S Z Ó

" A tudomány története maga a tudomány " szoktuk mondani és ez különösen érvényes akkor, amikor egy eddig még ismeretlen , számunkra új területtel ismerkedünk meg. Nincsen ez másképpen a ma már több mint 100 éves kvantummechanikával sem. Az elmúlt 100 év hosszú idő a mindennapi életünket alapjaiban meghatározó technikai fejlődés skáláján . Gondoljunk csak arra, hogy a XIX század végén mennyire más volt az élet a mi kultúrkörünkbe tartozó Európában és Amerikában. A XX-ik század döntő változást hozott a fizika tudományában. A Világról alkotott képünk alapjaiban változott meg. Ezért a XIX.-XX. századforduló előtti fizikát "klasszikus fizikának", az azt követő időszakét pedig "modern fizikának" szoktok nevezni. A relativitáselmélet és a kvantummechanika az a két jellegzetes tudományterület, ahol szakítani kellett évszázadokon át jól bevált gondolati sémákkal és természetesnek tűnő szemléletekkel.

A fizikatörténet tele van csattanós anekdotákkal és a tudományt "csináló" zseniális elmék szellemes mondásaival. Mindezek nemcsak színesebbé és játékosabbá teszik a tudományt de mély bölcsességgel a dolgok lényegét üzenik meg számunkra. Valószínűleg ezért is maradtak fenn.

A XX-ik századi fizikát találóan jellemzi az alábbi kis történet :

Az Einstein által kidolgozott relativitáselmélet megszületésekor nagy vihart kavart. Állandó beszéd és vitatéma volt nemcsak a fizikusok, de a laikusok népes táborában is. Minden, magára valamit is adó gondolkodó elme erről beszélt. Érvelt mellette vagy ellene, hitt benne vagy nem, nevetett a képtelenségein vagy komolyan vette. A jellemző az volt, hogy sokan beszéltek róla, de valójában szinte senki sem értette meg. Ekkor mondotta Einstein, hogy talán ha hárman értik az új elmélet lényegét.

Sir Arthur Eddington a századforduló nagy tudósegyénisége, neves csillagász volt. Ő vezette 1919-ben azt az afrikai csillagászati expedíciót, amely teljes napfogyatkozáskor mérésekkel bizonyította, hogy a Nap gravitációs tere valóban eltéríti a fénysugarakat. Egy munkatársa beszámolt Eddingtonnak Einstein megjegyzéséről , majd hozzáfűzte :

- Ön minden bizonnyal a három ember egyike!

Látván azonban Eddington arcán a megütközést és a kételyt, így folytatta:

-Professzor úr, azt hiszem ön túlságosan is szerény. Einstein mellett ön érti az általános relativitáselméletet.

Erre Eddington megszólalt .

- Azt én is tudom. Csak azon gondolkodom, hogy ki lehet a harmadik?

Ez az anekdota akkor válik még érdekesebbé, ha elolvassuk századunk egyik zseniális "fizikacsinálójának" , a kvantumelektrodinamika egyik kidolgozójának, Richard Feynmannak a gondolatait

RICHARD P. FEYNMAN (1918-1988)

Amerikai fizikus. A XX. század egyik legzseniálisabb tudósa volt. Színes egyéniségéről sok legenda kering. Híresek voltak a California Institute of Technology-n tartott fizika előadásai. Részt vett az atombomba létrehozásában. A kvantumelektrodinamika egyik kidolgozója, munkásságáért 1965-ben megkapta a fizikai Nobel-díjat

Nézzük tehát, mit is gondol Feynman a kvantummechanikáról:

" *Egy időben az újságok azt írták, hogy a világon csak tizenkét ember érti a relativitás-elméletét. Nem hiszem, hogy valaha is lett volna ilyen időszak. Elképzelhető egy olyan időpont, amikor csak egyetlen ember értette, mert ő volt az aki kitalálta, de még nem írta le. Amint azonban az emberek elolvasták a közleményét, ilyen vagy olyan módon sokan megértették.*

Bizonyosan többen mint tizenketten. Ugyanakkor viszont azt hiszem, nyugodtan elmondhatom: A KVANTUMMECHANIKÁT SENKI SEM ÉRTI."

Elgondolkoztató vélemény és őszintén meg kell mondanunk, hogy valószínűleg igaz is! Annak ellenére azonban, hogy valójában "nem értjük" , meglepő leleménnyel és sikerrel alkalmazzuk, nemcsak az elektronikus eszközökben, de az Univerzum születése titkának a megfejtésében is. Elképzelhető, hogy a "megérteni" (!) fogalmunkat kellene átértelmeznünk ?

Jogosan merül fel a kérdés a Tisztelt Hallgatóban : "Hát ha az sem érti ezt az egészet, aki csinálta, akkor milyen jogon várható az el egy villamosmérnök hallgatótól, hogy valamit is megértsen belőle, sőt még le is vizsgázzon ?" A dolog természetesen nem ilyen egyszerű!

A kvantummechanikát "nem érteni" többféleképpen lehet. Mi ezen tantárgy keretei között nem tudunk olyan mélységig eljutni , hogy bátran elmondhassuk: "*mi már nem értjük a kvantummechanikát*." A mi szintünkön még minden "érthető" kell, hogy legyen! Ami azt jelenti, hogy az alaptörvények megtanulhatók, a belőle levonható következtetések megtehetők és sikeresen alkalmazhatók konkrét "egyszerű" problémák megoldásában és (például a villamosmérnöki gyakorlatban előforduló) alapvető elektronikus effektusok megmagyarázásában. Kialakítható az a gondolkodásmód (paradigma) amely segítségével mindez "könnyedén" és "szemléletesen " végrehajtható. Számunkra ez jelenti a "megértést". Mindez megtanulható és számonkérhető. Ennek a tantárgynak ez a feladata! Mivel ez a szemlélet gyökeresen eltér a klasszikus fizikában megszokottól, ezért a feledat nem is olyan könnyű.

A megszerzett tudásunk arra is elég, hogy az érdeklődő hallgató továbblépjen és próbálja megérteni azt, hogy Feynman mit gondolt akkor, amikor a meghökkentő kijelentését tette. Ez azonban már nagyon messze vezet és nem nélkülöz alapvető kognitív-pszichológiai és filozófiai meggondolásokat sem. De Önök előtt az Élet ! A fiatalság itt nagy előny!

Mindez azt jelenti, hogy az elvárható "kvantummechanikai szemlélet" kialakítása nem megy egyik napról a másikra . Ez mindenkitől kemény szellemi erőfeszítést, kitartást és időt követel. Ne féljünk szembesülni jelenlegi szemléleti korlátainkkal és lerombolni azt bármilyen csábító is a vélt szellemi biztonsága!

Végül rátérve prózaibb dolgokra ki kell mondanunk, hogy sem a kézbevett előadás vázlat, sem a hozzájuk fűzött szöveges kiegészítés nem pótolja a rendszeres előadás látogatást és a hallottakon való állandó töprengést.

Bárhogyan is alakuljon a mérnöki szakma egy biztos, a XXI-ik század mérnöke nem nélkülözheti a modern természettudományos gondolkodást, aminek szerves része a kvantummechanika.

OROSZ LÁSZLÓ
BME
FIZIKA INTÉZET
FIZIKA TANSZÉK

A F I Z I K A C3 T A N A N Y A G A

BEVEZETŐ Klasszikus fizikai kiegészítő

1. KVANTUMMECHANIKA

Bevezető (Történeti áttekintés)

1.1. Hullámmechanika

1.1.1 A Schrödinger egyenlet és a hullámfüggvény
1.1.2. A hullámfüggvény matematikai tulajdonságai
1.1.3. Egyszerű példák kötött állapotokra
1.1.3.1. Az egydimenziós potenciálvölgy.
1.1.3.2. A potenciáldoboz
1.1.3.3. A harmonikus lineáris oszcillátor
1.1.4. Nem kötött állapotok tárgyalása
1.1.4.1. A valószínűségi áramsűrűség
1.1.4.2. Áthaladás potenciálgáton (közelítő számítás
1.1.4.3. Áthaladás potenciálgáton, potenciálvölgyön

1.2. A kvantummechanika axiomatikus felépítése

1.2.1. A kvantummechanika matematikai eszközei
1.2.2. Az operátorok felcserélési törvényei
1.2.3. A kvantummechanikai méréselmélet alapjai
1.2.4. A koordináta és az impulzus kvantummechanikai tárgyalása
1.2.5. A határozatlansági reláció
1.2.6. A klasszikus mechanika és a kvantummechanika kapcsolata
1.2.6.1. Az Ehrenfest tétel
1.2.6.2. A klasszikus mechanika mozgásegyenlete
1.2.6.3. Az energia és az idő közötti határozatlansági reláció

1.3. A perdület és a mágneses momentum

1.3.1. A pályaperdület
1.3.2. A (zárt) pályamozgás mágneses momentuma
1.3.3. Mozgás centrális erőtérben
1.3.3.1. A pályaperdület meghatározása
1.3.3.2. A sugárirányú (radiális) mozgás leírása
1.3.3.3. A hidrogénszerű ion
1.3.3.4. Az atomok elektronszerkezete
1.3.3.5. Az Állapotfüggvények (atompályák) grafikus ábrázolása

1.4. Atomok mágneses térben

1.4.1. A mágneses tér harása a pályamozgásból származó mágneses momentumra
1.4.2. Az elektron saját mágneses momentuma és az elektronspin
1.4.3. A spin-pálya kölcsönhatás

1.5. Sok (azonos) részecskéből álló rendszer vizsgálata

1.5.1. Az energia operátora és az állapotfüggvény
1.5.2. A Hartree közelítés és az SCF módszer
1.5.3. A Pauli elv
1.5.4. Kvantumstatisztikák
1.5.5. Bozonokból álló rendszer
1.5.5.1. Fotongáz
1.5.5.2. Fonongáz

1.6. A kovalens kémiai kötés

1.6.1. A molekulapályák
1.6.1.1. Egydimenziós modell
1.6.1.2. A hidrogén molekula ion

1.6.2. A molekulapályák felépítése atompályákból
1.6.3. A hidrogénmolekula

2. SZILÁRDTESTFIZIKA

2.1. A fémek szabadelektron elmélete
2.1.1. A Sommerfeld fémmodell
2.1.2. A szabadelektron modell alkalmazásai
2.1.2.1. A szabad elektrongáz fajhője
2.1.2.2. A kontakt potenciál

2.2. Szilárd testek energiasáv elmélete
2.2.1. A periodikus potenciálú tér egydimenziós modellje
2.2.2. Az energiasávok és az atomi energiaszintek kapcsolata
2.2.3. Az energiasávok és a szabad elektrongáz kapcsolata

2.3. Az effektív tömeg közelítés
2.3.1. Az effektív tömeg fogalma
2.3.2. Szilárd testek sávszerkezete és az elektromos vezetési tulajdonságok kapcsolata

2.4. Pozitív töltéshordozók szilárd testekben: a "lyukak"
2.4.1. A Hall effektus
2.4.2. A lyukak

2.5. Az elektromos vezetés fizikai alapjai szilárd testekben, az Ohm törvény
2.5.1. A relaxációs idő közelítés
2.5.2. A vezetőképesség számítása

2.6. Szilárd testek háromdimenziós modellje
2.6.1. Ideálos kristályok leírása
2.6.2. Az elektronállapotok számítása
2.6.3. A sávszerkezet (diszperziós reláció)
2.6.4. Az elektronok dinamikája
2.6.5 Az állapotsűrűség

2.7. Félvezetők általános tulajdonságai
2.7.1. A Fermi szint meghatározása szerkezeti félvezetők esetén
2.7.2. A fajlagos vezetőképesség számítása szerkezeti félvezetők esetén
2.7.3. Adalékolt félvezetők
2.7.4. A p-n átmenet

2.8. Félvezető kristályok
2.8.1. Általános tulajdonságok
2.8.2. A szilícium sávszerkezete
2.8.3. A germánium sávszerkezete
2.8.4. A Gallium-Arzenid kristály

2.9. Szilárd testek optikai tulajdonságai és a sávszerkezet

2.10 Mikrostruktúrák: A jövő elektronikája

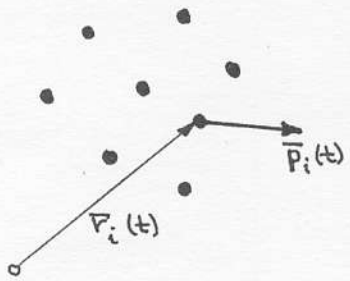
OROSZ LÁSZLÓ
BME
FIZIKA INTÉZET
FIZIKA TANSZÉK

BEVEZETÉS

Klasszikus fizikai kiegészítés

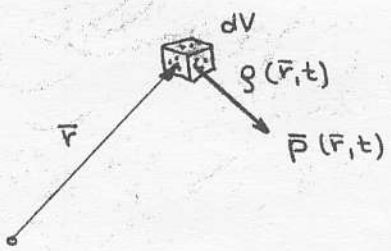
– részecske modell
– hullám modell
} a klasszikus fizikában

pontrendszer (MECHANIKA)



$n \gg 1$

kontinuum (MECHANIKA)



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

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

⇩ általánosítás

FIZIKAI MEZŐ
(tetszőleges fizikai mennyiség)

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

pl: $\bar{p}(\bar{r},t)$, $\bar{E}(\bar{r},t)$, $\bar{B}(\bar{r},t)$, ...

elemi gerjesztések → hullámjelenség

Síkhullám:

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

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

↓

$\Psi(\bar{r},t)$ = állandó

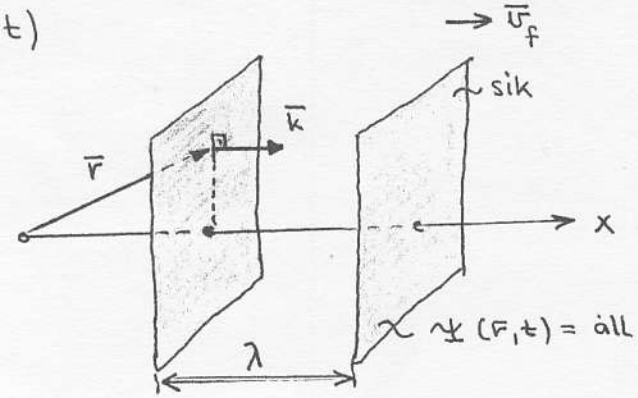
$\bar{k}\bar{r} - \omega t$ = állandó

$kx - \omega t$ = állandó

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

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

(fázissebesség)



$$\Psi(\bar{r},t) = A \cdot \sin(\bar{k}\bar{r} - \omega t) \longrightarrow \text{MATEMATIKA}$$

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

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

FRISSÍTVE 2003

BEVEZETÉS
Klasszikus fizikai kiegészítő

A klasszikus fizikában gyakran találkozunk olyan jelenségekkel, amikor egy ”*F*” fizikai mennyiség a tér minden ”$\vec{r}$” pontjában és bármely ”t” időpillanatban valamilyen $F(\vec{r},t)$ értéket vesz fel. Gondoljunk például egy közegben az anyag sűrűségére, vagy a közeg egy pontjának az elmozdulására, az akár az elektromágneses térre. A célunk ekkor legtöbbször az, hogy meghatározzuk a kérdéses fizikai mennyiséget, mint a hely és az idő függvényét, azaz az $F(\vec{r},t)$ függvényt. Az ilyen (vektorváltozós skalár) függvények szemléltetésére az ún. színfelületek használjuk. Ez azt jelenti, hogy meghatározzuk a tér azon pontjainak a halmazát, amely pontokban az ”F” érték ugyanaz, azaz $F(\vec{r},t)=F_0$. Ez a térben egy adott ”t” időpillanatban egy (vagy több) felület lesz. Az idő múlásával ez a felület változtathatja a helyét és az alakját. Ez szemlélteti a jelenség dinamikáját. Magát a jelenséget adott fizikai hullámok gerjesztésének illetve ezen hullámok terjedésének nevezzük.

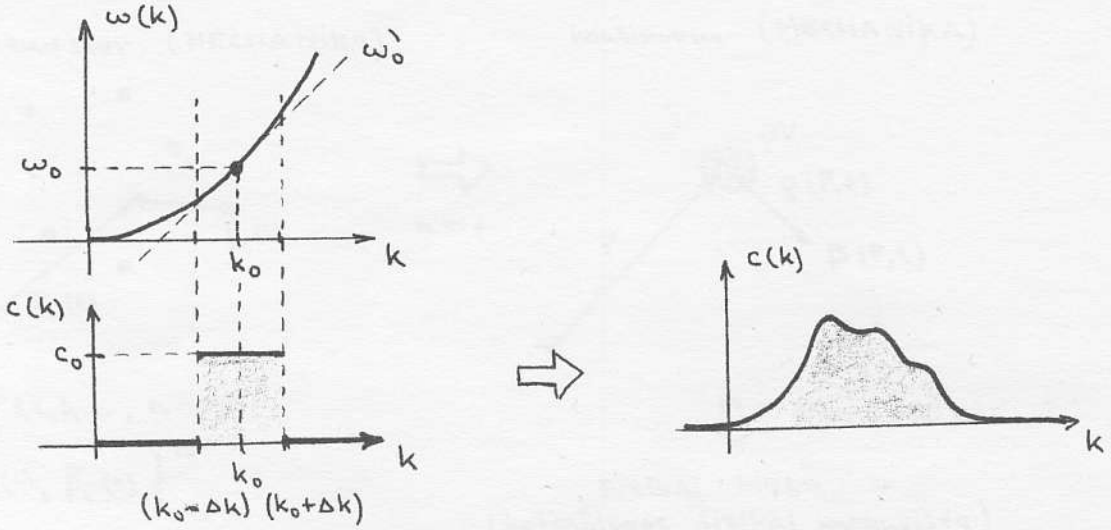
A vizsgált reális fizikai rendszerekben a tér egyes pontjaiban megvalósuló fizikai állapotok nem függetlenek egymástól. Ezért terjedhet a hullám a közegben. Ekkor a rendszer dinamikai leírása általában egy (lineáris) hullámegyenlettel történik. Ezt kell megoldanunk az adott kezdeti és peremfeltételek ismeretében (ezek adják meg, hogy milyen módon gerjesztjük. A megoldások matematikai leírására az elkövetkezőkben komplex függvényt fogunk használni. Ennek az az oka, hogy a komplex függvényeknek kellemes matematikai tulajdonságai vannak, amelyek megkönnyítik a velük való számolást. Fizikai tartalma természetesen csak valós mennyiségnek lehet. Ezért mindig meg kell mondanunk azt, hogy az elméleti tárgyalásban használt komplex függvényből hogyan kapunk egy olyan valós függvényt, amely a vizsgált fizikai jelenség leírására szolgál. A klasszikus fizikában legtöbbször ez a komplex függvény valós, vagy képzetes része szokott lenni.

A lehető legegyszerűbb megoldás lehet egy a közegben haladó síkhullám. A síkhullám esetén a szintfelületek síkok lesznek (innen van az elnevezés is). Ezeket a szintfelületeket most ”hullámfront(ok)nak” vagy ”fázisfelület(ek)nek” is nevezik. Speciális síkhullám az ún. harmonikus síkhullám. Ekkor mind térben, mind pedig időben egy ”szinuszos” periodicitást tapasztalunk. A (harmonikus) síkhullámot jellemző adatok az ω körfrekvencia (az időbeli periodicitást megadó mennyiség) és a λ hullámhossz (a térbeli periodicitást megadó mennyiség). Ez utóbbi helyett a $\vec{k}$ hullámszám vektort fogjuk használni, amely megadja a síkhullám terjedésének az irányát is. Ez a vektor ugyanis merőleges a hullámfrontok síkjára. Nagysága pedig a hullámhossz reciprokával arányos. Célszerű. Célszerű olyan Descartes koordinátarendszerben dolgoznunk, amelyben a síkhullám az x tengely mentén halad, azaz $\vec{k}\equiv(k,0,0)$. Ekkor ugyanis a hullám leírására egy egydimenziós *F(x,t)* hullámfüggvényt lehet használni.

(2)

Hullámcsomag

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



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

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

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

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

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

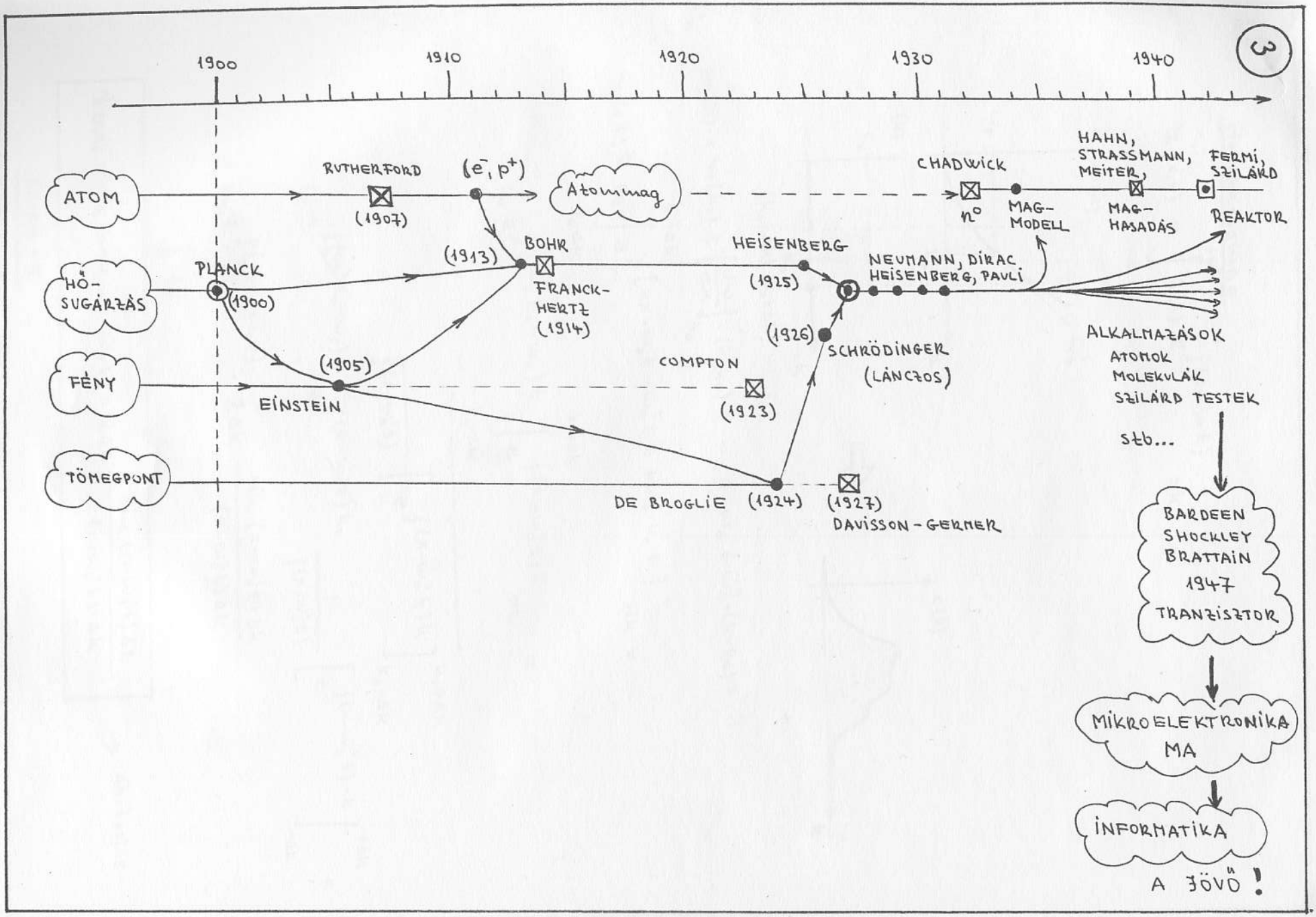
⇓ Re

$$\boxed{\Psi(x,t) = c_0 \cos(k_0 x-\omega_0 t)\cdot 2\Delta k \cdot \frac{\sin(x-\omega_0' t)\Delta k}{(x-\omega_0' t)\cdot \Delta k}} \rightarrow \text{ábrázolás}$$

$\Delta x \cdot \Delta k = \pi$

Ha a vizsgált fizikai rendszer ”lineáris”, akkor különböző ω (kör)frekvenciájú síkhullámok lineáris kombinációja szintén megoldása a hullámegyenletnek. Ezt a megoldást szemléletesen hullámcsomagnak nevezzük akkor, ha az egy térben lokalizált (véges kiterjedésű) (hullám)jelenséget ír le. Az összetevő ”k” hullámszámú síkhullámok amplitúdóinak összességét a hullámcsomag ”*c(k)*” spektrumának nevezzük. A matematikai nehézségek elkerülése végett egy olyan hullámcsomagot vizsgálunk meg, amelynek a spektruma ”négyszög alakú”. Ez azt jelenti, hogy egy k_0 hullámszám $\pm\Delta k$ környezetében lévő minden síkhullámot egyforma ”c_0” amplitúdóval összeadunk. Ez a hullámcsomag a specialitása ellenére már rendelkezik azokkal az általános tulajdonságokkal, amelyekre most rá szeretnénk mutatni. Ha a spektrum elegendően keskeny, akkor az $\omega(k)$ függés a spektrum $k_0 \pm \Delta k$ tartományában lineárisnak tekinthető. Ezzel a közelítéssel a hullámcsomag térbeli alakja egyszerű integrálással megkapható. Az eredményt megvizsgálva azt láthatjuk, hogy minél jobban lokalizált egy hullámcsomag, annál szélesebb spektrummal rendelkezik és viszont. Ez általában (azaz tetszőleges alakú de véges szélességű) spektrum esetén is igaz! A hullámcsomag, mint egységes objektum haladási sebessége az ún. csoportsebesség. Ezt legtöbbször a hullámcsomag egy pontjának (pl. a maximumának) a haladási sebességét jelenti.

A hullámcsomagok harmonikus hullámokra való felbontását, (illetve a hullámcsomag felépítését) ”Fourier analízisnek” nevezzük. Az ennek megfelelő matematikai művelet a ”Fourier integrál” illetve ”Fourier transzformáció”.


1900
1910
1920
1930
1940
ATOM
RUTHERFORD
(1907)
(e⁻, p⁺)
Atommag
CHADWICK
n°
MAG-MODELL
HAHN, STRASSMANN, MEITER,
MAG-HASADÁS
FERMI, SZILÁRD
REAKTOR
HŐ-SUGÁRZÁS
PLANCK
(1900)
(1913)
BOHR
FRANCK-HERTZ
(1914)
HEISENBERG
(1925)
NEUMANN, DIRAC HEISENBERG, PAULI
ALKALMAZÁSOK
ATOMOK
MOLEKULÁK
SZILÁRD TESTEK
stb...
FÉNY
(1905)
EINSTEIN
COMPTON
(1923)
(1926)
SCHRÖDINGER
(LÁNCZOS)
TÖMEGPONT
DE BROGLIE
(1924)
(1927)
DAVISSON-GERMER
BARDEEN
SHOCKLEY
BRATTAIN
1947
TRANZISZTOR
MIKROELEKTRONIKA
MA
INFORMATIKA
A JÖVŐ!

A fizika és ezen belül a kvantummechanika is (mint a természettudományok általában) az elméleti modellek és a kísérleti eredmények állandó kölcsönhatásának eredményeképpen fejlődik. Minden elméleti állítás kísérleti igazolást követel és minden kísérleti eredmény elméleti magyarázatot igényel. A ”Kísérlet” (azaz a "Valósággal való szembesülés") ebben a kapcsolatrendszerben teljes "vétó"-val rendelkezik. ”*A tudomány nagy tragédiája, ahogyan egyetlen rusnya tény lemészárol egy gyönyörű elméletet*" írta Thomas Huxley. A ”lemészárolt, gyönyörű elméletek” történetéből valószínűleg egy, a mai fizika könyvnél sokkal érdekesebb és vastagabb könyvet lehetne írni. Bár manapság a feltámadás és a túlélés szép példányaival találkozhatunk az áltudományok művelőinek egyre hangosabb és követelőzőbb táborában. Nem árt, ha odafigyelünk!

A kvantummechanika kialakulását és történeti fejlődését, a kísérleti eredmények (□ jelöli) és az elméleti modellek (• jelöli) egymásrahatását a közölt hálódiagram szemlélteti.

A ”régi” kvantummechanika 1900. december 14-én született. Ekkor hangzott el a német Fizikai Társaság ülésén az akkor 42 éves (!) Max Planck előadása, amelynek a címe: ”A normálspektrum energia-eloszlási törvényének az elmélete” volt. Ekkor ismertette a fekete test hőmérsékleti sugárzására vonatkozó elképzeléseit (a részleteket a következő oldalakon ismertetjük). Ennek a legfontosabb megállapítása az volt, hogy egy n frekvenciájú (rezgésszámú) rezgő atom (ún. ”atomi oszcillátor”) energiája (szó szerint idézve:) ”*meghatározott számú kicsiny egyforma részből áll. Erre a h természeti állandó szolgál, amelyet a rezgésszámmal megszorozva az említett energiaelemet kapjuk.”* Ez volt a ”kvantumhipotézis” első megfogalmazása.

Rutherford mérései alapján kiderült, hogy egy atom atommagból és a körülötte ”keringő” elektronokból áll (1911). Ettől kezdve beszélhetünk ”elektronfizikáról” és ”atommag fizikáról”. A kvantummechanika elsősorban az elektronok viselkedésének a vizsgálata során fejlődött. De a neutron felfedezése (Chadwick 1932) után az elmélet megfelelő általánosítással alkalmas volt az atommag modellek megalkotására is. A kvantummechanikai elmélet és a kísérletezés összhangjának diadala volt az első atomreaktor megépítése (E. Fermi, 1942) és a tranzisztor megalkotása (Bardeen, Shockley, Brattain 1947). Egyik sem születhetett volna meg, a kvantummechanika elmélete nélkül. "*Semmi sem olyan gyakorlati, mint egy jó elmélet*" mondotta Boltzmann. A mai mindennapjaink bizonyítják, hogy a kvantummechanika egy jó elmélet!

Tudnunk kell azonban, hogy a kvantummechanika fogalmi rendszere és szemlélete nagyon eltér a megszokott klasszikus fizikai gondolkodásunktól. Ezért a hétköznapi nyelvre ”lefordított” állításait a ”józan ész” képtelennek és lehetetlennek (abszurdnak) ítéli.

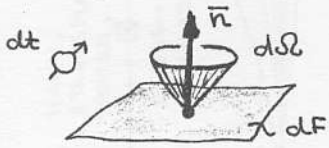
Létezik azonban egy olyan univerzális ”formális rendszer” egy egzakt nyelv, amellyel az igen absztrakt állításainkat egyértelműen kifejezhetjük. Ez a ”nyelv” a matematika.

Igen komoly filozófiai kérdés az, hogy mi lehet az oka annak, hogy a matematika ilyen jól használható a természetben tapasztalható jelenségek leírásában és megértésében. Tény azonban, hogy szinte egyetlen mód a természeti törvények pontos megfogalmazására az, ha azt a matematikai állítások (egyenletek) formájában adjuk meg. A hétköznapi szemlélet hiánya miatt a Kvantummechanikában erre különösen nagy szükség van. Bár a Fzika nem matematika, de nem lehet meg a Matemetika nélkül. Ahogyan azt először G. Galillei megfogalmazta ”A Természet a matematika nyelvét beszéli.” (ekkor a XVII. század elejét mutatta a naptár.)

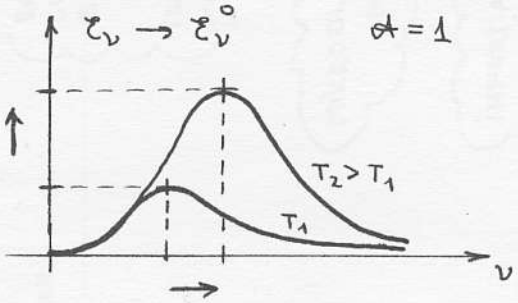
1. KVANTUMMECHANIKA

Bevezető (Történeti áttekintés)

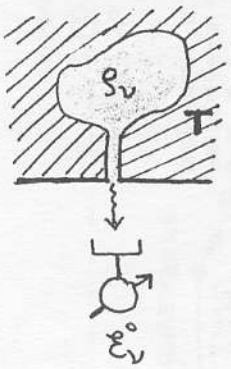
A fekete test sugárzása



$\varepsilon_\nu \, d\nu$

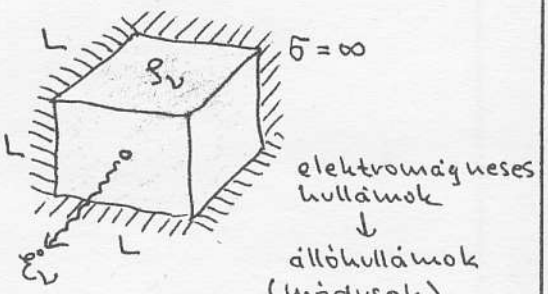


modell:



$$\varrho_\nu \sim \varepsilon_\nu^0$$

↑ SZÁMÍTHATÓ ↑ MÉRHETŐ



elektromágneses hullámok
↓
állóhullámok
(módusok)

$$\varrho_\nu = \frac{1}{L^3} \, n(\nu) \cdot \langle \varepsilon_\nu \rangle$$

$n(\nu) \sim \nu^2$, $\langle \varepsilon_\nu \rangle \sim kT$

$$\varepsilon_\nu^{RJ} = A \cdot \nu^2 kT \qquad \text{(Rayleigh–Jeans)}$$

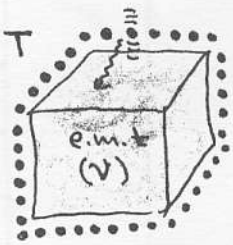
PLANCK (1900)

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

$h = 6{,}625 \cdot 10^{-34}$ J·s.

$$\varepsilon_\nu^{PL} \to \varepsilon_\nu^{RJ} \qquad h\nu \ll kT$$

elméleti magyarázat

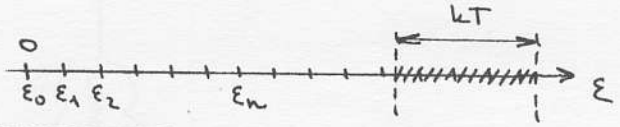


rezgő atomok sokasága (ν)

termikus egyensúly

$\langle \varepsilon_\nu \rangle$ e.m.t $=$ $\langle \varepsilon_\nu \rangle$ atomok

$$\langle \varepsilon_\nu \rangle^{PL} = \frac{h\nu}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1} \longrightarrow kT \qquad h\nu \ll kT$$



$$\varepsilon_n = n \cdot h\nu$$

1. KVANTUMMECHANIKA

Bevezető (Történeti áttekintés)

A hőmérsékleti sugárzás jelenségét a hétköznapokban is mindenki tapasztalhatja. Minden T hőmérsékletű test elektromágneses hullámok formájában energiát sugároz. Ennek oka a testet felépítő atomokban lévő elektromos töltések (gyorsuló, pl. rezgő) mozgása. Abszolút fekete testnek azt a testet nevezzük, amely a ráeső elektromágneses sugárzást teljes egészében elnyeli. Ez a "test" egy tetszőleges anyagi minőségű szilárd anyagba vájt, tetszőleges alakú üreg elegendően kicsiny kivezető nyílásával modellezhető. Ugyanis a nyíláson bejutó fény (elektromágneses sugárzás) elvileg végtelen sok reflexió után érné el ismét a lyuk kivezető nyílását. Ekkorra azonban (az egyes reflexióknál elnyelődött energiák következtében) az intenzitása gyakorlatilag a zérusra csökken. Így a nyíláson belépett fény teljesen elnyelődött. Pontosan ez a fekete test definíciója.

Valamely "T" hőmérséklet esetén az üreg falában az elektromos töltéssel rendelkező atomok (a statisztikus fizikában tanultak szerint) termikus mozgást végeznek. Ezek a "ν" frekvenciával rezgő atomok, (ún. atomi oszcillátorok) mint piciny (atomi) antennák elektromágneses hullámot bocsátanak be az üregbe. Ugyanakkor (az üregből) rájuk eső elektromágneses sugárzást el is nyelik. Egyensúly esetén az atomok által elnyelt és kisugárzott energia egymással megegyezik. Mindezek eredőjeként az üregben elektromágneses állóhullámok formájában ρ_ν homogén energia sűrűségű elektromágneses tér van jelen. A nyíláson keresztül eltávozó energia evvel arányos kell, hogy legyen. Méréssel megállapítható a kisugárzott E_ν energia frekvencia szerinti eloszlása. (Ezt nevezték el "normál spektrumnak". Lásd 3. oldal.) Ez egy jellegzetes, "harang alakú" görbe.

A XIX. század végén a fizikusok sikertelenül próbálkoztak avval, hogy elméleti számításokkal megadják a görbe matematikai alakját. A Maxwell egyenleteket, a termodinamika és a statisztikus fizika ismert törvényeit alkalmazva rendre rossz eredmények születtek (pl. J.W.S. Rayleigh és J.H. Jeans vagy W.Wien). A sikeres megoldás Max Planck (1900) nevéhez fűződik. Elképzelése a következő volt. Termikus egyensúly lévén, a falban lévő tetszőleges ν frekvenciájú atomi oszcillátorok átlagenergiája egyenlő kell, hogy legyen az üregben kialakult ν frekvenciájú elektromágneses állóhullámok átlagenergiájával. Ebből kifolyólag nyilvánvaló, hogy a rezgő atomok energiája fogja meghatározni az üregben lévő majd onnan távozó (és így a mérhető) elektromágneses sugárzás energiáját. Elméleti számításokkal kimutatta, hogy csak akkor kapható meg a kísérletekben tapasztalható ("harang alakú") emissziós spektrum, ha feltételezzük azt, hogy az atomi oszcillátorok "ε" energiája nem lehet tetszőleges. Pontosabban, egy atomi méretű ν frekvenciával rezgő tömegpont (mechanikai oszcillátor) energiája csak a "$h\nu$" energia adag ("energiakvantum") egész számú többszöröse lehet, azaz $\varepsilon_n = n \cdot h\upsilon$ *(n=0,1,2,...).* Egy oszcillátor energiája tehát "kvantált" azaz nem folytonosan változik. Elvileg ez igaz kell, hogy legyen egy makroszkópikus tömegű rezgő tömeg esetén is. A "h" kicsi értéke miatt azonban a szokásos energiáknál ez a kvantáltság olyan kicsi, hogy a klasszikus mechanikai mérésekkel nem mutatható ki.

A kezdetben pusztán csak egy paraméternek tekintett, "h" értékét úgy kell megadni, hogy az így meghatározott görbe visszaadja a kísérleti eredményeket. A későbbiek során, éppen magának Plancknak az ez irányú erőfeszítései során derült ki az, hogy a "h" (amit előbb "hatáskvantumnak", majd később "Planck állandónak" neveztek el) nem csupán csak egy egyszerű paraméter, hanem egy új természeti állandó. Ugyanis nem fejezhető ki a már ismert klasszikus természeti állandókkal. Maga Planck ezt írta erről visszaemlékezésében: "*Rövidesen próbálkozni kezdtem, hogy a h hatáskvantumot valamiképpen bekényszerítsem a klasszikus elmélet kereteibe, de ez minden ilyen kísérletnek makacsul ellenszegült. Hiábavaló fáradozásaim több éven át elhúzódtak és igen sok munkámba kerültek. Néhány kollegám valami tragikust látott ebben . Nekem más a véleményem. Számomra értékesebb volt a nyereség, amelyet ez az alapos feltárás hozott. Ma már tudom, hogy a h hatáskvantum a fizikában sokkal jelentősebb szerepet játszik, mint ahogy kezdetben gondoltam. Látom, milyen elkerülhetetlenül szükséges, hogy atomi problémák tárgyalásánál teljesen új szemléletet, teljesen új számítási módszert vezessünk be. "*

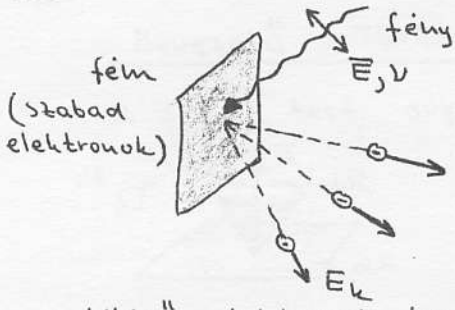
A "h" (mint a fizika új természeti állandója) mindig megjelenik az elméleti modelljeinkben, ha azok atomi szinten lezajló jelenségeket írnak le.

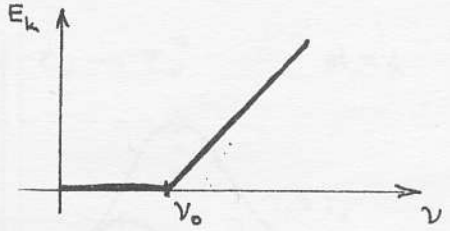
Az 1918-as fizikai Nobel-díjat Max Planck kapta a „hatáskvantum felfedezéséért".

Megszületett tehát a Kvantummechanika, amely a XX. század legnagyobb és legsikeresebb szellemi alkotásának bizonyult. Megjelenésével egy teljesen új természetszemlélet és a hétköznapi eszközök soha nem sejtett sokasága jelenik majd meg. Mindezt azonban akkor még senki nem sejthette.

A továbbiakban az adódó matematikai összefüggések egyszerűsítése miatt a $\hbar$ -t (kiejtése: "há vonás") fogjuk használni, amelynek értéke $h/2\pi$. Ez az ún. redukált Planck állandó.

5 A fényelektromos jelenség



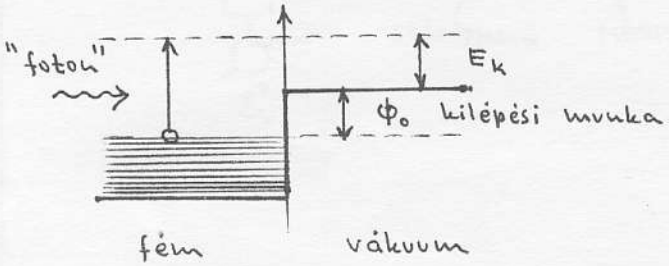


a kilépő elektronok kinetikus energiája mérhető

a klasszikus elképzelés:

$\bar{E}(t)$ ↕ ⊖ ↕ $\quad E_k \sim |\bar{E}|^2 \sim J$ (a fény intenzitása) NEM JÓ!

EINSTEIN (1905)



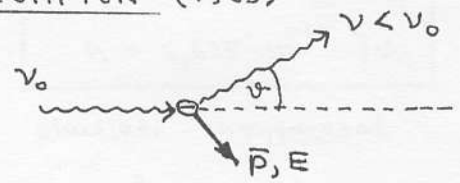
$$E_k = h\nu - \Phi_0 = h\left(\nu - \underbrace{\frac{\Phi}{h}}_{\equiv \nu_0}\right)$$

A foton ⟶ "részecske tulajdonság"

$$p = mc = \frac{mc^2}{c} = \frac{E}{c} = \frac{h\nu}{c} = \frac{h}{\lambda} \longrightarrow \text{3 dim} \longrightarrow \boxed{\begin{aligned}\bar{p} &= \hbar\bar{k}\\ E &= \hbar\omega\end{aligned}}$$

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

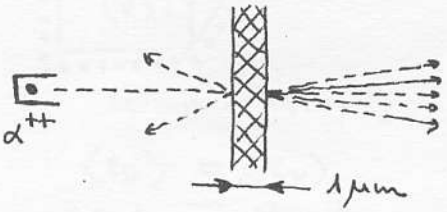
COMPTON (1923)

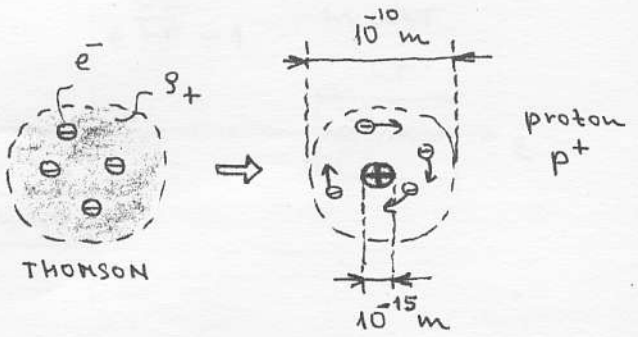


$$\Delta\lambda = \Lambda(1 - \cos\vartheta) \qquad \left(\Lambda = \frac{h}{mc}\right)$$

Az atom szerkezete

RUTHERFORD (1907, 1911)





A kvantummechanika kialakulásának fontos állomása volt az ún."fényelektromos jelenség". Ezt a több mint száz éve ismert effektust hétköznapjainkban is gyakran használjuk, valahányszor egy fotocella vezérelt ajtón átmegyünk.

A XIX. század utolsó harmadában a szikra- illetve gázkisülések vizsgálata (különböző minőségű illetve kis nyomású) gázokban igen érdekes és ugyanakkor egy kísérleti fizikus számára izgalmas kihívást jelentő tudományos kutatás volt. 1888-ban Hallwachs (is) azt tapasztalta, hogy ha a negatív töltésű elektródát ultraibolya fény éri, akkor a szikrakisülés „könnyebben" jön létre. Ebből ő arra a következtetésre jutott, hogy bizonyára az elektródából a fény hatására negatív töltések lépnek ki. Mindez még közel 10 évvel az „elektron" felfedezése előtt történt.

Ma már tudjuk, hogy a fémekben könnyen mozgó elektronok vannak, amelyeket onnan ki is lehet „szabadítani". A kísérleti tapasztalatok szerint tehát, ha egy fémlapra fény (elektromágneses hullám) esik, akkor a fémből elektronok lépnek ki.

A Maxwell-féle elektrodinamika törvényei szerint, ha a fény kölcsönhatásba lép a pontszerűnek feltételezett elektronnal, akkor a fémből kilépő elektron kinetikus energiája a fény intenzitásával lesz arányos. Mindez könnyen belátható. Az elektromágneses hullámban oszcilláló "E" elektromos térerősség hatására gyorsul fel az elektron. Minél nagyobb ez a térerősség, az elektron annál nagyobb sebességre tesz szert, azaz annál nagyobb mozgási energiával fogja elhagyni a fémet.

A mérések azonban azt mutatták, hogy a távozó elektron kinetikus energiája a beeső fény frekvenciájával arányos. Sőt, ha a fény frekvenciája egy (az illető fémre jellemző) frekvencia értéknél kisebb, akkor nincsen elektronkilépés. Mindezen tények szöges ellentétben álltak a klasszikus fizikai elképzelésekkel.

Az *Annalen der Physik* neves, nívós fizikai folyóirat (volt). A 17. kötete (1905-ös év) különösen érdekes! Ebben a kötetben ugyanis (a 132-ik., az 549-ik és a 851-ik oldalon) három igen fontos cikk jelent meg. Mindegyik a kialakulóban lévő modern fizika egy-egy kulcsfontosságú alapkövét tette le.

Az egyik a „Brown-mozgás elméletét" tárgyalta és így a statisztikus fizika fejlődéséhez járult hozzá.

A második a „mozgó testek elektrodinamikájáról" szólt és a modern tér-idő fogalmunk megszületését jelentette.

A harmadik a fényelektromos jelenség igen ötletes magyarázatát adta, hozzájárulva ezzel a kvantummechanika kialakulásához ugyanakkor már a „kvantumelektrodinamika" csíráját is magába rejtette.

Már az sem mindennapi (még egy íly' neves tudományos folyóirat életében sem), hogy egyetlen kötetében (alig több mint 700 oldalon belül) ennyi zseniális és újszerű gondolat jelenjen meg. De sokkal meglepőbb a helyzet, ha figyelembe vesszük, hogy mindhárom cikk fejlécén ugyanaz az (addig gyakorlatilag ismeretlen) név szerepelt. A név viselője egy akkor 26 éves fiatalember, a berni szabadalmi hivatal kezdő alkalmazottja volt. Neve ma már szinte a „legismertebb tudós név" még a közember számára is.

Ö volt Albert Einstein!

A fényelektromos jelenség magyarázatát tehát A.Einstein adta meg (1905). Feltételezte, hogy a ν frekvenciájú fény az elektronnal való kölcsönhatás során az elektronnak csak "$h\nu$" nagyságú energiát adhat át. Ezt az energia adagot ("fénykvantumot") fotonnak nevezte el. Ha ez az energia kisebb, mint az elektront a fémfelülethez kötő maximális energia (ezt a Φ_0 "kilépési munkának" nevezik.) akkor az elektron nem tud kilépni a fémből.

Alkalmazva a relativisztikus mechanika összefüggéseit Einstein a fotonhoz egy impulzust is rendelt. Így a fotont egy részecske tulajdonságaival ruházta fel (aminek a nyugalmi tömege zérus). Megszületett a híres (és azóta is gyakran félreértett) "hullám- részecske kettős természet" ideája. A "foton" fogalma nem egyszerű. A hétköznapi értelemben vett szemléletes képet igen nehéz alkotni róla. Kezdetben Einstein véges hosszúságú igen keskeny hullámvonulatnak képzelte. Ezt szemléletesen a fény "tűsugárzás" elméletének nevezték. Azonban 1911-ben a magyar Selényi Pál elsőként kísérletileg bebizonyította, hogy az atomi fénykibocsátás gömbhullám formájában történik. Ezt a "hullám képet" igen nehéz összeegyeztetni a foton "részecske" képével. Nem véletlenül mondta Debye:" *A fizikusok nagy szerencséje, hogy Selényi a kísérletét nem néhány évvel korábban végezte el. Akkor talán meg sem születhetett volna a fénykvantumok elmélete." A* T. Huxley jósolta "mészárlás" (3.oldal) ezúttal elmaradt. A foton furcsa fogalmának a fogadtatására Planck mondatai is jellemzőek, eszerint:" *Einstein nagyságából mit sem von le az a körülmény, hogy más tanulmányaiban kalandos és megalapozatlan hipotézisekbe bocsátkozik. Egyik ilyen hipotézise fénykvantumok létezésének a feltételezése "*. Ekkor 1914-et írtak.

Az 1921-es fizikai Nobel-díjat Albert Einstein kapta:"*érdemdús matematikai-fizikai kutatásaiért, különös tekintettel a fényelektromos -jelenség törvényének a felfedezésére "*

A fotonimpulzus (mint részecske tulajdonság) közvetlen bizonyítékát A.H.Compton mérései szolgáltatták 1923-ban. A róla elnevezett „Compton-effektus" felfedezéséért 1927-ben Nobel díjat kapott.

Ettől kezdve a "foton" fogalma végleg meggyökeresedett a fizikában. A kvantummechanika majd a (relativisztikus-)kvantumelektrodinamika fejlődésével egyre bonyolultabbá vált de mára már a mindennapi fizikai gondolkodásunk szerves része.

„A közvélemény Einsteinről alkotott képét nagyrészt közepes tehetségű emberek alakították ki. Az újságírók örökké interjúért zaklatták, könyveket írtak életéről és eredményeiről, úgy tettek, mintha megértenék azokat a problémákat, amelyekkel birkózott. Az így létrejött közvéleménykép messze állott a valóságtól. Elég nehéz dolog egy olyan géniuszt értékelni, aki ilyen egyedülálló adottságokkal rendelkezik és ilyen egyedüli helyet foglal el a tudománytörténetben…." Írta róla a magyar származású Lánczos Kornél, aki hosszú éveken át Einstein közvetlen munkatársa és így személyes jó ismerőse volt. Nyilván való, hogy a"Térről" és az „Időről" mint alapvető fogalomról mindnyájunknak van valamilyen (a hétköznapok tapasztalatán alapuló) elképzelése. Annyira megszoktuk már ezeket a fogalmakat, amelyek a maguk módján beépültek a szemléletünkbe, hogy minden ettől eltérő állítás mélyen meghökkent minket. Nem meglepő tehát, hogy az einsteini Téridő fogalom forradalmian új struktúrája és a hozzá kapcsolódó speciális relativitáselmélet volt az, amely Einsteint közismertté tette. Pedig a valóban eredeti alkotása a "foton" fogalma volt!

A „különc, tudós professzor sztereotípiája" Einsteinben látszott testet ölteni. Sok személyéhez kötődő „story" él és terjed róla, amelyeknek nagy részét éppoly meghökkentő „legendává" alakította a szájhagyomány, mint amilyen elméletének furcsasága volt. Ezek egy része nélkülözi a valóságos alapokat, de ahogyan mondani szokás „ha nem is igaz, jól ki van találva"!

„Nem volt csodagyerek, bár a természet titkai már igen hamar érdekelni kezdték. Az ötéves korában ajándékba kapott iránytű rendkívüli módon lenyűgözte és erősen hatott rá az az elemi geometriai kézikönyv, ami tizenkét éves korában került a kezébe. Az iskolák nemigen feleltek meg Einstein vérmérsékletének, és tanárai gyakran fegyelmezetlennek találták. Egyik elkeseredett tanára egyszer meg is jósolta nem túl találóan: >>Einstein, Einstein, maga semmire sem fogja vinni az életben!<<"- írta Láczos Kornél.

Később, egyetemi évei alatt sem tűnt ki a társai közül. „Egyik matematikaprofesszora az a Hermann Minkowski volt, aki később a speciális relativitáselmélet geometriai értelmezésének úttörője lett. Amikor elolvasta Einstein 1905-ös tanulmányát, igen meg volt lepve. >>Ez ugyanaz az Einstein lenne –kérdezte egyik barátjától - , aki néhány éve a diákom volt? Akkor úgy látszott, hogy nagyon keveset tud!<<" (L.K.)

A társadalmi átlagra tervezett intézményes oktatás és a különlegesen gondolkodó Einstein konfliktusa szükségképpen végig kísérte az életét. Nem volt „jó" diák és egyetemi tanársága idején nem szeretett tanítani sem. Bár mindez igen izgalmas lehet az utca emberének, de a „zseniális bukott diák" legendája csak a középszerűség önámításának tekinthető.

Mint már az előzőekben említettük a gázkisülések és ezen belül az ún. a katódsugárzás vizsgálata a XIX. század végén érdekes tudományos munka volt. Lassan kialakult a sejtés, hogy talán a katódsugarakban addig ismeretlen, elektromos töltéssel rendelkező részecskék áramlanak. J.Stoney 1890-ben ezeknek a (hipotetikus) részecskéknek az „elektron" nevet adta.

1897-ben J.J.Thomson a katódsugarak elhajlást vizsgálta elektromos térben. Sikerült bebizonyítania, hogy a katódsugárzás valóban negatív töltések (tehát elektronok) áramlásából áll. Meghatározta a katódsugárban repülő elektronok tőmeg-tőltés arányát. A kísérlet részleteiből azt a következtetést vonta le, hogy az elektronnak univerzális és elemi részecskének kell lennie. Az elektron léte fizikai realitássá vált.

Valószínűleg még senki nem sejtette azt, hogy a felfedezett elektron, a XX. század alapvető objektuma lesz és egész iparágak épülnek majd rá. 1906-ban a fizikai Nobel-díj nyertese az első elemi részecske felfedezője J.J.Thomson volt.

J..J. Thomson joggal feltételezhette, hogy a katódsugárcsőben mozgó elektronok csakis az elektróda anyagát felépítő atomokból származhatnak. Így az addig „oszthatatlannak" (ez az „atom" szó eredeti jelentése) gondolt atom valójában egy, elemibb részletekkel bíró objektum, azaz valamilyen szerkezete van. A XIX-XX. század fordulójára (az addigi tapasztalatok alapján) megszületett az ún. Thomson-féle atommodell. Eszerint az atom egy kb. 10^{-10} m átmérőjű gömb alakú egyenletes pozitív töltéseloszlás, amelyben pontszerű elektronok úszkálnak.

Ernest Rutherford angol fizikus közvetlen mérésekkel szerette volna ellenőrizni a modell helyes voltát. Ezért elektronjuktól megfosztott He (hélium) atomokat lőtt vékony fémfóliára. A visszapattanó és a fólián szinte akadálytalanul áthatoló He lövedékek aránya azt mutatta, hogy a Thomson-féle atommodell nem helyes (1907, 1911). A szóráskísérletek eredménye szerint, az atomban a pozitív töltés csak egy „kicsiny" térrészbe, egy kb. 10^{-15} m átmérőjű gömbbe koncentrálódik. Ezen kísérleti tény alapján Rutherford egy új atommodellt alkotott. Eszerint az atom egy kb. 10^{-15} m átmérőjű pozitív töltésű atommagból és körülötte mozgó elektronokból áll. A továbbra is pontszerűnek képzelt elektronok, a Coulomb vonzás következtében, az atommag körül keringenek egy kb. 10^{-10} m sugarú pályán. A hidrogén atom a periódusos rendszer első eleme. Ha megfosztjuk az egyetlen elektronjától, akkor egy még elemibb objektumot kapunk, amelyik így az "első előtt álló" (görögül protosz) lesz. Rutherford a hidrogén atom magját "protonnak" nevezte el.

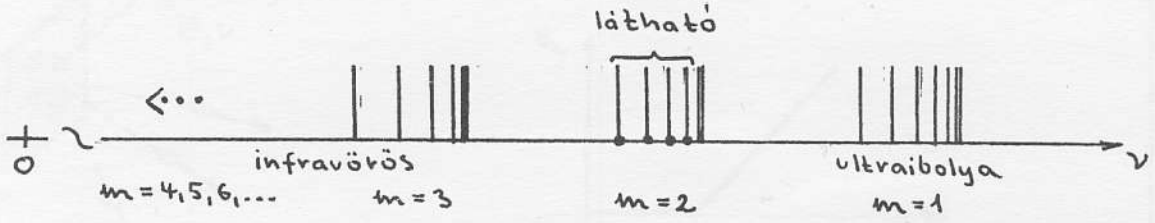
Rutherford atommodellje a kvantummechanika fejlődésének egyik gerjesztője volt, és mint ilyen fizika-történeti jelentősége óriási. Megalkotója a kémiai Nobel-díjat (nem ezért, hanem még korábban) 1908-ban, a

rádióaktivitással kapcsolatos kutatásaiért kapta (többek között az „alfa” és a „béta” sugárzás azonosítása és elnevezése is tőle származik).

(6) Atomok emissziós spektruma (vonalas színképek)

↓

Hidrogén atom (BALMER 1885)



Balmer: $\nu = R\left(\frac{1}{4} - \frac{1}{n^2}\right)$ $n = 3,4,5,6$

→ általánosítás RYDBERG-RITZ

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

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

$n > m$

BOHR atommodellje (1913)

Posztulátumok:

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

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

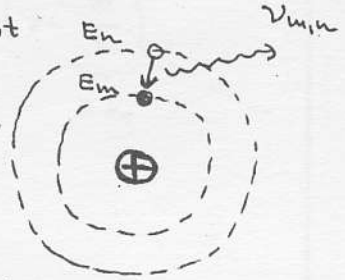
P3: $L_n = n \cdot \hbar$ $n = 1,2,3,\ldots$

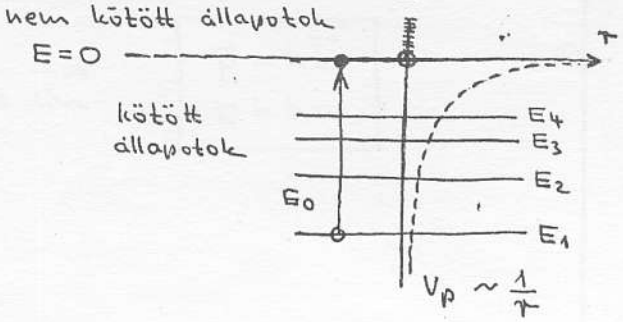
↓ eredmény

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

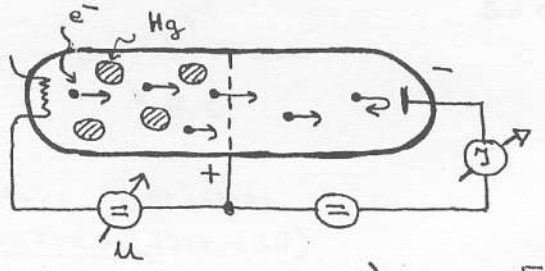
↓

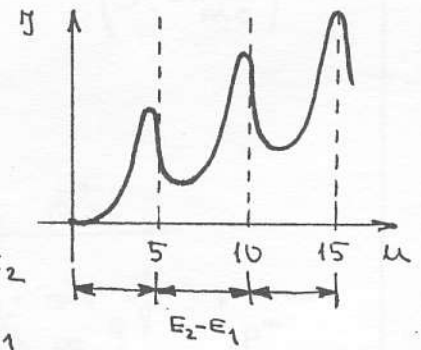
Rydberg – Ritz $\nu_{m,n} = \ldots$

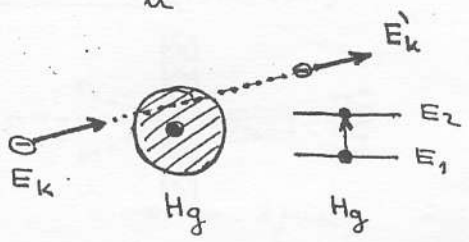




FRANCK–HERTZ (1914)







$E_k + E_1 = E_k' + E_2$

$E_k - E_k' = E_2 - E_1$

"rugalmatlan" ütközések

A Rutherford féle atommodell megfelelt ugyan a korabeli kísérleti tényeknek, de alapvető elméleti hiányossága is volt. Ugyanis, ha az elektron kering az atommag körül, akkor centripetális gyorsulással rendelkezik. Ekkor azonban, az elektrodinamika törvényei szerint, elektromágneses hullámot kellene gerjesztenie és így energiát kellene állandóan kisugároznia. Az elektron (az energia-megmaradás elve értelmében) állandóan veszítene az energiájából és rövid idő alatt beleesne az atommagba (elméleti becslések szerint ez kb. 10^{-18} sec). Azaz az atom nem lenne stabil. Ugyanakkor igaz viszont az is, hogy a spektroszkópiai megfigyelések szerint az atomok bizonyos körülmények között elektromágneses hullámot bocsátanak ki. A kisugárzott energia frekvencia szerinti eloszlása minden fajta atomra (sőt molekulára) különböző. Közös jellegzetességük a diszkrét frekvencia eloszlás. Ezt "vonalas spektrumnak" hívjuk.

A legegyszerűbb atom a hidrogén atom. Ezért célszerű, ha először a hidrogén atom spektrumát próbáljuk megérteni. Kezdetben csak a négy látható vonal (frekvencia illetve hullámhossz érték) volt ismeretes.

Az 1860-as évektől a spektroszkópia megfigyelések során hatalmas mennyiségű kísérleti adat gyűlt össze. A hidrogén atom látható négy spektrumvonalát igen nagy pontossággal Anders Angstrőm mérte meg.
A kísérleti spektroszkópia fejlődése lehetővé tette, hogy a megfigyeléseket kiterjesszék mind az infravörös, mind pedig az ultraibolya tartományba is. Így „láthatóvá vált” a hidrogén atom többi (rendkívül sok) spektrumvonala is.

Az IQ tesztek egyik közkedvelt feladata, amikor szabályosságot kell felfedezni egy adott számsor elemei között. Például az (1,2,3,5,8,…..) feladatot az emberek döntő többsége könnyedén megoldja. Valamivel nehezebb lenne a következő (1, 7/2, 7, 23/2, ….). Érdekes feladatnak mutatkozik a (1, 9/8, 5/4, 4/3, 3/2, ….) számsor is. Erre csak akkor tudunk könnyen válaszolni, ha „segítségként” felírjuk: (c, d, e, f, g, a, ….). Szinte rögtön felismerjük, a C-dur hangsor alaphanghoz viszonyított frekvenciáit.

Mindezen előkészítés azt a célt szolgálta, hogy kellően felmérjük annak a feladatnak a nehézségét, amelyben szabályosságot kell felfedezni a (6562.1, 4860.74, 4340.10, 4101.20, ….) számadatok között. Az első ránézésre a megoldás meglehetősen komplikáltnak ígérkezik. Hacsak nem találunk valamiféle vezérfonalat, (hasonlóan a C-dur skálához) a megoldás szinte reménytelennek tűnik. Pedig ezt a feladatot már megoldotta valaki. Az illető Johann Jacob Balmer svájci középiskolai tanár volt. A meglepően egyszerű megoldás a bázeli leányiskola évkönyvében látott először napvilágot, majd 1885-ben egy rövid közlemény formájában az „*Annalen der Physik*”-ben, a kor vezető európai tudományos folyóiratában is megjelent. A közlemény címe: ”Megjegyzések a hidrogén atom színképvonalaihoz”. A megadott számsor ugyanis a hidrogén atom által kibocsátott látható fény hullámhosszait jelenti 10^{-10} m egységben.

J.J.Balmer ábrázoló geometriát tanított. A geometria nemcsak önmagában érdekelte, de foglalkoztatta annak építészeti és művészeti vonatkozása is. Szerteágazó érdeklődési köre tette őt alkalmassá arra, hogy igen egyszerű formulát kapjon a hidrogén atom fent megadott spktrumvonalainak a megadására. A fizikatörténet bizonyítja, hogy egy új tudományterület kezdeti szakaszában elsősorban a széleskörű ismerteken alapuló analógiaérzék lehet igen gyümölcsöző, természetesen csak akkor, ha mindez logikai igényességgel is társul. Ez történt Balmer esetében is. Filozófiai beállítottságát tekintve „Pithagoras” követői közé tartozott, aki hitt abban, hogy a világ jelenségei összefüggő harmóniát alkotnak és ez a harmónia egész számokkal kifejezhető. Feltételezte ezért, hogy hasonlóan a C-dur skálához a hidrogén atom spektruma is egész számokkal megadható. Maga a módszer, ahogyan Balmer a végső felismeréshez eljutott igen eredeti és intuitív, de most nem fontos. A lényeg az, hogy végülis a hidrogén atom látható frekvencia spektrumára a következő összefüggést kapta: $\nu = R\left(\frac{1}{4} - \frac{1}{n^2}\right)$ ($n = 3, 4, 5, 6$), ebből a keresett hullámhosszak a $\lambda = \frac{c}{\nu}$ hányados segítségével megkaphatók.

Balmer formulája és neve csaknem 20 évre feledésbe merült. Csak akkor fedezték fel újra, amikor Rydberg (1890) és Ritz (1906) munkássága következtében nyilvánvalóvá vált az, hogy kellő általánosítással, a képlet segítségével az összes (ultraibolya és infravörös tartományban lévő „végtelen sok”) frekvenciaérték is kiszámítható.

A Balmer-formula megadta ugyan a hidrogén atom teljes sugárzási spektrumát, de azt megmagyarázni nem tudta.

Végül is Niels Bohr dán fizikus volt az, aki három egyszerű posztulátum (alapfeltevés) segítségével matematikai levezetését adta a Balmer formulának (Koppenhága, 1913. április). A Bohr-féle modell alapfeltevései a következők.

1.) Az elektron a hidrogén atomban csak meghatározott energiájú pályákon tud sugárzás nélkül keringeni. Ezek a (kör)pályák tehát stabilak.
2.) Ha az elektron egy magasabb energiájú pályáról egy alacsonyabb energiájú pályára "ugrik", akkor az energia különbséget egy hn energiájú foton kibocsátásával leadja.

3.) Csak azok a (kör)pályák stabilak, amelyen az elektron pályamozgásból adódó perdülete, a „$\hbar$”-nak egész számú többszöröse.

A körpályán történő mozgáshoz szükséges centripetális gyorsulást az elektron és a proton között fellépő Coulomb erő biztosítja. A 3. posztulátumban rögzített kvantálási törvény segítségével a diszkrét energiaszintek kiadódnak. A 2. posztulátum alapján pedig a Balmer formula egyszerűen megkapható.

Később megszületett a modell egy továbbfejlesztett változata is, amelyben az elektron (az általánosabbnak tekinthető) ellipszis pályákon is mozoghat. Ez volt a Bohr- Sommerfeld modell.

N.Bohr a fizikai Nobel-díjat 1922-ben kapta meg, az indoklás szerint:”Az atomok szerkezetének és az azokból eredő sugárzásoknak a vizsgálataiért.” Modelljének merész újdonsága döntö lépés volt abba az irányba, amely szakítást jelentett a megszokott klasszikus fogalmakkal. Bohr ennek tudatában volt, szavait idézve: „…az előadott gondolatok merev ellentétben állnak a fogalmaknak azon csodálatra méltó, összefüggő rendszerével, mellyet joggal >>klasszikus<< elektrodinamikának nevezünk”

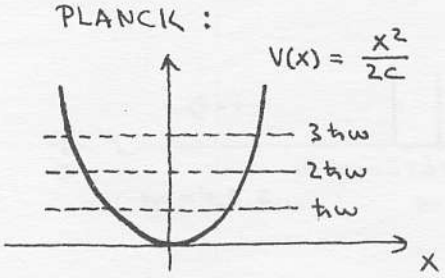
A fizikusok feltételezték, hogy minden atom szerkezete a hidrogén atoméhoz hasonló.

A diszkrét energiaszintek közvetlen mérését J.Franck és G.L.Hertz valósította meg (1913-ban, hat hónappal a Bohr modell megszületése után!). A mérés elve az volt, hogy megmérték a higany atomokkal ütköző elektronok ütközés utáni kinetikus energiáját. A higany atom tömege kb. nyolcvanezerszer nagyobb, mint az elektron tömege és a kísérletben az átlagsebessége az elektronokéhoz képest elhanyagolható. Ha az ütközés során az ütköző elektron kinetikus energiája lecsökken (azaz az ütközés rugalmatlan), akkor ez azt jelenti, hogy a higany atom valamelyik elektronjának az energiája megnövekedett. Ha az atomban az energiaszintek diszkrétek, akkor az ütköző elektronok energiacsökkenése nem lehet akármekkora.

1926-ban a fizikai Nobel-díjat megosztva J.Franck és G.L.Hertz kapta „az elektronok és az atomok egymás közötti ütközés törvényeinek a felfedezésért”.

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

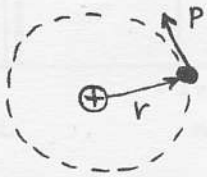
PLANCK :



$E_n = n \cdot \hbar\omega$

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

BOHR :



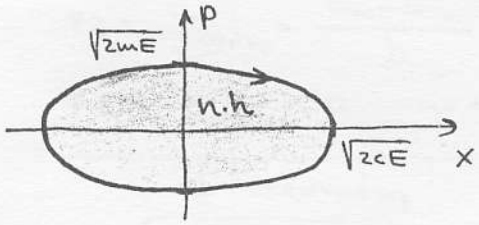
$L_n = p \cdot r = n\hbar$

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

A teljes energiafüggvény (≡ Hamilton függvény)

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

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



$$\oint p\,dx = \pi \cdot \sqrt{2mE} \cdot \sqrt{2cE} = 2\pi \cdot E \cdot \sqrt{mc} \cdot \frac{1}{\omega}$$

(kvantált)

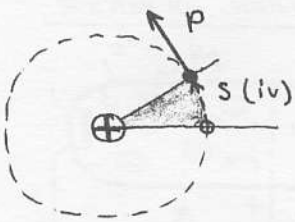
$$\oint p\,dx = 2\pi \cdot \hbar\omega \cdot n \cdot \frac{1}{\omega} = n \cdot h$$

↓ ÁLTALÁNOSÍTÁS

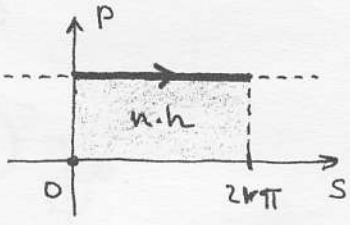
Általános koordináták: $\{q_1, q_2, q_3, \ldots, q_f\}$ →

$$\boxed{\oint p_k\,dq_k = n_k \cdot h} \qquad (k = 1,2,3,\ldots f)$$

Alkalmazása a BOHR féle atommodellben



$(q \equiv s)$



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

$$L = n \cdot \hbar$$

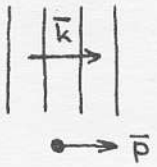
A lineáris oszcillátorra vonatkozó Planck-féle és a körmozgásra vonatkozó Bohr-féle kvantálási törvény formailag nagyon különbözik egymástól. Mi lehet az az általános kvantálási törvény, amely minden esetben érvényes? A választ Bohr és Sommerfeld adta meg 1916-ban. Az általánosítás alapja az, hogy egy tetszőleges, (egydimenziós) periodikus mozgást végző tömegpont mozgását az impulzus és a koordináta által definiált ún. fázissíkban egyetlen fázispontnak zárt trajektorián történő mozgásával adhatjuk meg. A kvantálási törvény az, hogy ezen zárt görbe által határolt terület a *„h”* Planck állandó egész számú többszöröse lehet csak. A törvény általánosítható tetszőleges szabadságfokú mozgás esetére is. Ekkor az összetartozó (általános) koordináta és (általános) impulzus párokra kell alkalmazni az említett összefüggést.

DE BROGLIE (1923)

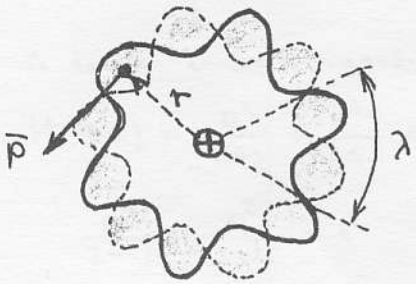
Elektromágneses hullám → fény → foton
ν, λ $E, \vec{p}$

tömegpont modell → elektron → HULLÁM ?
$E, \vec{p}$ ν, λ

$E = \hbar\omega$
$\vec{p} = \hbar\vec{k}$



(Bohr P3)



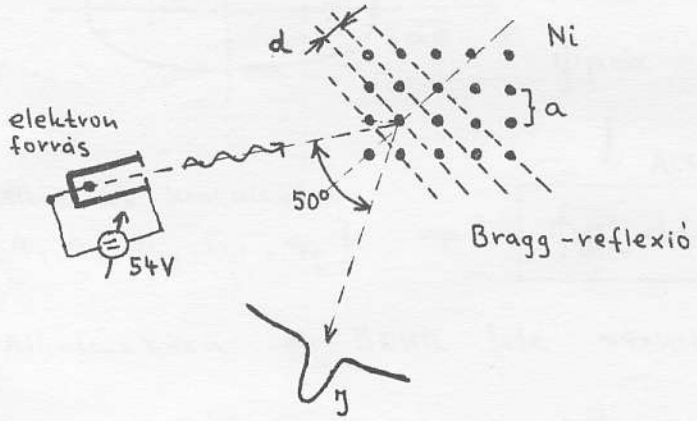
$2\pi r = n \cdot \lambda$ (állóhullám)

$\uparrow$

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

$\underbrace{pr}_{\equiv L_n} = n \cdot \hbar$ (P3)

DAVISSON - GERMER (1927)



→ Thomson - Stern (H atom)

HEISENBERG (1925)

$$\begin{bmatrix} \omega_{11} & \omega_{12} & \omega_{13} \dots \\ \omega_{21} & \omega_{22} & \omega_{23} \dots \\ \omega_{31} & \omega_{32} & \omega_{33} \dots \\ \vdots & & \end{bmatrix} \equiv \underline{\underline{\omega}} \rightarrow \underbrace{\underline{\underline{x}}, \underline{\underline{p_x}}, \underline{\underline{E}}, \dots}_{\text{TÚL ABSZTRAKT !}}$$

"mátrix diagonalizálás" (algebra)

SCHRÖDINGER (1926)

De Broglie hullám → hullámegyenlet → "SZEMLÉLETES" !

Louis de-Broglie 1923-ban (majd az 1924-ben megvédett doktori dolgozatában) egy igen furcsa hipotézist dolgozott ki. Arra gondolt, hogy ha az elektromágneses tér hullámszerű tulajdonságot (pl. diffrakció, interferencia, stb…) és részecske jellegű tulajdonságot (foton!) is mutat, akkor ez a ”kettősség„ esetleg az elektronokra is igaz. Azaz az elektron mozgásához egy valamiféle hullám rendelhető.
Később így emlékezett vissza azokra az időkre:

„…nem könnyű szívvel, hanem vonakodva és kényszer hatására hagytam el a klasszikus fizika hagyományos pozícióit, ez a megállapítás talán megmutatja a hitetlenkedőknek, hogy a hagyományos pozíciók mennyire védhetetlenekké váltak.”

„… aki egy új elmélet alapvető gondolatait kifejti nem mindig veszi észre rögtön annak minden következményét. Személyes meglátásai alapján irányítva, a matematikai hasonlóságok belső ereje által indíttatva, szinte önmaga ellenére kényszerül új útra, amelyről maga sem tudja, hogy tulajdonképpen hova vezet...” „Lassanként olyan értelmezésekre kényszerül, amelyekre eredetileg nem is gondolt…”

„Minthogy a fényelmélet keretében össze kellett házasítani a megfelelően értelmezett hullám- és részecske-fogalmat, szükségszerűen felmerült a következő kérdés: Vajon az elektronnak, akárcsak a fénynek, a jól ismert korpuszkuláris természeten kívül nincsen-e hullám természete is, amely a hullámoptikához hasonló jelenségekben nyilvánul meg?” 1923-ban „ennek a kérdésnek a felvetése igen merész dolog volt, mert akkor még semmi sem mutatott arra, hogy az elektronnak hullámtermészete is van. De ha az ember elgondolkozott a kvantumelmélet által bevezetett új fogalmakon, akkor lehetett találni néhány bizonyítékot, amely az elgondolás helyessége mellett szólt.” Például: *„…Planck, Bohr és Sommerfeld által bevezetett kvantumfeltételekben egész számok szerepelnek, ami az anyagi pont dinamikájában még sohasem fordult elő, de egészen megszokott olyan problémákban, amelyekben hullámokról van szó (interferencia, rezonancia, stb…)”*

L. de-Broglie ezt a hullámot igen találóan "vezérhullám”-nak nevezte el és meglehetős óvatossággal fogalmazott:
„Az anyagi részecskék lehetséges megnyivánulásainak térbeli eloszlását ekkor a részecskékhez társuló hullám terjedése kell, hogy leírja… ”

A mindennapokban a fizikusok ezt a vezérhullámot „elektronhullámnak” szokták hívni. Ez azonban azt a hamis képet sugallja, mintha „az elektron maga hullámzana”. Mint az majd később ki fog derülni, ez nincsen így. Mindenesetre a félreértések elkerülése végett mi az elkövetkezőkben a „de-Broglie hullám” elnevezést fogjuk használni.

De Broglie feltevése szerint, az általa bevezetett hullám frekvenciája és hullámhossza az elektron energiájából és impulzusából számítható ki ($E = \hbar\omega$, $\vec{p} = \hbar\vec{k}$), hasonló módon, mint ahogyan azt a foton esetében láttuk.

Ennek az igen furcsa hullám-modellnek a meghökkentő eredménye az volt, hogy segítségével a Bohr féle harmadik (kvantálási) hipotézis igen szemléletes jelentést kapott. Nevezetesen csak azok a pályák stabilak, amelyeken az elektronhoz rendelt ”vezérhullám” önmagával interferálva állóhullámot alakit ki.

Az 1929-ben kiosztott fizikai Nobel-díj tulajdonosa Louis de Broglie lett „az elektron hullámtermészetének a felfedezéséért”.

Az elektron hullámtulajdonságának a közvetlen kimutatása C.J.Davisson és munkatársa L.H.Germer (1927) amerikai fizikusok nevéhez fűződik. Nikkel kristály felületéről szóródó elektronnyaláb intenzitás-eloszlását vizsgálták. Ez olyan volt, hogy az csak az elektronokhoz rendelt de-Broglie féle hullámoknak a kristályatomokon történő diffrakciójával volt magyarázható. Hasonlóan a röntgen sugárzás Bragg-féle reflexiójához. Ez azt jelenti, hogy egy kristály röntgendiffrakciós és elektrondiffrakciós képe megtévesztően hasonló. Tőlük függetlenül G.P.Thomson (Aberdeen, 1928) arany, platina és alumínium filmeken áthaladó elektronnyaláb diffrakciós képeit hozta létre.

Mivel ezek a kísérletek alapvetően hozzájárultak a kvantummechanikai gondolkodásmód fejlődéséhez így az 1937-es fizikai Nobel-díjat megosztva C.J.Davisson és G.P.Thomson kapta.

Tudománytörténeti érdekesség, hogy G.P.Thomson aki az „elektron hullám” kísérleti kimutatásáért nyerte el a legnagyobb tudományos díjat, annak a J.J.Thomsonnak a fia, aki 31 évvel előtte az „elektron mint elemi részecske” kimutatásáért kapta meg ugyanezt a tudományos elismerést.

Joggal merül fel a kérdés: valójában mi is az, ami „hullámzik”?!
Erre a nyilvánvaló kérdésre azonban még nem volt válasz! De Broglie szavait idézve:

”A hullám-részecske dualitás helyes értelmezését azonban nem láttam világosan és továbbra is foglalkoztatott a kérdés.” Tegyük hozzá: ebbéli gondjaiban nem volt egyedül!

A 24 éves(!) Werner Heisenberget (aki ekkor Göttingenben magántanárként dolgozott) nagyon zavarta az, hogy a Bohr-féle atommodell túl szemléletes. Olyan sajátosságokat tulajdonít az elektronnak, amit közvetlenül még soha senki nem mért meg (pl.:a pontszerű elektron az atomban kering). Ezért kigondolt egy olyan számítási módszert, amely kiindulásul csak a hidrogén atom megmérhető adatait tartalmazta (a Balmer-féle frekvenciákat) Ezeket az adatokat táblázatokba rendezte és a táblázatokkal fura, általa definiált műveleteket kellett végezni. Mint utóbb kiderült ezek mátrix műveletek voltak. Megszületett az ún. "mátrixmechanika" (1925), egy eredeti módszer, amit senki sem értett meg igazán!

Amúgy W.Heisenberg a XX.századi fizika egyik nagy egyénisége. A Kvantummechanika egyik kidolgozója aki a szilárdtestfizikában (ferromágnesség elmélete) és az atommagfizikában (atommagmodellek) is sokat és maradandót alkotott. Később még találkozunk a nevével! A fizikai Nobel-díjat 1933-ban kapta meg.

1.1. Hullámmechanika

1.1.1. A SCHRÖDINGER egyenlet és a hullámfüggvény

szabadon mozgó tömegpont → $\bar{p}, E$

Síkhullám: $\bar{k}$, ω

$$E = \hbar\omega$$
$$\bar{p} = \hbar\bar{k} \qquad \text{(de Broglie)}$$

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

$$\begin{cases} \dfrac{p^2}{2m} + V_0 = E & \text{(mechanika)} \quad V_0 = \text{állandó} \\ \dfrac{\hbar^2 k^2}{2m} + V_0 = \hbar\omega & \text{(diszperziós reláció)} \end{cases}$$

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

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

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

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

Tehát

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

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

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

1.1. Hullámmechanika

1.1.1 A Schrödinger egyenlet és a hullámfüggvény

Az anekdota szerint a kvantummechanika axiomatikus kiépítésének a története a Zürichi Egyetem egyik elméleti fizika szemináriumán elhangzott, ártatlannak tűnő kérdéssel vette kezdetét. Ebben az időben (1925, 26) Peter Debye a zürichi Műszaki Főiskola tanára volt. Rendszeresen szervezett közös szemináriumokat az Egyetem fizikusaival. Ő javasolta (az ott elméleti fizikát tanító, akkor 39 éves) Ervin Schrödingernek, hogy egy ilyen közös szeminárium keretében ismertesse Louis de Broglie (1924) doktori dolgozatát. Az a feltételezés, hogy az elektron valamiféle ”hullám jellegű tulajdonságokkal” is rendelkezik nem kis meglepetést okozott a kor fizikusainak. A fiatalság (mint mindig) most is nagy érdeklődéssel fordult az új és igencsak ”furcsa” elmélet felé. Az ominózus szeminárium végén Pete Debye feltette a kérdést az előadónak:

”Ha van hullám, akkor hullámegyenletnek is lennie kell! Milyen ez az egyenlet?”

Természetesen az azonnali válasz elmaradt, hiszen de Broglie publikált dolgozatában erről nem esett szó. Schrödingert azonban elgondolkoztatta a feltett kérdés és maga próbált válaszolni rá. Pár hét múlva megszületett az ún: ”Schrödinger egyenlet”, amely a (nemrelativisztikus) kvantummechanika egyik axiómája lett (A mi besorolásunk szerint ez az 5.axióma).

Az *Annalen der Physik* (1926 január, február, május és juniusi számában) összesen négy cikk jelent meg (gyors egymásutánjában) amely a témával foglalkozott. Schrödinger először egy relativisztikus egyenletet (a későbbi ún. Klein–Gordon egyenletet) konstruálta meg, de ez nem adta meg jól a ”próbakőnek” tekintett Hidrogén atom spektrumát. Végül is ennek egy nemrelativisztikus közelítése vezetett a helyes eredményre.

A későbbiekben ezt az egyenletet nevezték el Schrödinger egyenletnek és megalkotóját az 1933. évi fizikai Nobel-díjjal tüntették ki.

Mivel a Schrödiger egyenlet a kvantummechanika egyik alapfeltevésének (azaz axiómájának) bizonyult, így az nem vezethető le más ismert törvényeinkből! Intuitiv lépések nyomán kimondott hipotézisről (feltételezésről) van szó, amelyet majd a gyakorlat ”bizonyít” vagy cáfol. Túl hosszú lenne, hogy tudománytörténeti hitelességgel kövessük az egyenlet megszületésének minden részletét. Erre nincs is szükség, mert ma már számtalan visszaemlékezés és önélatrajzi írás jelent meg, amely a ”fizika újkori” forradalmával, a modern fizika megszületésével foglalkozik.

Mi egy olyan gondoltmenetet mutatunk be, amely lényegét tekintve hasonló ahhoz, mint amit Schrödinger követhetett. Az előtanulmányaink hiányos volta miatt azonban ez sokkal egyszerűbb, mint az eredeti volt (lehetett).

Tudjuk, hogy egy szabadon mozgó tömegponthoz (a továbbiakban legtöbbször elektront fogunk mondani) egy síkhullám rendelhető a de-Broglie által definiált módon.

A szabadon mozgó, tömegpontnak képzelt elektron energiája és impulzusa közötti kapcsolatot a newtoni mechanika határozza meg (energia megmaradás tétele). Ez az összefüggés egyértelműen megadja az elektronhoz rendelt síkhullám frekvenciája és hullámszáma közötti kapcsolatot is (ennek neve diszperziós összefüggés).

Első lépésként tehát egy olyan differenciálegyenletet kell keresni, amelynek a megoldása olyan síkhullám, amely kielégíti a diszperziós összefüggést. Ez egyszerűen hely és idő szerinti deriválásokkal megkapható.

(10) Új matematikai szimbólumot vezetünk be:

$$\frac{\partial^2 \Psi_0}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi_0}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Psi_0}{\partial z^2} \equiv \underbrace{\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)}_{\text{Neve: LAPLACE operátor}} \cdot \Psi_0 \equiv \Delta \cdot \Psi_0$$

(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 $\quad V_0 \rightarrow V(\bar{r},t)$, $\quad \Psi_0 \rightarrow \Psi(\bar{r},t)$

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

Időfüggő SCHRÖDINGER egyenlet

Vezessünk be egy új matematikai szimbólumot

$$\underbrace{\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \cdot + V(\bar{r},t)\right]}_{\text{matematikai műveletek (operációk) sorozata} \equiv \text{operátor } (\hat{H})} \Psi \equiv \hat{H} \cdot \Psi$$

↓

HAMILTON OPERÁTOR

Így:

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

Időfüggő Schrödinger egyenlet operátor szimbólumot használva

Kvantummechanika — V. posztulátuma

Parciális differenciál egyenlet → közönséges differenciál egyenlet(ek) (SZEPARÁLÁS)

$\left\{ \begin{array}{l} V(\bar{r},t) \rightarrow V(\bar{r}) \quad \text{konzervatív rendszer } E = \text{állandó} \\ \Psi(\bar{r},t) \rightarrow \psi(\bar{r}) \cdot \theta(t) \quad \text{(szeparálható alakba írható)} \end{array} \right.$

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

$$\underbrace{\frac{\hat{H}\psi}{\psi}}_{(\bar{r})} = \underbrace{-\frac{\hbar}{j} \frac{\dot{\theta}}{\theta}}_{(t)} \qquad \forall (\bar{r},t)$$

Az így kapott másodrendű (négyváltozós) parciális differenciálegyenlet még csak a szabadon mozgó elektronhoz rendelt sikkhullámot adja meg.

Axióma rangjára akkor emelkedett ez az egyenlet, amikor Schrödinger feltételezte azt, hogy ugyanez az egyenlet érvényes tetszőleges mozgás esetén is. Ekkor a potenciális energia a hely és az idő tetszőleges függvénye lehet. Az egyenlet megoldása pedig komplex alakban felírható helytől és időtől függő valamilyen $\Psi(\vec{r},t)$ függvény lesz. Ennek neve: "állapotfüggvény" vagy "hullámfüggvény". Megszületett az ún. „időfüggő Schrödinger egyenlet",.egy egyenlet, amit minden fizikus rögtön használni tudott.

De a kérdés továbbra is válasz nélkül maradt: "Mi az, ami hullámzik?"!

Az időfüggő Schrödinger egyenlet formálisan igen egyszerű alakba irható fel, ha bevezetjük az ún. "operátorok" fogalmát. Operátoroknak nevezzük jól definiált matematikai műveletek együttesét. Ha egy operátor egy függvényre hat, akkor ez azt jelenti, hogy a függvényen végre kell hajtani azokat a műveleteket, amelyeket az illető operátor előír. Az operátor tehát egy függvényt egy másik függvénybe transzformál
(egy függvényhez egy másik függvényt rendel.)
Az időfüggetlen Schrödinger egyenletben szereplő operátort Hamilton operátornak nevezik.

A parciális differenciálegyenletek megoldása általában igen bonyolult matematikai feladat. Csökkennek a nehézségek, ha a többváltozós differenciálegyenlet egyváltozós ún. "közönséges" differenciálegyenletekké alakítható át. Ezt a műveletet szeparálásnak (a változók szétválasztásának nevezzük.). A keresett többváltozós függvény ekkor egyváltozós függvények szorzataként írható fel.

Ha az elektron potenciális energiája nem függ az időtől, akkor az elektron összenergiája állandó, azaz konzervatív rendszerről van szó. Ebben az esetben (tetszőleges helyfüggő potenciális energia esetén is) a megoldás felírható egy (csak a helykoordinátáktól függő) háromváltozós és egy (csak az időtől függő) egyváltozós függvény szorzataként. Azaz a helykoordináták és az időparaméter szeparálhatók.

(11)

Bizonyítás:

$$u(x+a) = \sum_n e^{-jk([x+a]-na)} \chi([x+a]-na) =$$

$$= \sum_{\downarrow [n-1]} e^{-jk(x-[n-1]a)} \chi(x-[n-1]a) = u(x)$$

A normálási feltétel (1. 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:

$\hat{H}\psi = \varepsilon\psi \longrightarrow \varepsilon = \langle \psi | \hat{H} \psi \rangle$ (ψ-t kellene tudni)

közelítő megoldás $\varepsilon \approx \langle \tilde{\psi} | \hat{H} \tilde{\psi} \rangle$ (IV. axióma)

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

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

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

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

Tehát:

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

ez a skalár szorzat csak $(n-n')$-től függ.

↓

egyszerűsítő feltételezések

A szeparálás műveletét a későbbiekben sokat fogjuk használni. Főbb lépései a következők:

1. A megoldásfüggvényt a feltételezett szeparált alakba írjuk.
2. Végrehajtjuk a differenciálegyenletben előírt deriválási műveleteket.
3. A diffegyenlet mindkét oldalát elosztjuk a szeparált alakban felírt megoldásfüggvénnyel
4. Az egyenletet úgy rendezzük, hogy az egyenlet egyik oldalán csak az egyik változótól függő kifejezések szerepeljenek.
5. Ezután mind a két oldalt ugyanazzal az állandóval tesszük egyenlővé.

A közölt módszerrel az időfüggő Schrödinger egyenlet szeparálható. Az időfüggő függvényre vonatkozó közönséges diffegyenlet egyszerűen megoldható. A helyfüggő függvényre az ún. időfüggetlen Schrödinger egyenlet adódik. Ezt megoldani csak a potenciális energia ismeretében lehet. A szeparálás során bevezetett „E" ún. szeparálási állandó fizikai jelentését egy újabb axióma (a 3.axióma) alapján tudjuk majd megmondani. Fogadjuk most el mintegy kijelentésként, hogy az E a rendszer összenergiáját adja.

Hátra van még annak a kiderítése, hogy mi a hullámfüggvény fizikai jelentése, azaz "Mi az, ami hullámzik!?"

Fizikai jelentése csak valós mennyiségnek lehet. Mivel a $\Psi(\vec{r},t)$ állapotfüggvény komplex, ezért valami módon egy $P(\vec{r},t)$ valós függvényt kell hozzárendelni. Mint miden fizikai tartalommal rendelkező **r** helyvektortól függő térfüggvénynek, így ennek a függvénynek is ki kell elégítenie néhány általános feltételt. Ezek alapvető fizikai meggondolásokból adódnak. Ezek szerint tehát $P(\vec{r},t)$ függvénynek egyértékűnek, folytonosnak és végesnek kell lennie. Belátható, hogy a $\Psi(\vec{r},t)$ állapotfüggvény is ugyanezen tulajdonságokkal kell, hogy rendelkezzen. Ezeket a tulajdonságokat (feltételeket) regularitási feltételeknek (regula = szabály) nevezzük. A későbbiekben mindig így fogunk rá hivatkozni. Mint az majd kiderül erre mindig sor kerül, valahányszor megoldjuk a Schrödinger egyenletet. A fontossága miatt célszerű ismét összefoglalni:

A $\Psi(\vec{r},t)$ függvény reguláris, ha: 1. egyértékű,
2. folytonos,
3. véges (ez utóbbit később még kiegészítjük).

Már csak az a kérdés, hogy mi módon kell a komplex állapotfüggvény ismeretében a valós P(**r**,t) függvényt megadni és mi lesz ennek a fizikai jelentése?

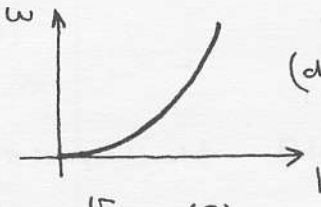
(12) Próbálkozások:

Pl: szabadon mozgó részecske ⟶ síkhullám (de Broglie)

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

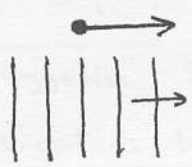
$V_0 \equiv 0$ választással

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



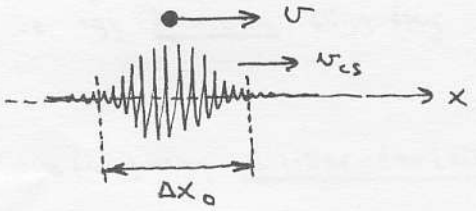
(diszperziós reláció)

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



} FURCSA !

szabadon mozgó részecske ⟶ hullámcsomag (lokalizált)



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

(EZ TALÁN ÉRTELMEZHETŐ)

↓

(DE) diszperzió is van

t időpillanatban Δx_0

$t+T_2$ időpillanatban $2\cdot\Delta x_0$

} a hullámcsomag SZÉTFOLYIK

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

Pl: $m = 1$ gr, $\Delta x_0 = 1$ mm } $T_2 = 10^{19}$ év — EZ JÓ (makroszkópikus részecske)

$m = 9\cdot10^{-31}$ kg, $\Delta x_0 = 10^{-10}$ m } $T_2 = 10^{-17}$ sec — EZ ROSSZ ! (az elektron nem stabil)

↓

El 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.

(ANYAGHULLÁM NINCSEN!)

Először maga Schrödinger is arra gondolt, hogy létezik valamiféle "anyagi közeg„ (az elektron anyaga), amelyben a létrejövő és tovahaladó jól lokalizált gerjesztést, mint egy elektront érzékeljük. Azonban ez az amúgy tetszetősnek tűnő elképzelés tarthatatlannak bizonyult. Ennek oka a következő:

Mint azt a bevezetésben láttuk minden lokalizált gerjesztés hullámcsomagként is felfogható, azaz elemi síkhullámok szuperpozíciójaként előállítható. Általános esetben ezen elemi síkhullámok fázissebessége függ a síkhullám frekvenciájától, így a kezdetben jól lokalizált hullámcsomag ”szétfolyik". Az általunk végzett számításokban ez azért nem jelent meg, mert egy igen keskeny spektrumot vizsgáltunk, amelyen belül (közelítésként) minden összetevő elemi síkhullám fázissebességét ugyanakkorának vettük azaz az „ $\omega(k)$ -t linearizáltuk”

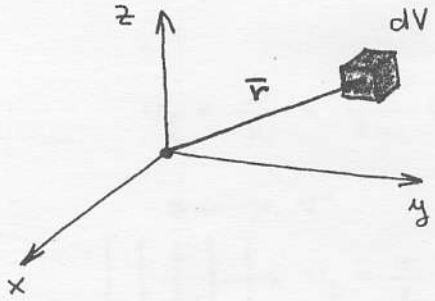
Elektron esetén a hullámcsomag szélessége (azaz az elektron „mérete”) kb. 10^{-17} secundum alatt megduplázódik. Azaz, ha a Schrödinger-féle elképzelés „igaz” volna, akkor az elektron nem lenne stabil részecske.

13

MAX BORN (1926) + (Jordan, Bohr)

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

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



$|\Psi(\bar{r},t)|^2 \, dV$ — megtalálási valószínűség !

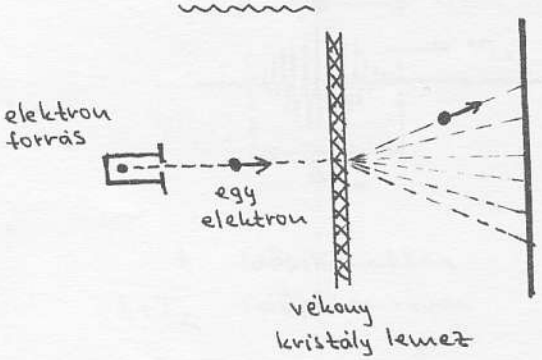
konzervatív rendszer esetén

$V(\bar{r})$

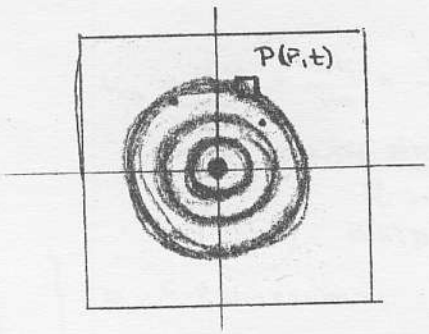
$$|\Psi(\bar{r},t)|^2 = |\psi(\bar{r})|^2 \equiv \psi(\bar{r})^* \psi(\bar{r})$$

↑ komplex konjugált

kísérleti ellenőrzés :



(egyszerre csak egyetlen elektron van a rendszerben!)



becsapódási pontok

↓

"INTERFERENCIA" gyűrűk

Végül is a hullámfüggvény fizikai értelmezésére vonatkozó, mindent kielégítő megoldást Max Born találta meg (1926). Javaslata rendkívül szokatlan, a klasszikus fizikai szemléletünkkel és ismeretelméleti elképzelésünkkel nehezen összeegyeztetehető volt. Nem véletlen, hogy a kvantummechanika „nagy öregjei" közül jó néhányan nem tudták elfogadni és azóta is sok fejtörést okoz számunkra. Mára már a sok kísérleti tapasztalat egyértelműen igazolta a borni hipotézis helyességét és ennek következtében beépült a fizikusi paradigmarendszerünkbe. Mindez megváltoztatta a világ megismerhetőségére vonatkozó fizikai elképzeléseinket. Ugyanakkor sokszor filozófiai félremagyarázások és hamis következtetések kiindulópontjává is vált.

Legyen a $P(\vec{r},t)=\left|\Psi(\vec{r},t)\right|^2$ az állapotfüggvény abszolút értékének a négyzete!.

$P(\vec{r},t)dV$ annak a valószínűségét adja, hogy a pontszerű elektron az **r** helyvektor *dV* környezetében van (azaz ott megtalálható).

Tekintsük most ezt az intuitív kijelentést egy axióma jellegű állításnak, azaz minden különösebb indoklás nélkül fogadjuk el! Kísérleti eredmények sokasága válik ezzel értelmezhetővé, amely igazolja majd feltevésünk helyességét. A következőkben kellő általánosítással a 4.axiomához jutunk el (induktív szemlélet!). Ugyanakkor látni fogjuk, hogy a „Kvantummechanika axiomarendszerének" az ismeretében a hullámfüggvény Born-féle értelmezése a 4. axiómából egzakt matematikával levezethető (deduktív szemlélet!).

Az előzőekben említett hullámcsomag szétfolyás tehát a megtalálási valószínűség időbeli szétterülését jelenti, ami pedig fizikailag igen szemléletes és érthető. Ezzel egy csapásra megszűnt a "hullám-részecske kettősség„ feloldhatatlannak tűnő „misztikus" önellentmondása. Pontszerű részecskék vannak és a kvantummechanika ezen pontszerű részecskék megtalálási valószínűségét határozza meg az időfüggő Schrödinger egyenlet segítségével. Ezt a fizikai interpretációt támasztja alá az a szórás-kísérlet is, amikor vékony fémfólián egyenként elektronokat lövünk át. A fólia mögött elhelyezett felfogó ernyőn lehet a szóródó elektronok becsapódását detektálni. A kezdetben szabálytalanul elhelyezkedő becsapódási pontok nagyszámú egyedi elektron-becsapódás után szabályos interferencia gyűrűkké olvadnak össze. Az adott helyre beérkező elektronok száma az ottani megtalálási valószínűséggel lesz arányos.

Max Born (1882-1970) széleskörű matematikai ismeretekkel rendelkező fizikus volt.
A „matematikusok Mekkájában", Göttingenben olyan nagyhírű „próféták" előadásait hallgatta, mint: Felix Klein, David Hilbert és Hermann Minkowski. A doktori munkáját a neves elméleti csillagász K. Schwarzschild vezetése alatt írta. Valószínűleg ennek a matematikai tudásának köszönhette, hogy a „hullámfüggvény valószínűségi értelmezése" éppen az ö ötlete volt.

Mindezekkel kapcsolatban a következőket írja:

Schrödinger „az elektront nem részecskének, hanem az általa felírt hullámfüggvény $|\psi|^2$ *négyzetével meghatározott sűrűségeloszlásnak tekintette….Én azonban naponta láttam, hogy Franck atomi és molekuláris ütközési kísérleteiben milyen termékeny szerepet játszik a részecske fogalom és meg voltam győződve, hogy a részecskéket nem lehet egyszerűen kiebrudalni. Módot kell találni a részecskék és a hullámok összebékítésére. Az összekötő láncszemet én a vlószínűség fogalmában láttam.…A hipotézist sikerült igazolni az ütközési folyamatoknak hullámok szóródásával való leírásával és más eljárásokkal.…A* ψ *függvény általában adott statisztikus értelmezése csupán az első lépés volt az atomfizikában a részecskék és a hullámok közötti kapcsolat megértésében.…Noha ezeket az elgondolásokat a fizikusok döntő többsége elfogadta, mindig volt néhány kivétel, közöttük olyan nagy nevek, mint Planck, Einstein, de Broglie és Schrődinger. Ez a magyarázata, hogy miért tartott huszonnyolc esztendeig amíg munkásságomért megkaptam a Nobel-díjat."*

Az 1954-es fizikai Nobel-díj átvételekor M.Born 72 éves(!) volt, az inoklásban ez állt: „alapvető kvantummechanikai munkásságáért, különös tekintettel a hullámfüggvény statisztikus interpretációjára."
Planck akkor már 7 éve halott volt. De Broglie 62, Einstein 75, Schrödinger 67 éves volt.
„Valamely tudományos igazság nem oly módon szokott érvényre jutni, hogy ellenfeleit meggyőzik és azok meggyőzöttnek jelentik ki magukat, hanem inkább úgy, hogy az ellenfelek lassanként kihalnak és a következő generáció kezdetektől fogva ezt az igazságot ismeri meg." E kijelentés igazsága szépen igazolódott a kvantummechanika fejlődése során, a hatáskvantum bevezetésétől egészen a borni interpretációig. Az idézett sorok írója Max Planck volt.

A felsorolt „nagy nevek" is mutatják, hogy a kvantummechanika alapjában valószínűségi szemlélete nem tartozik a könnyen elfogadható fizikai interpretációk közé. Einstein közkedvelté vált mondását szabadon idézve:

nehezen elfogadható, hogy az „Isten kockajátékos”. M. Born kedvelte a filozófiát és megfelelő alapképzettséget is szerzett benne. Átérezte hipotézisének természet-filozófiai vonatkozásait is. Nem véletlenül írta a következőket:

.. „*Még ha figyelmen kívül hagyjuk is a filozófiai szempontokat, a fizikában a sugárzás korpuszkuláris és hullámtulajdonságai közötti ellentmondás a statisztikus nézőpont nélkül nem oldható fel. ...Noha az új elmélet kísérletileg jól megalapozottnak látszik, mégis felvethető a kérdés, vajon az elmélet nem tehető-e ismét determinisztikussá a jövőben, további kiterjesztéssel vagy finomítással? Erre ezt válaszolhatjuk: egzakt matematikai számításokkal bebizonyítható, hogy a kvantummechanika ma elfogadott formalizmusa nem tesz lehetségessé ilyen kiegészítést. Ha tehát meg akarjuk őrizni a reményt, hogy a determináció egy napon visszatér, úgy a mai elméletet alapvetően tévesnek kell minősítenünk. Vagyis az elmélet egyes állításait kísérletekkel kellene megcáfolni. A deterministának tehát nem tiltakoznia, hanem kísérleteznie kell, ha meg akarja téríteni a statisztikus elmélet híveit.*”

Tudománytörténeti érdekesség, hogy a „kvantummechanka” elnevezést először Born használta egy 1924-ben megjelent dolgozatában. Személyében tehát a „keresztapát” is tisztelhetjük.

1.1.2. A hullámfüggvény matematikai tulajdonságai

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

$\hat{H}(c\psi) = E(c\cdot\psi)$ $\quad \equiv\varphi \quad \equiv\varphi$

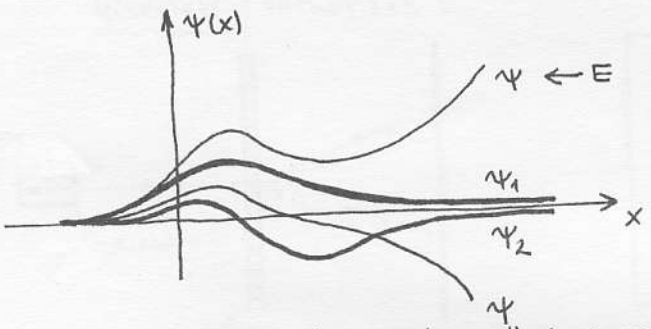
$\rightarrow \int |\psi|^2 dV = \int |\varphi|^2 dV = 1 \rightarrow \boxed{|c|=1}$

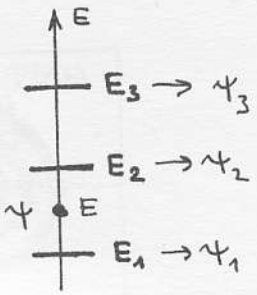
Gondolatmenet: 1 dim (elméletes) $\rightarrow$ általánosítás $\rightarrow$ 3 dim. (reális jelenségek)

(Modern mikroelektronikai eszközök pl: kvantum völgyek)

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

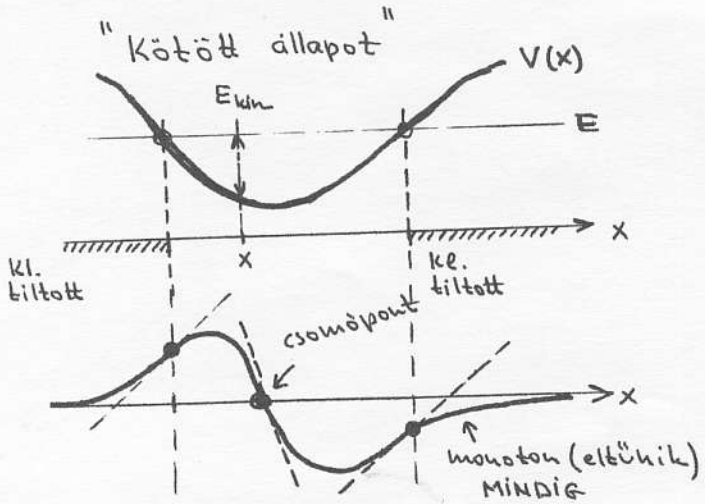
$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi'' + V(x)\psi = E\psi$ + REGULARITÁS





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

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



a csomópontok száma változik

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

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

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

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

$V(x)=E \quad \psi''=0$

$\psi=0 \quad \psi''=0$ $\Big\}$ inflexió

1.1.2. A hullámfüggvény matematikai tulajdonságai

Az időfüggetlen Schrödinger egyenlet egy lineáris (differenciál) egyenlet. Azaz, ha a „ψ” állapotfüggvény megoldása az egyenletnek, akkor a „$c \cdot \psi$” szintén megoldás, ahol „c” egy komplex szám. A hullámfüggvény fizikai jelentéséből következik, hogy a $|\psi|^2$ (pszi abszolút értéke négyzetének) az egész térre vett integráljának egynek kell lennie. Az ilyen függvényeket "négyzetesen integrálhatónak„ hívjuk. Ez már (egy egységnyi abszolút értékű komplex szám erejéig) meghatározza a „c” komplex szám értékét.

Az időfüggetlen Schrödinger egyenlet egy ún. "sajátérték egyenlet". A Hamilton operátor ugyanis a ψ állapotfüggvényt önmaga állandószorosába, azaz $E \cdot \psi$ -be kell, hogy transzformálja. A lineáris (vektor) tereknél találkozhattunk már hasonló feladattal. Az ott használatos elnevezések analógiájára a ψ állapotfüggvényt "sajátfüggvénynek" , az E-t "sajátértéknek " hívjuk.

Az alábbiakban megvizsgáljuk $\hat{H}\psi = E \cdot \psi$ differenciálegyenletnek az általános matematikai tulajdonságait. Az egyenletben két ismeretlen mennyiség van, ezek a ψ függvény és az E állandó.
A megoldás menete a következő.

1.) Tetszőleges E (valós) esetére meghatározzuk a lehetséges ψ (matematikai) megoldásokat.

2.) A kapott matematikai megoldások közül kiválasztjuk azokat, amilyek eleget tesznek az előzőkben definiált regularitási feltételeknek. Ezeket a reguláris megoldásokat fizikai megoldásoknak is mondhatjuk, hiszen csak a reguláris ψ függvényekhez rendelhetünk fizikai állapotokat. Bizonyos esetekben ezen megoldásfüggvényekhez tartozó E sajátértékek megszámlálható halmazt alkotnak. Azaz az energiaszintek kvantáltak. Az ilyen állapotokat kötött állapotnak nevezzük.
A kötött állapotokhoz tartozó állapotfüggvények matematikai jellegzetességeit egy „egydimenziós világ” esetben vizsgáljuk meg. Ez elég egyszerű ahhoz, hogy már az elemi analízis módszereivel boldoguljunk, ugyanakkor az eredményeink kellő általánosítással a „reális, háromdimenziós” világra is átvihetők.

A klasszikus newtoni mechanika szerint egy (az „x” tengely mentén mozgó) tömegpont csak olyan tartományban mozoghat, ahol a potenciális energiája kisebb, mint az E összenergiája. Ezért azt a tartományt, ahol a részecske potenciális energiája nagyobb, mint az összenergiája, "klasszikusan tiltott" tartománynak nevezzük. "Visszafordulási pontnak" hívjuk azokat a helyeket, ahol a potenciális energia éppen egyenlő az E összenergiával. Egy részecske kötött állapotban van, ha a klasszikus mozgási tartománya véges nagyságú.

Ennek legegyszerűbb esetét fogjuk tárgyalni..

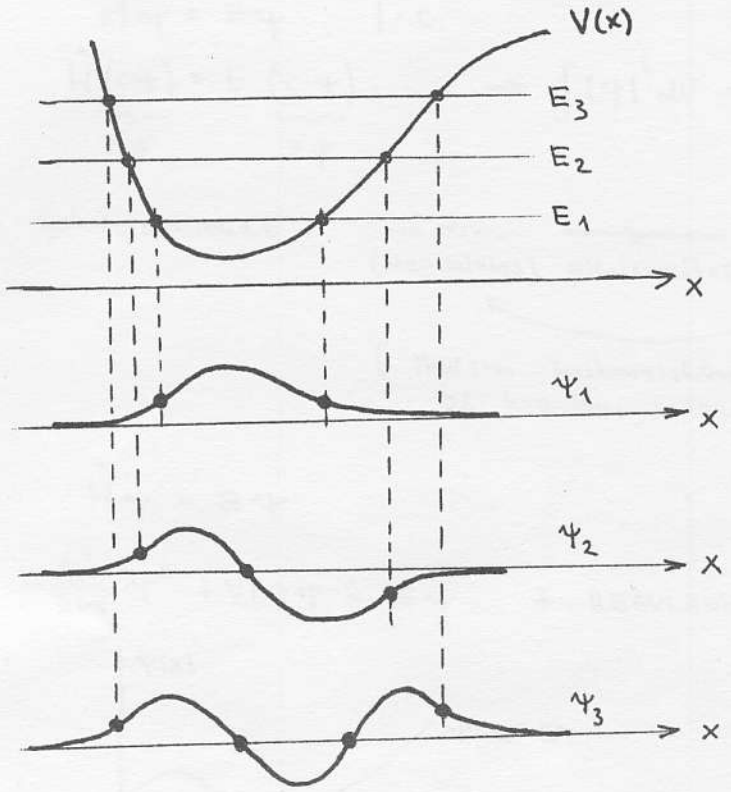
Ebben az egydimenziós világban a kötött állapot ψ állapotfüggvénye valós függvény.

A valós állapofüggvény második deriváltjának az előjele ($\psi'' > 0, \psi'' < 0$) meghatározza a függvény alakját (az „x” tengely felöl nézve konvex vagy konkáv).

A regularitási feltételek miatt a hullámfüggvénynek a végtelenben zérushoz kell tartania, hiszen csak így lehet az állapotfüggvény négyzetének az integrálja egységnyi. Ez pedig a valószínűségi értelmezéshez elengedhetetlen.

A vizsgálat eredménye szerint a hullámfüggvény a klasszikusan tiltott tartományban monoton eltűnő, míg a klasszikus mozgás tartományában oszcillál az „x” (helykoordináta) tengely körül. Inflexiója van a függvénynek a visszafordulási pontokban és ott, ahol a függvény értéke zérus. Minél magasabb energiaszinthez tartozó állapotfüggvényt tekintünk, annál több oszcillációval rendelkezik.

Kötött állapotok esetén általában kapjuk, hogy:



"egy púp"

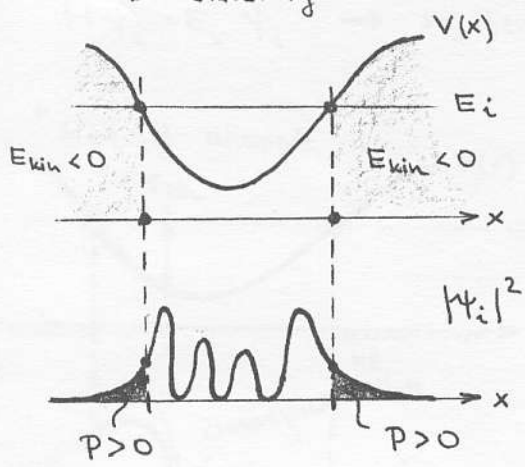
"két púp"

"három púp"

↓ stb ↓ stb

(ψ_i pontos meghatározása a Schrödinger egyenlet megoldásával történik → analitikus vagy numerikus módszerekkel)

Érdekesség:



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

↓

A "tömegpont szemlélet" nem jó!

A kapott eredmények alapján megmondható, hogy az egyes energiaszintekhez milyen hullámfüggvény tartozik („egypúpú”, „kétpúpú” stb…)

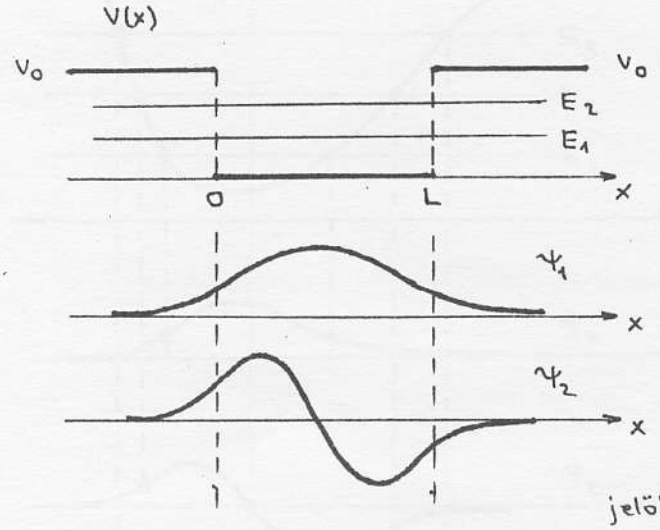
Mivel a klasszikusan tiltott tartományban a hullámfüggvény csak a végtelenben tűnik el így a megtalálási valószínűség ebben a tartományban nem lesz nulla. Arra a meglepő eredményre juthatunk, hogy a kvantummechanika szerint a részecske véges valószínűséggel tartózkodhat abban a térrészben is, ahol a mozgási energiája negatív(!). Ahhoz, hogy ennek az állításnak reális fizikai tartalmat tulajdoníthassunk, szakítanunk kell a hagyományos tömegpont modellel.

Gyökeresen új szemléletet kell kialakítanunk magunkban!

EZ PEDIG A KVANTUMMECHANIKA SZEMLÉLETE.

1.1.3. Egyszerű példák kötött állapotokra

1.1.3.1. Potenciál völgy (Vázlatos tárgyalás)



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

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

+ REGULARITÁS

↓ (Matematika)

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

jelölések:

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

$$-\frac{2m}{\hbar^2}E \equiv -k^2$$

$x<0$ tartományban:

$$\psi'' = +\alpha^2\psi \longrightarrow \psi(x) = A_0 e^{\alpha x} + B_0 e^{-\alpha x}$$

$$\text{REGULARITÁS} \longrightarrow \lim_{x\to-\infty}\psi(x) = 0$$

$$\Rightarrow \psi(x) = A_0 e^{\alpha x}$$

$x>L$ tartományban:

$$\psi'' = +\alpha^2\psi \longrightarrow \psi(x) = A_0 e^{\alpha x} + B_0 e^{-\alpha x}$$

$$\text{REGULARITÁS} \longrightarrow \lim_{x\to\infty}\psi(x) = 0$$

$$\Rightarrow \psi(x) = B_0 e^{-\alpha x}$$

$0 \le x \le L$ tartományban:

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

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

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

↓

$x=0$ pontban:

$$A_0 = B$$

$$\alpha A_0 = k\cdot A$$

$x=L$ pontban:

$$B_0 e^{-\alpha L} = A\sin kL + B\cos kL$$

$$-\alpha B_0 e^{-\alpha L} = kA\cos kL - kB\sin kL$$

$\Rightarrow \alpha \Rightarrow E$ számítható [Feladat]

Megjegyzés: 1 dimenzióban mindig van legalább egy kötött állapot

GYAKORLATI ALKALMAZÁS: "kvantum völgyek" (Szilárdtestfizika)

1.1.3. Egyszerű példák kötött állapotokra

1.1.3.1. Az egydimenziós potenciálvölgy.

Az ábrából látható, hogy kötött állapotról akkor beszélhetünk, ha a részecske energiája pozitív, és nagysága kisebb, mint a potenciálvölgy (potenciálgödör) magassága. A klasszikus mozgás tartománya az L hosszúságú szakasz. Az általános ismereteink alapján fel tudjuk rajzolni a hullámfüggvények várható alakját. Pontos matematikai kifejezésekhez a Schrödinger egyenlet megoldásával juthatunk.
Ennek menete a következő:

1. A potenciális energia szakaszonként van megadva (V_O és zérus) ezért a differenciálegyenlet megoldását is szakaszonként keressük meg.
2. Tetszőleges, pozitív, de V_O-nál kisebb E energia esetén az általános matematikai megoldások egyszerűen megkaphatók. Ezek exponenciális, szinusz vagy koszinusz függvények.
3. A regularitási feltételek teljesítésével a lehetséges matematikai megoldások közül kiválasztjuk a fizikai megoldásokat.

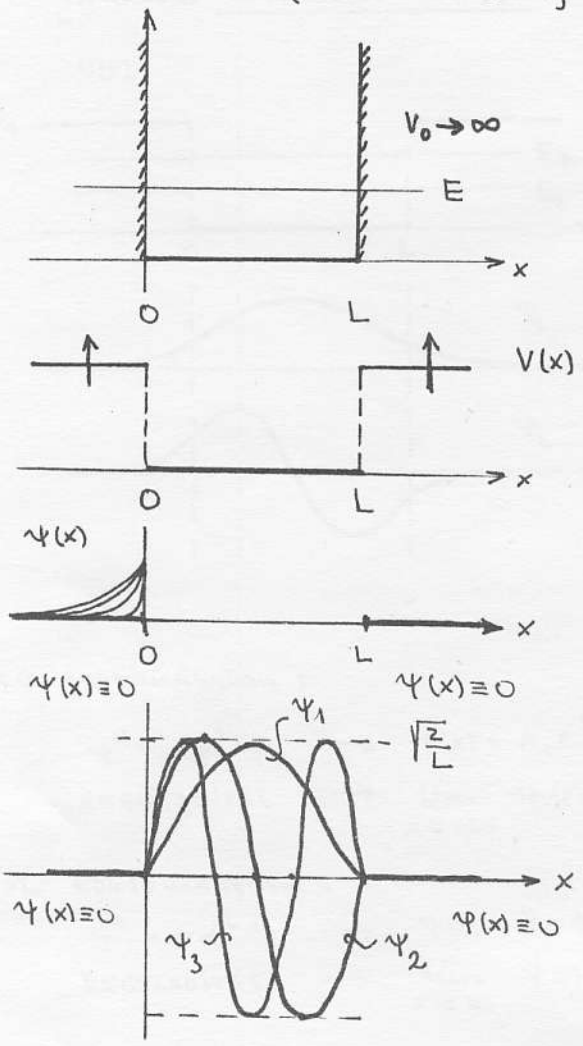
Jelen esetben a regularitási feltételek a következők:

-a hullámfüggvénynek a végtelenben el kell tűnnie,
-a potenciálvölgy határpontjaiban (0 és L) a hullámfüggvénynek és
a deriváltjának is folytonosnak kell lennie.

Ezeknek a feltételeknek csak bizonyos E_1, E_2, E_3, ….stb.... energiákhoz tartozó hullámfüggvények tesznek eleget.
Ezek elemi matematikai (grafikus) eljárással egyszerűen meghatározhatók.
A V_0 nagyságától függően mindig véges számú kötött állapotot kapunk. És (ebben az egy dimenziós esetben) bármilyen alacsony is legyen a potenciálvölgy mélysége, egy kötött állapot mindig lesz.

1.1.3.2. Potenciál doboz

(Matematikailag egyszerűen megoldható)



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

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

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

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

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

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

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

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

Regularitási feltétel: $\psi(x)$ folytonos

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

$\psi(0) = 0 + B = 0$ azaz $B \equiv 0$

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

$n = 0 \pm 1 \pm 2 \pm \ldots$ (matematika)

$$k = \frac{\pi}{L}n \quad \to \quad E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}n^2 \qquad (n = 1, 2, 3, \ldots)$$

Fizika

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

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

1.1.3.2. A potenciáldoboz

Az egydimenziós potenciálvölgyben mozgó elektron kvantummechanikai tárgyalása elég egyszerű feladatnak bizonyult. Tovább egyszerűsödik a matematikai munka, ha az ún. (egy dimenziós) "potenciáldoboz"-ba bezárt részecskét tárgyaljuk.

A potenciáldoboz a potenciálvölgyből kapható a $V_0 \to \infty$ határátmenettel.

Mivel a klasszikusan tiltott tartományban a potenciális energia végtelen nagy, ezért itt az állapotfüggvénynek azonosan nullának kell lennie. Reguláris megoldást ebben az esetben csak a (0,L) tartományban kell keresnünk. Látható, hogy ebben a térrészben a potenciális energia zérus. A Schrődinger egyenlet általános matematikai megoldása elemi módon megkapható: $\psi(x) = A \cdot \sin(kx) + B \cdot \cos(xk)$. A regularítási feltételek szerint a tartomány határain a hullámfüggvénynek folytonosnak kell lennie. A deriváltak folytonosságát most nem kell megkövetelni, mert végtelen magas potenciálvölgyről van szó. Ennek megfelelően tehát a hullámfüggvény a 0 és L pontokban zérus kell, hogy legyen.

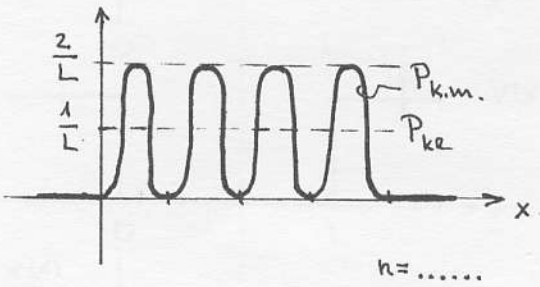
Végeredményül azt kapjuk, fizikai megoldás csak olyan szinusz függvény lehet, amely esetén a potenciáldoboz L hossza a ψ állapotfüggvény fél–hullámhosszának egész számú többszöröse. (Hasonlóan a két végén rögzített húr lehetséges rezgési módusaihoz). A reguláris (fizikai) megoldásfüggvényekhez tartozó energiaszintekre egy matematikai kifejezés adódik: $E = E_0 \cdot n^2$. Eszerint tehát a diszkrét energiaszintek értékei egy egész szám (n = 1, 2, 3,...) négyzetével arányosak. Azaz a lehetséges energiaszintek kvantálási szabálya egy *E(n)* zárt matematikai képlettel fejezhető ki. Általában is igaz, hogy vannak olyan fizikai feladatok, amelyek esetén a kvantálási törvény zárt matematikai kifejezés alakjában megfogalmazható. Az itt megjelenő egész számot (ill. számokat) kvantumszámoknak nevezzük. Mindig meg kell adni a kvantumszámok lehetséges értékeit is, mert ezek mindig az illető fizikai feladattól függnek.

A kapott megoldás értelmezése:

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

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

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



A megtalálási valószínűség-sűrűség a klasszikus mechanika szerint

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

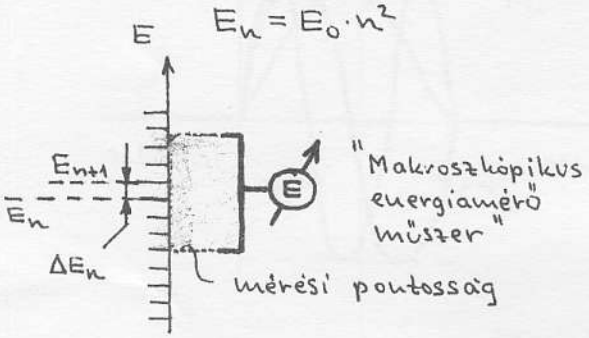
$$P_{ke} = A \cdot \frac{dt}{dx} = \frac{A}{\dot{x}} \equiv P_0 = \frac{1}{L}$$

Érdemes megvizsgálni: Kvantummechanika → Klasszikus mechanika

(Korrespondencia elv)

Az energia:

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

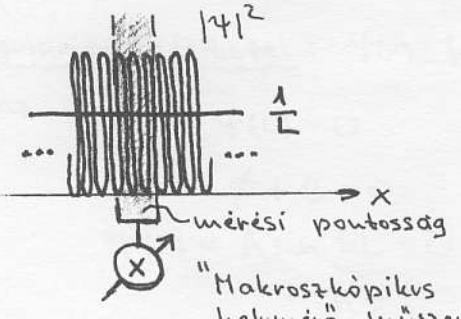


$$\frac{\Delta E_n}{E_n} = \frac{(n+1)^2 - n^2}{n^2} = \frac{2n+1}{n^2} \qquad (n \gg 1)$$

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

A kvantáltság "eltűnik"

A megtalálási valószínűség



→ a helymérés átlaga: $\frac{1}{L}$

A klasszikus mechanika szerint a potenciáldoboz belsejében, ahol a potenciális energia állandó (nevezetesen zérus), a részecskére nem hat erő. Ezért a sebessége állandó. Ebből az következik, hogy mindenhol ugyanakkora valószínűséggel található meg.

Az állapotfüggvény (Ψ hullámfüggvény) ismeretében a részecske megtalálási valószínűsége is meghatározható. Eredményül azt kapjuk, hogy a kvantummechanikai valószínűségsűrűség a klasszikus körül oszcillál méghozzá annál nagyobb térfrekvenciával, minél nagyobb a részecske energiája. Ez az észrevételünk általában is igaznak fog bizonyulni.

Az egydimenziós potenciáldobozban mozgó részecske klasszikus tárgyalásban két fal között pattogó tömegpontnak felel meg. Az imént kapott kvantummechanikai eredmények első pillantásra meglehetősen idegenek a klasszikus szemléletünk számára. A makroszkopikus világban a newtoni fizika eredményeit tapasztaljuk, ezért azt várjuk, hogy a kvantummechanika makroszkopikus határesetben vissza kell, hogy adja a klasszikus mechanika eredményeit. Érdemes tehát ezt megvizsgálni ebben az igen egyszerű és szemléletes esetben. A klasszikus határeset a mikroszkopikus energiaszintekhez képest nagy(?) energiát jelent. Ez azt jelenti, hogy a klasszikus mechanikával tárgyalható részecske energiája sokkal nagyobb, mint az alapállapoti energia (az első energiaszint!). Azaz az *„n”* kvantumszám sokkal nagyobb, mint egy.

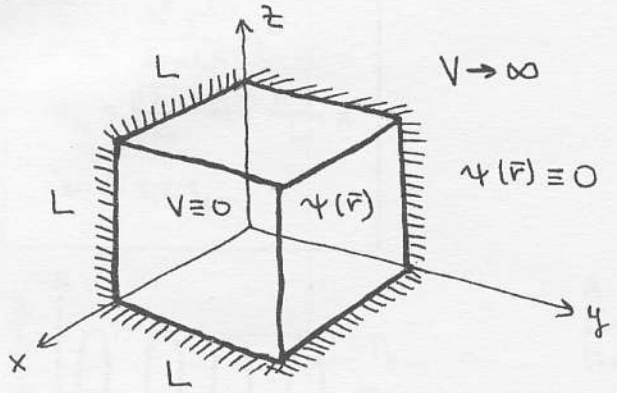
Minden makroszkopikus mérés csak valamilyen véges relatív pontossággal végezhető el. Ez a mérőműszerek tulajdonsága. A makroszkopikus fizika szerint egy mérőműszer pontossága elvileg tetszőlegesen csökkenthető, de mindig véges marad. Ennek pusztán technikai okai vannak.

Az energiaszintek vonatkozásában azt kapjuk, hogy a makroszkopikus energiamérés esetén nagyon sok kvantált energiaszint esik a mérőműszer pontatlansági tartományába. Így makroszkopikus esetben az energia kvantáltsága kimérhetetlen lesz, azaz folytonos energiaskálát tapasztalunk.

Az állapotfüggvények szempontjából a nagy kvantumszám nagyon sűrű térbeli oszcillációt jelent. Ekkor a makroszkopikus helymérés pontatlansági tartományában a hullámfüggvénynek igen nagyszámú oszcillációja esik. Így a kvantummechanikai megtalálási valószínűség erre a tartományra vett átlaga éppen a klasszikus értéket adja. Azaz a klasszikus mechanika eredményeit fogjuk a makroszkopikus hosszúság skálán is tapasztalni.

Azt a kívánalmat, hogy az általánosabbnak és alapvetőbbnek tekintett kvantummechanika határesetben adja vissza a klasszikus mechanika eredményeit a „korrespondencia elvének" hívjuk, és gyakran használjuk eredményeink globális ellenőrzésére. Azaz egy mikrofizikai modell helyességének ez szükséges feltétele.

Háromdimenziós potenciál doboz



$V \to \infty$

$\psi(\bar{r}) \equiv 0$

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

$\psi(\bar{r}) \equiv 0$ ha $\bar{r} \notin L^3$

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

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

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

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

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

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

$$-k_x^2 - k_y^2 - k_z^2 = -k^2 \longrightarrow E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m}\left(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2\right)$$

$$\left.\begin{aligned} X'' &= -k_x^2 X \\ Y'' &= -k_y^2 Y \\ Z'' &= -k_z^2 Z \end{aligned}\right\} + \text{PEREMFELTÉTELEK} \left(\psi(\bar{r}) = 0 \text{ a falnál}\right) \longrightarrow \left\{\begin{aligned} k_x &= \frac{\pi}{L} n_x \quad (n_x = 1,2,3\ldots) \\ k_y &= \frac{\pi}{L} n_y \quad (n_y = 1,2,3\ldots) \\ k_z &= \frac{\pi}{L} n_z \quad (n_z = 1,2,3,\ldots) \end{aligned}\right.$$

Adódott tehát:

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

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

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

↑

u.n.: kvantum számok

A háromdimenziós potenciáldoboz az egydimenziósnak a kézenfekvő általánosítása. Egy L élhosszúságú kocka alakú tartomány belsejében a potenciális energia zérus, azon kívül pedig végtelen. A Schrödinger egyenlet most egy háromváltozós parciális differenciálegyenlet. Ennek a megoldása a már részletezett szeparálással végezhető el. Feltételezzük tehát, hogy a $\psi(x,y,z)$ háromváltozós hullámfüggvény felírható három egyváltozós függvény szorzataként $\psi(x,y,z)=X(x)\cdot Y(y)\cdot Z(z)$. Mindhárom függvényre ugyanaz a közönséges differenciálegyenlet adódik, mint amit az egydimenziós esetben kaptunk. A regularitási feltételek is ugyanazok, mint az egydimenziós esetben voltak. Mivel három egyváltozós függvényt kell meghatározni így három kvantumszám fog az eredményeinkben megjelenni. Ezek egymástól függetlenül pozitív egész számok lehetnek. A lehetséges energiaszintek értékére az egydimenziós dobozhoz igen hasonló formula adódik:

$$E = E_0 \cdot \left(n_x^2 + n_y^2 + n_z^2\right), \qquad \{n_x, n_y, n_z = 1, 2, 3, ...\}$$

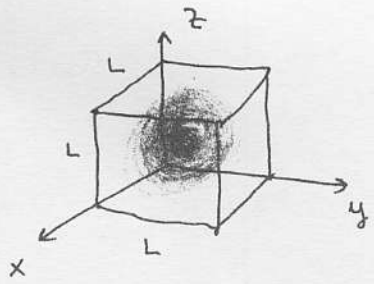
Degenerált (elfajult) állapotok

$$\{n_x, n_y, n_z\} \rightarrow \Psi(\vec{r}), \quad E = E_0\left(n_x^2 + n_y^2 + n_z^2\right)$$

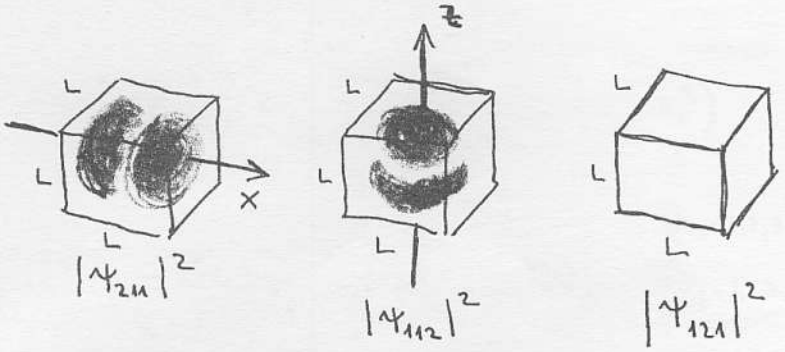
Ψ	n_x	n_y	n_z	E
Ψ_{111}	1	1	1	$3E_0$
Ψ_{211}	2	1	1	
Ψ_{121}	1	2	1	$6E_0$
Ψ_{112}	1	1	2	

→ Egy sajátértékhez több sajátfüggvény tartozik.

Degenerált állapotok és a "szimmetria"



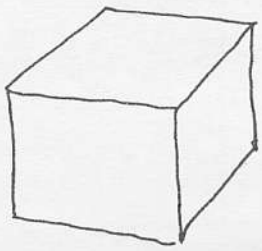
$|\Psi_{111}|^2 \quad E = 3E_0$



$|\Psi_{211}|^2 \quad |\Psi_{112}|^2 \quad |\Psi_{121}|^2$

$E = 6E_0$

Feladat:



$|\Psi_{221}|^2$

A háromdimenziós potenciáldoboz tárgyalása során egy új fogalommal a degeneráltság fogalmával ismerkedhetünk meg. Mint azt láttuk egy állapotot egy kvantumszám hármas (három kvantumszám együtt) határoz meg. Különböző kvantumszám hármasok különböző állapotfüggvényeket adnak meg. Ugyanakkor lehetnek olyan különböző kvantumszám hármasok, amelyek ugyanakkora energia értéket eredményeznek.. Azaz előfordulhat, hogy egy energiaértékhez (energiaszinthez) több állapotfüggvény tartozik. Ezt nevezzük degenerációnak.

Az elektronállapotok degenerációja a vizsgált rendszer (térbeli) szimmetriájának a következménye. Ez a kapcsolat olyan szoros és jellegzetes, hogy a rendszer szimmetriájának az ismeretében következtetni lehet az állapotfüggvények matematikai alakjára is. Ez a fontos észrevétel a magyar származású Wigner Jenő érdeme.

Wigner Jenő a kvantummechanika közismerten nagy egyénisége. A szimmetria meggondolásai annyira alapvetőnek bizonyultak, hogy a kidolgozott módszere a későbbiek során a kvantummechanikai számítások (az atomi elektronhéj és az atommagok) alapvető eszközévé vált.

A szimmetria tulajdonságok matematikai tárgyalása az ún. „csoportelmélet” segítségével történik. A csoportelmélet alapjait az 1832-ben, a 21éves korában, párbajban megölt zseniális francia matematikus Evariste Galois [ejtése: GALOÁ] tette le. A csoportelméletet E.Galois az ötöd- és magasabbfokú egyenletek algebrai megoldhatatlanságának a problémája vizsgálatához teremtette meg, amely azután hamarosan nélkülözhetetlenné vált a matematika egész területén és a XX.századi modern fizikában is. A wigneri felismerés a csoportelmélet továbbfejlődésénk az ösztönzőjévé vált. Mára már egy igen hatékony matematikai apparátust sikerült kiépíteni.

Napjainkban a „szimmetriacsoportok” használata az elemi részek fizikájának alapvető eszközévé vált.

Az 1963.-évi fizikai Nobel-díjat Wigner Jenő kapta, indoklásul: „ az atommagok és az elemi részek elméletének fejlesztéséért, kivált az alapvető szimmetriaelvek felfedezéséért és alkalmazásáért.”

A következőkben az állapotfüggvény és a rendszer szimmetriájának a kapcsolatát fogjuk szemléltetni a jelenlegi ismereteinknek megfelelő, lehető legegyszerűbb szinten.

Tekintsük a háromdimenziós, kocka alakú potenciáldobozban lévő elektron (részecske) esetét.
A rendszer szimmetriája azt jelenti, hogy ha egy geometriai transzformációval (forgatás, tükrözés) a kockát önmagába transzformáljuk, akkor ez semmiféle fizikai változást nem eredményez. Meg fogjuk nézni, hogy mi történik egy állapotfüggvénnyel a szimmetriatranszformációk során.

Egy adott energiaszinthez tartozó ψ hullámfüggvény ismeretében a részecske $P=|\psi|^2$ megtalálási valószínűség sűrűsége meghatározható. A $P(x,y,z)$ háromváltozós függvény ábrázolására az ún. szintfelületeket használjuk. Szintfelületnek nevezzük azon térbeli pontok összességét amelyek kielégítik a $P(x,y,z)=P_0$ egyenletet. Ezek a pontok egy térbeli felületet adnak. Mármost a ψ állapotfüggvény ábrázolása esetén felrajzoljuk azt a szintfelületet, amelyen belül az elektron „közel egy” (pl.: 0.95) valószínűséggel található meg.

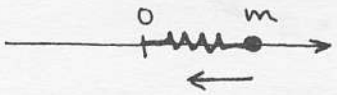
A potenciáldoboz esetén a ψ hullámfüggvények matematikai alakja jól ismert. Ezek vizsgálata alapján a következőket vehetjük észre:

Alapállapotban minden szimmetriatranszformáció során a $|\psi_{000}|^2$ szintfelület önmagába transzformálódik.

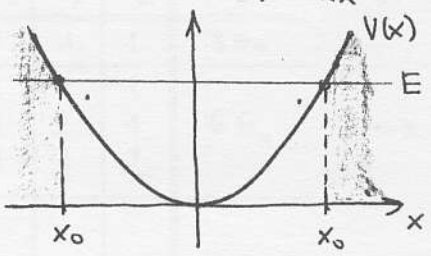
A második energiaszinthez tartozó három (degenerált) állapotfüggvény olyan, hogy minden szimmetriatranszformáció során a $|\psi_{211}|^2, |\psi_{121}|^2, |\psi_{112}|^2$ szintfelületek egymásba transzformálódnak.

1.1.3.3. Harmonikus lineáris oszcillátor

Klasszikus pontmechanikában



$F = -kx$

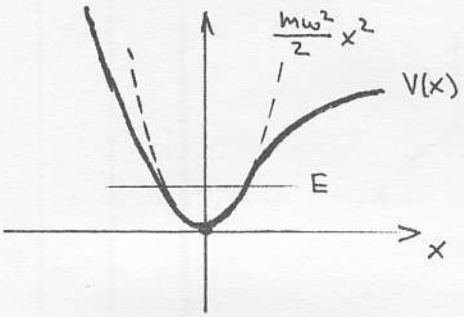


$$x(t) = x_0 \sin(\omega t + \delta)$$

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

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

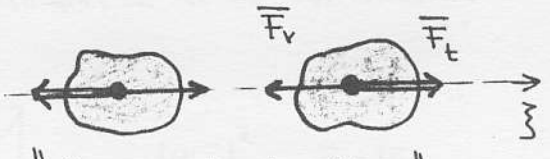
↓ általánosítás



Koordináta rendszer választás

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

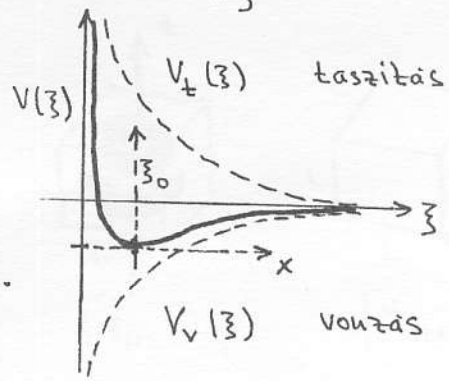
$$V(x) = \underbrace{V(0)}_{=\emptyset} + \underbrace{\left[\frac{dV}{dx}\right]_0}_{=\emptyset} x + \underbrace{\frac{1}{2}\left[\frac{d^2V}{dx^2}\right]_0}_{\equiv \frac{1}{2}m\omega^2} x^2 + \dots$$



" Vonzás és taszítás "

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

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



Kvantummechanikai tárgyalás

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

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi'' + \frac{m\omega^2 x^2}{2}\psi = E\psi \quad \to \quad \left.\begin{matrix}\psi(x) = ? \\ E = ?\end{matrix}\right\} \text{ sajátérték feladat}$$

Matematika:

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

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

(jelölés bevezetésével)

1.1.3.3. A harmonikus lineáris oszcillátor

A (egydimenziós) harmonikus lineáris oszcillátor esetén a potenciális energia az egyensúlyi helyzettől való eltérés (legyen x) négyzetével arányos. A klasszikus mechanikai tulajdonságai már jól ismertek. A mechanikában széles körben használjuk. Ennek oka a következő. Bármely két test közötti kölcsönhatás taszító és vonzó erők együttes fellépésének a következménye. E két erőhatás eredményeként a két test között stabil egyensúlyi állapot jöhet létre. Ebben az esetben a potenciálfüggvénynek az egyensúlyi helyzetben minimuma van. Az egyensúly helyzettől való kis kitérések esetén, a potenciálfüggvény egy parabolával közelíthető. Azaz a rendszer egy oszcillátornak tekinthető.

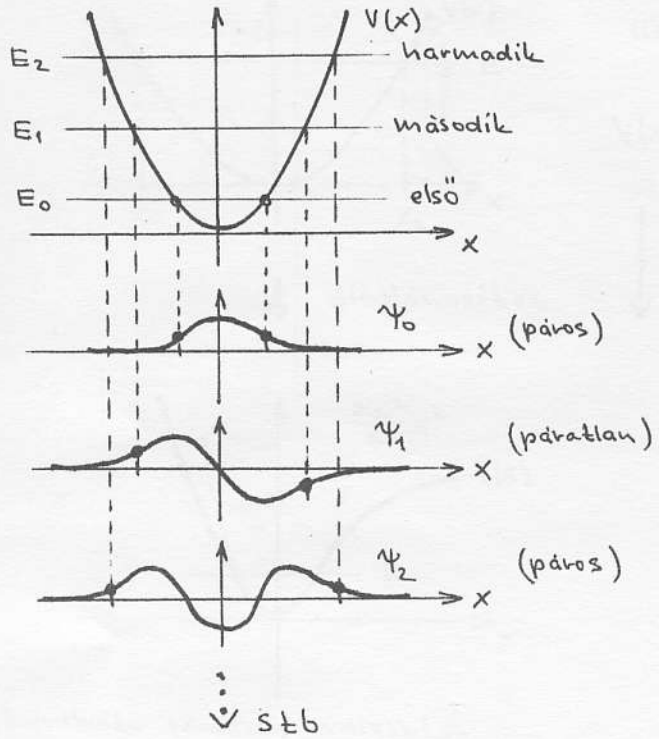
A kvantummechanikai tárgyalás esetén az időfüggetlen Schrödinger egyenletet kell megoldanunk. A potenciális energia helyére egy parabolikus (x^2- től függő) függvényt kell beírnunk. Ismeretlen az E energia és a ψ állapotfüggvény. Alkalmasan bevezetett állandók segítségével első pillanatra egyszerűnek tűnő differenciálegyenletet kapunk. Bár a differenciálegyenlet egyszerűnek látszik, megoldásával eddig még nem találkoztunk.

(22)

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

η : ? ψ : ?

A már ismertetett általános meggondolások alapján a kvalitativ 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 (próbálgatás !) $\psi_0 = A_0 e^{-\gamma x^2}$

$E_0 \rightarrow \eta_0$

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

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

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

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

Tehát:

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

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

(KELL!)

$\eta_0 = 2\gamma$

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

(matematikai megoldás) →

Az egyenlet megoldása pusztán eddigi matematikai ismereteink alapján igen nehéz lenne. Támaszkodhatunk azonban arra, amit a Schrödinger egyenlet általános matematikai vizsgálata során tapasztaltunk. Azaz tudjuk, hogy kötött állapot lévén az energiaszintek kvantáltak, és az állapotfüggvények "egypúpú", "kétpúpú", "hárompúpú", stb.. (valós)függvények lesznek. Mivel a potenciális energia szimmetrikus (páros függvény), könnyű belátni, hogy az állapotfüggvények páros és páratlan függvények lesznek. A legalacsonyabb energiaszinthez (az alapállapothoz) tartozó ψ függvény tehát egy "egypúpú" páros függvény kell, hogy legyen. Keressük ezt egy x^2-től függő exponenciális függvény alakjában (ún. Gauss függvény). Közvetlen behelyettesítéssel igazolhatjuk, hogy a feltételezésünk helyes volt.

Regularitási feltétel:

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

A_0 meghatározása:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi_0(x)|^2 \, dx = 1 \qquad A_0 = \ldots\ldots\ldots$$

Az E_0 energiaszint (alapállapoti energia) 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:

$$\boxed{\begin{aligned} E_0 &= \tfrac{1}{2}\hbar\omega \\ \psi_0 &= A_0 e^{-\frac{\alpha}{2}x^2} \end{aligned}} \leftarrow \alpha = \frac{m\omega}{\hbar}$$

További próbálkozások

$\psi_1(x) = (c_1 \cdot x)\,\psi_0$ (páratlan)

$\psi_2(x) = (c_0 + c_2 x^2)\,\psi_0$ (páros)

$\psi_3(x) = (c_1 x + c_3 x^3)\,\psi_0$ (páratlan)

$\vdots$

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

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

↑ 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:

Ugyancsak megkapjuk az alapállapot energiáját. Ennek értéke $\hbar\omega$ **felével (!)** egyenlő. Tovább is próbálkozhatunk az állapotfüggvények felírásával. Hiszen, ha az alapállapothoz tartozó Gauss függvényt egy alkalmas (páros vagy páratlan) polinommal megszorozzuk, akkor mind szimmetriáját, mind pedig alakját tekintve a várt tulajdonságú hullámfüggvényeket (állapotfüggvényeket) kapjuk. Keressük tehát a megoldást egy ismeretlen polinom és az ismert Gauss függvény (alapállapot) szorzatának a formájában.

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

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

azaz

$$\mathcal{H}_n'' - 2\alpha x \mathcal{H}_n' + (\eta_n - \eta_0)\mathcal{H}_n = 0 \qquad \text{(HERMITE diff. egyenlet)}$$

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

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

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

$$\underbrace{\sum_{k=0} k(k-1) c_k \cdot x^{k-2}}_{c_0 \cdot \phi + c_1 \cdot \phi + 2c_2 x^0 + \cdots} - \sum_{k=0} 2\alpha \cdot k \cdot c_k x^k + \sum_{k=0} (\eta_n - \eta_0) c_k x^k = \phi$$

átindexelés $k \to k+2$

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

Tehát

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

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

u.n. rekurziós formula ↓ (HERMITE polinomok)

$c_0 \to c_2, c_4, c_6, c_8, \ldots \to \mathcal{H}_n(x)$ páros

$c_1 \to c_1, c_3, c_5, c_7, \ldots \to \mathcal{H}_n(x)$ páratlan

↑ (peremfeltételekből)

↓ POLINOM kell hogy legyen !

A feltételezett ψ_n függvényt beírva a Schrödinger egyenletbe (némi manipuláció után) az ismeretlen polinomra egy újabb differenciálegyenlet adódik. Ez első pillantásra bonyolultabb, mint a kezdeti, ψ_n-re vonatkozó egyenletünk. Nagy előnye azonban az, hogy a megoldásai ismeretesek. Ez ugyanis egy Hermite-féle differenciálegyenlet és a megoldásai H_n az ún. Hermite polinomok. Az egyenletben van még egy ismeretlen, ez az η_n. Ez tartalmazza a meghatározandó E_n energiát.

A későbbiekben sokszor kell majd megkeresnünk a Schrödinger egyenlet megoldásait. Ekkor természetesen már nem fogjuk a matematikai részleteket tárgyalni, hanem majd csak hivatkozunk arra a matematikai módszerre, amely alkalmazásával a megoldások magkaphatók. Ennek a neve az alábbiakban elmondandó ún. "polinom módszer". A módszert ezen a feladaton keresztül mutatjuk be.

A polinom módszer főbb lépései tehát a következők:

1.) A differenciálegyenlet megoldását egy hatványsor alakjában keressük, tehát meghatározandók a hatványsor együtthatói.
2.) A hatványsorba felírt keresett függvényt beírjuk a differenciálegyenletbe és elvégezzük a szükséges deriválásokat.
3.) Az így adódó, nullára redukált egyenletben az azonos hatványkitevőjű tagokat összevonjuk, így egyetlen hatványsort kapunk.. (Ennek oka az, hogy egy hatványsor deriváltja ismét hatványsor és hatványsorok összege ugyancsak hatványsor)
4.) Mivel egy hatványsor csak akkor azonosan egyenlő nullával, ha minden hatványtag együtthatója nulla. Így az együtthatókra egy ún. rekurziós összefüggést kapunk.
5.) Megkeressük az egyenlet polinom megoldásait. Azaz azokat, amelyeknél a hatványsor egy véges fokszámú polinom lesz.

$\mathcal{H}_n(x)$ akkor lesz polinom, ha:

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

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

$c_{n+2} = 0$, $c_n \neq 0$, $\frac{\ldots}{\ldots} = \phi$ kell, hogy legyen (η_n még ismeretlen!)

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

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

$\downarrow$

E_n = meghatározható

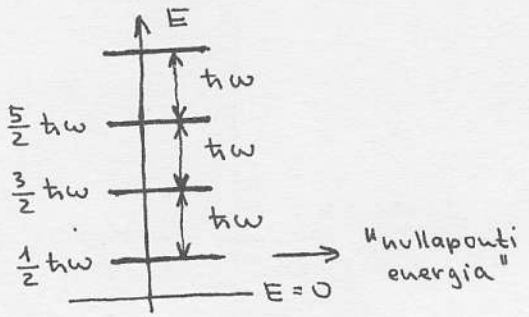
$$E_n = \frac{\hbar^2}{2m}\eta_n = \frac{\hbar^2}{2m}(\eta_0 + 2\alpha n) = E_0 + \frac{\hbar^2\alpha}{m}n = E_0 + \hbar\omega \cdot n$$

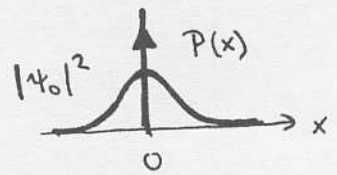
$E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$

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

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

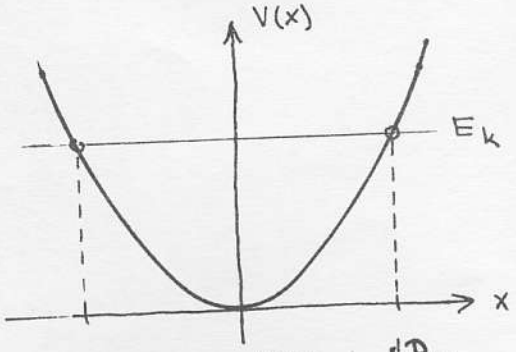
$$\psi_n = \mathcal{H}_n(x)\, e^{-\frac{\alpha}{2}x^2}$$

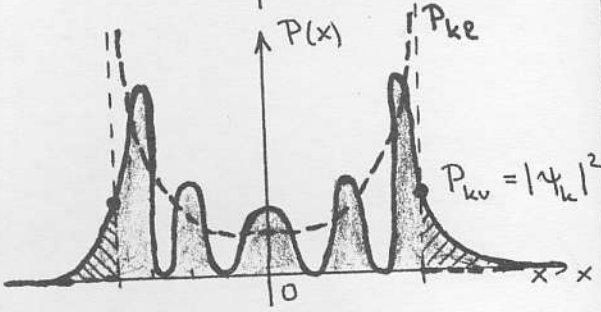












$$P_{ke} = \frac{\text{áll}}{\dot{x}} = \frac{A}{\sqrt{E - V(x)}}$$

Kölcsönhatás $\hbar\omega$ energiaadagokban!

A harmonikus lineáris oszcillátorra kapott megoldások jellegzetességei tehát a következők.

Az energiaszinteket az $E_n = \hbar\omega \cdot \left(n + \frac{1}{2} \right)$, $n = 0, 1, 2, 3, \ldots$ összefüggés adja meg.

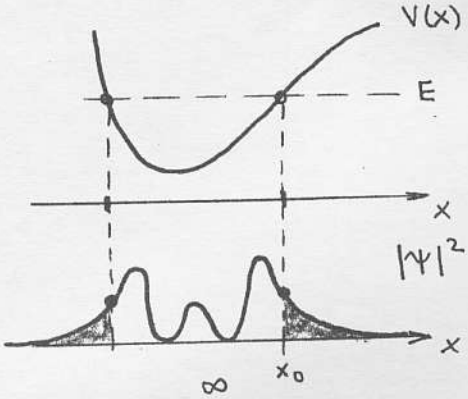
Az alapállapoti energia (*n=0*) nem nulla, hanem véges érték. Ezt nevezik nullaponti energiának. Mivel ez a legalacsonyabb energia, ezért ez az oszcillátorból nem vonható el. Ez azt is jelenti, hogy az oszcillátor soha nincsen nyugalomban. Kis ún. alapállapoti (nullaponti) rezgést mindig végez.

Az energiaszintek egymástól egyenlő távolságra helyezkednek el. Ez a távolság éppen $\hbar\omega$. Tehát az oszcillátor csak, $\hbar\omega$ nagyságú energiát tud leadni, vagy felvenni.

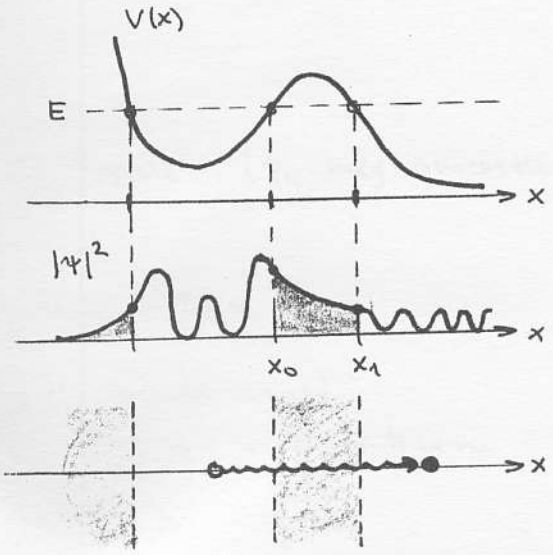
A kvantummechanikai megtalálási valószínűség sűrűség a klasszikus eredmény körül ingadozik.

1.1.4. Nem kötött állapotok tárgyalása

1.1.4.1. A valószínűségi áramsűrűség



$$P(x>x_0) = \int_{x_0}^{\infty} |\Psi|^2 dx > 0$$



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

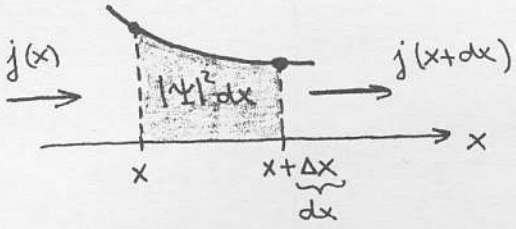
Az állapotfüggvény fizikai tartalma:

$$\Psi(\vec{r}) \to \Psi(x) = \begin{cases} \text{kötött állapot esetén: } \int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi|^2 dx = 1 \\ \text{nem kötött állapot esetén: } \int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi|^2 dx = \infty \quad (!) \end{cases}$$

$\downarrow$

új fogalom: valószínűségi áramsűrűség $(\vec{j} \to j(x))$

1 dimenziós esetben: $(\Delta x \to dx)$!



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

"kontinuitási egyenlet"
$\downarrow$
"mérleg egyenlet"

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

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

1.1.4. Nem kötött állapotok tárgyalása

1.1.4.1. A valószínűségi áramsűrűség

Láttuk azt, hogy az elektron behatol a klasszikuson tiltott tartományba is. Így ha ez a tartomány véges szélességű, akkor az elektron ezen a tartományon véges valószínűséggel át is tud jutni. Ennek a jelenségnek a neve "alagút effektus". Az effektus azért kapta ezt a nevet, mert nem arról van szó, hogy a részecske "átugorja " a potenciálgátat. Az összenergiája ugyanis mindvégig állandó marad.

Ha a klasszikusan megengedett tartomány mérete "végtelen nagy", akkor ebben az esetben ún. nem kötött állapotok alakulnak ki. A hullámfüggvénynek a (kötött állapotok esetén definiált) valószínűségi értelmezése ekkor, minden további nélkül, már nem lehetséges. Ugyanis a hullámfüggvény nem lesz négyzetesen integrálható. A hullámfüggvény fizikai jelentésének az általánosításához új fogalmat kell bevezetnünk. Azaz meg kell szabadulnunk a négyzetesen integrálhatóságtól. Ez az új fogalom a "valószínűségi áramsűrűség”.

Az egyszerűsítés miatt egydimenziós modellből fogunk kiindulni. Tekintsünk egy időtől függő állapotot. Ekkor a részecske megtalálási valószínűségsűrűsége időben változni fog. A teljes térre vett valószínűség azonban állandó (kötött állapotok esetében éppen egy). Ez azt jelenti, hogy ha egy véges térrészben a megtalálási valószínűség, pl. csökken, akkor azon kívül nőnie kell. A jelenség úgy modellezhető, hogy a valószínűség mintegy "kiáramlik" az adott térészből. Hasonlóan egy adott mennyiségű közeg zárt térben történő áramlásához.

Bevezethető a valószínűség áramlási sűrűsége („J”). Egydimenziós modell esetén egy *dx* nagyságú tartományban a megtalálási valószínűség időbeli megváltozása egyenlő a "beáramló" és a "kiáramló" valószínűségek összegével. Az így adódó egyenlet az ún. kontinuitási egyenlet.

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

$$\hat{H}\Psi = -\frac{\hbar}{j}\dot{\Psi} \longrightarrow \frac{d}{dx} j = -\frac{\partial}{\partial t}|\Psi|^2$$

$j \equiv \sqrt{-1}$ (!)

$j \equiv$ valószínűségi áram sűrűség.
Ezt kell definiálni !

$$-\frac{\partial}{\partial t}|\Psi|^2 = -\frac{\partial}{\partial t}\Psi^*\cdot\Psi = -\dot{\Psi}^*\Psi - \Psi^*\cdot\dot{\Psi}$$

$$\left.\begin{aligned}\hat{H}\Psi &= -\frac{\hbar}{j}\dot{\Psi}\\ (\hat{H}\Psi)^* &= +\frac{\hbar}{j}\dot{\Psi}^*\end{aligned}\right\}$$

$$-\frac{\partial}{\partial t}|\Psi|^2 = -\frac{j}{\hbar}\left\{\Psi(\hat{H}\Psi)^* - \Psi^*\hat{H}\Psi\right\} = -\frac{j}{\hbar}\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\Psi\Psi^{*\prime\prime} + \frac{\hbar^2}{2m}\Psi^*\Psi^{\prime\prime}\right\}$$

$$(\hat{H}\Psi) \equiv \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V\right)$$

$$= -\frac{j}{\hbar}\cdot\frac{\hbar^2}{2m}\underbrace{\left\{\Psi^*\Psi^{\prime\prime} - \Psi\Psi^{*\prime\prime}\right\}}_{\frac{d}{dx}\left(\Psi^*\Psi^{\prime} - \Psi\Psi^{*\prime}\right)} = +\frac{\hbar}{2mj}\frac{d}{dx}\left(\Psi^*\Psi^{\prime} - \Psi\Psi^{*\prime}\right) =$$

$$= \frac{d}{dx}\left\{\frac{\hbar}{2mj}\left(\Psi^*\Psi^{\prime} - \Psi\Psi^{*\prime}\right)\right\} \equiv \frac{d}{dx}j(x)$$

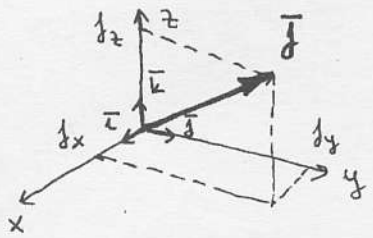
azaz

$$j(x) \equiv \frac{\hbar}{2mj}\left(\Psi^*\Psi^{\prime} - \Psi\Psi^{*\prime}\right)$$

konzervatív rendszerek esetén

$$\Psi(x,t) = \psi(x)\, e^{-j\frac{E}{\hbar}t} \longrightarrow j(x) = \frac{\hbar}{2mj}\left(\psi^*\psi^{\prime} - \psi\psi^{*\prime}\right)$$

Általánosítás:



$$\left.\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial x} &\longrightarrow j_x\\ \frac{\partial}{\partial y} &\longrightarrow j_y\\ \frac{\partial}{\partial z} &\longrightarrow j_z\end{aligned}\right\} \quad \bar{j} = \frac{\hbar}{2mj}\left(\Psi^*\nabla\Psi - \Psi\nabla\Psi^*\right)$$

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

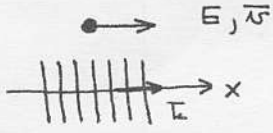
Tudjuk, hogy a részecske állapotát a hullámfüggvény egyértelműen meghatározza. Tehát, az imént bevezetett „J” valószínűségi áramsűrűséget is a hullámfüggvény fogja megadni. Azaz ki kell deríteni a Ψ állapotfüggvény és a J valószínűségi áramsűrűség kapcsolatát. Tudjuk, hogy a Ψ-t az időfüggő Schrödinger egyenlet határozza meg, a J-t pedig a kontinuitási egyenlet definiálja. Tehát ha sikerül az időfüggő Schrödinger egyenletet egy kontinuitási egyenlet alakjába átírni, akkor ebből az utóbbiból ki lehet olvasni a J-nek a Ψ által definiált alakját. A számolás elvégezhető. Eredményül azt kapjuk, hogy a valószínűségi áramsűrűség egy valós mennyiség (ahogyan az kell is!) és nagyságát a Ψ hullámfüggvény és Ψ' annak helyszerinti deriváltja határozza meg.

$$J = \frac{\hbar}{2mj}\left(\Psi^* \cdot \Psi' - \Psi \cdot \Psi'^*\right)$$

Mint azt láttuk, egydimenziós kötött állapot esetén a ψ valós függvény, így a J a valószínűségi áramsűrűség zérus

Az eredmények szemléletesen általánosíthatók háromdimenziós esetre.

Példa: Szabadon mozgó részecske:



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

$$\left.\begin{aligned} \psi(x) &= A\,e^{jkx} \\ \psi^*(x) &= A^* e^{-jkx} \\ \psi'(x) &= jk\cdot\psi \\ \psi^{*\prime}(x) &= -jk\cdot\psi^* \end{aligned}\right\} \quad j = \frac{\hbar}{2mj}\left\{jk|A|^2 + jk|A|^2\right\} = \frac{\hbar k}{m}|A|^2 =$$

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

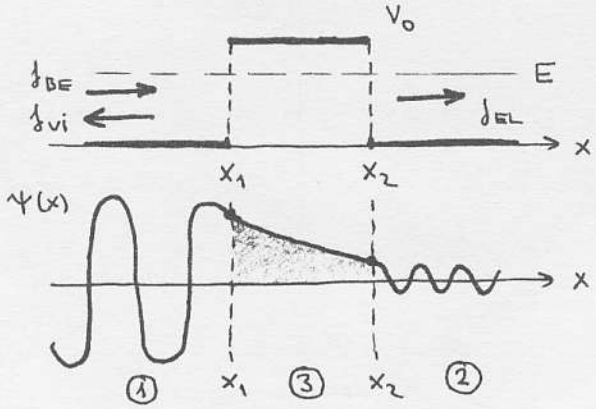
↓ általában:

$$\boxed{\overline{j} = \frac{\overline{p}}{m}|\psi|^2}$$

analógia: áramsűrűség a klasszikus fizikában.

1.1.4.2. Áthaladás potenciálgáton (közelítő számítás)

(GAMOW formula)



A részecske átjutásának a valószínűsége (≡transzmisszió)

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

$$\left.\begin{aligned} j_{BE} &= v_1\cdot|\psi_1|^2 \\ j_{E1} &= v_2\cdot|\psi_2|^2 \end{aligned}\right\} \quad v_1 = v_2$$

$$\left.\begin{aligned} T &= \frac{|\psi_2(x_2)|^2}{|\psi_1(x_1)|^2} \\ \psi_1(x_1) &= \psi_3(x_1) \\ \psi_2(x_2) &= \psi_3(x_2) \end{aligned}\right\} \quad T \approx \left|\frac{\psi_3(x_2)}{\psi_3(x_1)}\right|^2$$

$$\psi_3'' = \underbrace{-\frac{2m}{\hbar^2}(E-V_0)}_{\equiv\alpha^2}\cdot\psi_3 \rightarrow \psi_3 = A\,e^{\pm\alpha x}$$

Szemléltető példaként kiszámíthatjuk egy szabadon mozgó részecske esetén a valószínűségi áramsűrűséget. A Ψ állapotfüggvény most egy síkhullám lesz Az általa definiált (valószínűségi) áramsűrűség egyszerűen meghatározható.

A kapott eredmény igen szemléletes. Az áramsűrűség ugyanis arányos lesz a részecske (De-Broglie által definiált) impulzusával és így a "v" sebességével, valamint a megtalálási valószínűség sűrűséggel, azaz $J = v \cdot |\Psi|^2$. A valószínűségekre tehát pontosan a klasszikus fizikából ismert áramsűrűség kifejezést kaptuk.

1.1.4.2. Áthaladás potenciálgáton (közelítő számítás)

A valószínűségi áramsűrűség bevezetése lehetővé teszi annak kiszámítását, hogy egy (az „x" tengely mentén mozgó) *„E<V₀"* kinetikus energiájú részecske mekkora valószínűséggel jut át egy „V_0" magasságú és „$L = x_2 - x_1$" szélsségű ún. "négyszögletes potenciálgáton". A feladat értelemszerűen egydimenziós. Az átjutás valószínűségét T "transzmissziós tényezőnek" nevezzük. Ez természetesen egy 0 és 1 közé eső valós szám. Definíciójához egyszerű fizikai meggondolások alapján jutunk.

A potenciálgátra balról beeső részecske bizonyos valószínűséggel áthalad illetve visszaverődik a potenciálgáton. A beeső, a visszaverődő és az átjutás után eltávozó szabadon mozgó részecske kvantummechanikai leírása a megfelelő valószínűségi áramsűrűségekkel történik. A transzmissziót az eltávozó „J_{EL}" és a beeső „J_{BE}" valószínűségi áramsűrűségek hányadosaként definiáljuk. A potenciálgát szimmetrikus alakja miatt a gát mindkét oldalán a részecske sebessége ugyanakkora. Így az a számítás során kiesik. A ψ hullámfüggvény folytonossága miatt a transzmissziót a gáton belül számított, exponenciálisan csökkenő hullámfüggvény határozza meg. Mivel a hullámfüggvény deriváltjára (a gát széleinél) semmiféle kikötést nem tettünk, ezért az eredményünk csak egy közelítő érték lehet. Neve Gamow -féle közelítés.

A Gamow közelítés matematikai alakja a következőnek adódott: $T_G = \exp\left\{-\acute{a}ll \cdot \sqrt{V_0 - E} \cdot L\right\}$

Láthatóan, a potenciálgát „L" szélességének a növelésével az átjutás valószínűsége exponenciálisan csökken.
Annak egyik jele, hogy a kapott összefüggés csakis egy közelítés lehet többek között az, hogy E=0 esetén $T_G>0$. Az az állítás, hogy (szemléletesen szólva) egy álló részecske is átjuthat a gáton, még a kvantummechanikai szemléletünk szerint is hamis kell, hogy legyen.

29

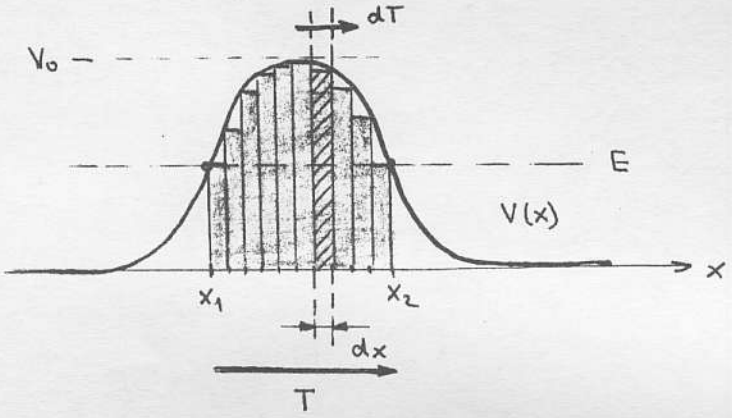
Azaz

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

(T definíciója miatt!)

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

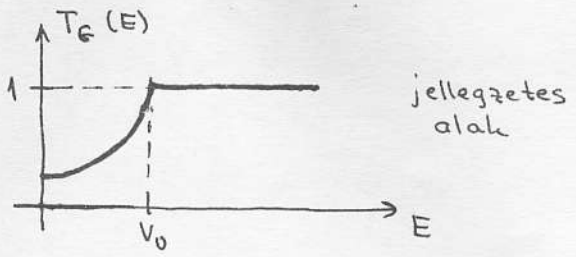
Tetszőleges alakú potenciálgát:



GAMOW közelítés:

$$T \approx T_G = \prod dT$$

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



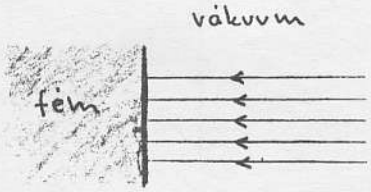
jellegzetes alak

A négyszögletes potenciálgátra kapott Gamow-féle eredmény segítségével közelítően meghatározhatjuk egy tetszőleges alakú potenciálgáton való áthaladás valószínűségét is.

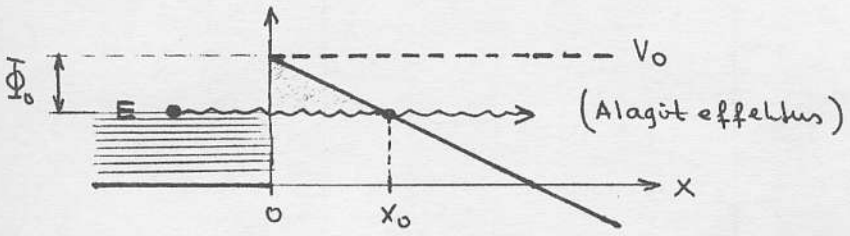
A tetszőleges alakú potenciálgát ugyanis ige kicsiny „dx” szélességű négyszögletes gátak együtteseként fogható fel. Feltételezzük, hogy az egyes elemi gátakon való *„dT”* áthaladási valószínűségek összeszorzódnak (lásd valószínűs égszámítás: független események együttes bekövetkezése!). Mivel az *„dT”* elemi valószínűségek exponenciális kifejezések, a $T_G = \prod dT$ szorzatuk is exponenciális kifejezés lesz. A kitevők összeadódnak és az eredő kitevő a gát alakjától és a részecske összenergiájától függő integrál lesz.

Példa: Hideg-emisszió (tér-emisszió)

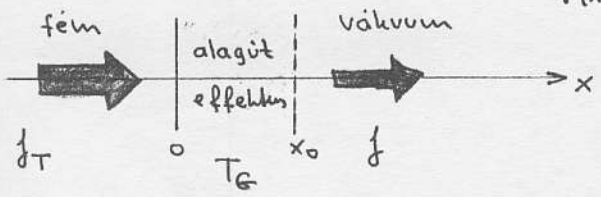
(Elektronok kilépése fémekből elektrosztatikus tér hatására)



$\vec{\mathcal{E}}$ (homogén elektromos tér)



$$V(x) = V_0 - \mathcal{E}\cdot x$$



$$\boxed{j = j_T \cdot T_G}$$

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

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

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

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

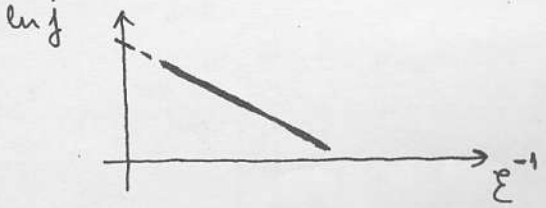
$$\int_0^{x_0}\sqrt{V(x)-E}\,dx = \sqrt{\mathcal{E}}\cdot\int_0^{x_0}\sqrt{x_0 - x}\,dx = \sqrt{\mathcal{E}}\left[-\frac{2}{3}(x_0-x)^{\frac{3}{2}}\right]_0^{x_0} = \frac{2}{3}\sqrt{\mathcal{E}}\,x_0^{\frac{3}{2}} = \frac{2}{3}\frac{1}{\mathcal{E}}\Phi_0^{3/2}$$

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

(közelítő összefüggés)

↓

FOWLER – NORDHEIM formula



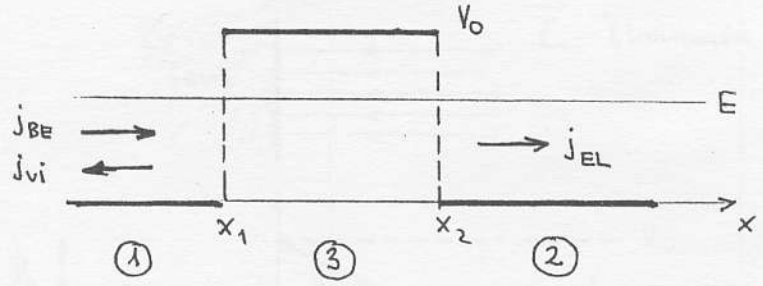
Az alagúteffektus egyik legszebb példája a hideg -(vagy tér-) emisszió jelensége, amikor elektrosztatikus tér hatására a fémből elektronok lépnek ki. A fém felületére merőleges, homogén, sztatikus elektromos tér potenciálja a fémen kívül lineáris lesz. A fémen belül az elektromos tér nulla. A fotóeffektusnál bevezetett potenciállépcső ennek megfelelően fog módosulni. A transzmissziós tényező az előzőekben tárgyalt

Ez az ún. Fowler-Nordheim formula. A számítások megegyeznek a mérési eredményekkel.

Az alagúteffektus a klasszikus fizikai szemlélet számára értelmezhetetlen és paradox jelenség. A mérési eredmények fényesen igazolják a kvantummechanikai szemléletünk helyességét. Létezése ma már trivialitás.

1.1.4.3. Áthaladás potenciálgáton, potenciálvölgyön ...

Négyszögletes potenciálgát : A számolás elvégezhető



(stacionárius állapot)

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

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

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

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

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

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

$$k \equiv \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \qquad (V \equiv 0)$$

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

$$L \equiv x_2 - x_1$$

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

T_G

(*) $\psi_1(x_1) = \psi_3(x_1)$

$\psi_1'(x_1) = \psi_3'(x_1)$

(*) $\psi_2(x_2) = \psi_3(x_2)$

$\psi_2'(x_2) = \psi_3'(x_2)$

$$\rightarrow T = \frac{j_{EL}}{j_{BE}} = \frac{|A_2|^2}{|A_1|^2} = \dots$$

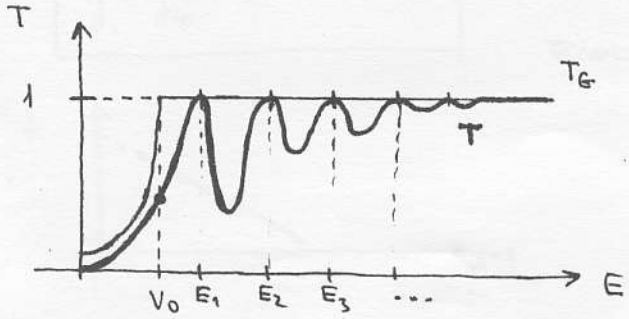
$$T = \frac{1}{1 + \frac{V_0^2}{4E(V_0-E)} \operatorname{sh}^2 \sqrt{\frac{2mL^2}{\hbar^2}(V_0-E)}}$$

$\rightarrow$ GAMOW ($E < V_0$) (Feladat)

$$\downarrow$$

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

Ha ($E > V_0$)



$T(E_i) = 1$

↑

(Feladat)

1.1.4.3. Áthaladás potenciálgáton, potenciálvölgyön

Térjünk rá a négyszögletes (egydimenziós) potenciálgáton történő transzmisszió pontos tárgyalására.

A hullámfüggvény kiszámítására a már ismert módszert használjuk. Azaz először meghatározzuk a Schrödinger egyenlet általános, matematikai megoldásait, majd ezekből (a regularitási feltételek segítségével) kiválasztjuk a fizikailag értelmezhető megoldásokat. A véges potenciálugrások (lépcsők) a teret (az „x" tengelyt) három részre bontják. Az egyes tartományokon belül a Schrödinger egyenlet általános megoldásai egyszerűen megkaphatók. Mivel most nem kötött állapotról van szó, ezért a végtelen távoli pontokban a J valószínűségi áramsűrűségnek kell végesnek lenni (a négyzetes integrálhatóságot csak kötött állapotban kell teljesítenie az állapotfüggvénynek!). A regularitási feltételeket a potenciálugrások helyén (x_1 és x_2 pontokban) is teljesíteni kell, azaz a ψ -nek folytonosan deriválhatónak kell lennie. A Gamow-féle közelítésben csak a ψ folytonosságát követeltük meg!

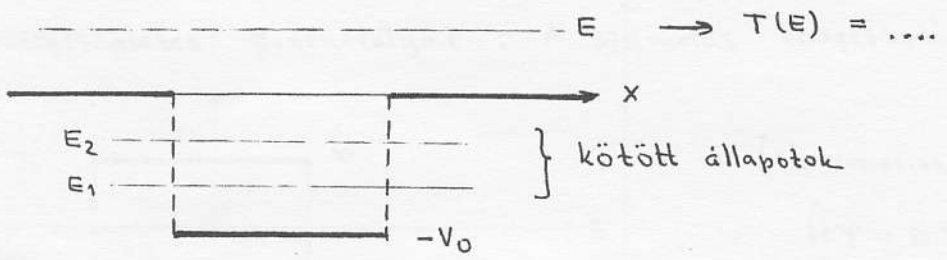
A transzmissziós tényezőt a már definiált módon határozzuk meg.

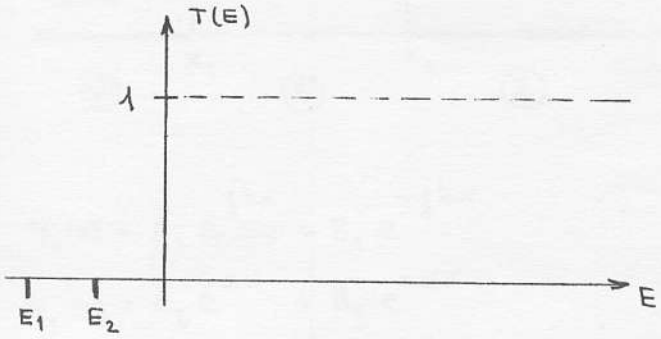
A *T* transzmissziós tényező értéke függ a beeső részecske „E" energiájától. A *T(E)* függvény jellegzetes alakjának főbb fizikai tartalma a következő:

1.) Ha a beeső részecske energiája a potenciálgát magasságánál kisebb ($E<V_0$), akkor a részecske alagút effektus révén véges valószínűséggel átmehet a gáton. (Klasszikus esetben biztosan nem jut át!)

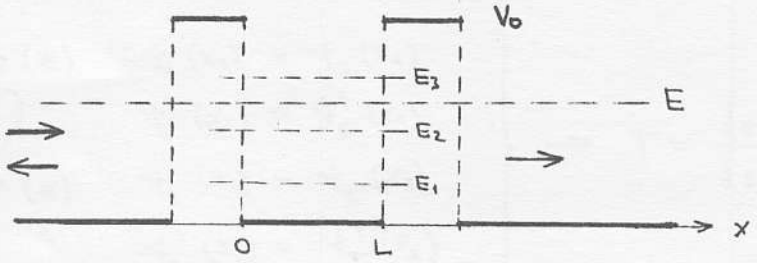
2.) Ha a beeső részecske energiája a potenciálgát magasságánál nagyobb ($E>V_0$), akkor a részecske csak bizonyos E_i energiákon képes biztosan áthaladni a gáton (Klasszikus esetben minden ilyen energián átjut!) A $T(E_i) = 1$ egyenlet megoldása egyszerű, és az eredmény igen szemléltetésen értelmezhető.

Négyszögletes potenciálvölgy:





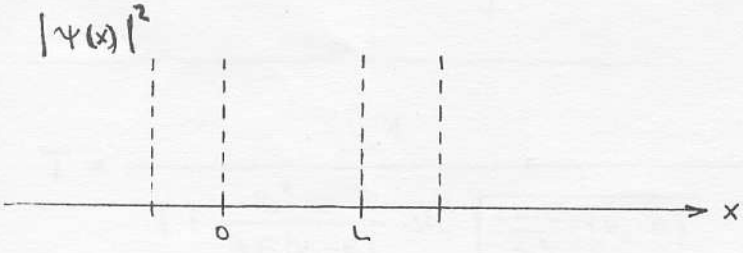
Rezonáns alagút effektus:

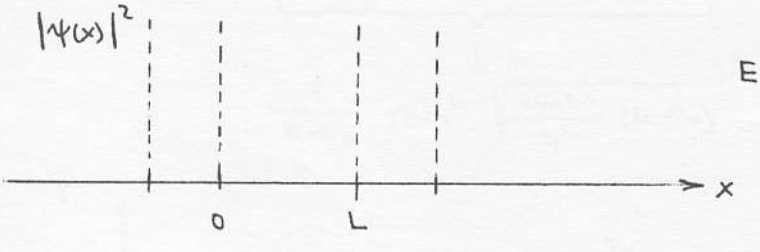


$E_1, E_2, E_3, \ldots$
(u.n. virtuális energiaszintek)

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

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





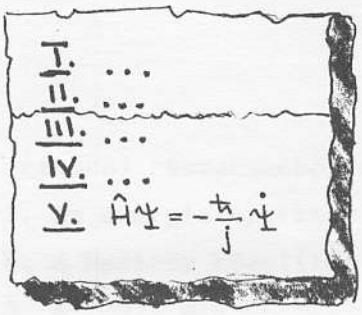
$E \approx E_i$

A V_0 mélységű négyszögletes potenciálvölgy kötött állapotú megoldásaival már foglalkoztunk. Láthatóan vannak nem kötött állapotú megoldások is. A T(E) transzmissziós tényező számítása ugyanúgy történik, mint a gát esetében. Az eredmények is nagyon hasonlóak az ott kapottakhoz.

A modern mikroelektronikában ma már használják az ún. rezonáns alagúteffektus jelenségét. Ekkor az elektronok két, egymáshoz "közel lévő", V_0 magasságú (egyforma) négyszögletes potenciálgáton haladnak át.
A kvantummechanikai számítások szerint vannak olyan $E_i < V_0$ energiaszintek, amelyekre $T(E_i) = 1$, azaz biztosan átmennek a két gáton. Ugyanakkor ezen energiaszintek esetén az elektronok viszonylag "sokáig" maradnak a két gát között. Mintha ott ideiglenesen kötött állapotba kerülnének. Innen van a „rezonáns alagúteffektus” elnevezés is.

Mindez tükröződik az elektronok (jól mérhető) makroszkopikus viselkedésérben is, amely az elektronikus eszközökben kerül felhasználásra. A szilárd testben mozgó elektronok számára az effektushoz szükséges potenciálugrásokat (az ún. epitaxiális rétegnövesztés technológiájával) ma már élő tudják állítani. A hiányzó részletekkel a szilárdtestfizikai fejezet végén találkozunk majd.

1.2. A kvantummechanika axiomatikus felépítése



Matematikai modell

Fizikai törvények

POSZTULÁTUMOK ↓ Axiómák

1.2.1. A kvantummechanika matematikai eszközei

$\hat{H}\Psi = -\frac{\hbar}{j}\dot{\Psi} \longrightarrow \Psi(\bar{r},t) = \psi(\bar{r})\, e^{-j\frac{E}{\hbar}t}$ (stacionárius állapot)

↑ $V(\bar{r})$ konzervatív rendszer

↑

$\hat{H}\psi = E\psi$ Az energia számítása

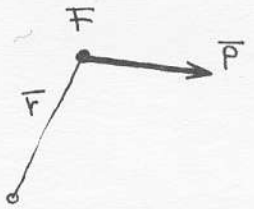
ÁLTALÁNOSÍTÁS ↓

$\hat{F}\varphi = F\varphi \rightarrow$ III. Axióma

↓ MÉRHETŐ, tehát valós kell, hogy legyen.

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

A klasszikus mechanikában



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

$\hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{p}_z$
$\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}$
} "alapvető operátorok"

$F \longrightarrow \hat{F} = F(\hat{x},\hat{y},\hat{z},\hat{p}_x,\hat{p}_y,\hat{p}_z)$ Legyen ez a definíciója az $\hat{F}$ operátornak

pl: ↓

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

1.2. A kvantummechanika axiomatikus felépítése

A kvantummechanika a fizika egyik axiomatikusan felépített rendszerének tekinthető. Azaz ismeretesek azok az alaptörvények (görögül axiómák, latinul posztulátumok), amelyeket közvetlen bizonyítás nélkül el kell fogadnunk és amelyekből minden más állítás levezethető. Az axiómarendszer helyességét az igazolja, hogy az eddig tapasztalt valamennyi jelenség a segítségével értelmezhető, sőt az általa előre megjósolt jelenségeket a mérések utóbb igazolják.

A kvantummechanika axiómáit mi öt db törvénybe foglaljuk össze. Ne zavarjon meg senkit az, hogy az irodalomban máshol esetleg ezekkel a törvényekkel részletesebb bontásban találkoznak. A lényeget ez nem érinti! Ahol az lehetséges volt, ott mi a "lényegileg összetartozó" állításokat egy axiómába foglaltuk össze. Ezen elvek szerint a kvantummechanika öt axiómája két csoportba választható szét. Az első két axióma rögzíti azokat a matematikai fogalmakat (eszközrendszert), amelyeket a fizikai fogalmainkhoz rendelünk. A maradék három axióma pedig lényegében a mérhető fizikai mennyiségekre vonatkozó állításokat fogalmazza meg.

Először az lesz a feladatunk, hogy az axiómákat "kitaláljuk". Ez úgy történik, hogy az egyedi mérési tapasztalatainkat általánosítjuk. Ez a kvantummechanika kialakulása során is így történt. Sok hibás általánosítás csapdáin és zsákutcáin átvergődve jutottak el a fizikusok a mai "letisztult" állapotig. Az, hogy ez mennyire "tiszta és érthető" illetve, hogy vajon ez-e a "végső" helyzet, az más kérdés. A válasz valószínűén mindkettőre nemleges. De ez már kívül esik a vizsgálódásunk területén.

1.2.1. A kvantummechanika matematikai eszközei

Először csak (az eddigieknek megfelelően) egyetlen részecske mikrofizikai tulajdonságainak a meghatározásával foglalkozunk. Ekkor a környezetnek a részecskére gyakorolt hatását az (általánosított) $V(\vec{r},t)$ potenciális energia függvény fejezi ki. (Az általánosítás az időfüggésben van!) A "több részecskés rendszerek" vizsgálatára később kerül majd sor, amikor már kellő jártasságot szereztünk az "egyszerűbb" jelenségek megértésében.

A Schrödinger egyenletek tárgyalásánál már bevezettük az ún. Hamilton operátort. Eddig ez azt a célt szolgálta csupán, hogy egyenleteink formálisan egyszerűbbnek tűnjenek. Általában a matematikában az ilyenfajta egyszerűsítés valójában valamilyen lényeges struktúra felismerését jelenti. Ez pedig már nem üres formai játék, mert magában rejtheti az általánosítás lehetőségét. Mint kiderült most is erről van szó. A $\hat{H}\psi = E\cdot\psi$ időfüggetlen Schrödinger egyenlet formailag egy sajátérték egyenlet, amely, a mérési tapasztalatok szerint, az elektron (vagy valamilyen más részecske) energiájának a meghatározására szolgál. Az *„E"* energiát az egyenlet sajátértéke adja meg. Ezen (egyedi tapasztalatot kifejező) egyenlet általánosításával juthatunk el az axiómák egy részéhez. Azaz tételezzük fel, nem csak az energia, hanem minden más esetben is hasonló matematikai számításokkal kaphatjuk meg egy keresett fizikai mennyiség számértékét! Kiindulásul megfogalmazhatjuk tehát a **harmadik axiómát.** Eszerint:

> **"Minden fizikai mennyiség lehetséges mérhető értékeit, az illető fizikai mennyiségre jellemző sajátérték-egyenlet sajátértékei adják meg.".**

Ezekben az egyenletekben operátorok, sajátértékek és sajátfüggvények szerepelnek. Meg kell tehát mondani, hogy milyen operátorokat kell használnunk, illetve azt, hogy mit jelentenek a sajátfüggvények? Ez irányú tapasztalatainkat az első két axiómában foglaljuk össze.

Kimondhatjuk tehát, a **második axióma** később még kibővítésre kerülő egyszerű változatát, azaz, hogy:

> **"A fizikai mennyiségekhez (jelen esetben mechanikáról lévén szó ezeket dinamikai változóknak fogjuk nevezni) operátorokat kell rendelni."**

Eddig annyit tudunk, hogy az összenergiához a Hamilton operátor tartozik. A többi operátor-hozzárendelést ebből fogjuk kitalálni és azt ugyancsak a második axiómába fogjuk rögzíteni. Induljunk ki abból, hogy a dinamikai változok közötti kapcsolatokat a klasszikus mechanikából már ismerjük! Tételezzük fel, hogy ezek a kvantummechanikában is érvényben maradnak! Ezek szerint egy tömegpont (részecske) minden dinamikai tulajdonsága megmondható, ha a helye ($\vec{r}$) és az impulzusa ($\vec{p}$) ismeretes. Tehát minden dinamikai változó az $\vec{r}$ vektor és a $\vec{p}$ vektor függvényeként definiálható. A klasszikus mechanikában a W_k kinetikus és a V potenciális energia összegét a $H(\vec{r},\vec{p}) \equiv W_k(\vec{p}) + V(\vec{r})$ Hamilton függvénynek nevezik A feladatunk tehát az, hogy kitaláljuk azokat az operátorokat, amelyeket a helykoordinátákhoz (x,y,z,) és az impulzus koordinátákhoz (p_x ,p_y ,p_z) kell rendelnünk úgy, hogy azok a jól ismert $\hat{H}$ Hamilton operátort adják vissza.

azaz

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

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

Schrödinger:

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

$$\hat{p}_y = \frac{\hbar}{j}\frac{\partial}{\partial y} \qquad \hat{y} = y\,.$$

$$\hat{p}_z = \frac{\hbar}{j}\frac{\partial}{\partial z} \qquad \hat{z} = z\,.$$

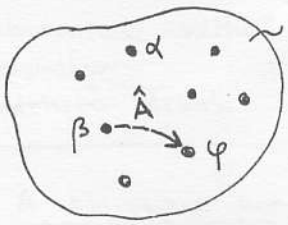
→ ÁLTALÁNOSÍTHATÓ

II. Axióma

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

MATEMATIKAI ÖSSZEFOGLALÓ:

Függvénytér és operátorok:



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

operátor:

$\varphi = \hat{A}\beta$ (leképzés $\mathcal{H} \to \mathcal{H}$)

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 számok

Operátor algebra:

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

$(\hat{A}\cdot\hat{B})\varphi = \hat{A}(\underbrace{\hat{B}\varphi}_{\gamma})$ (operátorok ÖSSZETESZTÉSE)

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

$\int_{\infty} |\psi|^2 dV = 1$ $\xrightarrow{\text{általánosítás}}$ (α,β) = komplex szám (SKALÁR szorzat)

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

↑

(x,y,z) } tetszőleges koordinátarendszer
(r,ϑ,φ) } választható.

A $H(p_x, p_y, p_z, x, y, z)$ Hamilton függvény és a Schrödinger egyenletnél bevezetett $\hat{H}$ operátor összehasonlításával egy kézenfekvő lehetőség kínálkozik a hely(koordináta) és az impulzus(koordináta) operátorok megkonstruálására. Mi a Schrödinger által javasolt megoldást fogjuk használni. Eszerint a hely(koordináta)–hoz rendelt operátornak a ”helykoordinátával való szorzást” feleltetjük meg és az impulzus(koordináta)–hoz rendelt operátor a megfelelő ”helykoordináta szerinti deriválás” matematikai műveletével hozható kapcsolatba.

Azaz $\hat{x} \equiv x \cdot$ valamint $\hat{p}_x \equiv \frac{\hbar}{j}\frac{\partial}{\partial x}$ és a többi komponens is esetén hasonló módon járunk el.

Az (x, y, z, p_x ,p_y ,p_z) dinamikai alapmennyiségekhez rendelt operátorok ismeretében egy tetszőleges $F(\vec{p}, \vec{r})$dinamikai változóhoz rendelt $\hat{F}$ operátor a Hamilton operátor mintájára kapható meg.

Ezek szerint, egy tetszőleges F dinamikai változóhoz oly módon rendelünk operátort (2.axióma!), hogy előbb felírjuk a dinamikai változó $F(p_x, p_y, p_z, x, y, z)$ klasszikus definícióját, majd ezután a koordináta és impulzuskomponensek helyébe beírjuk a Schrödinger féle operátorokat, azaz $\hat{F} \equiv F(\hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{p}_z, \hat{x}, \hat{y}, \hat{z})$.

Az eddigiek alapján már megfogalmazhatjuk azt az általános matematikai módszert, amelyet mindig alkalmazunk majd valamely ismert dinamikai változó kvantummechanikai tárgyalása során. Először felírjuk az illető dinamikai változó klasszikus mechanikai definícióját $(F(\vec{p}, \vec{r}))$. Utána a 2.axióma szerint megkonstruáljuk a dinamikai változóhoz rendelt operátort $(\hat{F})$. Majd ezután felírjuk a sajátérték egyenletet és megoldjuk $(\hat{F}\varphi_i = F_i \cdot \varphi_i)$. A 3.axióma szerint így megkapjuk a szóban forgó dinamikai változó mérhető értékeit $\{F_1, F_2, F_3, ..., F_i, ...\}$. A kapott számítások a kísérletekkel összehasonlíthatók, azaz (és ez nagyon lényeges!) a használt elméleti modell fizikailag közvetlenül vagy közvetetten értelmezhető. A használt módszer egyszerűsített sémája tehát a következő:

"Klasszikus mechanika → Operátorok → Sajátérték egyenlet → Fizikai értelmezés → Mérés”.

A továbbiakban mindig így fogunk hivatkozni rá!

Az imént elmondottak a természettudományos gondolkodásmód (paradigmarendszer) alapsémájának az alkalmazását jelenti a kvantummechanikában.

Ez a séma (az ”egzakt” tudományok esetén) leegyszerűsítve a következő:

”Elmélet”→”Matematikai modell”→”Kvantitatív eredmények”→”Kísérlet”

Ez a természettudományos gondolkodásmód (a ”régi görögöktől” napjainkig) több ezer év során szerzett ismeretek és tapasztalatok során alakult ki és bizonyult sikeresnek. Ennek nyomán az Emberiség egy ”technikai civilizációt” hozott létre annak minden örömével és keserűségével együtt. Lehet filozofálgatni azon, hogy ez a civilizáció az “Embert” boldogabbá tette–e vagy sem (J.J. Rousseau óta sokan és sokat gondolkodtak már el ezen az “örökzöld” témán). A tény azonban tény marad: az Emberiség ezt az utat választotta a ”bölcseleti civilizáció” helyett, jóllehet ennek csírái is megvoltak főleg a távolkeleti gondolkodási sémák mélyén.

A kísérletekkel (a tapasztalattal) való szembesülés azt a ”természetes igényünket” fejezi ki, hogy a fizikában használt modelljeink ”reálisak” legyenek (azaz legyen ”valóságtartalmuk”). Nem reális modellek lehetnek nagyon szépek, izgalmasak, emberközeliek és ”lélekemelőek” (a vallási mítoszoktól kezdve a számtalan ezoterikus tanon át a hétköznapi babonákig) de ezeknek az ”objektív” valóságtartalma a természettudományos szemlélet szerint (diplomatikusan fogalmazva) ”erősen vitatható”. Igy ezek használata kívül esik a Fizika (mint tudomány) körein. Napjainkban az áltudományok (média által ”felkapott”) egyre hangosabb (és népszerűbb) képviselői miatt néha rákényszerülünk ilyen irányú tudományos vizsgálatokra is. De (a több százéves tapasztalatok szerint) ennek ”józanító” hatása az áltudományokra nézve enyhén szólva is kétséges és így egy ”fizikus számára” elveszett erőfeszítés. Talán ezért hallgatunk akkor is, amikor szólni kellene?! (Pl. ”az örökmozgó” évenkénti feltalálása kapcsán.)

Mivel az operátorok kulcsfontosságú szerepet töltenek be a kvantummechanikai számításokban, ezért szükség van az általunk gyakran használt matematikai szabályok és tételek rövid összefoglalására. Itt elsősorban a matematikában a "lineáris terek" elméletében tanultakra alapozunk.

<u>Rövid matematikai összefoglaló</u>.

A háromdimenziós fizikai terünk geometriai tulajdonságait már régóta kutatja a gondolkodó Ember. A geometria a régi görög természetfilozófia egyik alapja volt. Az évszázadok során felgyülemlett geometriai ismertek rendszerbefoglalása Euklidesz nevéhez fűződik. Az alapfogalmakra és axiómákra épülő logikai konstrukció a görög tudományos gondolkodás csúcsteljesítménye volt. Állításai (matematikáról lévén szó) azóta is érvényesek.

Az általánosítás lehetősége több oldalról is kínálkozott, egyrészt a háromnál több dimenzó, másrészt a komplex számok irányába. Így alakult ki aztán a Funkcionálanalízis, mint a matematika egyik fontos részterülete.

A lineáris tér (= vektor tér)

Adott $\Gamma = \{a, b, c, ...\}$ komplex (vagy valós) számok halmaza, amelyeket "skalároknak" nevezünk. Legyen adva $L = \{\bar{x}, \bar{y}, \bar{z}, ...\}$ „absztrakt" elemek halmaza ezeket "vektoroknak" nevezzük. Itt most nem kell semmiféle konkrét algebrai, vagy geometriai objektumra gondolni, ezek legyenek valóban „absztrakt" elemek. A „felül vonás" $(\bar{x})$ jelölést azért vezettük be, hogy egy „vektor" láthatóan is különbözzön egy „skalártól" (a). A vektorok „L" halmazán értelmezzük a vektorok összeadása (jelölése:"+") és a skalárral való szorzás (jelölése „·") műveletét. Ez utóbbit gyakran nem jelőljük (azaz a „pontot" elhagyjuk).

Az "L" halmaz lineáris tér (vagy vektortér), ha teljesülnek a következő axiómák:
(„Ha A akkor B" logikai kifejezést „A→B"-vel fogjuk jelölni)

1.) $\bar{x}, \bar{y} \in L \rightarrow \bar{x} + \bar{y} \in L$

2.) $\bar{x} \in L$ és $a \in \Gamma \rightarrow a\bar{x} \in L$

3.) $\bar{x} + \bar{y} = \bar{y} + \bar{x}$ [a vektorok összeadása „kommutatív" művelet.]

4.) $(\bar{x} + \bar{y}) + \bar{z} = \bar{x} + (\bar{y} + \bar{z})$ [a vektorok összeadása „asszociatív" művelet]

5.) $\exists\ \bar{0},\ \ \bar{x} + \bar{0} = \bar{x}$ [van „nulla vektor", jelölés $0 \equiv \bar{0}$]

6.) $\exists\ (-\bar{x}),\ \ \bar{x} + (-\bar{x}) = \bar{0}$ [van „inverz" elem, jelölés: $\bar{x} + (-\bar{y}) \equiv \bar{x} - \bar{y}$.]

7.) $1 \in \Gamma,\quad 1 \cdot \bar{x} = \bar{x}$

8.) $a, b \in \Gamma,\quad a(b\bar{x}) = (ab)\bar{x}$

9.) $(a + b)\bar{x} = a\bar{x} + b\bar{x}$

10.) $a(\bar{x} + \bar{y}) = a\bar{x} + a\bar{y}$

Ha a skalárok valósak, akkor "valós lineáris térről", ha komplexek, akkor "komplex lineáris térről" beszélünk.

Bevezethető a skalár szorzás művelete, amely a tér két tetszőleges „$\bar{x}, \bar{y}$" eleméhez egy $(\bar{x}, \bar{y})$ komplex számot rendel a következő axiómák szerint:

1.) $(\bar{x}, \bar{y}) = (\bar{y}, \bar{x})^*$

2.) $(\bar{x}, a\bar{y}) = a(\bar{x}, \bar{y})$

3.) $(\bar{x}_1 + \bar{x}_2, \bar{y}) = (\bar{x}_1, \bar{y}) + (\bar{x}_2, \bar{y})$

4.) $(\bar{x}, \bar{x}) \geq 0$

A normált terek

A lineáris (vektor) tér normált tér, ha létezik egy "léképzés", amely az L vektortér minden "$\bar{x}$" eleméhez egy valós $\|\bar{x}\|$ számot rendel a következő axiómák szerint:

1.) $\|\bar{x}\| \geq 0$

2.) $\|a\bar{x}\| = |a| \cdot \|\bar{x}\|$

3.) $\|\bar{x} + \bar{y}\| \leq \|\bar{x}\| + \|\bar{y}\|$

A metrikus terek

Metrikus egy vektortér, ha létezik egy olyan leképzés, amely a tér bármely két "$\bar{x}, \bar{y}$" eleméhez egy "$r(\bar{x}, \bar{y})$" valós számot rendel a következő axiómáknak megfelelően:

1.) $r(\bar{x}, \bar{y}) = r(\bar{y}, \bar{x})$

2.) $r(\bar{x}, \bar{x}) = 0$

3.) $r(\bar{x}, \bar{y}) + r(\bar{y}, \bar{z}) \geq r(\bar{x}, \bar{z})$

Euklideszi tér

Euklideszi a vektortér („E"), ha a normát a skalár szorzással definiáljuk (azaz. $L \equiv E = \{\bar{x}, \bar{y}, \bar{z}, ...\}$)

Azaz $\|\bar{x}\| = \sqrt{(\bar{x}, \bar{x})}$ és $r(\bar{x}, \bar{y}) \equiv \|\bar{x} - \bar{y}\|$

Hilbert tér

Hilbert térnek („H") nevezzük a komplex Euklideszi teret. Azaz $H \equiv E = \{\bar{x}, \bar{y}, \bar{z}, ...\}$

A fentiekben nem kellett megmondani, hogy az absztrakt vektor tér $L = \{\bar{x}, \bar{y}, \bar{z}, ...\}$ elemei milyen konkrét matematikai objektumokkal valósítjuk meg.
A lineáris terek egy konkrét megvalósítását a tér **egy reprezentációjának** nevezzük.

A kvantummechanika megalkotása során kiderült, hogy az elméleten belül olyan függvényekkel kell dolgozunk, amelyek Hilbertet alkotnak.

Azaz meg kell ismerkednünk a Hilbert tér egy adott függvényreprezentációjával.

A $H = \{\bar{x}, \bar{y}, \bar{z}, ...\}$ absztrakt Hilbert tér egy függvényreprezentációját a következőképpen fogjuk jelölni:: $H = \{\alpha, \beta, \gamma, ..., \varphi, \psi, ...\}$. A halmaz $\alpha, \chi, \gamma, ...stb...$ elemei adott tulajdonságú (a Hilbert tér axiómarendszerét kielégítő) komplex függvények.

Legyen tehát megadva, (a későbbiekben még részletezendő) ismert tulajdonságú "függvények" $H = \{\alpha, \beta, \gamma, ..., \varphi, \psi, ...\}$ halmaza! A matematikai összefoglalóban már láttuk, hogy ezek a tulajdonságok nagyon hasonlítanak egy véges dimenziós Euklideszi vektortér tulajdonságaira. Ezért az elnevezéseket is onnan vettük át.

Ezen a függvényhalmazon értelmezhetünk különböző transzformációkat. Ezeket a transzformációkat másként operátornak nevezzük. Általában egy transzformáció (operátor) a halmaz egy pl. β elemét a halmaz egy másik pl. φ elemébe visz át. Ezt így jelöljük: $\varphi = \hat{A}\beta$.

Egy $\hat{A}$ **operátor lineáris**, ha eleget tesz az általános linearitási feltételnek. Az operátorok tehát tulajdonképpen a H (függvény)halmazon értelmezett lineáris transzformációk, amelyek a halmazt önmagára képezik le.

Az operátorok között két műveletet definiálunk az "összeadást" $\left(\hat{A} + \hat{B}\right)$ és a "szorzást" $\left(\hat{A}\hat{B}\right)$.

A H halmazon értelmezzük a "skalár szorzást". Ez a halmaz bármely két (α, β függvény) eleméhez egy $\langle \alpha | \beta \rangle$ komplex számot rendel a megadott (integrálási) definíció szerint.

(35) $\int_{\infty} \alpha^*(\bar{r})\alpha(\bar{r})\,dV = \int_{\infty} |\alpha(\bar{r})|^2\,dV \equiv \langle\alpha|\alpha\rangle = 1$ (NORMA)

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

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

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

részletesen kiírva (β,γ függvények esetén)

$\int_{\infty} \ldots$

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

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

részletesen kiírva (β,γ függvények esetén)

$\int_{\infty} \ldots$

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 $\hat{A}^+ = \hat{A}$

$$\langle\alpha|\hat{A}\alpha\rangle = A\langle\alpha|\alpha\rangle$$
$$\langle A\alpha|\alpha\rangle = A^*\langle\alpha|\alpha\rangle$$

$\downarrow$

$A^* = A$ azaz valós

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

Bizonyítás :

$$\hat{A}\alpha_i = A_i\alpha_i$$
$$\hat{A}\alpha_j = A_j\alpha_j \longrightarrow (\hat{A}\alpha_j)^* = A_j\alpha_j^*$$

egyenlő, mert $\hat{A}^+ = \hat{A}$

$$\langle\alpha_j|\hat{A}\alpha_i\rangle = A_i\langle\alpha_j|\alpha_i\rangle$$
$$\langle\hat{A}\alpha_j|\alpha_i\rangle = A_j\langle\alpha_j|\alpha_i\rangle$$

$$(A_i - A_j)\langle\alpha_j|\alpha_i\rangle = 0$$

$(A_i - A_j) \neq 0$ $\quad \langle\alpha_j|\alpha_i\rangle = 0$ kell, hogy legyen

$(A_i \neq A_j)$

Egy α függvény önmagával vett $\langle \alpha | \alpha \rangle$ skalár szorzatát "normának" nevezzük. Ez a skalár szorzat definíciójából fakadóan mindig egy valós szám. A H halmaz olyan függvényekből áll, amelyek normája véges mennyiség. Ezeket normálható függvényeknek nevezzük.

A normát definíciószerűen egynek választjuk, $\langle \alpha \alpha \rangle = 1|$.

Két függvény, α és β "ortogonális", ha a skalár szorzatuk zérus, azaz $\langle \alpha | \beta \rangle = 0$.

A skalár szorzat felhasználásával minden $\hat{A}$ operátorhoz hozzá tudunk rendelni egy másik $\hat{A}^+$ ún. "adjungált" operátort a következő képpen: $\langle \varphi | \hat{A} \psi \rangle = \langle \hat{A}^+ \varphi | \psi \rangle$.

Egy operátor önadjungált, ha adjungáltja megegyezik önmagával $\hat{A} = \hat{A}^+$. Azaz $\langle \varphi | \hat{A} \psi \rangle = \langle \hat{A} \varphi | \psi \rangle$

Az önadjungált operátoroknak kiemelt szerepe van a kvantummechanikai alkalmazásokban. Ennek oka az, hogy az önadjungált operátorok sajátértékei valósak (1.Tétel).

Azaz, ha $\hat{A}^+ = \hat{A}$ és $\hat{A}\alpha = A \cdot \alpha$, akkor $A^* = A$

Így (a már közölt harmadik kvantummechanikai axióma értelmében) a dinamikai változókhoz önadjungált operátorokat kell rendelni, hiszen minden mérési eredmény csak valós szám lehet.

Az önadjungált operátorok másik, a fizikai alkalmazások szempontjából igen fontos tulajdonsága az, hogy a különböző sajátértékihez tartozó sajátfüggvényei ortogonálisak egymásra (2.Tétel).

ORTONORMÁLT (függvény) rendszer

$\{\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \dots, \alpha_i, \dots\}$ — lineárisan függetlenek

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

↓

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

$\forall \varphi \in \mathcal{H}$ $\quad \boxed{\varphi = \sum_{i=1}^{\infty} a_i \alpha_i}$ $\quad (a_i$ = 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

(!) VIGÁZAT

Következmények:

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

↓

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

Az a_i skalár komponensek meghatározása:

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

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

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

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

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

Bázistranszformációk $\rightarrow$ Mátrixok

FIZIKA:

Elektron állapot $\rightarrow \varphi \in \mathcal{H}$ — I. Axióma

↓

A "szuperpozíció elve": $\varphi = c_1 \varphi_1 + c_2 \varphi_2$

↑ ↑ ↑

lehetséges állapotok

Az ortogonalitás igen fontos tulajdonság. Gondoljunk például arra, hogy segítségével elemi módon, szemléletesen értelmezni tudjuk az egy, két és a háromdimenziós (geometriai) terek egymásra-épülését. Az, hogy az általunk ismert fizikai tér a tapasztalataink szerint háromdimenziós, ez más kérdés! Mint láttuk, a konkrét geometriai (háromdimenziós) terünk egyfajta általánosítás kiindulópontjának tekinthető. Matematikai absztrakciónk képes arra, hogy tetszőleges, háromtól különböző dimenziós, absztrakt tereket is leírjunk és használjunk.

Egy függvényrendszert ortonormáltnak hívunk, ha az elemei lineárisan függetlenek, a normájuk egy és az elemek páronként ortogonálisak egymásra. A H függvénytér fontos tulajdonsága az, hogy mindig kiválasztható belőle egy B ortonormált függvényrendszer. Ezt a B függvényrendszert a tér bázisának mondjuk és az α_i elemeit bázisfüggvényeknek nevezzük azért, mert a H függvénytér bármelyik ψ eleme felírható az α_i bázisfüggvények lineáris kombinációjaként. Erre azt mondjuk, hogy a H függvénytér "teljes tér", mert elemei egy bázis szerint sorbafejthetők. A bázisfüggvények száma éppen a tér dimenziószámát adja. (Láthatóan helyzet, és ezért a szóhasználat is, ugyanaz mint a már megszokott és ezért szemléletes háromdimenziós tér esetén.) Mivel (jelen esetben) a H függvénytér α_i bázisfüggvényeinek a száma végtelen $(i = 1,2,3,...\infty)$, így a H egy végtelen dimenziójú euklideszi tér. Mint ismeretes, a "végtelen" a matematikában nem mennyiség, hanem minőség! Így a "végtelen dimenziós euklideszi" tér néhány tulajdonsága kissé eltér a véges dimenziósokétól. Ez azt jelenti, hogy van néhány olyan tulajdonság, ami a véges dimenziós euklideszi terekben triviálisan teljesül de a végtelen dimenziós térben már nem (pl. egység élhosszúságú kocka "átlós csúcspontja" nem eleme a térnek). Ezért bizonyos kikötéseket kell tennünk annak érdekében, hogy a tér továbbra is "euklideszi" maradhasson.

Mindenesetre azokat az euklideszi tereket, amelyekben a "számok" a "komplex számokat" jelentik Hilbert térnek nevezzük (függetlenül annak dimenziójától). A matematikusok azt mondják, hogy a Hilbert tér nem más, mint a "komplex számtest felett értelmezett euklideszi tér".

Mivel a H tér minden φ elemének a normája egy, ezért ez a B bázis szerinti a_i sorfejtési együtthatókra nézve egy megkötést jelent. Az a_i sorfejtési együttható a φ függvénynek és az α_i bázisfüggvény $\langle \alpha_i | \varphi \rangle$ skalár szorzatával egyenlő. A B bázis a H -n értelmezett bármelyik operátor sajátfüggvény-rendszere lehet.

Ezen rövid és koránt sem teljes matematikai összefoglalás után kimondhatjuk a kvantummechanika **első axiómáját** is :

Egy részecske (pl. egy elektron) állapotaihoz a H Hilbert tér elemeit rendeljük.

Ez azt jelenti, hogy a (fizikai) elektronállapotokat a számításaink során (matematikai) függvények reprezentálják, azaz jelenítik meg.

Ebben az axiómában (is) egy igen fontos tapasztalati tény fogalmazódik meg. A mikrofizikai jelenségeknek ugyanis van egy (a klasszikus jelenségeknél nem tapasztalt és ezért a hétköznapi szemléletünk számára egyáltalán nem szemléletes) sajátossága, amit az ún. "szuperpozíció elvében" fogalmazunk meg. Eszerint, ha egy mikrofizikai objektum felvehet két különböző állapotot, akkor felveheti ezen állapotok "valamiféle vegyülékét" is. Ezt nevezzük a két állapot "szuperpozíciójának", amit a matematika nyelvén az állapotokhoz rendelt hullámfüggvények lineáris kombinációjával adunk meg. (Ne felejtsük el, hogy most a számok komplex számokat jelentenek!) Látható, hogy a "szuperpozíció" ténye matematikailag a Hilbert téren, igen egyszerűen megfogalmazható, ugyanakkor nehezen tudjuk (sőt szinte lehetetlen is) ezt a jelenséget hétköznapi fogalmainkkal képszerűen leírni. Ennek ellenére (mint azt majd látni fogjuk) a klasszikus szemmel nézve furcsa tapasztalatok sokasága bizonyítja ezen első axióma realitását.

"Hiába, a Kvantummechanika megértéséhez csak a Kvantummechanikán keresztül vezet az út!" (O.L.)

1.2.2. Operátorok felcserélési törvényei
(csereviszonyok)

$\hat{x} = x\cdot$

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

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

Általában:

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

(kommutátor)

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

Axióma II.

$$\left.\begin{aligned}[\hat{p}_x, \hat{x}] &= \frac{\hbar}{j}\\ [\hat{p}_y, \hat{y}] &= \frac{\hbar}{j}\\ [\hat{p}_z, \hat{z}] &= \frac{\hbar}{j}\end{aligned}\right\}$$ az operátorok nem cserélhetők fel

↓

FIZIKAI TARTALMA → MÉRÉS

↑

$$\left.\begin{aligned}[\hat{p}_x, \hat{p}_y] &= \varnothing\\ [\hat{p}_y, \hat{p}_z] &= \varnothing\\ [\hat{p}_z, \hat{p}_x] &= \varnothing\\ [\hat{x}, \hat{y}] &= \varnothing\\ [\hat{y}, \hat{z}] &= \varnothing\\ [\hat{z}, \hat{x}] &= \varnothing\\ [\hat{p}_x, \hat{y}] &= \varnothing\\ &\vdots \text{ stb}\end{aligned}\right\}$$ az operátorok felcserélhetők

1.2.2. Az operátorok felcserélési törvényei

Az általunk használt Schrödinger féle kvantummechanikai modellben (ezt Schrödinger féle reprezentációnak is szokták nevezni) már meghatároztuk a helykoordinátákhoz és az impulzus komponensekhez rendelt operátorokat. Érdemes megvizsgálni azt, hogy ha két operátor (egymás után) hat egy függvényre, akkor számít-e az operátorok sorrendje. Láttuk azt, hogy ha két operátor egymás után hat egy függvényre, akkor azt az "operátorok szorzási" műveletével fejezzük ki. Az operátorok között definiáltuk az összeadás (különbség) műveletét is. A két operátorból ennek a két algebrai műveletnek a kombinációjával egy újabb operátor képezhető, amelyet a két operátor ún. "kommutátorának" hívunk. Ha a kommutátor(operátor) zérus, akkor ez azt jelenti, hogy a két operátor egymás utáni alkalmazásakor a sorrendjük felcserélhető. Röviden azt mondjuk, hogy "a két operátor felcserélhető". Mint azt majd látni fogjuk a kommutátoroknak igen fontos szerepe van a kvantummechanikai méréselméletben. Emiatt valójában nem is az a fontos, hogy az alapmennyiségekhez (koordináta és impulzus) milyen operátorokat rendelünk, hanem az, hogy ezeknek a kommutátorai mivel egyenlőek. Ezeket "felcserélési törvényeknek" vagy " kommutációs relációknak" nevezzük.

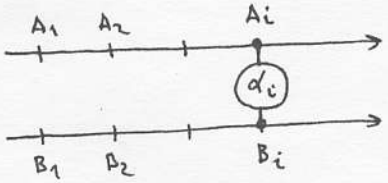
A második axiómánkat ki kell tehát egészítenünk avval, hogy megadjuk a koordináta és impulzuskomponensek között fennálló felcserélési törvényeket.

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

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

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

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



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

$\hat{A}(\underbrace{\hat{B}\alpha_i}_{c\cdot\alpha_i}) = A_i \cdot (\underbrace{\hat{B}\alpha_i}_{c\cdot\alpha_i})$ (kell, hogy legyen)

$\hat{B}\alpha_i = c\alpha_i \longleftrightarrow \hat{B}\beta_i = B_i\beta_i$

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

"azonos" sajátfüggvény rendszerek

Az általában előforduló esetek:

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

$\hat{A}\alpha_i(x) = A_i \alpha_i(x)$
$\hat{B}\beta_i(y) = B_i \beta_i(y)$
$\Big\}$ $\varphi_i(x,y) \equiv \alpha_i(x)\cdot\beta_i(y)$

$\hat{A}\varphi_i = A_i \varphi_i$
$\hat{B}\varphi_i = B_i \varphi_i$
$\Big\}$ azonos sajátfüggvények

Pl: $[\hat{P}_x, \hat{W}_k(x)] = 0 \xrightarrow{\text{ált.}} [\hat{A}, f(\hat{A})] = 0$

($\hat{W}_k(x)$ ↑ $\frac{1}{2m}\hat{P}_x^2$)

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

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

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

$\vdots$

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

$\vdots$

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

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

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

Fontos tétel a következő:

Ha két operátor felcserélhető, akkor a sajátfüggvény-rendszerük megegyezik.

Két esetet különböztethetünk meg.

Az első esetben a két (függvény)operátor olyan, hogy különböző változójú függvényekre hatnak. Ekkor a közös sajátfüggvény-rendszer a két operátor sajátfüggvényeinek a szorzatából áll.

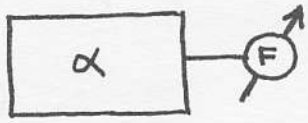
A másik esetben a két operátor olyan, hogy az egyik operátor a másiknak egy hatványsorba fejthető függvénye. Ez létezhet, hiszen az operátorok összeadása és szorzása jól definiált műveletek. Ekkor a két operátor sajátfüggvényei ugyanazok lesznek és a sajátértékek mintegy öröklik az operátorok közötti függvénykapcsolatot is.

1.2.3. A kvantummechanikai méréselmélet alapjai.

$\Psi(\vec{r},t)$ fizikai jelentése → $|\Psi|^2 dV$ (VALÓSZÍNŰSÉG) → MÉRÉS

→ $\vec{j} = \frac{\hbar}{2mj}\left(\Psi^* \nabla\Psi - \Psi \nabla\Psi^*\right)$

jelölés:



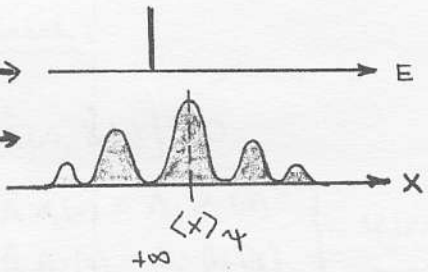
"RENDSZER"

pl: egy elektron amelyik α állapotban van

"MÉRŐMŰSZER" (adott dinamikai változó mérésére szolgáló berendezés)



III. Axióma $\hat{H}\psi = E\psi$ →



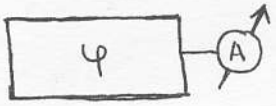
BORN $|\psi|^2 dx$ →

$$\begin{cases} \langle x\rangle_\psi = \int_{-\infty}^{+\infty} x\,|\psi|^2 dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \hat{x}\,\psi^*\psi\,dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*\hat{x}\,\psi\,dx \\ \langle E\rangle_\psi = E \rightarrow \hat{H}\psi = E\psi \rightarrow \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*\hat{H}\psi dx = E\underbrace{\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*\psi\,dx}_{1} \end{cases}$$

↓ azaz

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

↓ ÁLTALÁNOSÍTÁS



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

IV. Axióma

1.2.3. A kvantummechanikai méréselmélet alapjai

Láttuk azt, hogy a $\Psi(\vec{r},t)$ állapotfüggvény Born féle fizikai értelmezése egy olyan intuitív kijelentés volt, amelyet a mérési tapasztalatok igazoltak.(Intuíció: a dolgok lényegének ösztönös felismerése)

Az elektronra (mikro részecskékre) vonatkozó valószínűségi kijelentések csak a méréseken keresztül értelmezhetőek. Ezért szükség lesz majd a "mérés" fogalmának a precíz definiálására. Addig is a "mérésen" a klasszikus fizikában már megszokott eljárást fogjuk érteni. A mérést magát egy mérőrendszer végzi. Ez egyrészt tartalmaz egy olyan berendezést, amely egy adott állapotú elektron (vagy egyéb részecske) előállítására alkalmas, másrészt egy mérőműszert, amelyik az ezen az elektronon (részecskén) végrehajtott mérés eredményét kijelzi. A mérőrendszert egy blokk diagrammal szemléltethetjük. A mérőrendszer mindkét része igen bonyolult lehet. Gondoljunk csak azokra a hatalmas részecskegyorsítókra, amelyekkel a földi körülményekhez képest igen különleges állapotú részecskéket lehet "gyártani". Valamint azokra az igen bonyolult számítógépek által vezérelt detektorokra, amelyek a mérőműszer szerepét töltik be. A funkció a lényeg, nem a bonyolultsági fok! Egy mérőműszer természetesen csak egyféle dinamikai változó mérésére alkalmas (hiszen egy adott méréskor csak egyféle eredményt jelezhet). Így beszélhetünk, pl.: helymérő, impulzusmérő, energiamérő, stb... műszerekről.

A negyedik axiómához a hullámfüggvény valószínűségi értelmezésének az általánosításán keresztül juthatunk el, a következőképpen. Legyen adva egy φ állapotú elektron (1.axióma)! Az egyszerűség végett tételezzünk fel egy egydimenziós modellt, azaz $\varphi(x)$ állapotfüggvény csak az x koordinátának legyen a függvénye! Legyen ebben az állapotban az elektron energiája E (3.axióma)! Ez azt jelenti, hogy ha valahányszor megmérnénk a φ állapotú elektron energiáját arra mindig E értéket kapnánk. Ezért az energiamérés átlaga is E lesz. Ezt az E értéket, mint az energiamérés átlagát, a $\varphi(x)$ állapotfüggvény ismeretében a Schrödinger egyenletből egy skalár szorzat segítségével ki tudjuk számítani: $\langle E\rangle_{\varphi} = \langle\varphi|\hat{A}|\varphi\rangle$. Ugyanekkor a $\varphi(x)$ állapotfüggvény ismeretében, a Born-féle valószínűségi értelmezés felhasználásával ki tudjuk számítani a helymérés várható értékét (a helymérés átlagát) is: $\langle x\rangle_{\varphi} = \langle\varphi|\hat{x}|\varphi\rangle$. Azt tapasztaljuk, hogy mind az energiamérés, mind pedig a helymérés várható(átlag)értékére formailag ugyanolyan típusú matematikai kifejezést kapunk. Ezek után az eredményeink általánosíthatóak. Azaz kimondjuk a **negyedik axiómát,** amely szerint:

> **"Egy tetszőleges φ állapotú állapotú elektron (részecske) esetén, egy tetszőleges "A" dinamikai változó mérésének a várható (átlag) értéke a $\langle\varphi|\hat{A}|\varphi\rangle$ skalár szorzat segítségével számítható ki."**

;

A kvantummechanika axiómái (= posztulátumai)

I. $\{\text{állapotok}\} \rightarrow \{\alpha, \beta, \gamma, \ldots, \varphi, \ldots\} \equiv \mathcal{H}$

II. $\{\text{dinamikai változók}\} \rightarrow \{\hat{A}, \hat{B}, \ldots, \hat{H}, \ldots\}$

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

$$\hat{F} = F(\hat{p}_x, \hat{x}, \ldots)$$

III. $\hat{F}\varphi_i = F_i \varphi_i \quad (i = 1,2,3,\ldots)$

IV. $\langle F \rangle_\gamma = \langle \gamma | \hat{F} | \gamma \rangle \qquad \gamma \in \mathcal{H}$

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.n. Heisenberg-féle csererelációkat.

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

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

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:

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

Mielőtt tovább mennénk, iktassunk be "pihentetőnek" illetve "kedvcsinálónak" egy kis "Filozofikus Közjátékot":

Az eddigiekben megalkottuk a kvantummechanika axiómarendszerét. Az axiómarendszer helyességét a mérési eredmények igazolják. Mi ezt (a szakmai érdeklődésünknek és a céljainknak megfelelően) az elektron(ok) viselkedésének a leírására fogjuk felhasználni. Így az alkalmazott matematikai egyenleteink is ennek felelnek majd meg. Ez azonban nem azt jelenti, hogy a kvantummechanika közölt axiómái csak az elektronokra érvényesek. Ugyanez az axiómarendszer, de egy általánosabb és absztraktabb formában, alkalmas a ma ismert valamennyi mikrofizikai jelenség leírására is. Mi ezzel a tanulmányaink során nem tudunk foglalkozni. De jó az, ha tudjuk, hogy a felírt axiómákkal egy olyan szemlélethez és paradigma rendszerhez (gondolkodási sémák rendszeréhez) jutottunk, amellyel a ma ismert (majdnem!) valamennyi fizikai jelenség (a gravitációt kivéve!) tárgyalható. A fizikusok vágya az, hogy az ismert négy kölcsönhatás (úgy, mint az erős, gyenge, elektromágneses és gravitáció) egyetlen egy kölcsönhatásból levezethető legyen. Eddig a gravitáció még kicsúszott a kezeink közül, de a másik három már valamiféle egységbe vonható. Az úton tovább kell haladni, bár az elméleti nehézségek óriásiak.

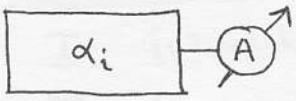
Az út neve a "GUT = Grand Unification Theories = Nagy Egyesítési Elméletek".

Az eddigi kísérleti és elméleti részecskefizikai ismereteink lehetővé teszik, hogy megbízhatóan reprodukáljuk az univerzum állapotát a nagy robbanást követő 10^{-18} (!!!)másodperctől kezdve napjainkig. De még sejtelmünk sincsen arról, hogy milyen meglepetéseket tartogat a Természet, ha születésének korábbi titkait kutatjuk. Az eddigi úton (GUT) mindvégig azt a kvantummechanikát használtuk, amelynek egyszerűsített változatát az előzőekben "kitaláltuk".

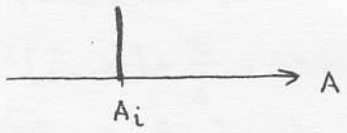
Joggal mondhatjuk, hogy a KVANTUMMECHANIKA az emberiség szellemi alkotásainak a csúcsa. Teljesítőképessége (az Univerzum titkainak a feltárása) és gyakorlati használhatósága (mai modern technológiák) minden eddigi szellemi alkotás fölé emelik ŐT ! .

MÉRÉS a kvantummechanikában:

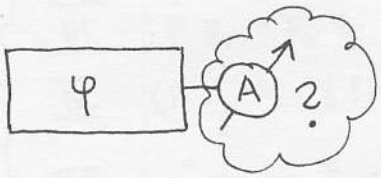
– mérés "SAJÁT ÁLLAPOTBAN":



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



– mérés (nem saját állapotban)



(III. Axióma)

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

III. Axióma: $\hat{A}\alpha_i = A_i\alpha_i \quad (i=1,2,3,\dots) \qquad \varphi \;\&\; \alpha_i$

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

I. Axióma: $\varphi = \sum_i^\infty a_i\alpha_i \longrightarrow \langle\varphi|\varphi\rangle = \sum_i^\infty |a_i|^2 = 1$

IV. Axióma:

$$\langle A\rangle_\varphi = \langle\varphi|\hat{A}|\varphi\rangle = \left\langle \sum_i^\infty a_i\alpha_i \,\middle|\, \hat{A} \,\middle|\, \sum_j^\infty a_j\alpha_j \right\rangle =$$

$$= \sum_i^\infty \sum_j^\infty a_i^* a_j \underbrace{\langle\alpha_i|\hat{A}|\alpha_j\rangle}_{A_j\alpha_j} =$$

$$= \sum_i^\infty \sum_j^\infty a_i^* a_j A_j \underbrace{\langle\alpha_i|\alpha_j\rangle}_{\delta_{ij}} = \sum_{i=1}^\infty |a_i|^2 \cdot A_i$$

azaz

$$\boxed{\langle A\rangle_\varphi = \sum_{i=1}^\infty |a_i|^2 \cdot A_i \qquad \sum_{i=1}^\infty |a_i|^2 = 1}$$

↓

ÉRTELMEZÉS ← VALÓSZÍNŰSÉG-SZÁMÍTÁS

Fogalmak:
- elemi mérés
- mérés

Ezen kis kitérő után térjünk vissza a kvantummechanikai méréselmélet kidolgozásához.

Láttuk azt, hogy a 3. és a 4.axióma a részecskék dinamikai jellemzőinek a mérésével kapcsolatosan tesz alapvető kijelentéseket. Szükség van tehát annak a pontos definiálására, hogy mit is kell értenünk "mérésen" a kvantummechanikában.

Induljunk ki a triviális esetből! Ekkor az elektron egy olyan állapotban van, amelyet egy olyan α_i függvény reprezentál (1.axióma), amelyik a mérendő A dinamikai változóhoz rendelt $\hat{A}$ operátor (2.axióma) i-edik sajátfüggvénye, azaz $\hat{A}\alpha_i = A_i \cdot \alpha_i$. Ekkor, valahányszor "megmérjük" az A dinamikai változót, mindannyiszor az A_i sajátértéket kapjuk (3.axióma). A mérendő dinamikai változó szempontjából azt mondhatjuk tehát, hogy az elektron a mérés előtt egy ”sajátállapotban” volt és a mérés során mindvégig abban is maradt. Ezen hosszú és bonyolult mondatok helyett röviden azt szoktuk mondani, hogy az elektron egy α_i "sajátállapotban" volt és a mérés "sajátállapotban" történt.

Bonyolultabb az eset akkor, amikor az elektron olyan állapotban van, amelyet egy olyan φ függvény reprezentál (1.axióma), amelyik nem tartozik a mérendő A dinamikai váltóhoz rendelt $\hat{A}$ operátor (2.axióma) sajátfüggvényei közé. Ekkor pongyolán, de röviden azt mondjuk, hogy a mérést ”nem sajátállapotban” végezzük. Mi lesz ekkor a mérés eredménye? Keressük meg azt az axiómát, amelyik közvetlenül választ adhat erre a kérdésre! Ez csak a 4.axióma lehet, hiszen a 3.axióma közvetlenül csak a sajátállapotban történő mérésre alkalmazható. Azaz a szóban forgó esetben a megmérendő A dinamikai változó várható(átlag)értékét tudjuk csak előre kiszámítani. Szükség van tehát arra, hogy precízen megmondjuk, hogy mit is jelent a kvantummechanikai mérés során a várható(átlag)érték méréssel történő meghatározása. Ezen (egyáltalán nem triviális) kísérleti kiértékelési mód megadása igen szemléletessé válik, ha előbb néhány, egyszerű elméleti meggondolást teszünk.

Elemi számolással és az axiómák felhasználásával a kérdéses várható értékre (az átlagértékre) egy igen fontos matematikai kifejezést kapunk. A levezetés során felhasználtuk azt, hogy az A dinamikai váltóhoz rendelt $\hat{A}$ operátornak az A_i sajátértékeihez tartozó α_i sajátfüggvényei a Hilbert tér egy bázisát adják és így a φ állapotfüggvény ezen bázisfüggvények szerint sorbafejthető. A sorfejtési együtthatókat a_i jelöli. Eredményül az adódik, hogy a mérés átlagértéke (a várható érték) az A_i sajátértékeknek $|a_i|^2$–el súlyozott összege lesz, azaz: $\langle A \rangle_\varphi = \sum_i^\infty |a_i|^2 A_i$. A súlyozási együtthatók az a_i sorfejtési együtthatókkal fejezhető ki. A φ állapotfüggvény normája miatt az $|a_i|^2$ súlyozási együtthatók összege egy: $\sum_i^\infty |a_i|^2 = 1$. Az eredmény az elemi valószínűség számításban tanultak alapján matematikailag könnyen értelmezhető.

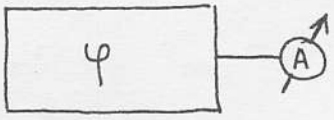
A fizikai értelmezéshez további meggondolások szükségesek.

A mondandónk jobb kifejthetősége végett finomítsuk a szóhasználatunkat és vezessük be az "elemi mérés" és a "mérés" fogalmát. Ez a két fogalom némileg hasonlít a valószínűs égszámításban használt "elemi esemény" és "esemény" fogalmakhoz. Bevezetésének didaktikai célja van. Az irodalomban **nem !! található** meg, mert ott mindkét fogalomra ugyanazt a "mérés" szót használják. A szövegkörnyezetből következik, hogy pontosan melyik fogalomról van éppen szó.

Elemi mérésnek fogjuk nevezni azt, amikor egy valamilyen állapotban lévő elektron (részecske) kölcsönhatásba lép a mérőműszer detektorával és ennek hatására az egy adott “értéket jelez”. Pongyolán, de röviden azt fogjuk mondani, hogy a mérőműszerünket ”rákapcsoltuk” az adott állapotú elektronra (részecskére) A 3.axióma értelmében egy elemi mérés eredménye csak egyetlen egy sajátérték lehet. Ha egy adott állapotú elektronon ugyanazon dinamikai változónak sok elemi mérését hajtunk végre, akkor a dinamikai változó méréséről beszélünk.

Nézzük meg, hogy az imént bevezetett fogalmak segítségével a tárgyalt méréseket hogyan tudjuk értelmezni (interpretálni).

A ”sajátállapotban történő” mérés során A dinamikai változó mérését egy α_i sajátállapotban hajtjuk végre, akkor minden elemi mérés eredménye ugyanaz az A_i sajátérték lesz A mérés eredménye tehát az A_i sajátérték maga.

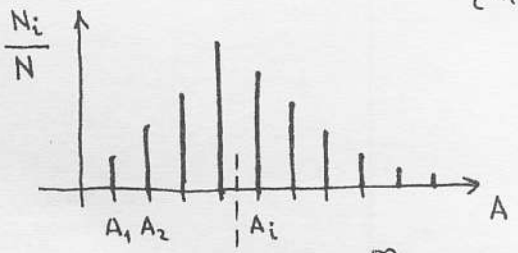


MÉRÉS ≡ N db elemi mérés

↓

$\{A_1, A_2, A_3, \ldots, A_i, \ldots\}$

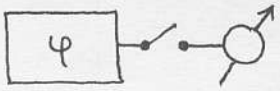
(III. Axióma)

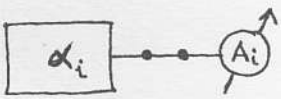


$$\langle A \rangle_\varphi = \sum_{i=1}^{\infty} \frac{N_i}{N} A_i \rightarrow \sum_{i=1}^{\infty} |a_i|^2 A_i$$

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

egy elemi mérés előtt → egy elemi mérés után





(III. Axióma)

Tehát

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

Mint azt láttuk, a "nem sajátállapotban történő mérés" esetén a mérés várható értéke a mérendő dinamikai változó sajátértékeinek súlyozott átlagaként számítható ki. A valószínűség számításban tanultak értelmében az $|a_i|^2$ súlyozó együtthatókat valószínűségekként kell értelmeznünk. Ez most az alábbi módon tehető meg:

Tekintsünk egy φ állapotú elektront! Mérjük meg ennek az elektronnak azt a fizikai tulajdonságát, amelyet az A dinamikai változóval jellemzünk! Ha ezen a φ állapotú elektronon egy elemi mérést végrehajtunk, akkor ennek eredménye a 3.axióma szerint csak valamelyik A_i *(i = 1,2,3,...)* sajátérték lehet. Végezzünk el *N* db elemi mérést, de ügyeljünk arra, hogy minden elemi mérés előtt az elektron ugyanabban a φ állapotban legyen. A mérés tehát most *N* db elemi mérésből áll. Minden egyes elemi mérés eredménye (véletlenszerűen!) valamelyik sajátérték lesz. Most a mérés eredményének azt a hisztogramot tekintjük, amelyik az elemi mérések során adódó A_i *(i = 1,2,3,...)* sajátértékek relatív gyakoriságát tartalmazza. Ez azt jelenti, hogy *N* db elemi mérés közül N_i esetben adódott A_i sajátérték. A valószínűségszámításban tanultak alapján $N \to \infty$ esetén az A_i sajátérték N_i/N relatív gyakorisága annak a valószínűségét adja, hogy egy elemi mérés eredménye éppen A_i lesz.

A kvantummechanikában a mérés tehát az alábbi módon interpretálható. A mérés előtt az elektron valamilyen φ állapotban van. Az, hogy ismerjük-e ezt az állapotot vagy sem most nem lényeges. A gyakorlatban mind a két eset előfordul. Egyszerűen tekintsük adottnak ezt a φ állapotot. Meg akarjuk mérni az A dinamikai változót. Rákapcsolva az A dinamikai változót mérő műszert a rendszerre (egy elemi mérést végrehajtva) a műszer valamelyik A_i sajátértéket fogja mutatni. De ez egyben, a 3.axióma szerint, azt is jelenti, hogy az elektronunk éppen α_i állapotban van. Azaz az elemi mérés során az elektron a kezdeti φ állapotból a mérőműszerrel való kölcsönhatás következtében az α_i állapotba ment át. Az elemi mérés előtt csak azt tudjuk megmondani, hogy mi annak a valószínűsége, hogy az elektron φ állapota pl. α_i állapotra fog változni. Azt mondjuk erre, hogy ”elemi mérés pillanatában(!)” dől az el, hogy melyik állapot fog létrejönni (realizálódni).

Tehát egy elemi mérés kimenetelére (általában az események bekövetkezésére) a kvantummechanika ”ab ovo” (eleve azaz már az axiómák szintjén!) csak valószínűségi kijelentéseket tud tenni.

Ez alapvetően más, mint az, amit a klasszikus fizikában (mechanikában) tapasztaltunk. Ott a valószínűségi kijelentések mögött mindig egy szigorúan kauzális (ok–okozati) ”alvilág” húzódott meg. Gondoljunk pl. a statisztikus fizikában tanultakra, ahol a gázmolekulák mindegyike az egzakt Newton törvények szerint mozgott, azaz bármelyik molekula mozgása elvileg determinisztikus volt. Praktikus okokból (a 10^{23} nagyságú, hatalmas részecskeszám miatt) tértünk rá a statisztikus tárgyalásra. Mindez azonban az elméleti, elemi alapokat nem érintette.

Mindez azért izgalmas dolog, mert a kvantummechanikában a Természet (jelenlegi ismereteink szerinti) legalapvetőbb törvényeit fogalmaztuk meg. A klasszikus fizika szigorú kauzalitásán nevelkedett szemléletünk számára nagyon meghökkentő kijelentés az, hogy a Természet alaptörvényei véletlenszerűek. Azaz nincsen egy kauzális ”alvilág” a kvantummechanikai események mögött (hiszen, ha lenne, akkor az axiomáink nem lennének alaptörvények). Legalább is eddig még ilyet senki soha nem tapasztalt! Ez az ”okok nélküli véletlen” nehezen emészthető fogalom. Nagyon úgy néz ki, hogy Einstein kétkedése ellenére az Úristen mégis csak kockajátékos!

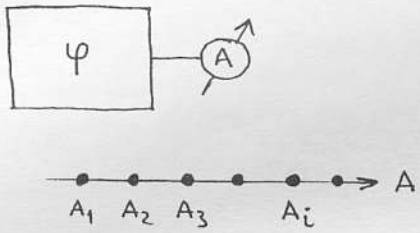
Az elmondottak filozófiai következményei beláthatatlanok.

Különösen ismeretelméleti vonatkozásai izgalmasak, ezért óvakodnunk kell az elhamarkodott és felületes kijelentésektől!

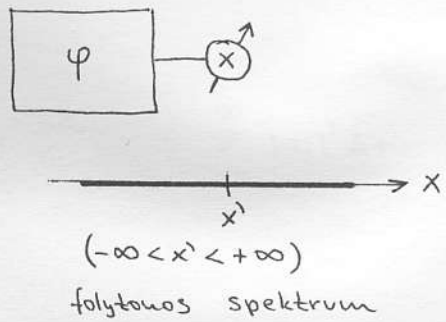
1.2.4. A koordináta és az impulzus kvantummechanikai tárgyalása

Kérdés:

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



diszkrét spektrum



folytonos spektrum

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

A $\mathcal{B}$ bázis meghatározása:

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

részletesen kiírva:

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

azonosító, változó

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

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

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

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

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

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

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

változó, azonosító

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

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

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

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

1.2.4. A koordináta és az impulzus kvantummechanikai tárgyalása

Mint azt láttuk, a 4. axiómához a hullámfüggvény Born féle értelmezésének az általánosításával jutottunk el. Most nézzük meg azt, hogy a 4. axiómából hogyan jön ki a Born féle értelmezés! Mint az ismeretes, ebben az esetben azt tudjuk megmondani, hogy mekkora valószínűséggel található meg az elektron a tér egy tetszőleges pontjában. Tehát helymérésről van szó. Az egyszerűség végett egydimenziós modellen fogunk dolgozni. A bevezetett sémánk szerint a mérőrendszerünk most egy $\varphi(x)$ állapotú elektronból és egy helykoordináta mérő műszerből áll. A helymérés eredménye a tapasztalatok szerint bármekkora lehet. Azaz az X dinamikai változóhoz rendelt $\hat{x}$ operátor sajátértékei folytonos spektrumot adnak. Ez némi nehézséget jelent a további matematikai lépésekben. Azért, hogy ezt könnyebben elviseljük, mindent a már megtanult diszkrét spektrum mintájára fogunk csinálni. Így pontosan tudni fogjuk azt, hogy honnan hová akarunk eljutni. Mint azt említettük, az $\hat{x}$ operátor x sajátértéke bármilyen valós szám lehet, ezért a sajátértékek és így a sajátfüggvények halmaza "kontinuum számosságú". Ez azt jelenti, hogy a sajátértékek ill. a sajátfüggvények nem számlálhatók meg. Ezért nem alkalmazhatunk egy *i=1,2,3,..* számláló indexet. Ehelyett bevezetünk egy folytonosan változó paramétert, amely átveszi a számláló index szerepét, és a sajátfüggvények megkülönböztetésére szolgál. Célszerű ennek az azonosító paraméternek magát a (folytonos) sajátértéket választani. Így tehát a $\chi(x,x')$ sajátfüggvényben az x betű a változót az x' szimbólum pedig az azonosító paramétert jelöli. Ez azt jelenti, hogy az x' sajátértékhez tartozó, x változótól függő függvényről van szó. A levezetés menete mindenben követi a már jól ismert diszkrét spektrumú esetet. Annyi csak a különbség, hogy a (diszkrét) szummázások helyett most (folytonos) integrálokat kell használni. A levezetés célja meghatározni azt, hogy mi annak a valószínűsége, hogy a kezdetben $\varphi(x)$ állapotú elektron az elemi helymérés hatására a $\chi(x,x')$ állapotba megy át. Ez más szavakkal azt is jelenti, hogy meghatározzuk annak *P(x′)* valószínűségét, hogy a helymérés eredménye x' lesz, azaz, hogy az elektront az x' helyen találjuk. Hasonlóan a diszkrét esethez ez a valószínűség most is a $\langle\chi|\varphi\rangle$ skalár szorzattal kapcsolatos.

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

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

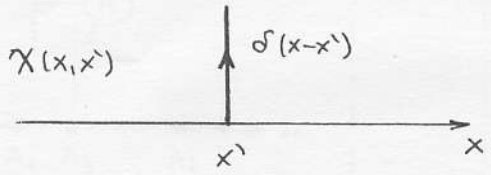
$$x\cdot\chi(x,x') = x'\cdot\chi(x,x')$$

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

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

norma:

Nem precíz, de "jó" (DIRAC)

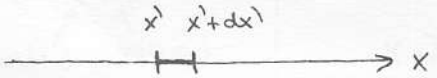


azaz

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

Tehát

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



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

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

↓

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

A *P(x′)* valószínűség meghatározásához ismernünk kell az $\hat{x}$ operátornak a $\chi(x,x')$ sajátfüggvényeit. Mi a Schrödinger féle operátorokat használjuk, ezért az $\hat{x}$ operátor az x-el való szorzást jelenti. A sajátérték egyenletből látszik az, hogy a $\chi(x,x')$ sajátfüggvény nem tartozhat az eddig használt H függvénytér elemei közé. Valójában nem is tekinthető a hagyományos értelemben vett függvénynek. A függvényfogalom általánosításával kapható ún. disztribúciók közé tartozik és Dirac-deltának hívják. A nevét P.A.M. Dirac-ról kapta, aki először oldotta meg ezt a sajátérték problémát. Ezek után már meghatározható a $\langle\chi|\varphi\rangle$ skalár szorzat és így a keresett valószínűség is. Eredményül a várt Born-féle kifejezést kapjuk.

Az impulzus

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

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

$$\frac{\partial \varphi}{\partial x} = j \underbrace{\frac{p_x}{\hbar}}_{\equiv k_x} \varphi \longrightarrow \underbrace{\varphi(x) = A \cdot e^{j k_x \cdot x}}_{\text{sajátfüggvény}} \qquad \underbrace{p_x = \hbar k_x}_{\text{sajátérték}}$$

(Ugyanigy történik a számitás $\hat{p}_y$ 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)

$$\boxed{\Phi(\bar{r}) = A \cdot e^{j \bar{k} \bar{r}} \qquad \bar{p} = \hbar \bar{k}} \longrightarrow A e^{j(k_x \cdot x + k_y y + k_z z)}$$

(de BROGLIE) a síkhullám az impulzus operátor sajátfüggvénye (≡ 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

$$\hat{p}_x \varphi_1 = p_1 \varphi_1$$
$$\hat{p}_x \varphi_2 = p_2 \varphi_2$$

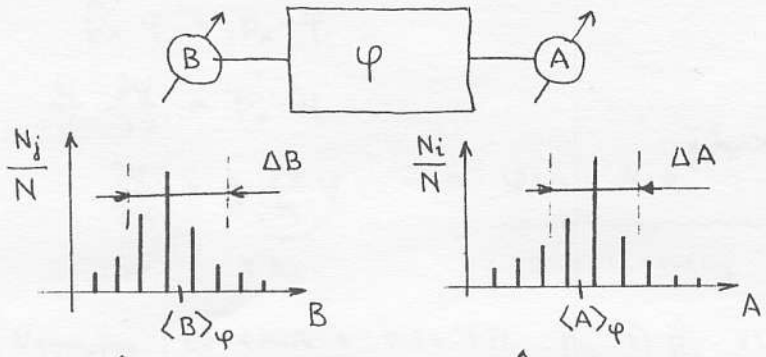
Számitsa ki : $\langle \varphi_1 | \varphi_2 \rangle$ skalár szorzatot !

Az előzőekben meghatároztuk a helykoordináta operátor sajátfüggvényeit. Oldjuk most meg a másik alapmennyiségre, az impulzusra vonatkozó sajátérték problémát is. A p_x, p_y és p_z impulzus komponensékhez tartozó operátorok egymással felcserélhetők és egymástól független változókra hatnak. Ez azt jelenti, hogy közös sajátfüggvény-rendszerük van, ami a különböző változójú sajátfüggvények szorzatából áll. (Lásd a 38.oldalon elmondottakat.) Eredményül azt kapjuk, hogy az impulzus sajátértékei és sajátfüggvényei éppen a jól ismert, a de-Broglie által intuitív módon bevezetett síkhullámok. Ez pont összhangban van az eddigiekkel.

Láttuk tehát, hogy sem a helykoordináta operátor sajátfüggvényei (Dirac delta disztribúciók) sem pedig az impulzus operátor sajátfüggvényei (nem normálható síkhullámok) nem tartoznak a H Hilbert tér elemei közé.

Belátható azonban, hogy ezek az állapotfüggvények előállíthatók a Hilbert tér elemeinek "határértékekként". Ezért (egy lehetséges módszerként) ezeket a "állapotfüggvényeket" is hozzávesszük a H halmazhoz, és az így kiegészített H^* téren fogjuk értelmezni az 1.axiómát.

1.2.5. A határozatlansági reláció



$\hat{B}\beta_j = B_j\beta_j$ $\qquad$ $\hat{A}\alpha_i = A_i\alpha_i$

$\varphi \neq \{\beta_j\}$ $\qquad$ $\varphi \neq \{\alpha_i\}$

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

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

Matematika:

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

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

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

$$\hat{G}^+\hat{G} = (g\Delta\hat{A} - j\Delta\hat{B})(g\Delta\hat{A} + j\Delta\hat{B}) =$$

$$= g^2\Delta\hat{A}^2 + jg\underbrace{(\Delta\hat{A}\Delta\hat{B} - \Delta\hat{B}\Delta\hat{A})}_{[\Delta\hat{A},\Delta\hat{B}] = j\hat{D}} + \Delta\hat{B}^2$$

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

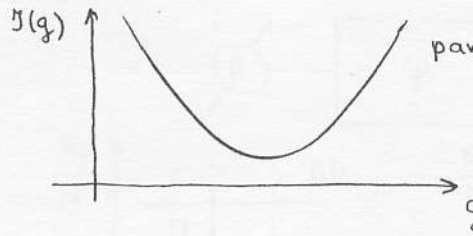
1.2.5. A határozatlansági reláció

A helyes kvantummechanikai szemléletünk kialakításának egyik igen fontos állomásához érkeztünk. A kapott összefüggések alapján végérvényesen szakítanunk kell a megszokott klasszikus fogalmainkkal és egy másfajta gondolkodásmódot kell önmagunkban kialakítanunk. Mindez nem nélkülözhet némi filozófiai kitérőt sem.
Tekintsünk egy φ állapotú elektront és mérjünk ezen két dinamikai változót (legyen ez A és B)! Vigyázzunk most is arra, hogy minden elemi mérés előtt az elektronunk φ állapotban legyen! A mérés eredménye két hisztogram lesz, amely a két dinamikai változó sajátértékeinek relatív gyakoriságait tartalmazza. Az axiómák segítségével előre meghatározhatók a két hisztogram jellemző adatai. Ezek a várható értékek (átlagértékek) és a négyzetes szórások. A várható(átlag) értékeket a 4.axióma alapján közvetlenül kiszámíthatjuk. Nézzük meg van-e valamiféle kapcsolat a két szórás (ΔA és ΔB) között? A kérdés indokolt, hiszen a két mérést ugyanabban a φ állapotban lévő elektronon történik.

A szórások kiszámításánál is a kvantummechanikai módszereit kell követnünk. Először is a szórás klasszikus definícióját lefordítjuk a kvantummechanika "nyelvére", majd az axiómák felhasználásával elvégezzük a szükséges számításokat.

A szórás matematikai definíciója a következő: "az átlagtól való eltérés négyzetének az átlagából vont négyzetgyök." A kvantummechanikai számításokban az "átlagot" a 4.axióma előírása szerint kell képezni. Ehhez pedig szükség van az "átlagtól való eltérés" ($\Delta\hat{A}$ illetve $\Delta\hat{B}$) operátorára. Ezt az operátort a 2.axióma szerint kell képeznünk. Azaz először megadjuk a klasszikus definíciót, majd utána a dinamikai változók helyébe operátorokat írunk. Az átlagérték nem dinamikai változó, hanem egy skalár érték, ezért a hozzá rendelt operátor az ezzel a számmal való szorzás lesz. A két dinamikai változó kvantummechanikai viszonyát a hozzájuk rendelt $\hat{A}$ és $\hat{B}$ operátorok csererelációja adja meg. Egyszerűen bizonyítható, hogy a $\Delta\hat{A}$ és $\Delta\hat{B}$ operátorok között is ugyanez a cserereláció érvényes. Képezzük a $\hat{G} = g \cdot \Delta\hat{A} + j \cdot \Delta\hat{B}$ operátort, ahol g tetszőleges valós paraméter. $\hat{G}$ nem reprezentál semmilyen dinamikai változót, mert nem önadjungált. Egyszerűen egy matematikai segédmennyiségnek kell tekintenünk. Képezzük a $\hat{G}\varphi$ függvény normáját, amelyik definíció szerint egy nem negatív valós mennyiség. Jelöljük ezt *I(g)*-vel. Az adódik, hogy *I(g)* a valós g paraméter négyzetes függvénye.

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



parabola → Diszkriminánsa ≤ 0

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

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

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

$$\boxed{\Delta A \cdot \Delta B \geq \frac{1}{2}\left|\langle \varphi | [\hat{A}, \hat{B}]\varphi\rangle\right|}$$

Heisenberg féle határozatlansági reláció

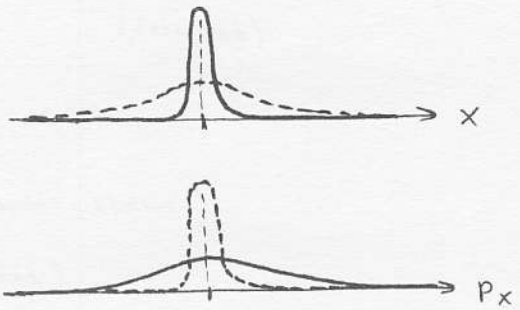
Példa:

$$\left.\begin{aligned}\hat{A} &\equiv \hat{p}_x \\ \hat{B} &\equiv \hat{x}\end{aligned}\right\} \quad [\hat{A}, \hat{B}] \equiv [\hat{p}_x, \hat{x}] = \frac{\hbar}{i}$$

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

$$\boxed{\Delta p_x \cdot \Delta p_y \geq 0}$$

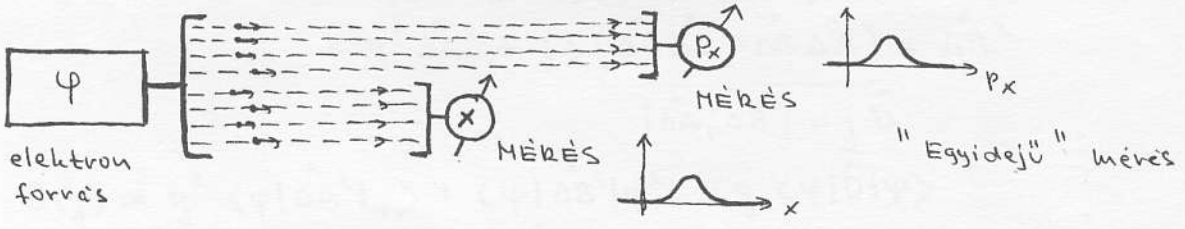
$$\boxed{\Delta x \cdot \Delta y \geq 0}$$



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
- merőműszer egy makroszkópikus eszköz
- rejtett paraméterek (BELL 1968)

Ahhoz, hogy *I(g)* ne legyen negatív, az szükséges, hogy a “g” paraméter megfelelő együtthatóiból képzett "diszkriminánsˮ ne legyen pozitív. Ebből a feltételből a ΔA és ΔB szórásokra egy egyenlőtlenség adódik. Ez az ún. Heisenberg féle határozatlansági reláció. Eszerint ha a két dinamikai változóhoz rendelt két operátor nem cserélhető fel, akkor a szórások szorzata nagyobb, mint egy pozitív szám. Ez azt jelenti, hogy nem létezik olyan állapot, amely esetén mindkét dinamikai változó "egyszerre" nulla szórással mérhető.

Tekintsük az x és a p_x között fennálló határozatlansági relációt Eszerint az elektron lehet például egy olyan állapotban, hogy a helye közel nulla szórással mérhető. Azaz az elektron tér egy meghatározott pontjának nagyon kicsi környezetében található. Ekkor azonban az impulzusmérés szórása nagyon nagy lesz, azaz erről semmi biztosat nem tudunk mondani. Ugyankkor viszont, van olyan állapotú elektron is, amelynek az impulzusa egy jól meghatározott érték. Ekkor viszont az elektron helymérése lesz nagyon bizonytalan.

Eddig mindig azt mondtuk, hogy egy φ állapotú elektronon *N* (sok) elemi mérést végzünk. Ezt azonban nem lehet megvalósítani! Ennek az oka a következő. Amikor az elemi mérés során az elektron a mérőműszer detektorával kölcsönhatásba lép, akkor ott mindig reális (mikro)fizikai objektumokkal találkozik (atomokkal, ionokkal, elektronokkal, elektromágneses térrel, stb...), hiszen a mérőműszer is az anyagi világunk része. A kölcsönhatás során a mérendő elektron mintegy "elkeveredik" a mérőműszert alkotó elektronok között. Mivel minden elektron teljesen egyforma, így őt onnan már visszavenni nem lehet. Azaz egy elemi mérést csakis egy elektronon és csak egyetlen egyszer lehet elvégezni. Akkor hogyan lehet értelmezni az *N* (sok) elemi mérésből álló mérést? A válasz egyszerű, ha figyelembe vesszük azt, hogy minden elektron tökéletesen egyforma, azaz nem lehet őket egymástól megkülönböztetni. Eszerint nem egyetlen φ állapotú elektronon mérünk *N* (sok)-szor, hanem *N* (sok) azonos φ állapotú elektronon mérünk egyszer. Az eredmény nyilván ugyanaz lesz. A két dinamikai változó "egyszerre" történő mérése is hasonlóan történik. Ekkor a sok azonos φ állapotú elektron felén megmérjük az egyik, a másik felén megmérjük a másik dinamikai változót. Az így kapott szórások között a Heisenberg féle határozatlansági reláció fog fennállni. Az elektronok egyformasága miatt a sok független elektronon történő mérésből adódó fizikai következtetéseinket egy elektron (helyesebben: "az" elektron) tulajdonságainak tekintjük. Ilyen módon alakítottuk ki szemléletünket. Ezért beszélhettünk az előzőekben mindig "egy (!) elektron "-ról.

A fontossága miatt foglaljuk össze a határozatlansági relációról hallottakat. A középiskolában azt tanultuk, hogy "egy elektron helyét és impulzusát nem lehet egyszerre pontoson meghatározni". Ez a megfogalmazás könnyen félreérthető, mert nem tisztázza az "egyszerre" szó jelentését. A most tanultak szerint a precíz állítás az, hogy: "Nincsen olyan állapot, amelyben lévő elektronok sokaságán elvégezve a hely- és az impulzusmérést, mindkét mérés szórása tetszőlegesen kicsinek adódik." Az "egyszerre" szó tehát szigorúan véve nem egyidejűségre utal, hanem az ugyanabban az állapotban történő mérést jelenti. Kvalitatív szemléletünkben, egyetlen elektron dinamikai tulajdonságainak jellemzésekor, mégis joggal asszociálunk az egyidejűségre. Hiszen egy objektum (elektron) a tulajdonságaival minden időpillanatban egyszerre rendelkezik. De ezzel ismét a filozófia (az ismeretelmélet) területére tévedtünk és ez már nem tartozik ennek a tantárgynak a témájába.

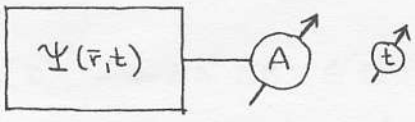
A határozatlansági reláció alapvető szerepet játszott a kvantummechanikai szemléletünk kialakulásában. A mikrofizikai modelljeink kvalitatív értelmezésekor állandóan használjuk.

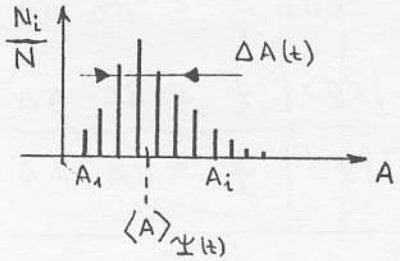
1.2.6. A klasszikus mechanika és a kvantummechanika kapcsolata

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) ≡ "időfüggetlen"

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

$$(\text{pl.:})\ \int_{\infty}\Psi^*\hat{A}\Psi\,dV \rightarrow$$

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

Adódik, hogy:

$$\frac{d}{dt}\langle A\rangle_{\Psi(t)} = +\frac{j}{\hbar}\langle\hat{H}\Psi|\hat{A}\Psi\rangle - \frac{j}{\hbar}\langle\Psi|\hat{A}\hat{H}\Psi\rangle =$$

$$= \frac{j}{\hbar}\langle\Psi|\hat{H}\hat{A}\Psi\rangle - \frac{j}{\hbar}\langle\Psi|\hat{A}\hat{H}\Psi\rangle =$$

$$= \frac{j}{\hbar}\langle\Psi|\underbrace{(\hat{H}\hat{A}-\hat{A}\hat{H})}_{[\hat{H},\hat{A}]\ \text{(kommutátor)}}\Psi\rangle$$

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

EHRENFEST tétel

1.2.6. A klasszikus mechanika és a kvantummechanika kapcsolata

1.2.6.1. Az Ehrenfest tétel

Az eddigiekben a megmérendő elektron φ állapota nem függött az időtől. Most a $\Psi(t)$ időfüggő állapotban történő mérést fogjuk megvizsgálni. Mivel az elektron állapota állandóan változik így a dinamikai tulajdonságai is pillanatról pillanatra változni fognak. Szó sem lehet tehát arról, hogy egy dinamikai változó mérését (ami sok elemi mérést jelent) egy elektronon egy adott időpontban elvégezhessük. Ennek ellenére a továbbiakban is mindig az "egy részecske - sok elemi mérés" szemléletet fogjuk használni az elméleti számításainkban. De tudnunk kell azt, hogy a mérések szempontjából ez valójában mit is jelent.

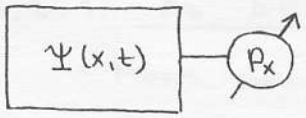
Legyen az elektronunk a $\Psi(\vec{r},t)$ időfüggő állapotban. Ekkor az A dinamikai változó mérésének a várható értéke is fog függni az időtől. Ezt az időfüggést az átlagérték idő szerinti első deriváltja (a változás sebessége) jellemzi. A várható érték a 4.axióma alapján kiszámítható, az állapot időfüggését az 5.axióma határozza meg. Eredményül az adódott, hogy az A dinamikai változó várható értékének a változási sebessége, a $\hat{H}$ energiaoperátor és az $\hat{A}$ operátor kommutátorától függ:

$$\frac{d}{dt}\langle A\rangle_{\Psi(t)} = \frac{j}{\hbar}\left\langle \Psi \left| \left[\hat{H},\hat{A}\right]\Psi \right.\right\rangle$$

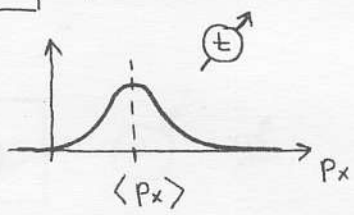
Ez az általános Ehrenfest tétel.

1.2.6.2. A klasszikus mechanika mozgásegyenlete

(Newton II. axióma)

(1 dim) 

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



EHRENFEST tétele:

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

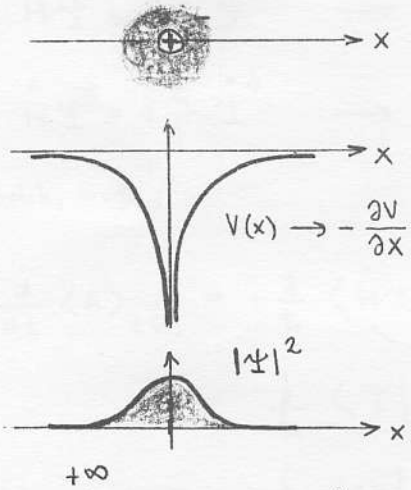
$$\left[\hat{H}, \hat{p}_x\right]\Psi = \underbrace{\left[\frac{\hat{p}_x^2}{2m}, \hat{p}_x\right]}_{\varnothing}\Psi + \left[\hat{V}, \hat{p}_x\right]\Psi = \frac{\hbar}{j}\left(\underbrace{V\cdot\frac{\partial\Psi}{\partial x}} - \underbrace{\frac{\partial}{\partial x}V\cdot\Psi}\right)$$

$$\underbrace{-V\frac{\partial\Psi}{\partial x}} - \Psi\frac{\partial V}{\partial x}$$

azaz

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

kétféle lehetőség van:

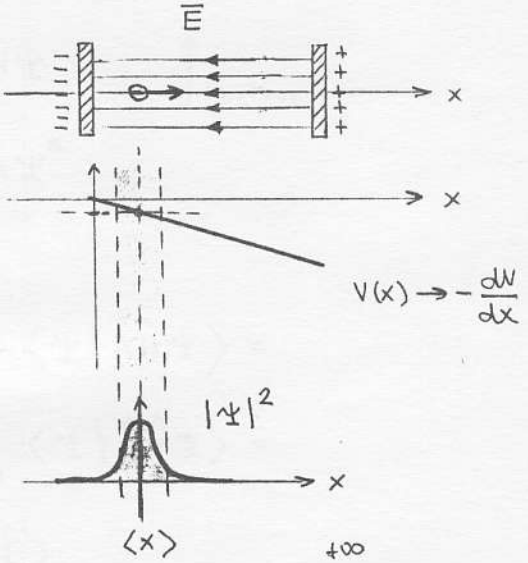


$$\frac{d}{dt}\langle p_x \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty}\left(-\frac{\partial V}{\partial x}\right)\underbrace{|\Psi(x)|^2}\,dx$$

↑ SCHRÖDINGER egyenletből

↓

A KVANTUMMECHANIKÁT KELL használni



$$\frac{d}{dt}\langle p_x \rangle \simeq \left[-\frac{\partial V}{\partial x}\right]_{\langle x \rangle} \cdot \underbrace{\int_{-\infty}^{+\infty}|\Psi|^2 dx}_{1}$$

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

A KLASSZIKUS MECHANIKÁT LEHET alkalmazni

1.2.6.2. A klasszikus mechanika mozgásegyenlete

Az Ehrenfest tétel alkalmazásaként elsőnek vizsgáljuk meg az impulzus várható értékének az időbeli változását. A tételt alkalmazva az adódik, hogy az impulzus várható értékének idő szerinti első deriváltja a potenciális energia negatív gradiensének az átlagával egyenlő:

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

A kapott eredmény fizikai értelmezésekor két esetet kell megvizsgálnunk.

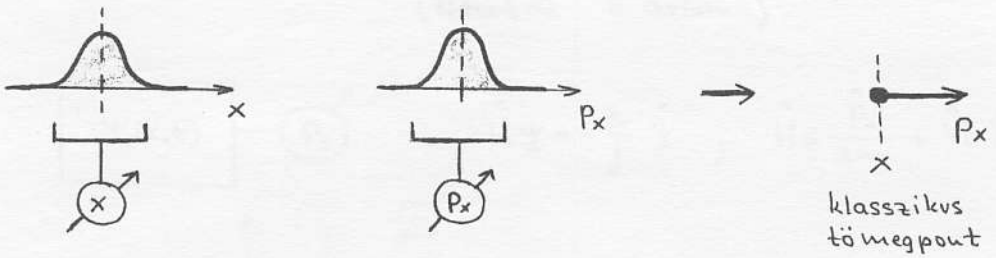
Először tekintsünk azt amikor az elektron potenciális energiája nagyon nagyot változik abban a térrészben ahol az elektron nagy valószínűséggel megtalálható. Ez a helyzet pl. atomokba kötött elektronoknál. Ekkor az impulzusátlag időderiváltjának a kiszámításához szükség van a hullámfüggvény ismeretére is. Ez pedig csak a kvantummechanika alkalmazásával kapható meg.

A másik esetben a potenciális energia térbeli változása elhanyagolhatóan kicsi abban a térrészben, ahol az elektron egy adott időpillanatban nagy valószínűséggel van. Ez a helyzet lép fel, amikor az elektront makroszkopikus tartományban változó elektromágneses térbe helyezzük (pl. egy kondenzátorba) .Ekkor a potenciális energia gyakorlatilag állandónak tekinthető az elektron "helyén". A kvantummechanikai átlagképzés során a hullámfüggvény az összefüggéseinkből eltűnik:

$$\frac{d}{dt}\langle p_x \rangle \approx \left[-\frac{\partial V}{\partial x} \right]_{\langle x \rangle}$$

Tehát a mozgástörvényt a kvantummechanika használata nélkül is meg tudjuk fogalmazni, azaz eljutottunk a klasszikus mechanikához. Látható tehát, hogy Newton második axiómáját le tudtuk vezetni a kvantummechanikából. Tehát a kvantummechanika magában foglalja a klasszikus mechanikát, azaz (ahogy annak lennie is kell!) a korrespondencia elv teljesül.

A "tömegpont" fogalom kialakulásának magyarázata:

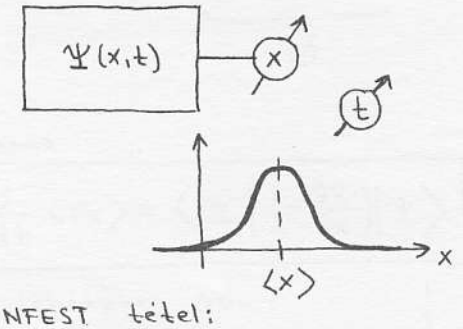


$\langle x \rangle \equiv x$ $\qquad$ $\langle p_x \rangle \equiv p_x$

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

A sebesség

(1 dim)



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

EHRENFEST tétel:

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

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

$$= -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}x\Psi - x\Psi''\right) = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(2\Psi' + x\Psi'' - x\Psi''\right)$$

azaz

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

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

A <u>munka tétel</u> (→ klasszikus mechanika)

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

(Feladat)

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

↓ $\frac{dW_k}{dt} = \bar{F}\cdot\bar{v}$

↓ (szilárdtestfizika)

Most már válaszolhatunk arra a kérdésre is, hogy hogyan alakult ki a klasszikus tömegpont fogalmunk. Egy makroszkopikus méretű objektum mérése során a klasszikus mérőműszerünkben egy időpontban (ami a mikroszkopikus skálán mindig egy véges időtartam) nagyon nagy számú kvantummechanikai elemi mérés zajlik le. Ennek az átlagát jelzi ki a műszerünk mint a klasszikus mérés eredményét. A határozatlansági relációt nem érzékeljük, hiszen a szórások bőven beleesnek a klasszikus mérőműszer pontatlansági tartományába. Azaz a klasszikus mechanikai mérések szerint egy részecske egy adott "időpillanatban" a tér egy adott "pontjában" lesz és adott impulzussal fog rendelkezni. Ennek alapján alkottuk meg a részecskék tömegpont modelljét.

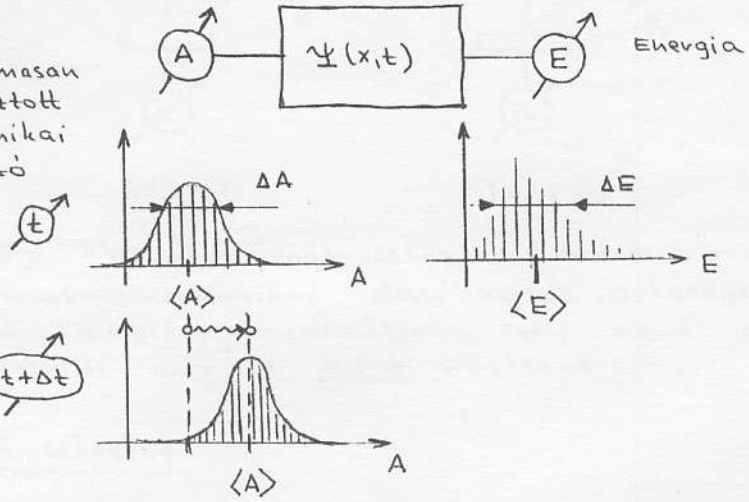
Második példaként vizsgáljuk meg a helykoordináta átlagának az időbeli változását! Az Ehrenfest tétel eredményeként tulajdonképpen a sebesség kvantummechanikai definíciójához jutottunk:

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

Az eddigiekből már leszűrhető az az általánosságban is igaznak bizonyuló következtetésünk, mely szerint a kvantummechanikai átlagok között éppen a klasszikus mechanika összefüggései állnak fenn. Ez tulajdonképpen az általános Ehrenfest tétel verbális megfogalmazása. Így részletes számítások nélkül is felírhatjuk például a munka-tétel Ehrenfest szerinti alakját. Ez a szilárdtest-fizikában nagyon fontos szerephez jut majd.

1.2.6.3. Az energia és az idő közötti határozatlansági reláció

Egy alkalmasan választott dinamikai változó



EHRENFEST tételek:

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

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

HEISENBERG határozatlansági reláció:

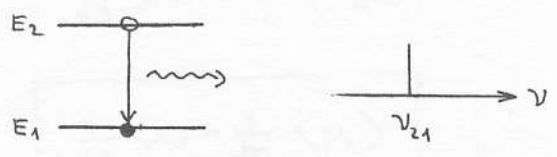
$$\Delta A\cdot\Delta E \geq \frac{1}{2}\left|\langle\Psi|[\hat{H},\hat{A}]\Psi\rangle\right| \rightarrow \Delta A\cdot\Delta E \geq \underbrace{\frac{1}{2}\left|\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dt}\langle A\rangle\right|}_{\frac{\hbar}{2}\cdot\left|\frac{d}{dt}\langle A\rangle\right|}$$

Tehát:

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

Δt MÉRHETŐ mennyiség (ÓRA): A rendszerben lezajló változásokat jellemzi (karakterisztikus időtartam)

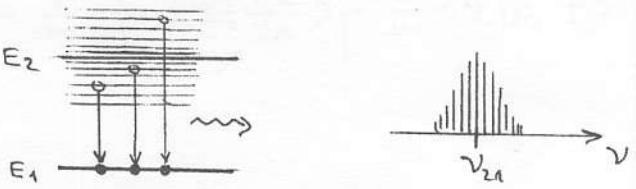
Példa: (BOHR atom)



(statikus modell)

$\Delta t \rightarrow \infty$

$\Delta E_2 = 0$ → éles spektrum vonal.



(A valóság dinamikus)

Δt = véges

ΔE_2 = véges → a spektrum vonal "kiszélesedik"

DINAMIKUS MODELL

Δt miért véges?

KVANTUMELEKTRODINAMIKA

1.2.6.3. Az energia és az idő közötti határozatlansági reláció

Az "idő" fogalmunk talán a legérdekesebb és bölcseleti szempontból a legizgalmasabb fogalmaink közé tartozik. A "Mi az idő?" kérdésre bizony nehezen tudnánk kapásból válaszolni.

A születésünk után átélt sok szubjektív élmény hatása következtében, lassan érlelődött bennünk az idő szubjektív érzete, majd ennek kapcsán a fogalma. Kisgyermek korunkban a tér-fogalmunk hamarabb alakult ki, mint az időé. Előbb értettük meg azt, hogy mit is jelent az "itt" és az "ott", mint a "most" és a "majd". "Hányat kell még aludni Karácsonyig?" kérdeztük. "Addig kell itt ülnöd, amíg a nagymutató legfelülre nem érkezik!" mondták a felnőttek. Mindkét esetben az "időről" illetve annak "múlásáról" volt szó. Emlékezzünk csak vissza arra, hogy mikor tanultuk meg azt, hogy "mennyi időt mutat az óra"! Ez kb. 8-9 éves korunkra tehető. A hosszú évek során kialakult szubjektív időérzetünk igen csalóka. Egy fogorvosi székben ülve a percek is óráknak tűnnek, a szeretteink körében szinte "repülnek az évek". Az absztrakt idő fogalmunk kialakulása még csak ezek után következett.

Mi tehát az idő? Pusztán csak egy szubjektív fogalom, vagy tőlünk függetlenül létező "valami". Vajon az Univerzumban is "telik az idő?" A Nagy Bumm "előtt is létezett az idő?" vagy az is "csak akkor keletkezett, mint amikor az Univerzum maga?". A kozmológia modern elmélete próbál válaszolni ezekre e kérdésekre (is). A természettudomány (jelesül a fizika) válaszait azonban a "szubjektív időérzettel terhelt elménkkel" kell értelmeznünk és ez egyáltalán nem egyszerű. Nem véletlen, hogy minden filozófiai és vallási rendszer sarkalatos pontja az "időhöz, mint olyanhoz" fűződő viszonya. Gondolhatunk a "lélekvándorlás" ciklikus időfogalmára, vagy a kereszténység lineáris időszemléleten alapuló tanaira, amely szerint az "Örökkévaló" az "örök élettel" kecsegteti vagy riasztja a mulandó embert. "Mi tehát az idő?" Érvényes-e itt is az ismert paradoxon: "Használni jól tudom, de megmagyarázni nem!". Einstein ezt így fogalmazta meg:

"Tudjuk, hogy mi az óra és mi a méter, nem tudjuk azonban, hogy mi az idő és mi a tér."

Emlékezetünkbe idézhetjük Madách Imre szavait az időről és annak múlásáról:

"Minden mi él az egyenlő soká él,
A százados fa, s egynapos rovar.
Eszmél, örül, szeret és elbukik,
Midőn napszámát s vágyait betölté.
Nem az idő halad: mi változunk,
Egy század, egy nap szinte egyre megy.
……."

Ezen kis, lírai kitérő után, térjünk vissza a kvantummechanikához!

Ismereteink már elegendőek ahhoz, hogy a kvantummechanika egyik leginkább félreérthető és ezért legtöbbször valóban félre is értett tételét precízen megfogalmazzuk.

Tekintsünk egy $\Psi(\vec{r},t)$ időfüggő állapotban lévő elektront és merjük meg egy *adott időpontban* az energiáját és egy másik A dinamikai változóját is! Az *adott pillanatban* a mérés eredménye két hisztogram lesz, értelemszerűen az egyik az energiára, a másik az A dinamikai változóra vonatkozik. Mivel az elektron állapota időben változik, így a mérés eredményét szemléltető hisztogramok is pillanatról pillanatra változni fognak. Az Ehrenfest tétel segítségével kiszámítható a várható(átlag)értékek változási sebessége.

$$\frac{\partial}{\partial t}\langle A\rangle = \frac{j}{\hbar}\langle\Psi\|\left[\hat{H},\hat{A}\right]\Psi\rangle.$$

A Heisenberg féle határozatlansági reláció pedig megadja a szórások közötti kapcsolatot.

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

Vezessünk be egy Δt mennyiséget (karakterisztikus időtartamot), amelyik a rendszerben lezajló időbeli változásokat jellemzi, az alábbi definíció szerint:

$$\Delta A = \frac{\partial}{\partial t}\langle A\rangle\cdot\Delta t$$

Azért, hogy jobban megértsük ennek a szükségességét tegyünk ismét egy kis filozofálgató kitérőt:

Az "időt", mint olyat mérni nem tudjuk. Mérni csak valamilyen dinamikai mennyiséget (változót) tudunk. A dinamikai mennyiségek megváltozása kelti bennünk az "idő múlásának" a képzetét. Minden, a Természetben meglévő,

vagy az ember által konstruált óra "működésének" is ez az alapelve (pl.: a Hold sarlója megváltozik, a Nap felkel és lenyugszik, a homokszemek leperegnek, az óramutató elmozdul, a kvarckristály alakja eltorzul, az elektromágneses térerősség megváltozik, stb.) Ha a változások a testünket felépítő sejtek fiziológiai tulajdonságait jellemzik, akkor az "idő múlását" bizony már saját bőrünkön is tapasztalhatjuk. (“*Nem az idő halad: mi változunk*...”) Ezért alakult ki bennünk az az érzés, mintha az "idő" mint olyan **önállóan létező, abszolút valami lenne**. Ezt a képzetet az einsteini relativitáselmélet már meg kellett, hogy rendítse bennünk (egyidejűség, idődilatáció, ikerparadoxon) .A kvantummechanika remélhetőleg a maradék illúziónkat is eloszlatja majd. Ez persze nem megy könnyen! Beidegzett gondolkodásmódunkhoz, megszokott szemléletünkhöz sokszor irracionális makacssággal ragaszkodunk. Néha "jobban hiszünk a szemünknek, mint az eszünknek”. Minden esetre mindez vitára késztet! Mint azt a bevezetőben elmondottak is sugallhatják, az időről, mint olyanról folytatott vitáink és elmélkedéseink nagyon messzire vezethetnek. Fontos filozófiai kategóriáról van szó, amellyel kapcsolatos gondolataink a tiszta racionalitástól, a bennünk szunnyadó miszticizmus gyökeréig ívelhetnek. Mindez azonban nem tartozik e tantárgy keretei közé.

Ott tartottunk tehát, hogy bevezettük a Δt mennyiséget. Ennek fizikai jelentése igen szemléletes. A Δt az az időtartam, ami alatt az A dinamikai változó átlaga éppen egy szórásnyit változik. Ez tehát egy olyan karakterisztikus, mérhető időtartam, amellyel a $\Psi(t)$ időbeli változását jellemezhetjük. Az állapotfüggvény ugyanis közvetlenül nem(!) mérhető, így annak időbeli megváltozása sem. Az előzőekben elmondottak szerint tehát az A dinamikai változó az óra szerepét tölti be. Ha a Δt kicsi, akkor ez azt jelenti, hogy az elektron az állapotát gyorsan változtatja. Ha a Δt nagy, akkor ez a változás lassú. Ezek után a fenti egyenletek kombinációjából egy igen fontos és érdekes összefüggésre juthatunk, nevezetesen:

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

Láthatóan a számolásunk eredményeképp egy határozatlansági relációt kapunk a Δt karakterisztikus időtartam és az energia ΔE szórása között.

Az elmondottak szemléltetésére nézzünk egy példát. Tekintsük a Hidrogén atom energiaszintjeit. Az alapállapotban az elektron végtelen hosszú ideig tartózkodhat ($\Delta t \to \infty$) ezért az alapállapoti energia egy pontos érték ($\Delta E \to 0$). Ha az elektron egy magasabb energiaszintre kerül, akkor egy idő múlva visszaugrik az alapállapotba, azaz az állapota megváltozott (Δt = véges). Ezért a gerjesztett állapot energiája nem egy pontos érték, hanem véges szórással rendelkezik (ΔE = véges). A legerjesztődéskor kisugárzott energia sem lesz egy meghatározott érték, és ez elmondható a kisugárzott foton frekvenciájáról is. Azt mérjük, hogy az atom által kisugárzott fotonok frekvenciája nem egy meghatározott érték, hanem egy keskeny frekvenciatartományba esik, amelynek a “szélességét” $\Delta E \equiv \hbar \cdot \Delta \nu$ összefüggéssel definiáljuk. Azt mondjuk erre, hogy a spektrumvonal elmosódik, kiszélesedik. Ezt a spektroszkópiában tapasztalt jelenséget a spektrumvonalak ún. "természetes vonalszélességének" nevezzük.

* * * * *

Ezzel befejeztük a kvantummechanikával kapcsolatos általános vizsgálódásainkat. Megtanultuk az alaptörvényeket (axiómákat) és a belőlük fakadó azon következtetéseket, amelyek már elegendőek ahhoz, hogy megértsük a kvantummechanikai gondolkodásmód lényegét. Az egyéni szemléletet azonban mindenkinek magának kell kialakítania önmagában. Természetesen még nagyon sok igen érdekes részlet van, amiről nem hallottunk. Ez azonban már nem tartozik azon ismeretek közé, amelyek feltétlenül elvárhatók lennének egy mérnöktől.

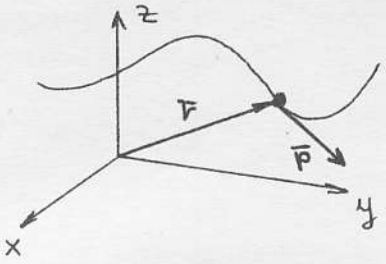
Ezek után az eddigiek alkalmazásával fogunk foglalkozni. A végső célunk azon mikrofizikai folyamatok alapelveinek a megértése, amelyek az elektronikus eszközökben lezajlanak.

Előtte azonban még meg kell értenünk azt, hogy egyetlen atom hogyan épül fel és hogyan “működik”.

1.3. A perdület és a mágneses momentum

1.3.1. A pályaperdület

Klasszikus mechanika :

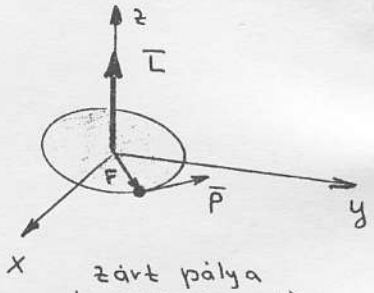


$$\bar{L} = \bar{r} \times \bar{p}$$

$L_x = \dots$

$L_y = \dots$

$L_z = x p_y - y p_x$



zárt pálya (kötött állapot)

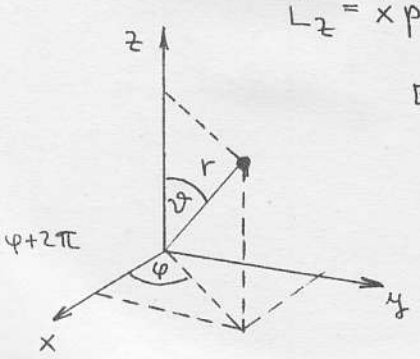
Kvantummechanika :

(II. Axióma)

$\hat{L}_x = \dots$

$\hat{L}_y = \dots$

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



Bizonyítás:

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

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

$z = r \cdot \cos\vartheta$

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

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

(III. Axióma) $\hat{L}_z \Phi = L_z \Phi$

$$\frac{\hbar}{j}\frac{\partial}{\partial \varphi}\Phi = L_z \Phi \longrightarrow \Phi = A \cdot e^{j\frac{L_z}{\hbar}\varphi}$$

(matematikai megoldás)

(I. Axióma) $\Phi \in \mathcal{H}$ $\longrightarrow$ regularitás : folytonos ✓ négyzetesen integrálható egyértékű

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

$$\Phi(\varphi + 2\pi) = \Phi(\varphi) \longrightarrow e^{j\frac{L_z}{\hbar}\varphi} \cdot \underbrace{e^{j\frac{L_z}{\hbar}2\pi}}_{1} = e^{j\frac{L_z}{\hbar}\varphi}$$

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

$\boxed{L_z = \hbar m_\ell}$ $(m_\ell = 0 \pm 1 \pm 2 \pm \dots)$ ←

(MÁGNESES kvantumszám)

1.3. A perdület és a mágneses momentum

1.3.1. A pályaperdület

Eddig a koordináta, az impulzus és az energia voltak azok a dinamikai változók, amelyek kvantummechanikai tulajdonságaival megismerkedtünk. Most egy újabb dinamikai változót, a pályamozgásból adódó perdületet fogjuk vizsgálni. A módszer a már megszokott lesz:

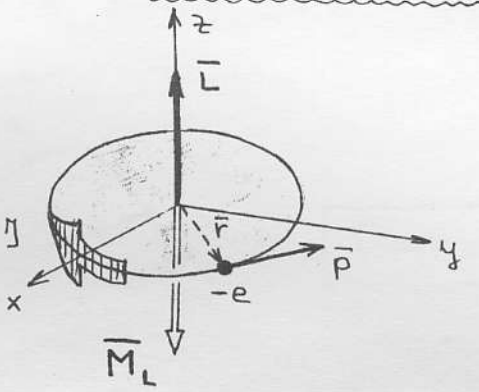
"Klasszikus mechanika → Operátorok → Sajátérték egyenlet → Fizikai értelmezés → Mérés "

Egy tömegpontnak egy adott pontra (legyen ez az origó) vett $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$ perdülete vektor mennyiség. Ezért három skalár adattal, pl.: az (L_x ,L_y ,L_z) három Descartes komponenssel jellemezhető. A 2.axióma szabályai szerint a megfelelő operátorok könnyen képezhetőek. Tekintsük az $\hat{L}_z$ operátort! Bizonyítható, hogy gömbi koordináta rendszerben ez az operátor a φ szög szerinti első deriválttal arányos: $\hat{L}_z = \frac{\hbar}{j}\frac{\partial}{\partial\varphi}$. Ez fizikailag szemléletesen is értelmezhető. Gondoljunk csak arra, hogy pl. az x-irányú mozgásból adódó p_x impulzushoz rendelt operátor az x-szerinti deriválttal arányos, és ugyanez igaz az y és a z komponensekre is. Gömbi koordinátarendszerben L_z perdület csak a φ változásából adódó mozgásból adódik. Így joggal várjuk, hogy az L_z perdülethez rendelt operátor a φ szög szerinti deriválással legyen arányos.

Az $\hat{L}_z\Phi = L_z \cdot \Phi$ sajátérték egyenlet matematikai megoldásai egyszerűen meghatározhatóak. Ezek közül a regularitási feltételek választják ki a fizikai megoldásokat (1.axióma). A $\Phi(\varphi)$ sajátfüggvény egyértékű, ha $\Phi(\varphi + 2\pi) = \Phi(\varphi)$. Ez csak akkor teljesül, ha az L_z sajátérték a $\hbar$ egész számú többszöröse, azaz $L_z = m_l\hbar$, ahol $m_l = 0,\pm1,\pm2,...\pm$.....Tehát az L_z sajátértéke kvantált

1.3.2. A (zárt) pályamozgás mágneses momentuma

Klasszikus mechanika:



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

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

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

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

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

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

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

Kvantummechanika:

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

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

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

$$M_z = -\frac{e}{2m} L_z = -\underbrace{\frac{e\hbar}{2m}}_{\equiv \mu_B} m_e$$

(BOHR magneton: a mágneses dipólmomentum kvantuma)

$$\boxed{M_z = -\mu_B \cdot m_e}$$

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

$$\boxed{\Phi = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{j m_e \varphi}}$$

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

1.3.2. A (zárt) pályamozgás mágneses momentuma

Ha egy pontszerű elektron zárt pályán mozog (pl. a Bohr- féle atommodellben) akkor ez a mozgó elektromos töltés mágneses teret kelt. Ez a tér egy mágneses dipólus terével jellemezhető. Ez a mágneses dipólus egy újabb dinamikai változó. Vizsgáljuk meg ennek a kvantummechanikai tulajdonságait!

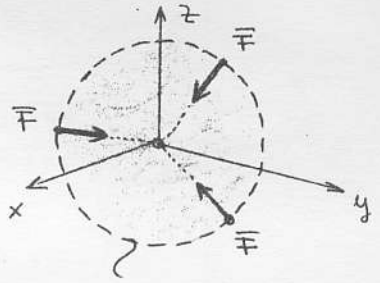
Az egyszerűség végett egy ”r” sugarú körpályán mozgó elektron esetét fogjuk vizsgálni. A klasszikus fizika szerint, a pályamozgás során az elektron “*m*” tömegéből adódó $\vec{L}$ perdülete és az “-e” elektromos töltéséből származó $\vec{M}_L$ mágneses momentuma között szoros kapcsolat van. A perdületet már az előzőekben részletesen tárgyaltuk. A körpályán mozgó elektron egy kis áramhurkot jelent. Így a mágneses momentuma a már tanult módon (“áramerősség x felület”) egyszerűen számítható: $M_L = I \cdot r^2 \pi$. Ezt összehasonlítva az *L* perdülettel eredményül az adódik, hogy a mágneses momentum vektor a pályaperdület vektorral arányos: $\vec{M}_L = -\frac{e}{2m}\vec{L}$. Az arányossági tényező láthatóan univerzális állandókból áll, úgymint az elemi töltés és az elektron tömege.

A mágneses momentum vektor Descartes komponenseihez rendelt operátorok a perdület operátor ismeretében a 2.axióma szerint képezhetők. Tekintsük a z komponenshez rendel $\hat{M}_{Lz}$ operátort. Ez az $\hat{L}_z$ operátortól csak egy konstans szorzóban különbözik. Ezért a 38.oldalon tanultak értelmében a két operátornak közösek a sajátfüggvényei és az operátorok közötti kapcsolatot a sajátértékek öröklik. Az adódik tehát, hogy az M_z mágneses momentum komponens kvantált. Azaz $M_{Lz} = m_l \mu_B$ ahol $m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \pm \ldots$.és érthető okokból mágneses kvantumszámnak hívjuk. A mágneses momentum kvantumát a μ_B -t, Bohr-féle "magneton"-nak nevezzük és univerzális fizikai állandókból áll (beleértve a kvantummechanikára jellemző $\hbar$ –t is). A magneton szót a foton szó mintájára képeztük. (Általában egy jelenség elemi kvantumait az illető fizikai jelenség nevéből képezzük. Így születtek meg a: foton, magneton, fonon, magnon, exciton, polaron,... stb ... szavak, amelyeket a szilárdtest-fizikában használunk. Ezek közül mi csak az első hárommal fogunk e tárgy keretében találkozni.).

1.3.3. Mozgás centrális erőtérben

1.3.3.1. A pályaperdület meghatározása

Klasszikus mechanika:



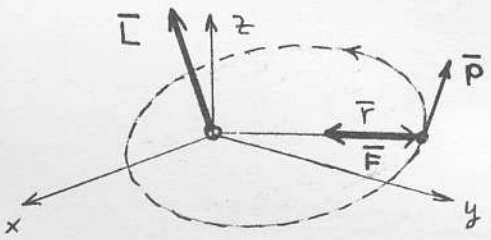
$V(F)$ = állandó

erő:

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

↓ pl:

$$V(r) = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{Q\cdot(-e)}{r^2}$$



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

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

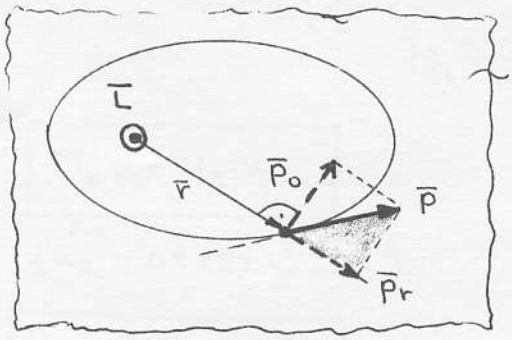
Centrális erőtérben:

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

Konzervatív rendszerben $\boxed{E = \text{áll}}$

Mivel $\bar{L}$ = állandó $\rightarrow$ $\bar{r}\times\bar{p} = m\cdot\bar{r}\times\dot{\bar{r}} = \underbrace{m\cdot\bar{r}\times\frac{d\bar{r}}{dt}}_{\bar{r}\times d\bar{r}}$ = állandó

($\bar{r}\times d\bar{r}$ irányának állandósága) ↓ SÍKMOZGÁS



a pálya síkja

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

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

$$L = r\cdot p_0$$

↓

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

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

(L^2 = állandó)

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

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

(centrifugális potenciál)

1.3.3. Mozgás centrális erőtérben

1.3.3.1. A pályaperdület meghatározása

Eddigi tárgyalásunkban a körpályán mozgó elektront kinematikailag adottnak vettük. Nem vizsgáltuk azt, hogy mik a létrejöttének a dinamikai feltételei. Ez pedig fontos, hiszen a valóságban egy elektron mozgásállapotát a környezetében lévő más testekkel való kölcsönhatásai határozzák meg. Csak az a mozgás létezhet, amelyet valamilyen erőhatás létrehoz. Mindig kell, hogy a kinematikának legyen dinamikai háttere is. A tárgyalásunk most is, mint mindig a szokásos sémán alapul:

"Klasszikus mechanika → Operátorok → Sajátérték egyenlet → Fizikai értelmezés → Mérés "

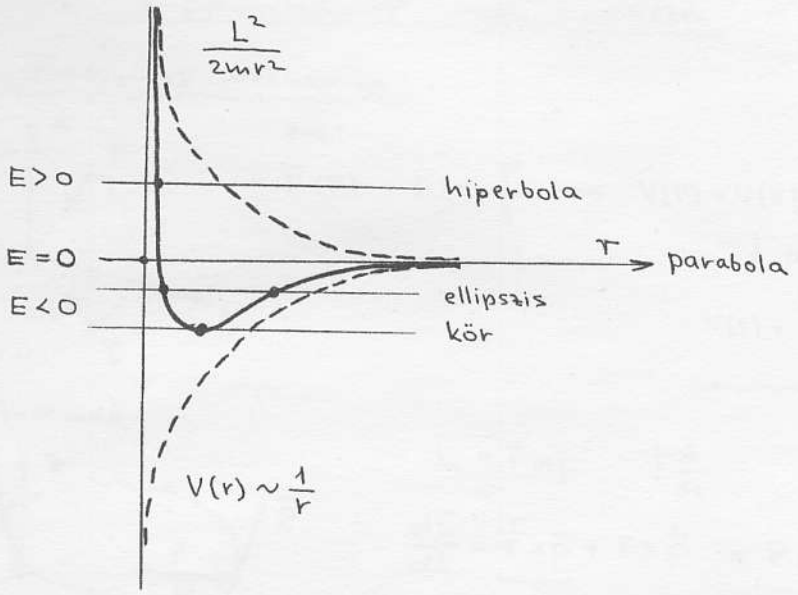
Először a klasszikus mechanikában tanultakat foglaljuk össze. Centrális erőtér esetén az erő mindig egy pont felé (erőcentrum felé) irányul. Nagysága legyen arányos az "*r*" sugárral, azaz a centrumtól mért távolsággal Ezen erőtérben egy *r*-től függő skalár potenciál definiálható, amelynek az ekvipotenciális felületei gömbök. Az erőtérben mozgó tömegpont tehát egy *V(r)* potenciális energiával rendelkezik. Egy elektromos ponttöltés is egy centrális erőteret hoz maga körül létre (Coulomb törvény).

Centrális erő hatására mozgó tömegpont $\vec{L}$ perdülete és az *E* összenergiája állandó. Mivel a pont sebessége mindig merőleges a perdület vektorra, így ha $\vec{L}$ iránya állandó, akkor a mozgás az erre merőleges síkban történik. Centrális erőtérben mozgó tömegpont tehát síkmozgást végez. Ezért a mozgás leírására célszerű a mozgás síkjában felvett polárkoordináta-rendszert választani. Centrális erőtér lévén a tömegpont potenciális energiája csak az r sugártól függ. A $H(\vec{r},\vec{p})$ összenergia kifejezése (a Hamilton függvény) definíció szerint a kinetikus és a potenciális energia összegéből áll. A kinetikus energia a sugárirányú mozgásból $(\vec{p}_r)$ és a sugárra merőleges $(\vec{p}_0)$ mozgásból adódó kinetikus energiák összegeként írható fel. A sugárra merőleges mozgás energiája pedig az állandó nagyságú perdülettel fejezhető ki, és csak az "*r*" függvénye lesz: $\frac{p_0^2}{2m}=\frac{L^2}{2mr^2}$. Ezért ez egy potenciális energiaként fogható fel. Az elnevezés jogosságának a fizikai háttere a következőkből érthető meg. Vizsgáljuk a tömegpont mozgását egy, a centrumot a tömegponttal összekötő egyeneshez rögzített, forgó vonatkoztatási rendszerben. Ekkor, ebben a koordináta rendszerben, a forgó mozgás következtében, tehetetlenségi erők is fellépnek. A tömegpont helyzetét ekkor az "*r*" távolság egyértelműen meghatározza, tehát a mozgása most egydimenziós lesz. A fellépő tehetetlenségi erőből adódó potenciális energiát "centrifugális potenciálnak" hívjuk. (A továbbiakba is gyakran használjuk a potenciális energia helyett a rövidebb potenciál kifejezést. Ha tudjuk azt, hogy fizikailag miről van szó, akkor **ez a pongyolaság megengedhető**!) Nos pontosan ez az a potenciális energia, amelyet a perdület a fentebb leírt módon meghatároz. Tehát a tömegpont összenergiája a sugárirányú mozgásból adódó kinetikus és csak a sugártól függő ún. effektív potenciál(is energia) összege. A $V_{eff}(r)$ effektív potenciál pedig a $V_{cf}(r)=\frac{L^2}{2mr^2}$ centrifugális és a *V(r)* centrális potenciál összege.

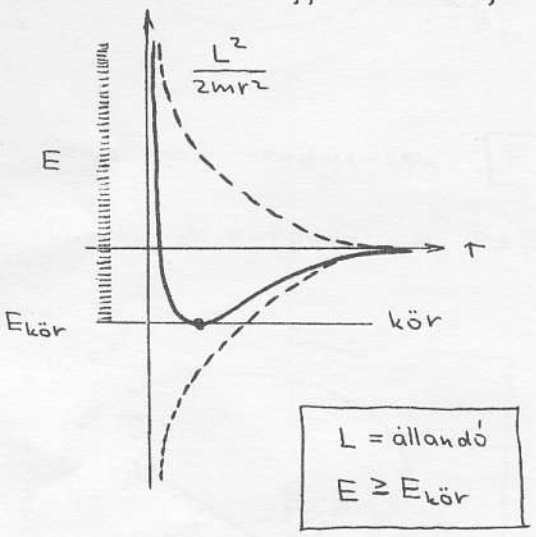
Az energia-megmaradás tétele miatt csak azok a pályák jöhetnek létre amelyek esetén a $H(\vec{r},\vec{p})=E$ egyenlet teljesül.

55

Centrális erőtérben mozgó részecske pályájának jellemzése

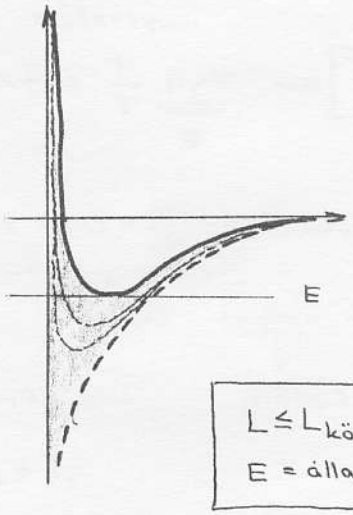


Fontos egyenlőtlenségek:



L = állandó

$E \geq E_{kör}$



$L \leq L_{kör}$

E = állandó

A mint láttuk, centrifugális potenciál pozitív, L^2-től és $1/r^2$-től függ. A vonzó Coulomb potenciál negatív és $1/r$-től függ.

Ismeretes, hogy $V = -\frac{\alpha}{r}$ -es vonzó potenciál esetén kúpszelet pályák adódnak. Az effektív potenciál ismeretében a különböző típusú pályák a $H(\vec{r}, \vec{p}) = E$ feltétel alapján energetikailag azonosíthatók. A kötött állapotot megvalósító zárt pályák (kör és ellipszis) összenergiája negatív. A nem kötött állapotot jelentő nyílt pályák (parabola és hiperbola) összenergiája nem negatív érték.

Két fontos egyenlőtlenséget lehet felírni.

Az egyik szerint az azonos perdületű pályák közül a körpálya energiája a legkisebb.

A másik szerint az azonos energiájú pályák közül a körpálya perdülete a legnagyobb.

Kvantummechanika:

Klasszikus mechanika Hamilton függvény	Kvantummechanika Hamilton operátor

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

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

↓ (Descartes) (polár)

$$H = \frac{1}{2m}p_r^2 + \frac{1}{2mr^2}L^2 + V(r) \longrightarrow \hat{H} = \frac{1}{2m}\hat{p}_r^2 + \frac{1}{2mr^2}\hat{L}^2 + V(r) \quad (=)$$

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:

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

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\hat{p}_r^2 + \frac{1}{2mr^2}\hat{L}^2 + V(r)$$

↓ $\hat{p}_r^2 = -\hbar^2\Delta_r$

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

cserevelációk:

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

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

Ezek után rátérhetünk a kvantummechanikai tárgyalásra.

Láttuk azt, hogy a centrális erőtérben lévő részecske mozgása legegyszerűbben polárkoordináta-rendszerben írható le. A $\hat{H}$ Hamilton operátort ezért most polárkoordinátákkal fogjuk megadni. Az eredményhez kétféle módon juthatunk el. Az egyik esetben felírjuk a klasszikus Hamilton függvényt polárkoordináta-rendszerben, majd a 2.axióma szerint megadjuk a Hamilton operátort. A másik módszer az , hogy megadjuk a Hamilton operátort Descartes koordinátákkal majd ezt az operátort átírjuk polárkoordinátás alakba. A feladat tulajdonképpen a Laplace operátor polárkoordinátákba való felírására redukálódik. Ez pedig matematikai kézikönyvekben megtalálható. Mindkét módon ugyanarra az eredményre kell jutnunk. Azaz ugyanannak az operátornak kétféle formában felírt alakját kapjuk. A két Hamilton operátor összehasonlításával a sugárirányú mozgás kinetikus energiájának az operátora és $\hat{L}^2$ a perdület négyzetének az operátora kapható meg. Látható ugyanis, hogy a Laplace operátornak jól felismerhető struktúrája (felépítése) van, azaz sugártól és szögektől "függő" részekből áll: $\Delta_{r,\vartheta,\varphi} = \Delta_r + \frac{1}{r^2}\Delta_{\vartheta,\varphi}$. Ennek alapján a perdület négyzetének az operátorára az adódik, hogy: $\hat{L}^2 = -\hbar^2\Delta_{\vartheta,\varphi}$. Látható, hogy ez magába foglalja a "z" irányú komponens négyzetének az $\hat{L}_z^2$ operátorát is.

A megfelelő sajátértékegyenletek tehát a következők:

$$\hat{H}\Psi(r,\vartheta,\varphi) = E\cdot\Psi(r,\vartheta,\varphi)$$
$$\hat{L}^2 Y(\vartheta,\varphi) = L^2\cdot Y(\vartheta,\varphi)$$
$$\hat{L}_z\Phi(\varphi) = L_z\cdot\Phi(\varphi)$$

Ránézésre látható, hogy a $\hat{H}$ Hamilton operátor, az $\hat{L}^2$ perdület operátor és az $\hat{L}_z$ perdület komponens operátor egymással páronként felcserélhető. A 38.oldalon tanultak szerint a három operátornak közös sajátfüggvény-rendszere van. Mivel az operátorok különböző változókra hatnak, ezért a közös sajátfüggvény a különböző változójú függvények szorzata lesz. Ezek szerint van az elektronnak olyan $\Psi(r,\vartheta,\varphi)$ állapota, amelyben az E összenergiája, az L^2 perdülete és L_z a perdület z irányú komponense adott pontos érték, azaz:

$$\hat{H}\Psi = E\cdot\Psi$$
$$\hat{L}^2\Psi = L^2\cdot\Psi$$
$$\hat{L}_z\Psi = L_z\cdot\Psi$$

A továbbiakban ezeket az állapotokat fogjuk megkeresni.

A perdület sajátérték egyenlet megoldása :

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

$$\left(-\hbar^2 \Delta_\vartheta + \frac{1}{\sin^2\vartheta}\hat{L}_z^2\right)\Theta\Phi = L^2\Theta\Phi$$

$$-\hbar^2 \Phi \Delta_\vartheta \Theta + \frac{\Theta}{\sin^2\vartheta}\underbrace{\hat{L}_z^2\Phi}_{L_z^2\Phi} = L^2\Theta\Phi \qquad \Big|\cdot\frac{1}{\Phi}$$

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

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

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

megoldása polinom módszerrel

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

Kapjuk tehát :

$$\boxed{\begin{aligned} Y(\vartheta,\varphi) &= P_\ell^{|m_\ell|}(\cos\vartheta)\cdot e^{j m_\ell \varphi} \\ L^2 &= \hbar^2 \ell(\ell+1) \qquad \ell = 0,1,2,3,\dots \\ L_z &= \hbar\, m_\ell \qquad m_\ell = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \pm \ell \end{aligned}} \rightarrow \text{neve: GÖMBFÜGGVÉNY}$$

A perdület komponensek közötti cserevelációk :

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

MÉRÉS (határozatlansági velációk)

Az $\hat{L}_z$ perdület komponens sajátérték egyenletét már megoldottuk (52.oldal).

Az $\hat{L}^2$ perdület operátor sajátérték egyenlete szeparálással oldható meg .

Az $Y(\vartheta,\varphi)$ sajátfüggvény a $\Theta(\vartheta)$ és a $\Phi(\varphi)$ függvények szorzataként írható fel. A szeparálást a tanult módon hajtjuk végre (10 és 19. oldal). Közben kihasználjuk azt, hogy $\hat{L}_z\Phi(\varphi)=\hbar m_l\cdot\Phi(\varphi)$, azaz a $\Phi(\varphi)$ függvény az $\hat{L}_z$ operátor sajátfüggvénye adott sajátérték mellett. Végül is a $\Theta(\vartheta)$ függvényre egy (az "m_l"-t, mint paramétert tartalmazó) másodrendű differenciálegyenlet adódik, amelyik polinom módszerrel megoldható. A reguláris megoldások az ún. (asszociált) Legendre [kiejtése: "lözsandr"] polinomok melyeknek a változója most a $\cos(\vartheta)$, és így erre a $\Theta(\vartheta)=P_l^{|m_l|}(\cos\vartheta)$ jelölést vezetjük be.

Az L^2 sajátértéket egy új kvantumszám (az ún. mellék kvantumszám) az *"l"* határozza meg: $L^2=\hbar^2 l(l+1)$, és ezért $L=\hbar\sqrt{l(l+1)}$. A mellék-kvantumszám lehetséges értékei *l= 0,1,2,...* egész számok. A reguláris (polinom) megoldás feltétele az is, hogy az egyenletben lévő mágneses kvantumszám abszolút értékének a maximális értéke *"l"* legyen. Tehát a mágneses kvantumszám lehetséges értékei $m_l=0\pm1\pm2\pm3\pm\ldots\pm l$. Ennek a fizikai tartalma igen szemléltes, azaz a perdület vektor "z" komponense nem lehet nagyobb, mint a vektor hossza.

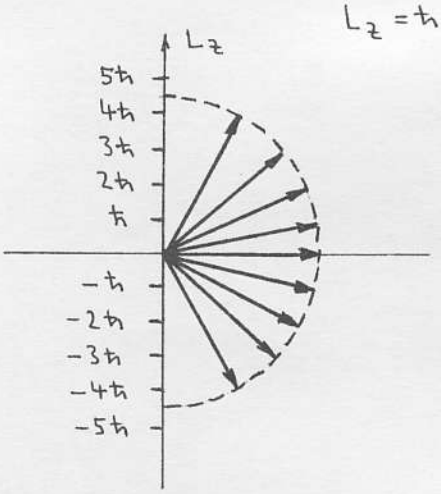
A szögektől függő $Y_l^{m_l}(\vartheta,\varphi)=P_l^{|m_l|}(\cos\vartheta)\cdot e^{jm_l\varphi}$ függvényt "gömbfüggvénynek" hívjuk. Az elnevezés oka a következő. Mint az ismeretes, a gömbfelület egy pontját egy (ϑ,φ) szögpárral tudjuk kijelölni (ezt használjuk a földi helymeghatározáskor is). Így az $Y(\vartheta,\varphi)$ függvény a gömbfelület egy pontjához egy komplex számot rendel.

A perdületvektor Descartes komponenseihez rendelt $\hat{L}_x,\hat{L}_y,\hat{L}_z$ operátorok nem cserélhetők fel egymással. A Heisenberg féle határozatlansági reláció szerint ez azt jelenti, hogy nincsen olyan elektronállapot amelyben mindhárom komponensnek pontos értéke van. Mindebből következik, hogy a fent meghatározott $\Psi(r,\vartheta,\varphi)$ állapotban az L_z értéke egy adott érték, és így L_x és L_y értéke teljesen határozatlan lesz. Ezért nem kell foglalkoznunk ezzel két komponenssel.

A pályaperdület kvantálásának szemléltetése:

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

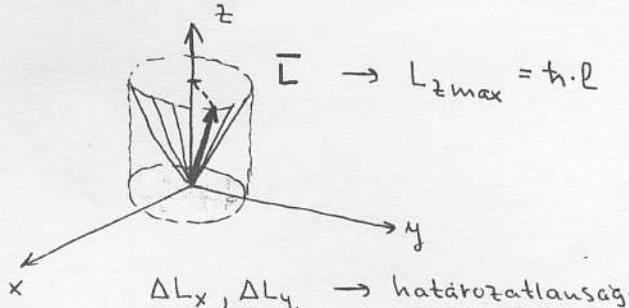
$$L_z = \hbar\, m_\ell \qquad (m_\ell = 0 \pm 1 \pm 2 \pm \ldots \pm \ell)$$



pl: $\ell = 4$

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

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



ΔL_x, ΔL_y → határozatlansági relációból.

A pálya mozgásból származó mágneses momentum:

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

$$\hat{M}_L^2 = \left(\frac{e}{2m}\right)^2 \hat{L}^2 \quad \rightarrow \quad \boxed{M_L = \mu_B\sqrt{\ell(\ell+1)}}$$

$$\hat{M}_z = -\frac{e}{2m}\hat{L}_z \quad \rightarrow \quad \boxed{M_z = \mu_B\cdot m_\ell}$$

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

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

1.3.3.2. A sugár irányú (radiális) mozgás leírása

Centrális erőtér: $V(\bar{r}) = V(r)$ (1.3.3.1)

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

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

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

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

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

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

Centrális erőtérben mozgó elektron $\vec{L}$ perdületvektorának a kvantálása egy vektorábrával szemléltethető. Csak olyan elektronállapotok léteznek, amelyben a perdület L nagysága és a "z" irányú komponense L_z határozott érték, de az x és y komponensek teljesen határozatlanok.

Adott "l" mellék-kvantumszám meghatározza a perdületvektor nagyságát: $L = \hbar\sqrt{l(l+1)}$. A mágneses kvantumszám $m_l = 0 \pm 1 \pm 2 \pm 3 \pm \ldots \pm l$ értékei pedig megadják a perdület "z" irányú vetületét: $L_z = \hbar m_l$. Az l és m_l közötti kapcsolat fizikai tartalma tehát az, hogy egy vektor bármelyik komponense nem lehet nagyobb mint a vektor hossza. Látható az is , hogy fennáll az $L_z < L$ reláció ,azaz a perdületvektor soha nem lehet függőleges. Ez összhangban van a vízszintes komponensek közötti határozatlansági relációval.

Teljesen hasonló eredmények adódnak a pályamozgásból adódó mágneses momentumra is. Ennek nyilvánvaló oka az, hogy a perdület és a mágneses momentum csak egy konstans szorzótényezőben térnek el egymástól.

1.3.3.2. A sugárirányú (radiális) mozgás leírása

Centrális erőtérben mozgó elektron energiája kötött állapotban negatív. A kvantált energiaszintek meghatározása $\hat{H}\Psi = E \cdot \Psi$ a Schrödinger egyenletnek (a Hamilton operátor sajátérték egyenletének) a megoldását jelenti. A $\Psi(\vec{r},t) = R(r) \cdot Y(\vartheta,\varphi)$ állapotfüggvény szeparálható. A szögektől függő részét az $Y(\vartheta,\varphi)$ gömbfüggvényeket már meghatároztuk. Ez tehát minden centrális potenciálnál ugyanolyan. A *V(r)* potenciális energia csak a sugártól függő *R(r)* függvényt meghatározó differenciálegyenletben jelenik meg. Ebben az egyenletben célszerű bevezetni a már jól ismert $V_{eff}(r)$ effektív potenciális energiát.

Láttuk, hogy:

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

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

---

matematika:

$$\Delta_r R = \frac{1}{r^2}\underbrace{\frac{d}{dr}\left(r^2 \frac{dR}{dr}\right)}_{2rR' + r^2 R''} = \frac{2}{r}R' + R''$$

$$\left.\begin{array}{l} \text{legyen: } P(r) \equiv r \cdot R(r) \longrightarrow P'' = 2R' + rR'' \\ \Delta_r R = \frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2 \frac{dR}{dr}\right) = \frac{2}{r}R' + R'' \end{array}\right\} \rightarrow \underline{P'' = r \cdot \Delta_r R}$$

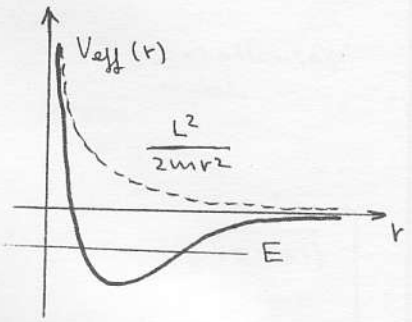
Tehát:

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

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

azaz

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



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

$$L^2 = \hbar^2 \ell(\ell+1) \qquad \ell = 0, 1, 2, \ldots$$

Tetszőleges centrális erőtérben mozgó részecske állapota

$$\Psi(\vec{r}) = \Psi(r, \vartheta, \varphi) = R(r) \cdot P_\ell^{|m_\ell|}(\cos\vartheta) \cdot e^{j m_\ell \varphi}$$

$$L = \hbar\sqrt{\ell(\ell+1)} \qquad \ell = 0, 1, 2, \ldots$$

$$L_z = \hbar m_\ell \qquad m_\ell = 0 \pm 1 \pm 2 \pm \ldots \pm \ell$$

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

legfontosabb feladatok:

$$V(r) = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{Q(-e)}{r}$$ (elektron az atomban)

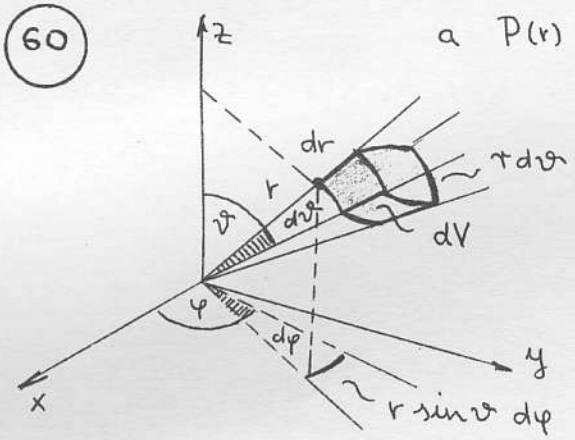
(Feladat)

$$V(r) = \frac{1}{2}m\omega^2 r^2$$ (térbeli harmonikus oszcillátor)

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

A sugárirányú mozgás kinetikus energiájának az operátora, a $\frac{\hat{p}_r^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_r$, elsőrendű deriváltakat is tartalmaz. Így az *R(r)* függvényt meghatározó differenciálegyenlet formailag nem egészen olyan, mint a már jól ismert egydimenziós Schrödinger egyenlet. Egy egyszerű transzformációval azonban ez a "hiányosság" kiküszöbölhető. Vezessük be ugyanis a *R(r)* helyett a *P(r) = rR(r)* függvényt. Ekkor *P(r)* függvényre már csak a sugár szerinti második deriváltat tartalmazó, formailag is a megszokott, egydimenziós Schrödinger egyenlet adódik. A sajátérték egyenletben az (egydimenziós) effektív potenciál szerepel.

Ezt az egyenletet az *L* perdület és a *V(r)* potenciális energia ismeretében már meg tudnánk oldani. Azonban a diszkrét energiaszintekhez tartozó *P(r)* egydimenziós sajátfüggvények alakját a 14-15 oldalakon tanultak szerint, a konkrét matematikai számítások nélkül is meg lehet jósolni.



a $P(r)$ fizikai jelentése

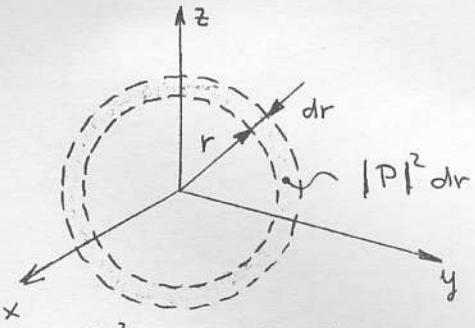
az elemi térfogat:

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

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

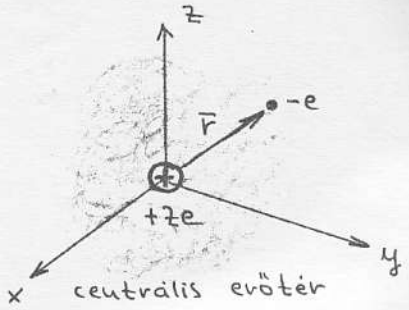
$$|\psi|^2 dV \to \underbrace{|P|^2 dr}_{\text{állandó} \equiv 1} \cdot \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} |Y|^2 \sin\vartheta \, d\vartheta$$

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



$|P|^2 dr$ valószínűséggel található a részecske az r sugarú dr vastagságú gömbhéjban → a "centrumtól r távolságra van"

1.3.3.3. A hidrogén szerű ion (a hidrogén atom)



$$V(r) = -\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0} \cdot \frac{1}{r}$$ (COULOMB potenciál)

$Z = 1$ (a hidrogén atom)

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

$$\psi(r,\vartheta,\varphi) = \underbrace{R(r)}_{\text{Gömbfüggvény } (\ell, m_\ell)} \underbrace{Y(\vartheta,\varphi)}$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dr^2} + \underbrace{\left(\frac{L^2}{2mr^2} - \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{r} \right)}_{V_{eff}(r)} \right] P = EP$$

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

$\ell = 0,1,2,3,4,\ldots$

Megoldása: polinom módszerrel

$$\begin{cases} P_{n,\ell}(r) \quad (\text{LAGUERRE}) \\ E_n = -Z^2 \dfrac{E_0}{n^2} \\ n = 1,2,3,\ldots \quad \text{Fő kvantum szám} \\ \ell = 0,1,2,3,4,\ldots \underline{(n-1)} \end{cases}$$

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

A *P(r)* egy "valódi" egydimenziós Schrödinger egyenlet sajátfüggvénye és igen szemléletes fizikai jelentéssel rendelkezik.

A teljes hullámfüggvénnyel felírt $|\Psi(r,\vartheta,\varphi)|^2 dV$ kifejezés megadja az elektron megtalálási valószínűségét az **r** pont *dV* környezetében. Számoljuk ki a tartózkodási valószínűséget, ha a *dV* térfogat egy r sugarú és dr vastagságú gömbhéj. Ez azt jelenti, hogy a tartózkodási valószínűség sűrűség szögektől függő részét összegezni kell a teljes gömbhéjra. Eredményül éppen a $|P(r)|^2 dr$ -et kapunk. Tehát a *P(r)* függvény ismeretében meg tudjuk határozni annak a valószínűségét, hogy az elektront a centrumtól bármelyik irányban r távolságban találjuk meg.

1.3.3.3. A hidrogénszerű ion

Ha a centrális V(r) potenciál helyébe a vonzó Coulomb potenciált írjuk, akkor általános esetben a hidrogénszerű ion kvantummechanikai modelljéhez jutunk. Azért "hidrogénszerű", mert egyetlen elektront tartalmaz és azért "ion", mert a pontszerűnek képzelt pozitív magtöltés az elemi töltés többszöröse, pl. *+Ze*.

A teljes hullámfüggvény szögektől függő $Y_l^{m_l}(\vartheta,\varphi)$ része általánosan ismert. Így csak a sugártól függő $R(r)$ tényezőt kell meghatározni. Az effektív potenciál ismeretében a számítások elvégezhetők. A kapott egydimenziós Schrödinger egyenlet (ami egy sajátérték egyenlet) polinom módszerrel oldható meg.

A reguláris megoldások (a sajátfüggvények) ún. (asszociált) Laguerre [ejtése:"lager"] polinomok. A sajátértékek a kötött állapot lehetséges energiaszintjeit adják. A kvantált energiaszinteket egy újabb kvantumszámmal, az "n" főkvantum-számmal tudjuk kifejezni. Reguláris megoldások akkor adódnak, ha a mellék-kvantumszám kisebb, mint a főkvantum-szám, azaz *l=0,1,2,...,(n-1)*. Ennek a korlátozó összefüggésnek a fizikai tartalma a klasszikus fizikai tárgyalás során az 55.oldalon bemutatott egyik egyenlőtlenségi relációból adódik. Nevezetesen, adott energiájú (n) állapotok perdülete (l) felülről korlátozott.

61

A teljes megoldás hidrogénszerű ion esetén :

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

$E_n = -Z^2 \frac{E_0}{n^2}$ $\quad n = 1,2,3,\ldots$ — FŐ kvantumszám

$L = \hbar\sqrt{\ell(\ell+1)}$ $\quad \ell = 0,1,2,\ldots,(n-1)$ — MELLÉK ~

$L_z = \hbar m_\ell$ $\quad m_\ell = 0,\pm1,\pm2,\ldots\pm\ell$ — MÁGNESES ~

$E_0 = 13{,}6$ eV (a Hidrogén atom ionizációs energiája)

$Z = 1$ (Hidrogén atom esetén)

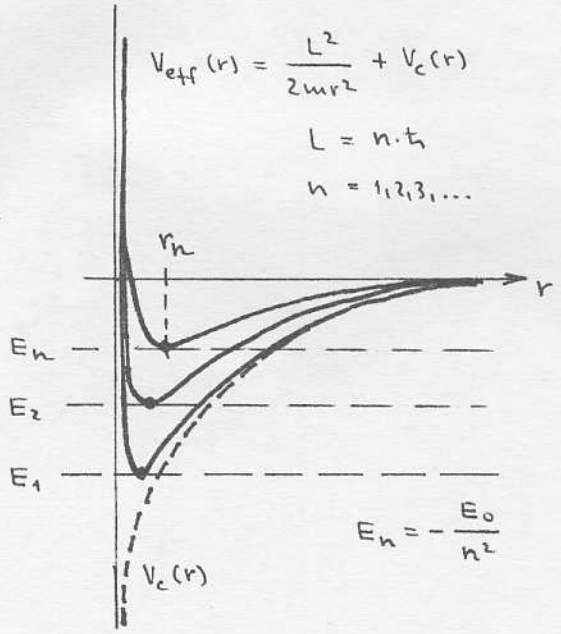
A BOHR modell és a SCHRÖDINGER modell összehasonlítása (H atom)

BOHR

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

$L = n\cdot\hbar$

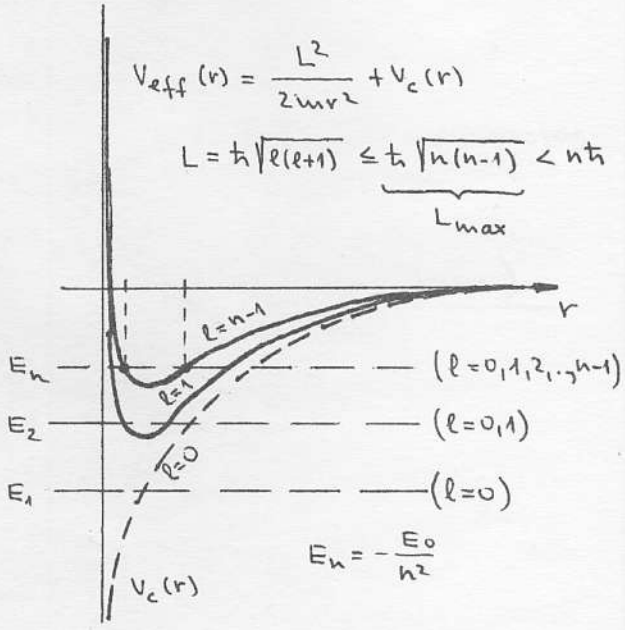
$n = 1,2,3,\ldots$

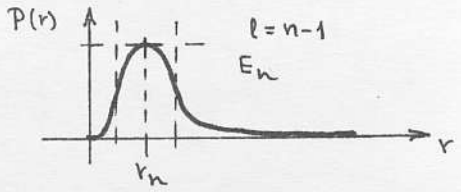


SCHRÖDINGER

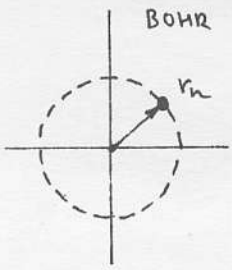
$V_{eff}(r) = \frac{L^2}{2mr^2} + V_c(r)$

$L = \hbar\sqrt{\ell(\ell+1)} \le \underbrace{\hbar\sqrt{n(n-1)}}_{L_{max}} < n\hbar$

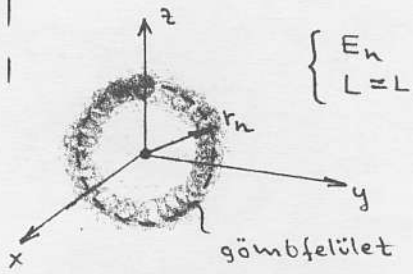




BOHR (kör) pályák



$\begin{cases} E_n \\ L = L_{max} = n\cdot\hbar \end{cases}$ ←



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

[Feladatok]

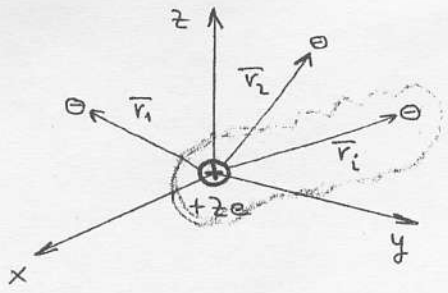
Az eddigiek röviden az alábbiakban foglalhatók össze. A hidrogénszerű ionban a kötött elektron állapotfüggvényét három kvantumszám határozza meg *(n,l,m$_l$)*. Ezek ugyanakkor megadják az ebben az állapotban pontosan (nulla szórással) mérhető dinamikai változókat is. Úgymint az *E(n)* összenergiát, az *L(l)* perdület nagyságát és $L_z(m_l)$ –t a "z" irányú perdület komponenset.

Mint azt a történeti bevezetőben láttuk, a Bohr modell a hidrogén atom energiaszintjeit jól adja meg (hiszen pontosan ebből a célból készült). A körpályán keringő pontszerű elektron képe azonban a kvantummechanikai szemlélet szerint teljesen hamis. Célszerű megvizsgálni azt, hogy milyen módon adja vissza a korrekt kvantummechanika a fél-klasszikus Bohr pályákat. Azaz hogyan teljesül ebben az esetben a megkívánt "korrespondencia" elv?

A Bohr modell esetén a diszkrét energiaszinteket a perdület Bohr-féle kvantálási törvénye határozza meg. Ezt grafikus módszerrel a következőképpen lehet szemléltetni. Felrajzoljuk a Bohr féle $\left(L = n \cdot \hbar\right)$ perdületkvantálásnak megfelelő effektív potenciál függvényeket (*n =1,2,3, …*). A körpálya feltétele az, hogy az E_n energiaszinteket jelentő egyenesek egy pontban (a minimumnál) érintsék az effektív potenciálokat ábrázoló görbéket. Az érintési pontok megadják a lehetséges körpályák r_n sugarait is.

A kvantummechanikai modell ennél jóval bonyolultabb. Ezért csak a Bohr modell szempontjából lényeges elemeit fogjuk figyelembe venni. Rajzoljuk fel itt is az effektív potenciálokat, de a perdületet a kvantummechanikai $L = \hbar\sqrt{l\left(l+1\right)}$ kvantálásnak megfelelően adjuk meg *(l=0,1,2, …)*. Látható, hogy az effektív potenciálok "kissé" az E_n energiaszintek "alá lógnak". Így az *l=0* esetet kivéve két metszéspont adódik. Az 55.oldalon tanultak szerint, az adott energiaszinthez tartozó körpályának mindig a maximális perdületű állapot felel meg. Az n-ik energiaszint esetén a maximális perdületet pedig a mellék-kvantumszám *l=n-1* értéke határozza meg. Ez ugyanakkor azt is jelenti, hogy adott perdület esetén ebben az állapotban minimális az energia. Ezért ebben a (körpályának megfelelő) állapotban a sugártól függő *P(r)* állapotfüggvénynek csak "egy púpja van". Tehát az elektron, jó közelítéssel, egy gömbhéjban lokalizálódik. A maximális megtalálási valószínűséghez tartozó gömbnek a sugara éppen a Bohr-féle körpálya sugarával egyezik meg. A Bohr modell tehát csak a maximális valószínűségeket "látja" és azt is csak egy síkban.

1.3.3.4. Az atomok elektronszerkezete



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

Az elektronok közötti kölcsönhatást elhanyagoljuk !

$\psi(\bar{r}_i)$ H szerű ion állapot

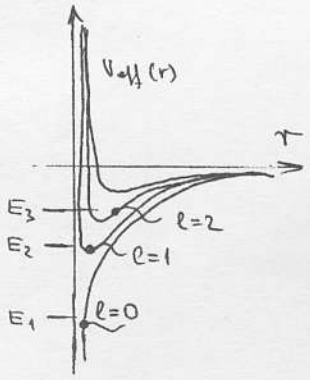
$\hat{H}\psi = E_n \psi$

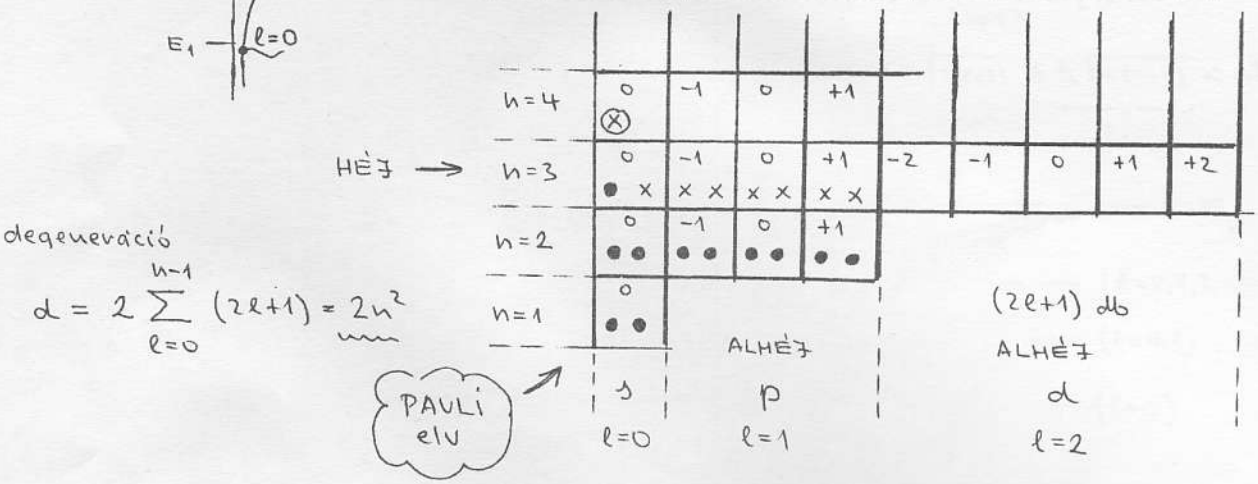
$$\psi_{n,\ell,m_\ell} = R_{n,\ell}(r)\, P_\ell^{|m_\ell|}(\cos\vartheta)\, e^{j m_\ell \varphi}$$

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

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

$$L_z = \hbar m_\ell \qquad m_\ell = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots \pm \ell$$





degeneráció

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

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: $[Ar](4s)$ → (3d helyett !)

$Z = 36$ Kr: $[Ar](3d)^{10}(4s)^2(4p)^6$

↓

Miért ilyen a nemesgázok elektronszerkezete (?)

↓

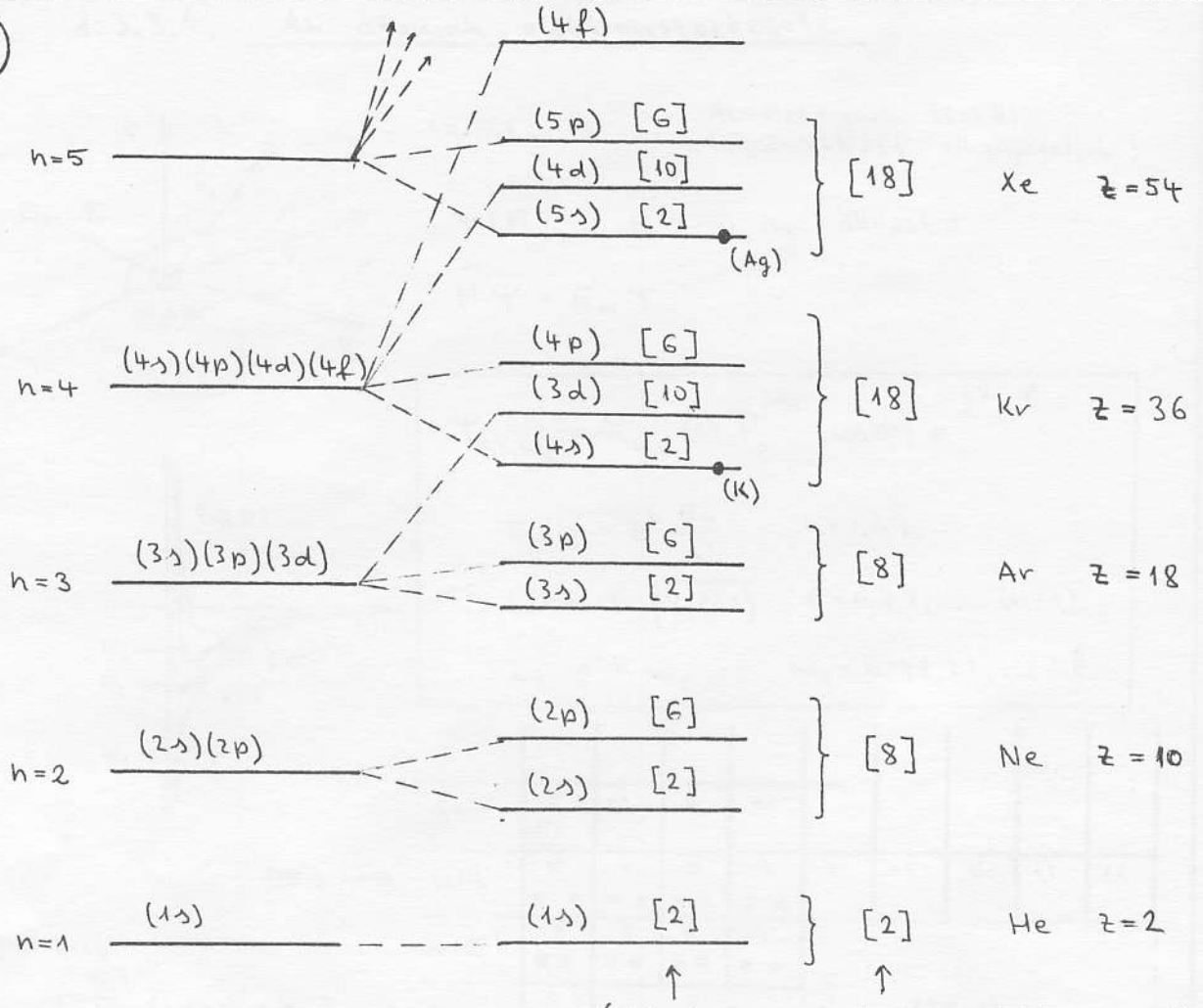
az elektronok közötti kölcsönhatás nem hanyagolható el.

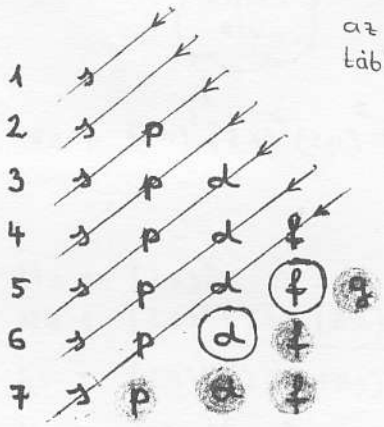
1.3.3.4. Az atomok elektronszerkezete

A hidrogénszerű ionnál tanultak azért fontosak, mert segítségével egy egyszerű általános atommodell alkotható, amely a periódusos-rendszer felépítésének a magyarázatául szolgál. Az egyedi atomok elektronszerkezetének pontosabb meghatározásához már bonyolultabb modellek szükségesek. Az elvekre még később visszatérünk.

Tételezzük fel, hogy az atomban lévő elektronok csak az atommag terét érzékelik, azaz az elektronok közötti kölcsönhatástól tekintsünk el! Ekkor minden elektronállapot valamilyen hidrogénszerű ionállapot lesz. A kérdés az, hogy hány elektron veheti fel ugyanazt az állapotot az atomban. Az atomi elektronállapotok betöltésénél két szabályt kell követnünk. Mindkettőt fogadjuk most el tapasztalati ténynek. Az egyik az ún. Pauli elv. Ez azt állítja, hogy egy atomban egy (n,l,m_l) kvantumszám hármassal jellemzett atompályán maximum két elektron lehet. Az elv mélyebb okairól és a pontos megfogalmazásáról a későbbiekben lesz szó. A másik az ún. Hund szabály, amely az állapotok betöltési sorrendjét határozza meg. A részletekre még az elektronspin bevezetése után visszatérünk.

Az atomok elektronszerkezetének a grafikus ábrázolására egy ún. blokk-diagramot fogunk használni. Minden "□"-al jelölt blokk egy atompályát reprezentál. Az atompályákhoz rendelt kvantumszámok értéke határozza meg a blokk relatív helyét az ábrában. Egy adott főkvantum-számhoz tartozó állapotok alkotják a "héjakat" (ezek a blokk-diagram sorai). Az azonos mellékkvantum-számú állapotok pedig ugyanazon "alhéjhoz" tartoznak (ezek a blokk-diagram oszlopai). Az $l=0,1,2,3,4,...$ alhéjakat $s,p,d,f,g,..$ betűkkel is szoktuk jelölni. Mindezek a középiskolai tanulmányainkból már ismertek.





az alhéjak betöltési sorrendjét megadó táblázat.

Mint már említettük, az elektronállapotok betöltési sorrendjét a Hund szabály rögzíti. Eszerint az állapotok betöltése alhéjanként történik. Az alhéjak sorrendjét pedig növekedő energiájuk határozza meg. Ha az elektronok közötti kölcsönhatást elhanyagoljuk, akkor az alhéjak energiáját csak a főkvantum-szám értéke határozza meg. Így az ugyanazon héjhoz tartozó alhéjak energiája megegyezik. Az elektronok közötti kölcsönhatás megváltoztatja az egyes alhéjak energiáját. Szemléletesen azt mondjuk, hogy az adott héjhoz tartozó energiaszint "felhasadt". A különböző héjakhoz tartozó alhéjak (felhasadt) energiaszintjei "összekeveredhetnek". (Például "3d" állapot energiája nagyobb lesz, mint a "4s" állapoté.) A felhasadt energiaszintek jól elkülönülő csoportokba rendeződnek.

Az egyes csoportosulásokhoz tartozó állapotok teljes betöltése az ún. nemesgázok elektronszerkezetét adja. Ezek meglehetősen stabil elektronszerkezetek, ami azt jelenti, hogy viszonylag nagy energia kell ahhoz, hogy egy elektront a lezárt héjból eltávozzon. Ezért a "nemes gázok" a szokásos körülmények között nem alkotnak vegyületeket. Egyatomos gáz formájában találkozunk velük.

Az alhéjak betöltési sorrendje (nagyrészt) az ún. átlós diagramból határozható meg.

1.3.3.5. Az állapotfüggvények (atompályák) grafikus ábrázolása

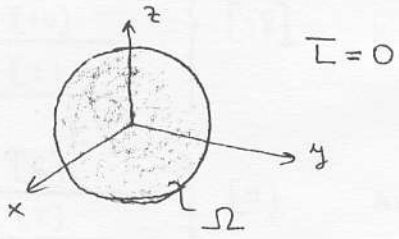
s állapotok:

$$\left.\begin{matrix} n \\ \ell = 0 \\ m_\ell = 0 \end{matrix}\right\} \; P_0^0(\cos\vartheta) = \text{állandó} \; \Big\} \; \psi_{n,0,0} = R_{n,0}(r)$$

gömbszimmetrikus

Ábrázolás:

$$\int_\Omega |\psi_{n,0,0}|^2 \, dV \cong 0{,}9$$



$\overline{L} = 0$

s állapot

p állapotok:

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

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

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

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

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

$$\begin{cases} \hat{L}^2 Y = L^2 Y \\ \hat{L}_z^2 \Phi = L_z^2 \Phi \end{cases} \longrightarrow \begin{matrix} \Phi = e^{\pm j |m_\ell| \varphi} \\ L_z^2 = \hbar^2 m_\ell^2 \end{matrix} \Big\} \; \text{degenerált állapot}$$

lineáris kombinációval ($m_\ell = \pm 1$ esetén)

$$\left\{ e^{-j\varphi}, \, e^{+j\varphi} \right\} \longrightarrow \left\{ \sin\varphi, \, \cos\varphi \right\}$$

(Feladat: bizonyítás)

1.3.3.5. Az Állapotfüggvények (atompályák) grafikus ábrázolása

Az állapotfüggvények meghatározzák az elektron megtalálási valószínűségét az atommag körül a térben. Ezt szemléletesen "elektronfelhőnek" is szoktuk hívni. Ez az atomi elektronfelhő megadja az illető atom kémiai tulajdonságait. Ezért hasznos bevezetni egy olyan grafikus módszert, amely vizuálisan informál minket az elektronfelhő atomon belüli eloszlásáról.

Az állapotfüggvényt szeparált alakban határoztuk meg. Mivel az *R(r)* sugártól függő rész nyilvánvalóan gömbszimmetrikus, így az elektronfelhő anizotrópiáját az $Y_l^{m_l}(\vartheta,\varphi)$ szögektől függő gömbfüggvények határozzák meg. Ezek ábrázolása ún. polár diagrammal történik. Ekkor felrajzoljuk azt az $Y_l^{m_l}(\vartheta,\varphi)=$ állandó felületet, amelyen belül az elektron közel egy valószínűséggel (“1-ε”) található meg.

Az s-állapot gömbszimmetrikus. Ábrázolása úgy történik, hogy megadjuk azt a gömböt, amelyen belül az elektron, pl.: 90 % valószínűséggel tartózkodik.

A p-állapotban a mellékkvantumszám $l=1$ és a mágneses kvantumszám lehetséges értékei $m_1=-1,0,+1$. Mint azt láttuk, ebben az állapotban az elektron perdülete $L=\hbar\sqrt{2}$ és a “z” irányú vetülete $L_z=-\hbar,0,+\hbar$. Láttuk, hogy az $Y_1^{-1}(\vartheta,\varphi)$, $Y_1^{+1}(\vartheta,\varphi)$, $Y_1^{0}(\vartheta,\varphi)$ függvények ugyanahhoz a perdületértékhez tartoznak, tehát degenerált állapotok, így ezek bármilyen lineáris kombinációja szintén lehetséges sajátfüggvények lesznek. Ezért a komplex függvények helyett azok lineáris kombinációjával képzett valós függvényeket használunk az ábrázoláskor.
Azaz tehát:

$Y_1^{-1}(\vartheta,\varphi)=\sin\vartheta\cdot e^{-j\varphi}$ helyett $\sin\vartheta\cdot\cos\varphi$

$Y_1^{+1}(\vartheta,\varphi)=\sin\vartheta\cdot e^{+j\varphi}$ helyett $\sin\vartheta\cdot\sin\varphi$

$Y_1^{0}(\vartheta,\varphi)=\cos\vartheta$

65

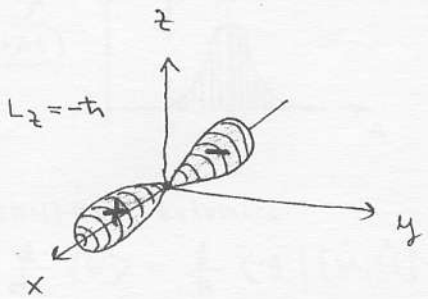
Legyen

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

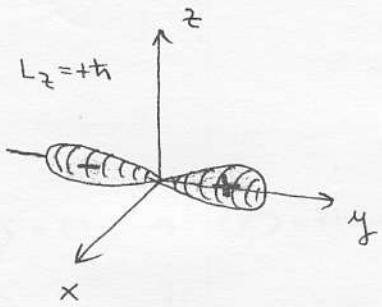
Polár (gömbi) koordináták definíciója

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

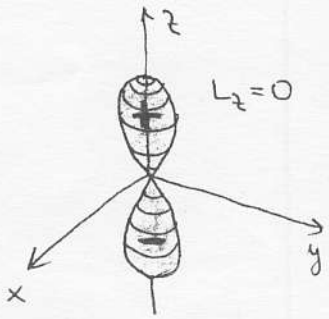
$$\rightarrow \quad \psi_{n,1,-1} = R_{n,1}\frac{x}{r}$$
$$\psi_{n,1,0} = R_{n,1}\frac{z}{r}$$
$$\psi_{n,1,+1} = R_{n,1}\frac{y}{r}$$



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



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



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

A kapott valós függvények Descartes koordinátákkal is kifejezhetők:

$$Y_1^{-1}(\vartheta,\varphi)=\frac{x}{r}, \qquad Y_1^{0}(\vartheta,\varphi)=\frac{z}{r}, \qquad Y_1^{+1}(\vartheta,\varphi)=\frac{y}{r}.$$

Eredményül az adódott, hogy a p-állapotok mindegyike egy csomósíkkal rendelkezik, ezek rendre az x=0, z=0 és az y=0 síkok. Csomósíknak nevezzük ugyanis azt a síkot, amely mentén a hullámfüggvény zérus. A gömbszimmetrikus állapot a csomósík mentén mintegy "befűződik" és egy hengerszimmetrikus állapot jön létre.

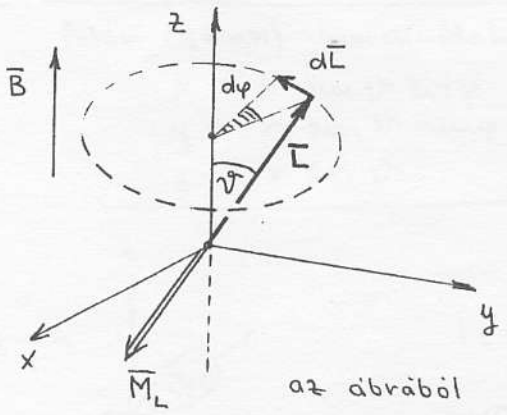
A geometriai ábrázolás során egy "kettős szivar" alakzatot kell felrajzolnunk (rendre az x, z, y tengelyek mentén).

A hullámfüggvény (+, -) előjelét is be szoktuk írni a megfelelő tartományokba.

1.4. Atomok mágneses térben

1.4.1. A mágneses tér hatása a pályamozgásból származó mágneses momentumra

Klasszikus mechanika :



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

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

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

↓ 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

$\overline{B} = 0$



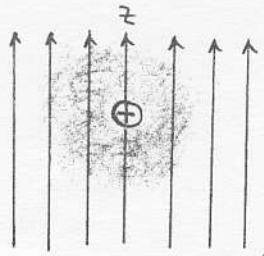
$\hat{H}_0$

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

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

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

$\overline{B}$



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

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

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

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

állítás:

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

↑

$R \cdot \Theta \cdot e^{j m_e \varphi}$

1.4. Atomok mágneses térben

1.4.1. A mágneses tér harása a pályamozgásból származó mágneses momentumra

Az, hogy a kvantummechanika axiómarendszere jó-e vagy sem magából az axiómákból természetesen nem derül (nem derülhet) ki! Erre a kérdésre a választ csak az elméleti számítások eredményeinek kísérleti ellenőrzése adhatja meg. A hidrogén atom Bohr-féle modelljében az energiaszintek helyes voltát közvetve a Balmer formula segítségével bizonyítottuk. Más kísérleti eredmény az idő tájt nem is volt ismeretes, így nem derült ki az, hogy a perdület Bohr-féle kvantálási törvénye vajon önmagában helyes-e vagy sem? A gyanú akkor ébredhet fel bennünk, amikor kiderül, hogy a kvantummechanika a perdületre más kvantálási szabályt ad meg. Felmerül tehát a perdület megmérésének a szükségessége. Ehhez pedig kölcsönhatásba kell lépni a perdülettel. Ez a hozzá szorosan csatolódó mágneses momentumon keresztül történhet. Ugyanis, ha a mágneses momentumot mágneses térbe helyezzük, akkor arra a tér valamilyen hatást fog gyakorolni. A következőkben evvel a hatással foglalkozunk.

Először megint a klasszikus fizikai modellt vizsgáljuk meg. Homogén $\vec{B}$ mágneses térben lévő $\vec{M}_L$ mágneses momentumra egy $\vec{M}_L \times \vec{B}$ forgatónyomaték hat. Mivel a mágneses momentumhoz egy $\vec{L}$ perdületvektor csatolódik, a forgatónyomaték most a perdületre is hatni fog. A perdület megváltozásának a törvényét a newtoni mechanikából ismerjük. Eszerint a perdület pillanatnyi megváltozása a forgatónyomatékkal arányos. Mivel a (mágneses momentumra ható) forgatónyomaték merőleges a mágneses momentumra, így a perdület $d\vec{L}$ megváltozásának is merőlegesnek kell lenni magára a perdületre. A perdületnek tehát csak az iránya változik meg, a nagysága állandó marad. A perdületvektor ún. precessziós mozgást fog végezni, azaz a perdületvektor végpontja egyenletes ω_L szögsebességgel fog forogni a mágneses tér iránya körül. Ennek szögsebességnek a neve a Larmor-féle körfrekvencia. Nagysága univerzális állandókon kívül a mágneses tértől függ.

A kvantummechanikai tárgyalás során a homogén mágneses térbe helyezett atom Schrödinger egyenletét kell megoldanunk. Az egyszerűség kedvéért tekintsünk egy hidrogén atomot. A hidrogén atom valamely ψ_n állapotában az elektron a pályamozgásából adódó perdülettel és a hozzá csatolódó mágneses momentummal is rendelkezik. Ez a mágneses momentum a jelenlévő mágneses térrel kölcsönhatásba lép, amit a Schrödinger egyenletben egy potenciális energia(operátor) taggal kell figyelembe vennünk: $\hat{W}_m = -\hat{M}_z \cdot B = \omega_L \cdot \hat{L}_z$ (2.axióma).

igazolás:

$$\left(\hat{H}_0 + \omega_L \hat{L}_z\right)\psi_n = \varepsilon_n \psi_n$$

$$\underbrace{\hat{H}_0 \psi_n}_{E_n \psi_n} + \underbrace{\omega_L \hat{L}_z \psi_n}_{\downarrow} = \varepsilon_n \psi_n$$

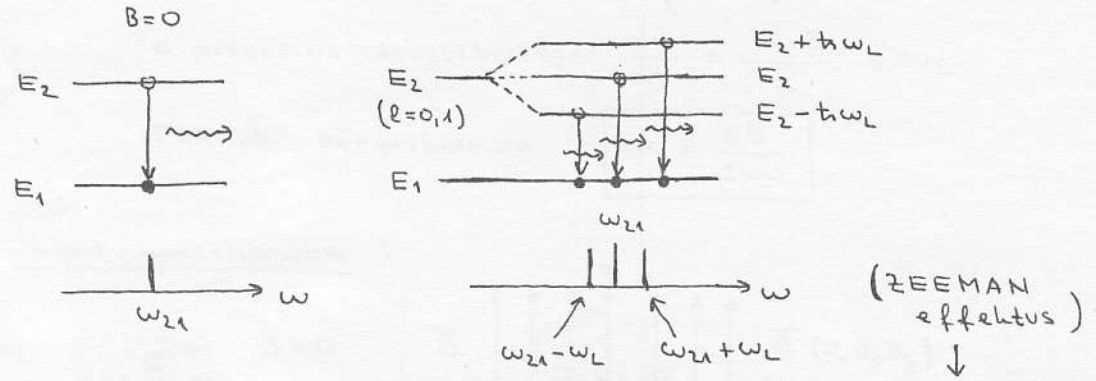
$$\frac{\omega_L \hbar}{j} R\cdot\Theta \cdot \underbrace{\frac{\partial}{\partial\varphi} e^{jm_\ell\varphi}}_{jm_\ell \cdot e^{jm_\ell\varphi}} = \omega_L \hbar m_\ell \cdot \psi_n$$

azaz

$$\boxed{\varepsilon_n = E_n + \hbar\omega_L \cdot m_\ell} \qquad (m_\ell = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots \pm \ell)$$

A külső mágneses tér hatására az <u>energiaszintek felhasadnak</u>

Kísérleti ellenőrzés:



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

1.4.2. Az elektron saját mágneses momentuma és az elektronspin

$Z = 47$ Ag atom elektronszerkezete:

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

(vegyérték elektron)



az atom mágneses momentuma

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

(atomtörzs)

Közvetlen behelyettesítéssel bizonyítható, hogy az elektron ψ_n állapotfüggvénye nem változik meg, ha a hidrogén atomot homogén mágneses térbe helyezzük. Ennek az az oka, hogy $\hat{W}_m$ a fellépő új potenciális energia tag operátora az $\hat{L}_z$ operátorral arányos. Mivel az $\hat{L}_z$ operátor felcserélhető a mágneses tér nélküli hidrogén atom $\hat{H}_0$ Hamilton operátorával, ezért a sajátfüggvényeknek meg kell egyezni. Az E_n energiaszintek azonban $\varepsilon_n = E_n + m_l \cdot \hbar\omega_L$ -re változnak. Ezt a megváltozást szemléletesen felhasadásnak nevezzük.

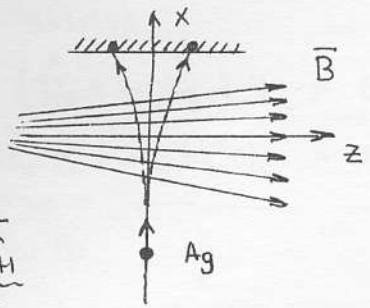
A pályaállapotok energiaszintjeinek a felhasadása megváltoztatja a lehetséges elektronátmeneteket és így a kibocsátható fotonok lehetséges energiáit is. Ez pedig a spektrum vonalak felhasadását eredményezi, ami spektroszkópiai méréssel detektálható. A jelenséget Zeeman effektusnak nevezik. Helyesebben ennek a neve a "normális Zeeman effektus" (1896. Ekkor még csak a klasszikus Lorentz-féle pontszerű elektronmodell létezett. Ennek alapján is meg lehetett magyarázni ezt a jelenséget). A következő fejezetben látni fogjuk, hogy az elektronnak magának is van egy mágnese momentuma. Természetesen ez is kölcsönhatásba lép a külső homogén térrel. A kétféle eredetű, de azonos nagyságrendű mágneses momentumok hatása a válóságban együtt kell, hogy jelentkezzen. Ekkor beszélünk az "anomális Zeeman effektusról". Az ellentmondó elnevezésnek történeti okai vannak.

1.4.2. Az elektron saját mágneses momentuma és az elektronspin

Ez a tantárgy nem fizikatörténet! Ezért az egyes kísérleteket nem a megszületésük sorrendjében mutatjuk be. Mai, letisztult és egzakt ismereteink birtokában legrövidebb úton, a kísérlet és elmélet összekapcsolódásának logikus láncolata mentén szeretnénk eljutni az elektronspin fogalmához. A tudomány története azonban nem mindig olyan logikus, ahogyan azt mai didaktikai szemléletünk igényelné. Ezért a célunknak megfelelően „átrendezzük az eseményeket”. (Akár így is történhetett volna!)

Az atomok elektronszerkezetének a tárgyalásakor már láttuk azt, hogy az egyes alhéjak betöltése nem az egymást követő héjak sorrendjében, hanem attól eltérő módon történik. A betöltési sorrend ellenőrzése mérés útján lehetséges.

Tekintsük például a Z=47 rendszámú Ezüst atomot! A 46 elektron lezárt alhéjakban helyezkedik el. Azt kell méréssel eldönteni, hogy a 47-ik elektron (4f), vagy (5s) állapotban van-e, azaz igaz-e a 63.oldalon bemutatott "átlós szabály"? A mérésre az ad lehetőséget, hogy a lezárt héjak pályamozgásból adódó eredő mágneses momentuma zérus kell, hogy legyen. Ennek oka az, hogy lezárt héj esetén az összes (+ és -) mágneses kvantumszámhoz tartozó pálya be van töltve, és így a mágneses momentumok kompenzálják egymást. Az ezüst atom eredő mágneses momentuma tehát csak a 47-ik elektron pályaállapotából adódhat. Ez pedig más az (5s) és más a (4f) állapotban. Azaz ha megmérjük az ezüst atom mágneses momentumát, akkor ennek alapján a feltett kérdés egyértelműen megválaszolható.



STERN-GERLACH kísérlet

Az Ag atom nyaláb két részre hasadt

↓

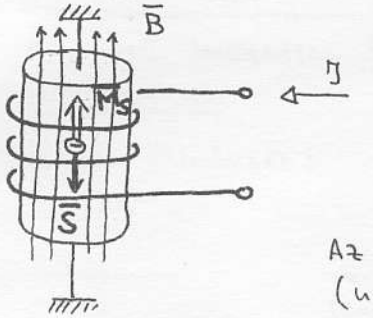
A mérés eredménye:

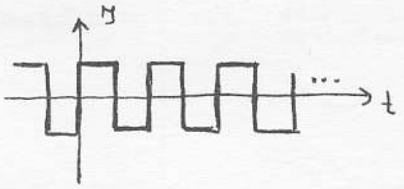
$$M_{Ag} = \pm \mu_B$$

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

$$\boxed{M_{sz} = \pm \mu_B}$$

EINSTEIN - DE HAAS kísérlet





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

$$\boxed{S_z = \mp \frac{\hbar}{2}}$$

A mérésekből adódik tehát:

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

saját : $\left.\begin{aligned} M_{sz} &= \pm \mu_B \\ S_z &= \mp \frac{\hbar}{2} \end{aligned}\right\} \quad \rightarrow \quad \frac{M_{sz}}{S_z} = -\frac{e}{m} \qquad (?)$

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

↓

Spin olyan dinamikai változó, amelynek nincsen klasszikus megfelelője

(Axióma 2 → mit kell tenni?)

↓

elméleti modell (ek)

Az atomok illetve molekulák mágneses momentumának a meghatározására az ún. “atom-” vagy “molekulasugaras mérés” használható. Ennek elve a következő. Ha inhomogén mágneses térbe egy mágneses momentumot (mágneses dipólust) helyezünk, akkor arra a forgatónyomatékon kívül egy erő is fog hatni, amelyik a (a mágneses tér irányától függően) a nagyobb vagy a kisebb térerősség irányába gyorsítja a mágneses momentumot. Ha tehát atomokból álló sugárnyalábot inhomogén mágneses térbe vezetünk, akkor a kezdetben együtt mozgó különböző irányú mágneses momentumok a rájuk ható különböző nagyságú erők hatására szétválnak. A beeső dipólus nyaláb így több ágra szakad. A becsapódások helye detektálható. Például, ha ezüst atomokból álló nyalábot használunk, akkor (4f) állapotú elektron esetén hét nyalábot ($m_l = 0 \pm 1 \pm 2$), (5s) állapot esetén egy nyalábot ($m_l = 0$) kellene kapnunk. Az érdekesség azonban az, hogy a bemenő ezüst atom nyaláb kettő(!) ágra válik szét. A nyalábokban a mágneses momentum mágneses térre vett vetületének (ez legyen a “z” irányú vetület) az értéke a mérések szerint $\pm\mu_B$ (Bohr magnetonnyi). Ez a meglepő kísérlet eredménye csak úgy magyarázható, ha feltesszük, hogy a 47-ik elektron (5s) pályaállapotban van (így ennek a mágneses momentuma zérus) és maga az elektron is rendelkezik egy (saját, ún. “belső”) mágneses momentummal, amelynek “z” irányú vetülete csak $\pm\mu_B$ lehet.

Magát, az imént vázolt molekulasugaras mérést 1920-ban Otto Stern a frankfurti egyetem magántanára dolgozta ki és a kísérleteit 1921-től W. Gerlach-al Rostockban folytatta. Ekkor még csak a Bohr-Sommerfeld atommodell létezett, ezért a mérések kiértékelése is csak ennek alapján történhetett. Mint tudjuk, e modell szerint a pályamozgás perdülete soha nem lehet zérus. Később a Schrödinger-féle elmélet megszületése után kiderült, hogy az elektron pályaperdületének legkisebb értéke valójában zérus (“s” állapot). Nyilvánvalóan ugyanezek érvényesek a pályamozgásból adódó mágneses momentumra is. A Stern-Gerlach féle (atom- illetve) molekulasugaras mérésekkel el lehetett dönteni azt, hogy melyik modellnek van igaza. A mérés eredménye utólag természetesen Schrödinger elméletét igazolta és (pl. a fentiekben tárgyalt ezüst atom esetén) elvezetett az elektron saját mágneses momentumának a felfedezéséhez is.

Az 1943-as fizikai Nobel díjat Otto Stern kapta, az indoklás szerint: “a molekulasugár-módszer kifejlesztéséért és a proton mágneses momentumának a felfedezéséért.”

Ha az elektronnak van saját mágneses momentuma, akkor joggal tételezhető fel, hogy van saját perdülete is. Ezt nevezzük spinnek. A bizonyítékot az a kísérlet szolgáltatja, amelyet Einstein javaslata alapján W.J.deHaas német fizikus végzett el. (Ma ezt Einstei-de Haas kísérletnek nevezzük.)

Eredetileg, 1915-ben, azt akarták ellenőrizni, hogy a ferromágnesség Ampere-féle elméletében feltételezett elemi köráramok azonosíthatók-e az atomokban keringő elektronokkal. Mivel a mérés nem a várt eredményt adta, ezért a jelenséget mágneses anomáliának nevezték el. A magyarázatra csak jóval később, az elektron saját mágneses momentumának és a spinjének a bevezetése után került sor. Mi már ennek a tudatában ismertetjük a kísérletet.

A mérés lényege a következő. Áramjárta tekercs homogén mágneses terébe vékony torziós szálra felfüggesztett vasrudat helyezünk. A fémben lévő, a ferromágnesességért felelős(?) elektronok saját mágneses momentumai "beállnak" a tér irányába. Változtassuk meg az áram irányát a tekercsben! Ekkor megváltozik a mágneses tér iránya is. Az elektronok mágneses momentumai követik a tér irányváltozását. Ha az elektronnak van saját perdülete, akkor azok is megfordulnak. De a perdület megmaradási tétele miatt az egész fémhengernek is el kell fordulnia ahhoz, hogy a rendszer eredő perdülete továbbra is zérus maradhasson. Ez az igen kicsiny kis makroszkopikus elfordulás rezonancia módszerrel felerősíthető. Ekkor az áram irányát éppen a mechanikai torziós rendszer rezonancia frekvenciájának az ütemében változtatjuk. A mérés eredménye az, hogy az elektron spinje, pontosabban a spinnek a mágneses tér irányára vett S_z vetülete, csak $\pm\hbar/2$ értéket vehet fel.

Mint már említettük, az eredeti elképzelés az volt, hogy a ferromágnességért az “atomi áramok”, azaz az atomi elektronok pályaállapotában fellépő mágneses momentum a felelős. Ha ez így lenne, akkor a mért perdületre (a pályaállapotoknak megfelelően) a $\hbar$ többszöröse adódott volna. Mivel nem ezt mérték, ezért nevezték az effektust “mágneses anomáliának”.

A mérési eredmények szerint tehát az elektron saját mágneses momentumának és a spinjének az aránya kétszer akkora, mint a pályamozgásból adódó ugyanezen mennyiségeké**.**

Ez a nagyon fontos kísérleti eredmény azt bizonyítja, hogy a spin nem egy klasszikus dinamikai változó, jóllehet a mértékegysége ugyanaz, mint a klasszikus perdületé.

Ezért a spin kvantummechanikai modelljének kidolgozásánál „bajban” leszünk! Mivelhogy nincsen klasszikus definíció, így a 2.axiómában előírt eljárás a "spin-operátor" definiálására nem alkalmazható.
Az eddig használt séma:

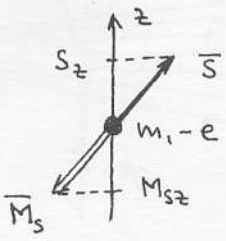
"Klasszikus mechanika → Operátorok → Sajátérték egyenlet → Fizikai értelmezés → Mérés."

helyett egy “fordított” utat kell követnünk. Ugyanis most a mért (kvantált) sajátértékek ismeretében kell “kitalálni” a dinamikai változót reprezentáló operátort és így annak kvantummechanikai tulajdonságait.
Az alkalmazandó séma tehát a következő:

"Mérés→Fizikai értelmezés → Sajátérték egyenlet → Operátorok → Kvantummechanikai elmélet.”

Hasonló problémával a részecskefizikusok nap mint nap találkoznak. Az elemi részecskéknek ugyanis számos olyan tulajdonsága van, amelyeknek nincsen megfelelője a klasszikus fizikában. Valójában az elemi részecskéket éppen ezen tulajdonságaik alapján osztályozzuk. Ezeknek (hogy „beszélni tudjunk” róluk) valamilyen nevet kellett adni. Ezek csak „fantázia-nevek”, tehát ha esetleg van is eredeti jelentésük, azt nem abban az értelemben használjuk. Az elméleti fizikusok fantáziája itt is meglehetősen játékosnak és élénknek bizonyult. Az izospin, a barionszám, a ritkaság, a leptontöltés, a kvarkok “színe”, és “íze” mind-mind olyan tulajdonságokat jelölnek, amelyek a klasszikus fizika szintjén nem “láthatók”, így nem is alakult ki bennünk velük kapcsolatos “hétköznapi szemléletes” kép. Itt egyedül csak a matematikára támaszkodhatunk. A részecskefizikában ennek alapján alakíjuk ki azt a sajátos szemléleti rendszert amelyben gondolkozva próbáljuk “megérteni a Természet titkait”. Itt a vezérfonal mindig valamilyen „megmaradási tétel” és azokat szűkítő „kiválasztási szabályok” felismerése. Mindezek mélyén a Természet valamilyen „szimmetria tulajdonsága” húzódik meg. Ezen szimmetriák olyan általános szabályszerűségek, absztrakt „mintázatok” amelyek leírására a „matematika”, mint a „mintázatok tudománya” egyedül alkalmas. Ez az a „királyi út” amely a Természet megértéséhez elvezethet. A „Nagy Bumm”-tól az „emberi értelemig”, amely megérti a „Nagy Bumm”-ot a bonyolultság és a szervezettség hihetetlen gazdagságával találkozunk. Hát igen: „Felség ! A Világ Nagyon Bonyolult!”.

GOUDSMIT – UHLENBECK



Pályamozgásból adódó $\overline{L}, \overline{M}_L$		Saját (belső) $\overline{S}, \overline{M}_S$
$L^2 = \hbar^2 \ell(\ell+1)$	$\ell \leftrightarrow s$	$S^2 = \hbar^2 s(s+1)$
$L_z = \hbar m_\ell$	$m_\ell \leftrightarrow m_s$	$S_z = \hbar m_s$
m_ℓ: $\underbrace{-\ell \ldots\ldots +\ell}_{(2\ell+1)\text{ db}}$		m_s: $\underbrace{-s \ldots\ldots +s}_{(2s+1)\text{ db}}$
$M_z = \text{áll} \cdot L_z$		$M_{sz} = \text{áll} \cdot S_z$
$M_z = -\frac{e}{2m} g_\ell \cdot L_z$	$g_\ell \leftrightarrow g_s$	$M_{sz} = -\frac{e}{2m} g_s \cdot S_z$
$g_\ell = 1$		$g_s = ?$
$M_z = \underbrace{-\frac{e}{2m} g_\ell \cdot \hbar m_\ell}_{-\mu_B \cdot g_\ell \cdot m_\ell}$		$M_{sz} = \underbrace{-\frac{e}{2m} g_s \cdot \hbar m_s}_{-\mu_B \cdot g_s \cdot m_s}$

Az elméleti modell "működése"

STERN-GERLACH KÍSÉRLET $(\pm \mu_B)$ → GOUDSMIT-UHLENBECK ELMÉLET → STERN-GERLACH $(\pm \mu_B)$

GOUDSMIT-UHLENBECK ELMÉLET → EINSTEIN-DE HAAS $\left(\mp \frac{\hbar}{2}\right)$

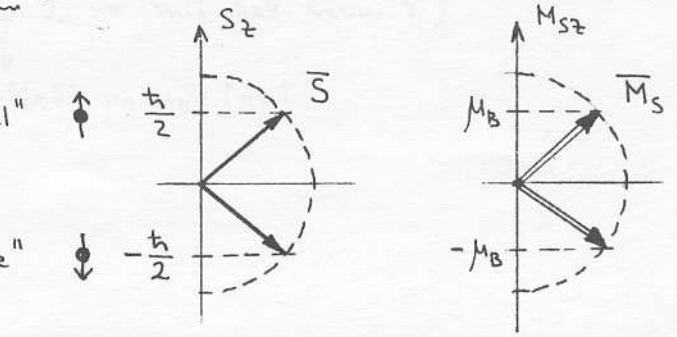
(S.G.)
$$\begin{cases} M_{sz} = \pm \mu_B \rightarrow g_s \cdot m_s = \pm 1 \rightarrow g_s = 2 \\ 2s+1 = 2 \rightarrow s = \frac{1}{2} \rightarrow m_s = \pm \frac{1}{2} \rightarrow S_z = \mp \frac{\hbar}{2} \end{cases}$$ (E.H.)

A spin "vektor" modellje:

$$S^2 = \hbar^2 \frac{1}{2} \cdot \frac{3}{2}$$

$$\downarrow$$

$$\begin{cases} S = \frac{\sqrt{3}}{2} \hbar \\ M_s = \sqrt{3}\, \mu_B \end{cases}$$



A spint, mint az elektronnak egy sajátos tulajdonságát, először S.A.Goudsmit és G.E.Uhlenbeck vezette be a kvantummechanikába 1925-ben. Az általuk kidolgozott spin-fogalom jelentősége messze túlnőtt azon, amit a felfedezők gondoltak.

A spinre jellemző kvantumszám(ok) definiálása legegyszerűbben a pályamozgásból adódó perdület mintájára történhet. Tételezzük fel, hogy az elektron spinje és mágneses momentuma éppen olyan elemi tulajdonsága az elektronnak, mint a tömege vagy a töltése. A pályamozgásból adódó momentumok mintájára be kell vezetni az "s" (ami az "l" mellékkvantum-számmal analóg), és az "m_S" (ami az "m_l" mágneses kvantumszámmal analóg) kvantumszámokat valamint a "g_S" (giromágneses) faktort. Ez utóbbi a perdület és a mágneses momentum arányát mérő puszta szám.

Az elmélet helyességét az bizonyítja, hogy a saját mágneses momentum mért értékeit (Stern-Gerlach) beírva az elméletbe, az kiadja az elektronspin mért értékeit (Einstein-deHaas). Mivel az "s" csak egyetlen értéket vesz fel (1/2), ezért nem tekinthető igazi kvantumszámnak, hiszen minden elektronállapotban mindig ugyanaz az értéke. Új kvantumszám az "$m_s = \pm 1/2$", amelyet találóan "spin kvantumszámnak" hívunk. Ezzel tulajdonképpen a Bohr-Sommerfeld féle (továbbfejlesztett) atommodell elektronjainál alkalmazott Pauli elv negyedik kvantumszámát „fedezték fel".

A spin vektormodellje a pályamomentum mintájára készíthető el.

Ha az elektron spinjéről beszélünk, akkor mindig a spin "z" irányú vetületére az S_z-re gondolunk. Tehát, ha azt mondjuk például, hogy az elektron spinje: „felfelé áll" , vagy „pozitív", vagy „+1/2", vagy „+ $\hbar$ /2", stb..., akkor ez mind azt jelenti, hogy az $S_z = + \hbar/2$.

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)

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

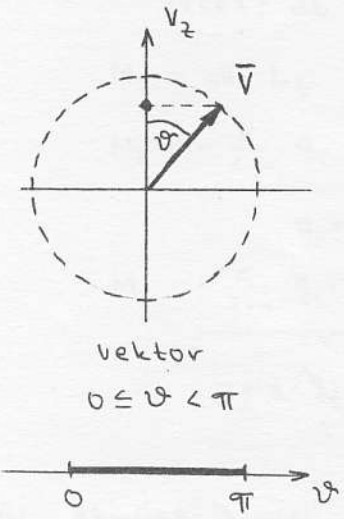
$\hat{S}_z \beta = -\frac{\hbar}{2}\beta$

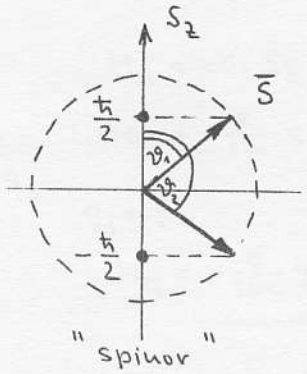
→ azaz $\chi_{m_s} = \begin{cases} \chi_{\frac{1}{2}} \equiv \alpha \\ \chi_{-\frac{1}{2}} \equiv \beta \end{cases}$

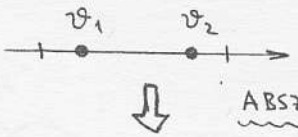
(két sajátfüggvényből álló tér !)

Formálisan bevezethető : ξ u.n. spin változó

$\chi(\xi)$ u.n. spin függvény

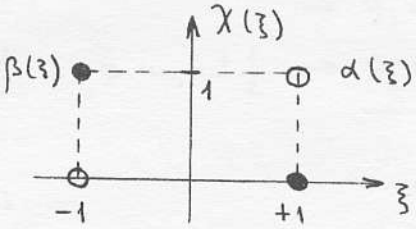






⇩ ABSZTRAKCIÓ





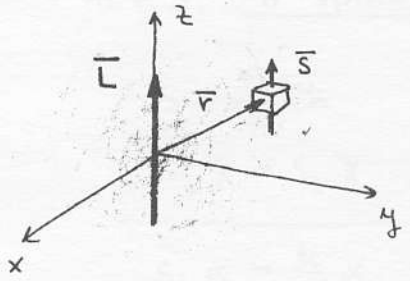
(Olyan furcsa, hogy
nem is fogjuk használni)

1.4.3. A spin-pálya kölcsönhatás

Láttuk azt, hogy nincsen olyan klasszikus mechanikai fogalom, amelyik az elektronspinnek felelne meg. Ezért a spin-operátor definiálására a 2.axiómában előírt módszer nem alkalmazható. Mint említettük, most egy inverz eljárást kell követnünk. Azaz a sajátértékek ismeretében kell megkonstruálni a spin "z" irányú komponenséhez rendelhető $\hat{S}_z$ operátort és a sajátfüggvényeket. A klasszikus fogalom hiánya miatt csak a heurisztikus utat követhetjük. (Heuristica=görög szó, jelentése: feltalálás, valamire való rájövés.) Legyen a $\chi(\xi)$ spin állapotfüggvény valamilyen ξ változó függvénye, amit "spin változónak" hívunk. A $+\hbar/2$ sajátértékhez tartozzon az $\alpha(\xi)$ sajátfüggvény, a $-\hbar/2$ sajátértékhez tartozzon a $\beta(\xi)$ sajátfüggvény. A továbbiakban mindig így fogunk ezekre hivatkozni.

Nem szükséges, hogy valamiféle konkrét klasszikus kép kapcsolódjon ezekhez, hiszen a dolgok lényegénél fogva ez amúgy is lehetetlen volna. Valamiféle támpontot nyújthat az, ha a spint egy adott nagyságú, klasszikus vektorként képzeljük el, de azzal a megszorítással, hogy a skalár komponensei eleget tesznek a kvantummechanikai törvényeknek. Jelen esetben a "z" irányú komponens csak kétféle ("fel" vagy "le") lehet, valamint az "x" és az "y" vetület teljesen határozatlan. A ξ változó, némi fantáziával, a vektor ϑ polárszögéből absztrahálható.

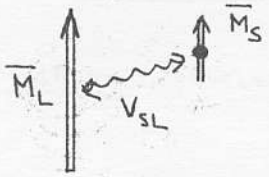
Az elektron-állapotok leírása



pl: $V(r) = -\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{r}$ (COULOMB tér)

Egy elektronállapot (neve: SPIN-PÁLYA)

$$\phi_{\underbrace{n,\ell,m_\ell,m_s}_{\text{kvantum-számok}}}(\underbrace{\bar{r},\xi}_{\text{változók}})$$



$$\phi_{n,\ell,m_\ell+\frac{1}{2}}(\bar{r},\xi) \neq \phi_{n,\ell,m_\ell-\frac{1}{2}}(\bar{r},\xi)$$

Az "elektronfelhő" függ az elektron spinjétől

↓

SPIN-PÁLYA kölcsönhatás

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

$$\boxed{V_{SL} = -a\bar{L}\bar{S}}$$

Az elkövetkezőkben a spin-pálya kölcsönhatást <u>elhanyagoljuk</u>

$$\phi_{n,\ell,m_\ell,m_s}(\bar{r},\xi) = \underbrace{\psi_{n,\ell,m_\ell}(\bar{r})}_{\text{pálya állapot}} \cdot \underbrace{\chi_{m_s}(\xi)}_{\text{spin állapot: } \alpha(\xi),\ \beta(\xi)}$$

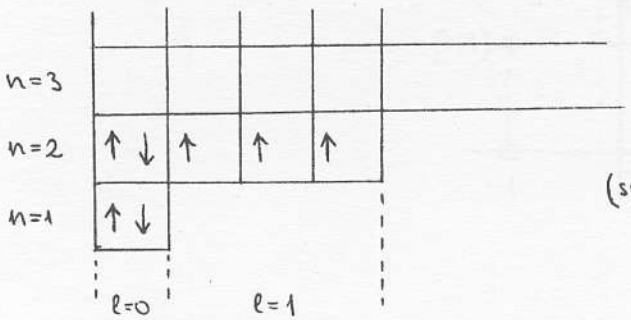
↓

általában $\psi(\bar{r})$

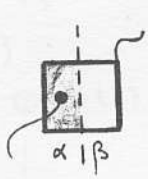
<u>PAULI elv</u>:

Egy spin-pálya állapotban legfeljebb egy elektron lehet

Atomok elektronszerkezete



(Hund szabály)



$\psi_{\underline{n}}$ (= pálya állapot)

$\underline{n}$: pálya állapotot megadó kvantum számok

$\phi_{\underline{n},m_s}$ (spin-pálya állapot)

Feladat: (Al, Si, P)

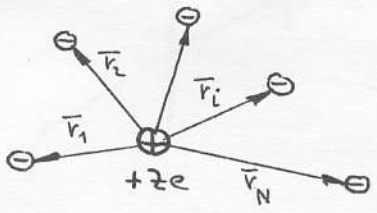
Egy elektron fizikai viselkedését az atomban nem csak az őt reprezentáló elektronfelhő szabja meg, hanem az elektron spinje is. Mindezen tulajdonságokat együttesen megadó állapotfüggvényt "spin-pályának" nevezzük. A spin-pálya állapotot az atomban négy kvantumszám fogja megadni (n, l, m_l, m_s) és az állapotfüggvény négy változónak $\{x, y, z, \xi\}$ a függvénye. Az elmondottak miatt az elektron állapot jelölésére a $\Phi_{n,l,m_l,m_s}(\vec{r}, \xi)$ szimbólumot fogjuk használni. Ez a jelölés azt is kifejezi, hogy az elektronfelhő eloszlása (azaz a megtalálási valószínűség!) függ az elektron spinjétől is. Ennek oka az úgynevezett "spin-pálya" kölcsönhatás. Ennek szemléletes fizikai tartalma az, hogy az elektronnak a pályamozgásból származó $\vec{M}_L$ és a saját $\vec{M}_S$ mágneses momentuma (hasonlóan, mint két mágneses dipólus) kölcsönhatásba lép egymással. Az ebből adódó $V_{SL} = -a \cdot \vec{L} \cdot \vec{S}$ potenciális energia jellemzi a spin-pálya kölcsönhatást. Ha ezt elhanyagoljuk, azaz ha ez a (kölcsönhatásra jellemző) operátor nem szerepel a Hamilton operátorban, akkor a teljes $\Phi_{n,l,m_l,m_s}(\vec{r}, \xi)$ állapotfüggvény szeparálható lesz és előállítható egy $\Psi_{n,l,m_l}(\vec{\mathbf{r}})$ pálya állapotfüggvény és egy $\chi_{m_s}(\xi)$ spinfüggvény szorzataként. A pályaállapotokat most már csak "külső" tényezők határozzák meg, az elektron spinjétől független lesz.

Ezek után pontosíthatjuk a már ismertetett Pauli elvet. Eszerint egy elektronrendszerben (pl: egy atomban) nem lehet két elektron ugyanabban a spin-pálya állapotban. Illetve (ha a spin-pálya kölcsönhatást elhanyagoljuk, akkor) egy pályaállapotban maximum két ellentétes spinű elektron lehet [↑↓]. Az atomok elektronszerkezetét szemléltető blokk diagramban egy □ blokk egy pályaállapotot reprezentál. A Hund szabály szerint az alhéjak betöltése úgy történik, hogy a pályaállapotokban egyedül lévő elektronok (ún. "nem kompenzált spinek") száma mindig a lehető legnagyobb legyen.

1.5. Sok (azonos) részecskéből álló rendszer vizsgálata

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

Pl:



Klasszikus mechanika:

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

A Hamilton függvény:

$$H = \sum_{i=1}^{N}\left(\frac{p_i^2}{2m} - \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r_i}\right) + \underbrace{\frac{1}{2}\sum_{i\neq j}^{N}\sum^{N}\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0|\bar{r}_i-\bar{r}_j|}}_{\text{elektronok közötti kölcsönhatás (Coulomb)}}$$

Kvantummechanika:

(II. Axióma:) $\{\hat{x}_i, \hat{y}_i, \hat{z}_i, \hat{p}_{xi}, \hat{p}_{yi}, \hat{p}_{zi}\}_{i=1}^{N}$

$\hat{x}_i \to x_i \cdot$, $\hat{p}_{xi} \to \frac{\hbar}{j}\frac{\partial}{\partial x_i}$

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^{N}\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_i - \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r_i}\right\} + \underbrace{\frac{1}{2}\sum_{i\neq j}^{N}\sum^{N}\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0|\bar{r}_i-\bar{r}_j|}}_{\text{(spin-pálya kölcsönhatást elhanyagoljuk)}}$$

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

(III. Axióma) A rendszer összenergiája

$$\hat{H}\Psi = E\Psi \longrightarrow \underbrace{\Psi(\bar{r}_1, \bar{r}_2, \ldots, \bar{r}_N)}_{\neq \psi_1(\bar{r}_1)\cdot\psi_2(\bar{r}_2)\cdots\psi_N(\bar{r}_N)}$$

A megoldása matematikailag nagyon bonyolult

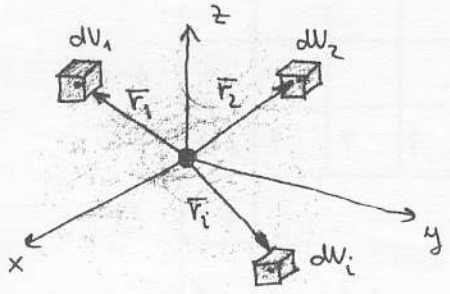
↓

KÖZELÍTÉSEK kellenek

↓

egy-részecske közelítés

A Ψ állapotfüggvény fizikai tartalma:



$$\left|\Psi(\bar{r}_1, \bar{r}_2, \bar{r}_3, \ldots, \bar{r}_N)\right|^2 dV_1\, dV_2\, dV_3 \cdots dV_N$$

1.5. Sok (azonos) részecskéből álló rendszer vizsgálata

1.5.1. Az energia operátora és az állapotfüggvény

Eddig csak egyetlen részecske kvantummechanikai tulajdonságait vizsgáltuk. A valóságban azonban szinte mindig több azonos részecskéből álló rendszerrel van dolgunk (pl: atomok elektronszerkezete) Szükség van tehát a kvantummechanika sokrészecskés kiterjesztésére. Mindezt az atomokon, mint egy konkrét reális példán, fogjuk bemutatni. Természetesen a kapott általános törvények más, sok azonos részecskéből álló rendszerre is érvényesek. A szokásos sémát alkalmazzuk: "Klasszikus mechanika → Operátorok → Sajátérték egyenlet → Fizikai értelmezés → Mérés."

Tekintsünk N darab pontszerű elektronból álló klasszikus fizikai rendszert. A rendszer teljes dinamikai leírásához ismerni kell minden elektron helyét és impulzusát. Ezek lesznek tehát a dinamikai alapmennyiségek: $\{\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3, ..., \vec{r}_N, \vec{p}_1, \vec{p}_2, \vec{p}_3, ..., \vec{p}_N\}$. A rendszer Hamilton függvénye (azaz az összenergiát megadó függvény) tartalmazza a részecskék közötti kölcsönhatást megadó $V(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3, ..., \vec{r}_N)$ potenciális energia kifejezését is.

A kvantummechanikára a 2.axióma szerint kell áttérni. Az alapmennyiségekhez rendelt operátorok definiálása az egyetlen részecske esetén megtanultak mintájára történik. Azaz minden egyes elektron hely- és impulzuskoordinátájához a szokásos módon rendelünk operátorokat.
Hanyagoljuk el a spin-pálya kölcsönhatást! A Hamilton operátor most 3N független változót tartalmaz, így a (pálya)állapotfüggvény is egy 3N változós függvény lesz: $\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3, ..., \vec{r}_N)$. A részecskék (elektronok) közötti (Coulomb) kölcsönhatást megadó potenciális energia olyan, hogy a rendszer hullámfüggvénye nem szeparálható, azaz nem fejezhető ki egyrészecske hullámfüggvények szorzataként:

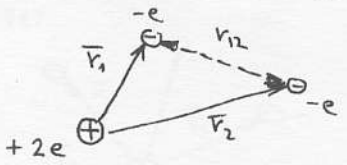
$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3, ..., \vec{r}_N) \neq \psi_1(r_1) \cdot \psi_2(\vec{r}_2) \cdot \psi_3(\vec{r}_3) \cdot .... \psi_N(\vec{r}_N).$$

Egyszerű számolással meggyőződhetünk arról, hogy egy 3N változós függvény kiszámítása gyakorlatilag megoldhatatlan feladatot jelent. Tekintsük például a nátrium atomot! Ennek 11db elektronja van. Így a állapotfüggvény 33 db változót tartalmaz. Ha minden változó csak 10 értéket vesz fel (ami eléggé pontatlan számolást jelentene), akkor 10^{33} adatot kell kiszámítani. Tegyük fel, hogy egyetlen adatot 1 nanosecundum (10^{-9}secundum) alatt lehet meghatározni. Akkor ehhez 10^{24} sec idő szükséges. Tájékozódásul az Univerzum kora 15 milliárd év, azaz kb. 5 10^{17} secundum. Látható, hogy sokváltozós állapotfüggvény egzakt kiszámítása lehetetlen. Számolni csak szeparált alakban megadott állapotfüggvénnyel lehet. Ezért **közelítéseket fogunk alkalmazni**.

A részecske rendszer pálya állapot függvényének a fizikai tartalma (az egyrészecske állapotfüggvényhez hasonlóan) a részecskék megtalálási valószínűségével van kapcsolatban. Pontosabban a $|\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3, ..., \vec{r}_N)|^2 dV_1 dV_2 dV_3 ... dV_N$ kifejezés annak a valószínűségét jelenti, hogy az az első részecskét az $\mathbf{r}_1$ pont dV_1 környezetében, ugyanakkor második részecskét az $\mathbf{r}_2$ pont dV_2 környezetében, stb... ,az N-ik részecskét az $\mathbf{r}_N$ pont dV_N környezetében találjuk.

1.5.2 A HARTREE közelítés és az SCF módszer

Példa modell : He atom $(Z=2,\ N=2)$



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

$$\hat{H} = \underbrace{\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_1 + V_c(r_1)\right] + \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_2 + V_c(r_2)\right]}_{\equiv \hat{H}_0} + \underbrace{\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 |\bar{r}_1 - \bar{r}_2|}}_{\text{kölcsönhatás} \equiv W(r_{12})}$$

$V_c(r_1) = \frac{2e^2}{4\pi\varepsilon_0 r_1}$

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

A feladat :

$\hat{H}\,\Psi(\bar{r}_1,\bar{r}_2) = E\,\Psi(\bar{r}_1,\bar{r}_2)$ $\longrightarrow$ megoldása nagyon bonyolult

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

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

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

jelölési megállapodás :

$\psi_i(\bar{r}_k)$

i : az állapotfüggvény azonosítója

k : az elektron azonosítója

Adódik a következő (Feladat : bizonyítása)

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_1 + V_c(r_1)\right]\psi_i(\bar{r}_1) = \varepsilon_i\,\psi_i(\bar{r}_1)$$
$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_2 + V_c(r_2)\right]\psi_j(\bar{r}_2) = \varepsilon_j\,\psi_j(\bar{r}_2)$$

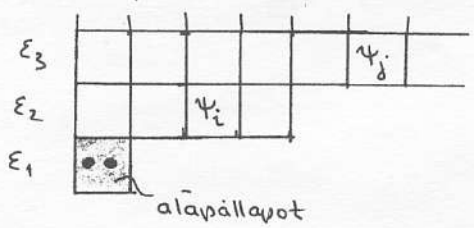
Két független egyenlet. Matematikai alakjuk pontosan ugyanolyan.

$\downarrow$

Matematikailag ez ekvivalens egy egyenlettel

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

Megoldások:



Az alapállapot :

$$\Psi(\bar{r}_1,\bar{r}_2) = \psi_1(\bar{r}_1)\,\psi_1(\bar{r}_2)$$
$$E = 2\varepsilon_1$$

1.5.2. A Hartree közelítés és az SCF módszer

A lehető legegyszerűbb, a valóságban is önállóan létező "sok elektronos" rendszer a Hélium atom. Csak két elektronnal rendelkezik ugyan, de ez már elegendő ahhoz, hogy a kvantummechanikai többrészecske probléma közelítő módszereit bemutassuk rajta.

A továbbiakban a spin-pálya kölcsönhatást elhanyagoljuk, így csak a pályaállapot-függvényt kell meghatározni. A spint csak az állapotok betöltésekor alkalmazandó Pauli elvnél vesszük figyelembe. Mint arra már a bevezetőben utaltunk, az elektronok közötti kölcsönhatás miatt a pályaállapot-függvény nem szeparálható, azaz az egzakt megoldás nem írható fel két egyrészecske állapotfüggvény szorzataként.

Kiindulásul próbálkozhatunk a legdurvább közelítéssel, amikor is az elektronok közötti kölcsönhatást elhagyjuk. Ekkor mindkét elektron csak az atommag elektromos terét érzékeli ugyanúgy, mint a hidrogénszerű ion esetén. A rendszer hullámfüggvénye most már szeparálható. A két hullámfüggvény mindegyikére ugyanazt a (hidrogénszerű ionnál már részletesen megoldott) Schrödinger egyenletet kapjuk, csak az egyikben az $\mathbf{r}_1$ a másikban az $\mathbf{r}_2$ változó szerepel. Matematikailag tehát csak egyetlen egyenletet kell megoldani. Ennek az Schrödinger egyenletnek a megoldásait már ismerjük. Ezek szolgáltatják azokat a lehetséges állapotokat, amelyeket a két elektron a Pauli-elv szerint majd betölt Tulajdonképpen a már megismert szemléletes “blokkdiagram” módszerhez jutottunk.

A Hartree közelítés :

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

$$E = \left\langle \Psi(\bar{r}_1,\bar{r}_2) \middle| \hat{H} \middle| \Psi(\bar{r}_1,\bar{r}_2) \right\rangle = E_{mért}$$

közelítés :

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

$$\tilde{E} = \left\langle \underbrace{\tilde{\Psi}(\bar{r}_1,\bar{r}_2)}_{?} \middle| \hat{H} \middle| \tilde{\Psi}(\bar{r}_1,\bar{r}_2) \right\rangle \longrightarrow E_{mért}$$

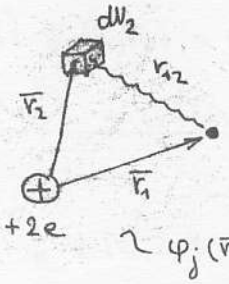
legyen :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_1 + V_c(r_1) + U_2(\bar{r}_1)\right]\varphi_i(\bar{r}_1) = \tilde{\varepsilon}_i\,\varphi_i(\bar{r}_1)$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_2 + V_c(r_2) + U_1(\bar{r}_2)\right]\varphi_j(\bar{r}_2) = \tilde{\varepsilon}_j\,\varphi_j(\bar{r}_2)$$

} csatolt egyenletek

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



↓ HARTREE javaslata a követhető volt :

$$U_2(\bar{r}_1) = \int_{\infty} \frac{e^2\,|\varphi_j(\bar{r}_2)|^2}{4\pi\varepsilon_0\,|\bar{r}_1-\bar{r}_2|}\,dV_2$$

$$\rho_j(\bar{r}_2) \equiv -e\,|\varphi_j(\bar{r}_2)|^2 \quad \text{(a második elektron mint töltéssűrűség)}$$

A második tehát :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_1 + V_c(r_1) + \int \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0|\bar{r}_1-\bar{r}_2|}\,|\varphi_j(\bar{r}_2)|^2\,dV_2\right]\cdot\varphi_i(\bar{r}_1) = \tilde{\varepsilon}_i\,\varphi_i(\bar{r}_1)$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_2 + V_c(r_2) + \int \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0|\bar{r}_1-\bar{r}_2|}\,|\varphi_i(\bar{r}_1)|^2\,dV_1\right]\cdot\varphi_j(\bar{r}_2) = \tilde{\varepsilon}_j\,\varphi_j(\bar{r}_2)$$

}

---

csatolt integro-differenciál egyenlet rendszer.
SCF (Self Consistent Field) megoldásokat keresünk.

Megoldás módszere : iteráció (Ha konvergál → sokszor NEM)

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

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

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

stb... SCF ha $\left\{\begin{array}{l} \varphi_j^{(n)} \cong \varphi_j^{(n+1)} \\ \varphi_i^{(n)} \cong \varphi_i^{(n+1)} \end{array}\right\}$

A kísérleti eredmények azt mutatják, hogy a kölcsönhatás mentes elektron modell meglehetősen pontatlan. Szükség van az elektronok közötti kölcsönhatás valamilyen módon történő figyelembe vételére is! Két, egymásnak élesen ellentmondó dolgot kell összeegyeztetnünk. Egyrészt számolnunk kell a kölcsönhatással, de ugyanakkor a szeparálhatóságot is valahogyan biztosítanunk kell. Ezt a feladatot az ún. Hartree közelítéssel sikerült megoldani.

Az egyszerűség végett maradjunk továbbra is a Hélium atomnál! Mint már említettük, ezen a két elektronból álló rendszeren az eljárás lényege már bemutatható és az eredmények majd igen szemléletesen általánosíthatók sok elektronból (sok azonos részecskéből) álló rendszerre is.

A 3. és a 4.axiómából látható, hogy ha az elektronrendszer átlagenergiáját éppen valamelyik $\Psi(\vec{r}_1,\vec{r}_2)$ "energia sajátállapotban"(!) számoljuk ki, akkor pontosan az ehhez az állapothoz tartozó *E* energiaszintet kapjuk meg. Ha a Ψ egzakt állapotfüggvény helyett valamilyen $\widetilde{\Psi}$ közelítő függvényt használunk, akkor az így adódó kvantummechanikai átlag csak közelítőleg adja meg a valódi (mérhető) energia értékét: $\widetilde{E}=\left\langle\widetilde{\Psi}\middle|\hat{H}\middle|\widetilde{\Psi}\right\rangle\approx E$ Az eddigiekből kiderült, hogy sokelektronos rendszerek esetén az egzakt (és ezért nem szeparálható!) állapotfüggvényeket nem ismerjük és pontos meghatározásukra még csak reményünk sincsen. Ezért csak közelítő megoldásokra szorítkozhatunk! A közelítés "jósága" attól függ, hogy a fentebb említett átlagérték mennyire közelíti meg a kísérletekben mérhető energia (saját)értéket. Ez támpontot ad egy közelítő eljárás kidolgozására.

Keressük ugyanis azt a lehető legjobb közelítést, amely $\widetilde{\Psi}(\vec{r}_1,\vec{r}_2)\equiv\varphi_i(\vec{r}_1)\varphi_j(\vec{r}_2)$ szeparált alakba írható. Ezt nevezzük "egyrészecske, vagy egyelektron" közelítésnek. A teljes rendszer, szorzat formájában felírt állapotfüggvényében szereplő $\varphi_i(\vec{r}_1)$ és $\varphi_j(\vec{r}_2)$ tényezőket pedig "egyrészecske (vagy egyelektron) állapotfüggvényeknek" hívjuk. Ezzel tulajdonképpen azt tételeztük fel, hogy fizikailag is van értelme egy elektron állapotáról beszélni egy elektronrendszeren belül! Ekkor ezeket a φ_i,φ_j egyelektron állapotokat olyan Schrödinger egyenletekből határozhatjuk meg, amelyekben az elektronok közötti kölcsönhatást is figyelembe vesszük. Ez formálisan úgy történik, hogy az egyelektron Schrödinger egyenletekbe egy-egy új potenciális energia tagot $\{U_1(\vec{r}_2),U_2(\vec{r}_1)\}$ írunk be, amelyik a másik elektron hatását modellezi. Ennek a potenciálnak a megadásán múlik a közelítő módszer eredményessége. Létezik olyan szisztematikus (görög szó, szigorúan következetest jelent) eljárás, amellyel ez a potenciál egyre nagyobb pontossággal meghatározható. Mi, ehelyett első közelítésként, egy igen szemléletes módon megkonstruálható potenciált fogunk használni. Ezt nevezzük Hertree-közelítésnek. A keresett potenciálhoz heurisztikus úton juthatunk el.

Vegyük, tehát a Hélium atomot és határozzuk meg a második elektron hatását az elsőre! Tekintsük a második elektront egy olyan $\rho_j(\vec{r}_2)$ töltésfelhőnek, amelyet az ő $\varphi_j(\vec{r}_2)$ egyrészecske állapotfüggvénye határoz meg a következő (triviális) módon $\rho_j(\vec{r}_2)\equiv-e\cdot\left|\varphi_j(\vec{r}_2)\right|^2$. Azaz az elektron töltését a megtalálási valószínűségnek megfelelően fogjuk "elkenni" a térben. Ennek a töltésfelhőnek az elektromos terét fogja érzékelni az első elektron. Így a pozitív töltésű atommag Coulomb kölcsönhatását megadó $V_c(\vec{r}_1)$ potenciális energia mellett fellép a második elektron ugyancsak Coulomb hatása által létrehozott $U_2(\vec{r}_1)=\int_\infty\frac{e^2\left|\varphi_j(\vec{r}_2)\right|^2}{4\pi\varepsilon_0\left|\vec{r}_1-\vec{r}_2\right|}dV_2$ ún. Hartree potenciális energia tag is. Ezt a két potenciálfüggvényt kell tehát beírnunk az első elektron Schrödinger egyenletébe:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_1+V_c(\vec{r}_1)+U_2(\vec{r}_1)\right]\varphi_i(\vec{r}_1)=\widetilde{\varepsilon}_i\cdot\varphi_i(\vec{r}_1).$$

Ugyanígy járunk el a másik elektron esetében is.

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_2+V_c(\hat{r}_2)+U_1(\vec{r}_2)\right]\varphi_j(\vec{r}_2)=\widetilde{\varepsilon}_j\cdot\varphi_j(\vec{r}_2).$$

Az így kapott ún. “csatolt integro-differenciálegyenlet rendszer" megoldása sem egyszerű, de legalább egy elvileg kezelhető modellhez jutottunk. Ezt a közelítést “SCF módszernek” hívjuk és mindig így fogunk rá hivatkozni. Az “SCF” egy betűszó, a Self Consistent Field angol kifejezésből származik. Ennek jelentése kb. “önmagával összhangban lévő mező”. Az elnevezés valóban találó, hiszen a φ egyelektron állapotfüggvények éppen ezen φ-k által definiált *U* Hartree potenciálok segítségével határozhatók meg.

Az egyenleteket iterációs módon (fokozatos megközelítéssel) old(hat)juk meg. Azaz kiindulásul feltételezünk egy $\varphi^{(0)}$ megoldást. Ezekkel kiszámítjuk a $U^{(0)}$ Hartree potenciálokat, és az így adódó Schrödinger egyenleteket megoldjuk. A kapott $\varphi^{(1)}$ megoldásfüggvények által meghatározott új $U^{(1)}$ Hartree potenciálok újabb $\varphi^{(2)}$ megoldásfüggvényeket szolgáltatnak stb.... Az eljárást addig kell folytatnunk, ameddig a két egymást követő lépésben kapott állapotfüggvények már csak kevéssé térnek el egymástól, azaz $\varphi^{(n)} \approx \varphi^{(n+1)}$. Sajnos ez az eljárás nem mindig konvergál! Ekkor újabb "trükköket" kell kitalálni. De ez már nem fizikai hanem inkább numerikus számítási probléma.

Általában : N db elektronból álló rendszer esetén

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_i + V_c(r_i) + \underbrace{\sum_{\substack{j=1 \\ (j\neq i)}}^{N} \int \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 |\bar{r}_i - \bar{r}_j|} |\varphi_j(\bar{r}_j)|^2 \, dV_j}_{\sum_{j\neq i}^{N} U_j(\bar{r}_i)} \right] \varphi_i(\bar{r}_i) = \varepsilon_i \varphi_i(\bar{r}_i) \qquad (i = 1,2,3,4,\ldots N)$$

$\sum_{j\neq i}^{N} U_j(\bar{r}_i)$ → KÖZELÍTÉS $\equiv U(\bar{r}_i)$

N db csatolt egyenletből álló rendszer!

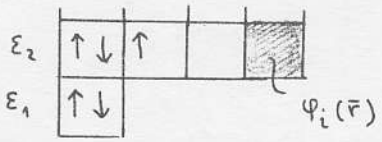
BONYOLULT !

minden elektronra pontosan ugyanolyan alakú kifejezés

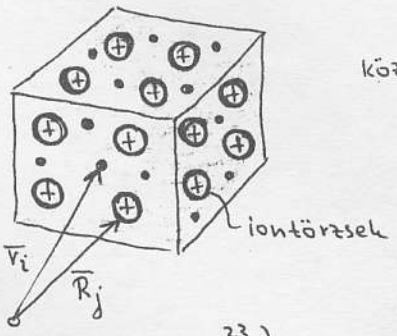
Így csak egyetlen egyenlet maradt (valójában N db teljesen egyforma egyenletünk van)

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + \underbrace{V_c(r) + U(\bar{r})}_{\equiv V(\bar{r})} \right] \varphi_i(\bar{r}) = \varepsilon_i \varphi_i(\bar{r})$$

(u.n. modell potenciál, ettől függ a közelítés jósága !)



Példa (a szilárdtestfizikában használt egyszerű fémmodell)

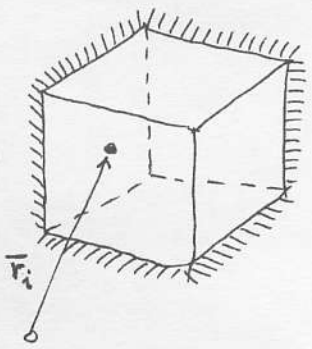


$(i = 1,2,3,\ldots N \simeq 6\cdot 10^{23})$

N db (vegyértékű) elektronból áll a rendszer

KÖZELÍTÉS ⟹

az i. elektron



$$\sum_{j=1}^{N} V_c(\bar{r}_i ; \bar{R}_j) + \sum_{j\neq i}^{N} U_j(\bar{r}_i) \cong U(\bar{r}_i)$$

- $\sum_{j=1}^{N} V_c(\bar{r}_i ; \bar{R}_j)$ → az iontörzsek hatása
- $\sum_{j\neq i}^{N} U_j(\bar{r}_i)$ → a többi elektron hatása
- $U(\bar{r}_i)$ → potenciál doboz → SOMMERFELD fémmodell

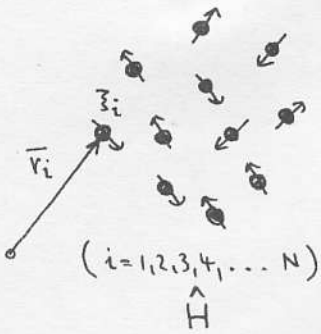
A Hartree módszert kételektronos rendszerre mutattuk be, de természetesen tetszőleges N számú elektront tartalmazó rendszerre is alkalmazható. Ekkor N db csatolt egyelektron Schrödinger egyenletünk lesz. Mindegyik egyenletben a Hartree potenciál a többi (N-1 db.) elektron hatását foglalja magába. Már kis N-ek esetén is a számolási nehézségek igen nagyok. Ezen egy újabb közelítéssel segíthetünk.

Ennek alapgondolata az, hogy minden elektron teljesen egyforma. Ezért feltételezhetjük, hogy az adott rendszer valamelyik elektronjának a Hartree-potenciálja egy "bizonyos mértékig ugyanolyan (?)" lesz mint a rendszer bármely más elektronjáé. Azaz a rendszeren belül minden egyelektron Schrödinger egyenlet gyakorlatilag ugyanolyan. (Éreznünk kell, hogy az óvatos fogalmazás nem véletlen!) Így tehát matematikai értelemben ismét csak egyetlen Schrödinger egyenletünk lesz, amelyben a Hartree potenciált egy valamilyen közelítő, kiátlagolt potenciálfüggvény alakjában adjuk meg. Ezt gyakran egybeolvasztjuk a külső testek által produkált potenciálokkal (pl.: az atommagok vagy iontörzsek hatásával) és ezt így együtt valamilyen ún. "modellpotenciállal" közelítjük. Ezek a modellpotenciálok bonyolult rendszerek esetén nagy intuíciót követelő elméleti meggondolások alapján adhatók meg. De ez már az ezen a területen tevékenykedő fizikusok feladata.

Az így kapott egyelektron Schrödinger egyenlet $\{\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3, ..., \varphi_n, ...\}$ sajátfüggvény rendszere fogja szolgáltatni a rendszer elektronjainak a lehetséges állapotait. Ezen állapotok betöltése a Pauli-elv figyelembevételével történik. Itt ismét a már tanult “blokk diagramra” kell utalnunk.

Egy ilyen intuitív modellpotenciállal mi is találkozunk majd a fémek szabadelektron elméletének a tárgyalása során. Ennek a lényege az, hogy a fémben lévő bármelyik vezetési elektronra a kristályt alkotó pozitív iontörzsek és a nagyszámú többi elektron egyszerre hat. Ezek első közelítésben semlegesítik egymást és így az elektron a fém belsejében "nem észlel" eredő töltéseket, ezért "szabadon" (?) tud mozogni. A felület közvetlen közelében a fizikai viszonyok azonban megváltoznak. Ezt mutatja az a tény, hogy az elektronok maguktól nem hagyják el a fémet, mert az iontörzs- és elektron-háttér ezt valamilyen módon megakadályozza. Ez az amúgy igencsak bonyolult hatás egy potenciáldobozzal helyettesíthető. Ez lesz most a modellpotenciálunk. A térbeli potenciáloboz esetén kapott állapotfüggvények adják a fémelektronok lehetséges állapotait. A további részletekre és a belőlük levonható fizikai következtetésekre még a későbbiekben visszatérünk majd.

1.5.3. A PAULI elv



N db azonos részecskéből álló rendszer.

A rendszer energiája:

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

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

$$\downarrow$$

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

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 (általánosítva!)

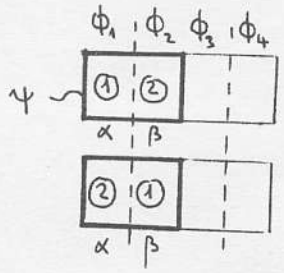
$$c = \begin{cases} -1 & \text{feles spinű részecskék} \rightarrow \text{fermionok} \rightarrow \text{FERMI-DIRAC stat.} \\ +1 & \text{egész spinű részecskék} \rightarrow \text{bozonok} \rightarrow \text{BOSE-EINSTEIN stat.} \end{cases}$$

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)



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

Általánosítás ↓

$$\tilde{\Phi}(\bar{x}_1, \bar{x}_2, \dots, \bar{x}_N) \equiv \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \phi_1(\bar{x}_1) & \phi_1(\bar{x}_2) & \dots & \phi_1(\bar{x}_N) \\ \phi_2(\bar{x}_1) & \phi_2(\bar{x}_2) & \dots & \phi_2(\bar{x}_N) \\ \vdots & & & \vdots \\ \phi_N(\bar{x}_1) & \phi_N(\bar{x}_2) & \dots & \phi_N(\bar{x}_N) \end{vmatrix} \circlearrowleft (=)$$

(u.n. determináns hullámfüggvény)

$\phi_N(\bar{x}_1) \leftrightarrow \phi_N(\bar{x}_2)$: (-1)

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

1.5.3. A Pauli elv

Tekintsünk egy N db azonos részecskéből álló rendszert! Minden egyes részecskét most az $\vec{r}_i$ helykoordinátájával és a ξ_i spinváltozójával jellemzünk . Ezt az $(\vec{r}_i, \xi_i)$ koordináta négyest egy $\bar{x}_i$ szimbólumba foglaljuk össze A rendszer tejes spinpálya állapotfüggvénye tehát most így írható fel: $\Phi(\bar{x}_1, \bar{x}_2, \bar{x}_3, ... \bar{x}_N)$. A részecskék legyenek egymástól megkülönböztethetetlenek. Ekkor, ha két részecskét megcserélünk akkor a rendszerben semmiféle fizikai változást észlelni nem lehet. Ez azt is jelenti, hogy az állapotfüggvény fizikai tartalmának sem szabad megváltoznia. Azaz a $|\Phi|^2$ invariáns (változatlan) két részecske megcserélésével szemben. Ez magára a Φ állapotfüggvényre nézve azt jelenti, hogyha a rendszerben két részecskét megcserélünk, akkor a Φ egy egységnyi abszolút értékű komplex számmal fog szorzódni. Ugyanazon két részecske kétszeres cseréje az eredeti sorrendet adja vissza. Ezért végül is az adódik, hogy ha a rendszer bármely két azonos részecskéjét megcseréljük, akkor a Φ állapotfüggvény (+1)-el vagy (-1)-el szorzódik, azaz vagy előjelet vált vagy nem. Ekkor azt mondjuk, hogy a rendszer állapotfüggvénye szimmetrikus (+) illetve antiszimmetrikus (-).

A kérdés mármost az, hogy a természetben vajon melyik eset valósul meg?
A tapasztalat azt mutatja, hogy mindkettő! Ezt a megfigyelésünket az ún. **"általános Pauli"** elvben fogalmazzuk meg. Eszerint:

"Fermionokból" álló rendszer állapotfüggvénye antiszimmetrikus míg a "bozonokból" állóé szimmetrikus.

A fermionok a feles spinű részecskék gyűjtő neve. Azok a részecskék tartoznak ide, amelyeknek a S_z spinje $\left\{\pm\frac{1}{2}\hbar, \pm\frac{3}{2}\hbar, \pm\frac{5}{2}\hbar, \pm.....\right\}$. A fermionok E. Fermi és P.A.M- Dirac által kidolgozott kvantum-statisztikai törvényeket követik. Innen van az elnevezésük is. A bozonok az egész spinű részecskék gyűjtő neve. Azok a részecskék tartoznak ide, amelyeknek az S_z spinje: $\{0, \pm\hbar, \pm 2\hbar, \pm 3\hbar, \pm.....\}$. A bozonok kvantumstatisztikáját Bose és A. Einstein dolgozta ki. Az elnevezés az ő munkásságukra utal. Az általánosított Pauli elv tehát egy alapvető szimmetria következtében fellépő, igen általános és ezért nagyon fontos törvényt fogalmaz meg, amely a vizsgált rendszert alkotó azonos mikrorészecskék megkülönböztethetetlenségéből fakad. Ezáltal a kvantummechanika axiómarendszerét sokrészecskéből álló rendszerekre is kiterjeszti.

A rendszer állapotfüggvényének a szimmetriájában jelentkező látszólag "kis" (előjel) különbségnek messzemenő következményei vannak, ami miatt a kétféle rendszer makroszkopikus viselkedése lényegesen eltér majd egymástól. Ennek oka viszonylag egyszerűen belátható.
Tekintsünk egy, két fermionból álló rendszert. Ha a rendszer $\Phi(\vec{x}_1, \vec{x}_2)$ állapotfüggvényét közelítőleg a tanult módon $\tilde{\Phi}(\vec{x}_1, \vec{x}_2) = \phi_1(\vec{x}_1)\phi_2(\vec{x}_2)$ szeparált alakba írjuk, akkor az nem teljesíti az általános Pauli elvet. Azaz nem vált előjelet, ha a két fermiont megcseréljük. Mivel két fermion teljesen egyforma, így bármelyik lehet akármelyik (ϕ_1-el vagy ϕ_2 -vel jelölt) egyrészecske spinpálya állapotban. Ezért ezt is figyelembe kell venni, amikor az egyes fermionokkal betöltjük az egyrészecske állapotokat. A mi esetünkben ez a következő lesz:

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

Az $1/\sqrt{2}$ együttható azt fejezi ki, hogy mind a kétféle részecske kiosztásnak egyformán ½ a valószínűsége. A fenti kifejezés matematikailag tömörebben egy determináns formájába is írható:

$$\tilde{\Phi}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{vmatrix} \phi_1(\vec{r}_1) & \phi_1(\vec{r}_2) \\ \phi_2(\vec{r}_1) & \phi_2(\vec{r}_2) \end{vmatrix}.$$

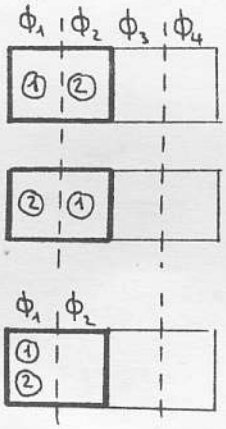
Ezért az íly módón megkonstruált állapotfüggvényt, utalva annak matematikai alakjára, "determináns hullámfüggvénynek" szoktuk nevezni. Hangsúlyoznunk kell a következőt. Annak ellenére, hogy ez a "determinánsos" felírás pusztán csak a tömörítés célját szolgálja, mégis (mint az mindjárt kiderül) az általánosítás során igen nagy könnyebbséget jelent majd.

Ha nem csak kettő, hanem pl. "N" db. (azonos) fermionból áll a rendszer, akkor is hasonló módon járunk el közelítő $\tilde{\Phi}$ állapotfüggvény előállításakor. Veszünk N db egyrészecske spinpálya állapotot, és ebbe elhelyezzük az N db.

fermiont. Csak akkor kapunk antiszimmetrikus $\widetilde{\Phi}$ állapotfüggvényt, ha egy spinpálya állapotba maximum egy fermiont teszünk, és a rendszer állapotfüggvényét az összes lehetséges kiosztás (permutáció) megfelelő szuperpozíciójaként állítjuk elő (1.axióma). Az egyes permutációknak megfelelő állapotfüggvényeket úgy kell szuperponálni, hogy az így kapott eredő állapotfüggvény antiszimmetrikus legyen. Az kétrészecskés esetből látható, hogy a közelítő állapotfüggvényt egy egyrészecske állapotokból felépített determináns alakjában célszerű felírnunk. Ugyanis a "determináns hullámfüggvény" kifejtési definíciója éppen úgy váltogatja az egyes tagok előjelét, hogy az antiszimetrikussá teszi magát az állapotfüggvényt. Egyszerűen belátható az is, hogy a determináns hullámfüggvény eleget tesz az eredeti Pauli-elvnek, amely szerint nem lehet két fermion (pl. elektron) ugyanabban a spin-pálya állapotban.

2. Bozonrendszer (pl: N=2

$$\Phi(\bar{x}_1,\bar{x}_2) \approx \tilde{\Phi}(\bar{x}_1,\bar{x}_2) = \underbrace{\phi_1(\bar{x}_1)\phi_2(\bar{x}_2) \neq \phi_1(\bar{x}_2)\phi_2(\bar{x}_1)}_{\text{(EZ ÍGY NEM JÓ!)}} = \tilde{\Phi}(\bar{x}_2,\bar{x}_1)$$



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

DE LEHET az alábbi is !

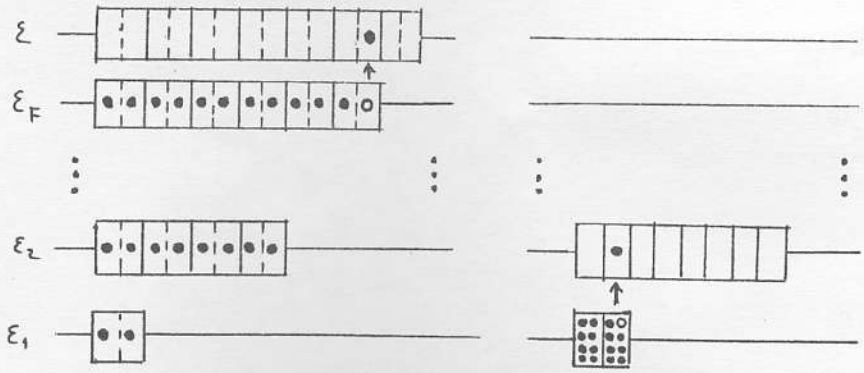
$$\tilde{\Phi}(\bar{x}_1,\bar{x}_2) = \phi_1(\bar{x}_1)\phi_1(\bar{x}_2) = \tilde{\Phi}(\bar{x}_2,\bar{x}_1)$$

Tehát egynél több részecske is lehet ugyanabban a spin-pálya állapotban

↓ Általánosítás

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

Fermion és bozon rendszer alapállapotainak az összehasonlítása:



Alapállapot (T=0) → gerjesztés → ELTÉRŐ MAKROSZKÓPIKUS VISELKEDÉS → MÉRÉSSEL ellenőrizhető !

Alapállapot (T=0) → gerjesztés

↓

Nagyszámú részecske esetén ($N \approx 6\cdot 10^{23}$)
Statisztikus módszerek kellenek → KVANTUMSTATISZTIKÁK

Vizsgáljunk most meg egy két bozonból álló rendszert. Ha megint az egyszerű szorzat alakban felírt $\tilde{\Phi}(\vec{x}_1,\vec{x}_2)=\phi_1(\vec{x}_1)\phi_2(\vec{x}_2)$ szeparált állapotfüggvényt tekintjük, akkor ez nem teljesíti ebben az esetben sem az általános Pauli elvet. Azaz, ha a két bozont megcseréljük, akkor nem kapjuk vissza magát a változatlan $\tilde{\Phi}$ állapotfüggvényt. A megoldás menete most is az, mint a fermionok esetén volt. Mivel a két bozon teljesen egyforma, így akármelyik kerülhet bármelyik állapotba. Tehát a teljes rendszer hullámfüggvényében az összes olyan lehetséges elrendezést figyelembe kell venni, amelynek a összenergiája megegyezik. A szimmetria most akkor is teljesül, ha mind a két fermion ugyanabban a pályaállapotban van. Ez egy lényeges különbség a fermion és a bozon rendszer között. Ez akkor válik még jobban szembetűnővé, ha viszonylag nagyszámú részecskéből álló rendszerek alapállapotát hasonlítjuk össze. Látható, hogy fermionrendszer esetén az állapotok egy magas energiaszintig be vannak töltve, ugyanakkor minden bozon a legkisebb energiájú állapotban van. Ez pedig lényeges különbségre vezet a két rendszer makroszkopikus viselkedésében. A későbbiekben majd látunk erre példákat is.

Nagyon nagyszámú részecskéből álló rendszerek makroszkopikus viselkedésének a leírásával a termodinamika foglalkozik. A rendszer állapotának a jellemzésére (termodinamikai) állapotjelzőket használunk (pl.: nyomás, térfogat, hőmérséklet, entrópia, részecskeszám = össztömeg, kémiai potenciál, stb...). Ezekről az eddigi fizika tárgyakban (FizikaC1 és C2) már részletesen tanultunk.

Az igen részletes, minden egyes részecskét nyomon követő (és emiatt gyakorlatilag megvalósíthatatlan!) mikroszkópikus tárgyalás és a mikrofizikai háttérről teljesen elfeledkező termodinamikai leírás között a "statisztikus fizikai" modell jelent egy közbülső, áthidaló megoldást. A továbbiakban ezzel a módszerrel fogunk nagy vonalakban megismerkedni.

1.5.4. Kvantumstatisztikák

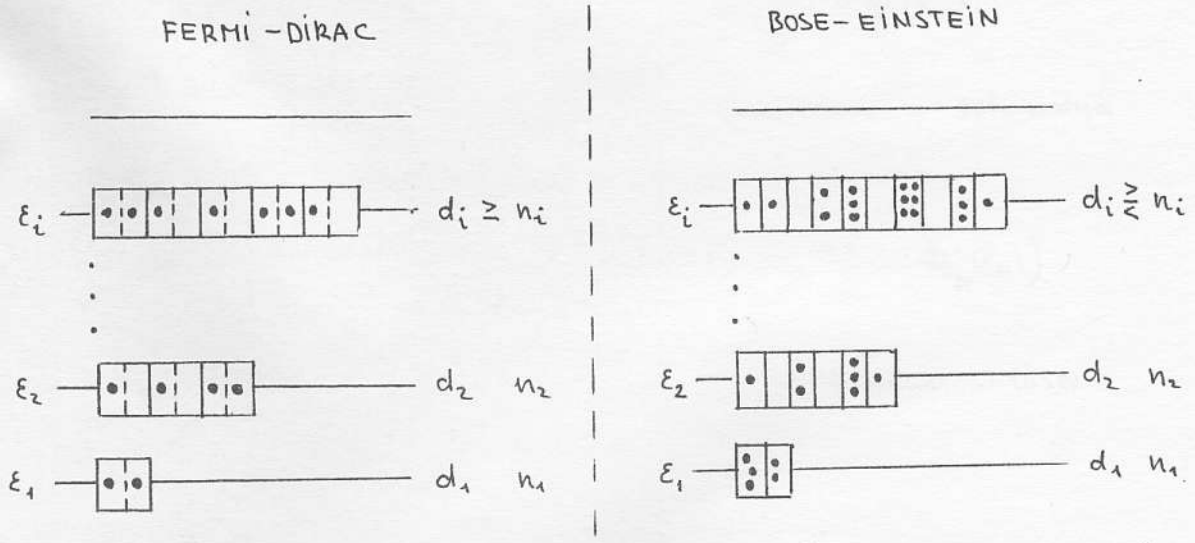
N db részecskéből álló rendszer : { bozonok / fermionok }

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

Egy-részecske közelítés

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

$N \gg 1 \longrightarrow$ statisztikai módszerek.

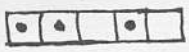


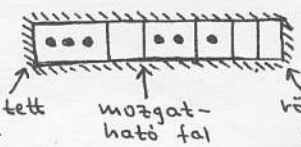
Termodinamikai állapot (T) $\longrightarrow$ makroállapot : $\{n_1, n_2, n_3, \dots, n_i, \dots\}$

mikroállapot termodinamikai valószínűség : W

$$W(n_1, n_2, n_3, \dots, n_i, \dots) = \begin{cases} \prod_i \binom{d_i}{n_i} = \prod_i \dfrac{d_i!}{n_i!\,(d_i - n_i)!} & (\mp\text{-D}) \\ \prod_i \dfrac{(d_i + n_i - 1)!}{n_i!\,(d_i - 1)!} \approx \prod_i \dfrac{(d_i + n_i)!}{n_i!\,d_i!} & (\text{B-E}) \end{cases}$$

Magyarázat : kombinatorikai modell :

(∓-D)  $\binom{d_i}{n_i}$

(B-E) 

a mozgatható falak száma : $(d_i - 1)$

1.5.4. Kvantumstatisztikák

Az előzőekben már megbeszéltük, hogy nagyszámú azonos részecskéből álló rendszerek kvantummechanikai tárgyalásakor mindig az egyrészecske közelítésben dolgozunk. Feltesszük, hogy a rendszerben definiálhatók egyrészecske állapotok. Tételezzük fel, hogy ezeket valamilyen módon a lehető legpontosabban sikerült már meghatároznunk. A statisztikus fizika azt vizsgálja, hogy ezek az egyrészecske állapotok hogyan vannak betöltve a rendszer egy, makroszkopikus állapotjelzőkkel jól definiált, termodinamikai (makro) állapotában. Mint azt láttuk, a "betöltési szabály" más a fermionokra (egy spinpálya állapotban legfeljebb egy fermion lehet) és megint más a bozonokra (itt egy spinpálya állapotban akármennyi bozon lehet) nézve. A két fajta rendszert egyszerre fogjuk tárgyalni. Az általános módszer ugyanis mindkét esetben ugyanaz. Így jól láthatóak majd a különbségek is.

A rendszer egy gerjesztett (nem a legalacsonyabb energiájú) állapotát fogjuk vizsgálni. Ez a makroszkopikus skálán (termodinamika) azt jelenti, hogy a rendszer hőmérséklete az abszolút nulla fölött van. Az egyrészecske állapotok általában degeneráltak, azaz több állapot is van, amelynek az energiája ugyanakkora. Legyen d_i azon egyrészecske állapotok száma, amelyek ugyanahhoz az ε_i energiaszinthez tartoznak. Legyen az ε_i energiájú részecskék száma a rendszerben n_i . Azaz a d_i lehetséges állapotban összesen n_i számú részecske van. A feladat az, hogy kiszámítsuk az n_i *(i= 1,2,3,..)* számokat a T hőmérséklet függvényeként. Magyarul az, hogy meghatározzuk, hogyan töltődnek be az egyrészecske állapotok a T hőmérsékleten.

A megoldás elvi módszerével már a klasszikus kinetikus gázelmélet kapcsán megismerkedtünk. Ismételjük át az ott bevezetett fogalmakat! Ezek: a makroállapot, a mikroállapot és a termodinamikai valószínűség. A makroállapot tulajdonképpen egy termodinamikai állapot, azaz a rendszernek egy, a mérhető makroszkopikus állapotjelzőkkel meghatározott, állapotát jelenti. A mikroállapot a részecskék szintjén jelenti a rendszer egy állapotát, tehát ekkor minden egyes részecske állapotát ismernünk kell. Nyilvánvaló, hogy a rendszer egy makroállapotához nagyon-nagyon sok mikroállapot tartozik. Gondoljunk csak a kinetikus gázelméletre mint analógiára! A termodinamikai valószínűség éppen az a W szám , amely megadja, hogy egy adott makroállapotot hány mikroállapot valósít meg. Mármost **a statisztikus fizika alapfeltevése** (amit az általa kapott helyes eredmények sokasága bizonyít) az, hogy a rendszer minden mikroállapota egyforma valószínűséggel valósul meg. Azaz a Természet nem részesít előnyben egyetlen egy mikroállapotot sem a többihez képest. Ezek után már nyilvánvaló, hogy a valóságban az a makroállapot fog megvalósulni, amelyet a legtöbb mikroállapot valósít meg. Azaz amelynek a termodinamikai valószínűsége a legnagyobb. (Innen adódik az elnevezés is.)

A most vizsgálandó modellünkben egy makroállapotot az $\{n_1, n_2, n_3, ..., n_i, ...\}$ adatsor határoz meg. Egy mikroállapot pedig egy lehetséges részecske-betöltést jelent. A feladat tehát azon n_i *(i= 1,2,3,...)* betöltési számok meghatározása, amelyeknél a $W(n_1, n_2, n_3, ..., n_i, ...)$ termodinamikai valószínűség maximális értékéket vesz fel.

A rendszer termodinamikai valószínűsége az egyes energiaszinteken számítható lehetséges betöltések szorzata lesz. Hiszen bármelyik energiaszinten egy megadott konkrét betöltési elrendezéshez a többi energiaszinten lehetséges összes elrendezés hozzárendelhető. A feladat tehát arra korlátozódik, hogy meghatározzuk azt, hogy d_i állapotot hányféleképpen lehet n_i fermionnal illetve bozonnal betölteni. Ismerve a fermionokra és a bozonokra érvényes betöltési szabályokat, az alábbi modellekhez juthatunk.

A W termodinamikai valószínűség matematikai képlete mind a fermion, mind pedig a bozon rendszer esetén egyszerű kombinatorikai modell segítségével megadható.

Fermionok esetén az ekvivalens kombinatorikai feladat a következő “Hányféleképpen lehet d_i darab dobozba n_i darab egyforma golyót elhelyezni úgy, hogy egy dobozba maximum egy golyó kerüljön?”.

Bozonok esetén az ekvivalens kombinatorikai feladat pedig a következő: “Hányféleképpen lehet $(d_i - 1)$ darab egyforma falat és n_i darab egyforma golyót egy sorban elhelyezni?”

Feladat:

$$W(\underbrace{n_1, n_2, \dots, n_i, \dots}_{\{n_i\}}) = \max \quad ; \quad \text{feltéve, hogy:} \quad \sum_i n_i = N, \quad \sum_i \varepsilon_i n_i = E$$

Megoldás:

Feltételes szélsőérték feladat $\rightarrow$ közönséges szélsőérték feladat

LAGRANGE (módszer)

$$W(\dots n_i \dots) \rightarrow S = k \cdot \ln W \rightarrow S = \ln W$$

$$\left.\begin{aligned} \sum_i n_i = N &\rightarrow N - \sum_i n_i = 0 \\ \sum_i \varepsilon_i n_i = E &\rightarrow E - \sum_i \varepsilon_i n_i = 0 \end{aligned}\right\} \text{mellékfeltételek}$$

$$K(n_1, n_2, \dots n_i, \dots) \equiv S + \alpha\left(N - \sum_i n_i\right) + \beta\left(E - \sum_i \varepsilon_i n_i\right)$$

(α, β: később meghatározható állandók)

$$\boxed{\frac{\partial K}{\partial n_i} = 0} \quad (\forall n_i) \quad \text{közönséges (feltétel nélküli) szélső érték}$$

$$\frac{\partial K}{\partial n_i} = \frac{\partial}{\partial n_i} \ln W + \alpha(\phi - 1) + \beta(\phi - \varepsilon_i) = \underbrace{\frac{\partial}{\partial n_i} \ln W}_{\text{(B-E) vagy (F-D)}} - \alpha - \beta\varepsilon_i = 0$$

$$\ln W = \begin{cases} \sum_i \ln d_i! + \sum_i \left[-\ln(d_i - n_i)! - \ln n_i!\right] & \text{(F-D)} \\ \sum_i \left[\ln(d_i + n_i)! - \ln n_i!\right] - \sum_i \ln d_i! & \text{(B-E)} \end{cases}$$

STIRLING közelítés (matematika): $\ln x! \approx x \ln x - x$ ha $x \gg 1$

($n_i \gg 1$ általában, ha $N \gg 1$)

$$\ln W \approx \begin{cases} \sum_i \left\{-(d_i - n_i)\ln(d_i - n_i) + (d_i - n_i) - n_i \ln n_i + n_i\right\} + \sum_i \ln d_i! & \text{(F-D)} \\ \sum_i \left\{(d_i + n_i)\ln(d_i + n_i) - (d_i + n_i) - n_i \ln n_i + n_i\right\} - \sum_i \ln d_i! & \text{(B-E)} \end{cases}$$

azaz

$$\ln W \approx \begin{cases} \sum_i \left\{-(d_i - n_i)\ln(d_i - n_i) - n_i \ln n_i\right\} + \text{állandó} & \text{(F-D)} \\ \sum_i \left\{(d_i + n_i)\ln(d_i + n_i) - n_i \ln n_i\right\} + \text{állandó} & \text{(B-E)} \end{cases}$$

A feladat ezek után az, hogy mindkét rendszer esetén a $W(n_1, n_2, n_3, ..., n_i, ...)$ többváltozós függvény maximumát megkeressük. Azonban a folytonos (!) változóknak tekintett n_i *(i= 1,2,3,..)* betöltési számok most nem függetlenek egymástól. Két "mellékfeltételt" kell kielégíteniük. Ugyanis a rendszerben a részecskék *N* száma adott és a rendszer összenergiája a vizsgált termodinamikai állapotban szintén egy meghatározott *E* érték. Tehát egy ún. "feltételes szélsőérték" feladattal állunk szemben. Az ilyen típusú feladatokat a Lagrange [kiejtése "lagranzs"] által kidolgozott módszerrel oldjuk meg. Ennek az alapgondolata az, hogy a vizsgálandó függvényhez úgy "adunk hozzá zérust", hogy valójában az a mellékfeltételeket tartalmazza. Az így kiegészített függvénynek már a közönséges (feltétel nélküli) maximumát kell megtalálni. A megjelenő két új paraméter (α és β) fizikai jelentését is tisztáznunk kell majd. A számolás során érthetővé váló matematikai okok miatt nem a *W*-nek, hanem az *lnW*-nek fogjuk a maximumát megkeresni. Mivel nekünk igazából a maximum helye, azaz az n_i *(i= 1,2,3,..)* betöltési számok, kellenek így ez megtehető. Ugyanis az "ln" egy monoton függvény!

A faktoriálisok logaritmusa az ún. Stirling [kiejtése:"sztörling"] formulával egyszerű, jól viselkedő folytonos függvénnyé alakítható, amelynek a deriváltja könnyen számítható.

$$\frac{\partial}{\partial n_i}\ln W = \begin{cases} \left[+\ln(d_i - n_i) - \dfrac{(d_i-n_i)}{(d_i-n_i)}(-1) - \ln n_i - \dfrac{n_i}{n_i} \right] & (F\text{-}D) \\ \left[+\ln(d_i + n_i) + \dfrac{(d_i+n_i)}{(d_i+n_i)} - \ln n_i - \dfrac{n_i}{n_i} \right] & (B\text{-}E) \end{cases}$$

$$\frac{\partial}{\partial n_i}\ln W = \begin{cases} \ln\left(\dfrac{d_i}{n_i} - 1\right) & (F\text{-}D) \\ \ln\left(\dfrac{d_i}{n_i} + 1\right) & (B\text{-}E) \end{cases} \Bigg\} = \underline{\ln\left(\frac{d_i}{n_i} \mp 1\right)}$$

Tehát

$$\frac{\partial K}{\partial n_i} = \ln\left(\frac{d_i}{n_i} \mp 1\right) - \alpha - \beta\varepsilon_i = 0$$

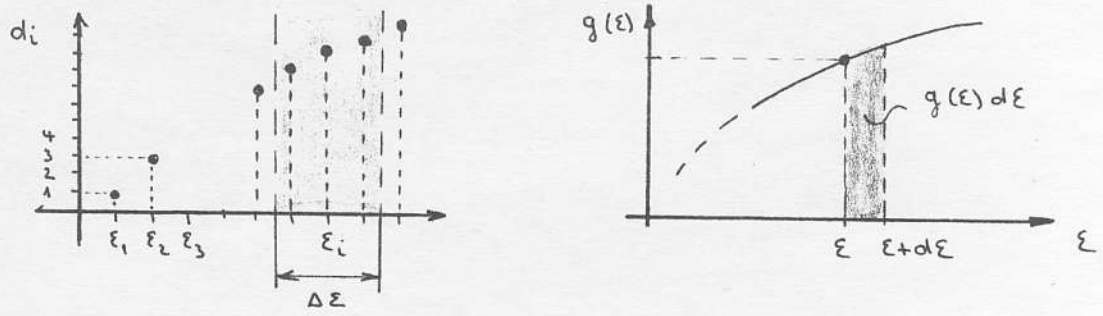
$$\frac{d_i}{n_i} \mp 1 = e^{\alpha+\beta\varepsilon_i}$$

$$\frac{d_i}{n_i} = e^{\alpha+\beta\varepsilon_i} \pm 1$$

$$\underline{n_i = \frac{d_i}{e^{\alpha+\beta\varepsilon_i} + \delta} \equiv d_i \cdot \underbrace{f(\varepsilon_i;\alpha,\beta)}_{\text{eloszlásfüggvény}}}$$

$$\delta = \begin{cases} +1 & \text{FERMI-DIRAC} \\ 0 & \text{MAXWELL-BOLTZMANN (!)} \\ -1 & \text{BOSE-EINSTEIN} \end{cases}$$

$N \gg 1$ esetén állítás u.n. kvázifolytonos közelítésre



d_i (≡ degeneráció azaz a spin-pálya állapotok száma)

↓

$g(\varepsilon)$ (≡ az állapotsűrűség) → $g(\varepsilon) \equiv \underbrace{d_s}_{\text{spin állapotok száma}} \cdot \underbrace{\mathcal{N}(\varepsilon)}_{\text{pálya állapot sűrűség}}$

A maximum létezésének a szükséges feltétele az, hogy az elsőrendű derivált zérus legyen. Mivel most többváltozós függvényről van szó, ezért ugyanez igaz a parciális deriváltakra is. A számolás eredményeként megkaptuk azt, hogy az egyes (ε_i) energiaszinteken hány darab részecskének kell lenni ahhoz, hogy az a maximális termodinamikai valószínűségre vezessen. Ami azt jelenti, hogy egy tetszőleges termodinamikai állapotban meg tudjuk határozni a részecskék energia szerinti eloszlását. A n_i betöltési számok és a d_i lehetséges állapotszámok (degeneráció) közötti kapcsolatot az $f(\varepsilon_i,\alpha,\beta)$ ún. "eloszlásfüggvény" teremti meg. Ez azt mondja meg, hogy az adott ε_i energiaszinten lévő n_i részecskék száma hányad része illetve hányszorosa a lehetséges d_i állapotoknak. Valójában ez volt a kitűzött statisztikus fizikai feladatunk. Hátra van még a két szabad paraméterünk, az α és a β fizikai jelentésének a tisztázása. Ezeket a két makroszkopikus állapotjelző (N és E) által definiált mellékfeltételeken keresztül vezettük be. Ezért tehát az α-t és a β-t a rendszer termodinamikai állapota egyértelműen meg kell, hogy határozza.

Mivel a rendszerünk nagyon nagyszámú részecskét tartalmaz, így a viszonylag magas (ε_i) energiaszintek is be lesznek töltve és az n_i *(i= 1,2,3,..)* betöltési számok (az esetek majd mindegyikében) szintén nagyon nagyok lesznek. Ez azt jelenti, hogy a relatív kvantálás elhanyagolható lesz (lásd a potenciáldoboz példáját a 18.oldalon), azaz kvázi-folytonos energiaskálán dolgozhatunk. Ekkor a d_i degeneráció helyett be lehet vezetni a $g(\varepsilon)$ ún. spinpálya állapot-sűrűséget. Gyakran, ha ez nem okoz félreértést, egyszerűen csak állapotsűrűséget mondunk. Ez azt jelenti, hogy a $g(\varepsilon)d\varepsilon$ kifejezés megadja az $(\varepsilon,\varepsilon+d\varepsilon)$ tartományba tartozó spinpálya-állapotok számát. A $g(\varepsilon)$ spinpálya állapotok száma a d_s spinállapotok és az $N(\varepsilon)$ pályaállapotok számának a szorzataként írható fel.

Tehát:

kvantált energiaszintek $\longrightarrow$ (kvázi) folytonos energiaszintek

$d_i \longrightarrow g(\varepsilon)\,d\varepsilon$

$n_i \longrightarrow n(\varepsilon)\,d\varepsilon$

$\varepsilon_i \longrightarrow \varepsilon$

$$n_i = d_i\, f(\varepsilon_i;\alpha,\beta) \longrightarrow n(\varepsilon)\,d\varepsilon = g(\varepsilon)\cdot f(\varepsilon;\alpha,\beta)\,d\varepsilon$$

$$n(\varepsilon) = g(\varepsilon)\,\frac{1}{e^{\alpha+\beta\varepsilon}+\delta}$$

β meghatározása:

$$\sum_i \varepsilon_i n_i = E \quad (=\text{állandó})$$

$$E = E(T) \rightarrow \beta = \beta(T) \qquad f(\varepsilon) \longrightarrow f^{M.B}(\varepsilon) \quad (\text{ha } \varepsilon \gg \varepsilon_1)$$

$$f(\varepsilon) = \frac{1}{e^{\alpha+\beta\varepsilon}+\delta} \rightarrow e^{-\alpha-\beta\varepsilon} = f^{M.B}(\varepsilon) = \text{áll.}\cdot e^{-\frac{\varepsilon}{kT}}$$

$$\boxed{\beta = \frac{1}{kT}}$$

α meghatározása:

$$\sum_i n_i = N \longrightarrow \int n(\varepsilon)\,d\varepsilon = \int \underbrace{g(\varepsilon)}_{\text{ismerni kell!}} f(\varepsilon;T,\alpha)\,d\varepsilon = N = \text{állandó}$$

$$\alpha \equiv -\frac{\mu}{kT} \qquad (\mu \text{ u.n. kémiai potenciál} \rightarrow \text{termodinamika})$$

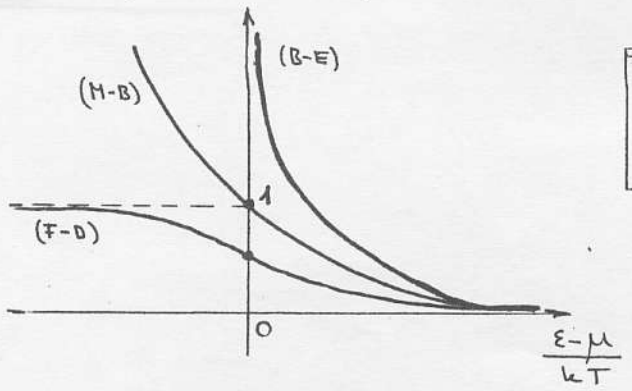
$$\boxed{N = \text{állandó} \rightarrow \mu}$$

Tehát:

$$\boxed{f(\varepsilon,T) = \frac{1}{e^{\frac{\varepsilon-\mu}{kT}}+\delta}}$$

$$\delta = \begin{cases} +1 & \text{FERMI-DIRAC} \\ 0 & \text{MAXWELL-BOLTZMANN} \\ -1 & \text{BOSE-EINSTEIN} \end{cases}$$

Szemléltetése közös ábrán



$$\boxed{n(\varepsilon) = g(\varepsilon)\,\frac{1}{e^{\frac{\varepsilon-\mu}{kT}}+\delta}}$$

A részecskék energia-szerinti eloszlás függvénye

Ugyanígy a $n(\varepsilon)d\varepsilon$ kifejezés megadja azon részecskék számát , amelyeknek az energiája az $(\varepsilon, \varepsilon + d\varepsilon)$ energiatartományba esik. Az eloszlásfüggvény felhasználásával ez az $n(\varepsilon) = g(\varepsilon) \cdot f(\varepsilon, \alpha, \beta)$ módon számítható ki.

A β paraméter meghatározása az *E* összenergiára vonatkozó mellékfeltételből történik. Mivel a rendszer összenergiája a termodinamika szintjén a rendszer *T* hőmérsékleteként mérhető, így a β paraméter a *T* hőmérséklettel kell, hogy kapcsolatba legyen. Ez a kapcsolat legegyszerűbben a korrespondencia elv segítségével kapható meg. Eszerint ugyanis nagy energiaszinteken, ahol a kvantálás már elhanyagolható, a kvantummechanika statisztikus törvényének (Fermi-Dirac és Bose-Einstein) a klasszikus statisztika törvényébe (Maxwell) kell átmennie. Ez akkor teljesül ha a β paraméter a *T* hőmérséklet reciprokával arányos, azaz $\beta = 1/kT$ (ahol "*k*" a Boltzmann állandó).

Az α paraméter meghatározása az *N* összrészecskeszám állandóságából határozható meg. Az előbbihez hasonló általános megoldás most nincsen. Részleteket csak a $g(\varepsilon)$ állapotsűrűség konkrét ismeretében tudunk mondani, hiszen az N elméleti úton történő meghatározásához kell az állapotsűrűség. Az α paraméter helyett bevezetjük a μ "kémiai potenciált" az $\alpha = -\mu/kT$ definícióval. A továbbiakban mindig ezt fogjuk használni. Mivel az α szerepét mostantól a μ veszi át, ezért ennek az értékét kell majd a rendszer részecskéinek a számából meghatároznunk.

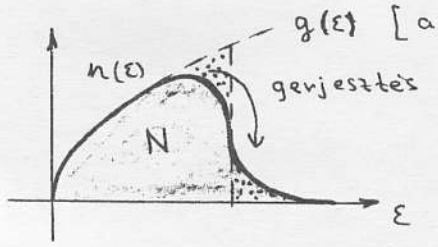
AZ eloszlásfüggvényre kapott eredményeinket egy egységes matematikai formába írhatjuk:

$$f(\varepsilon, T) = \left[\exp\left\{ \frac{\varepsilon - \mu}{kT} \right\} + \delta \right]^{-1},$$

ahol $\delta = +1$ esete a Fermi-Dirac, $\delta = -1$ pedig a Bose-Einstein statisztikát adja. Látható az is, hogy a $\delta = 0$ esetében éppen a klasszikus statisztikus mechanikában tanult Maxwel-féle eloszláshoz jutunk. Ez azért megnyugtató, mert így a statisztikák területén is teljesül a korrespondencia el. Azaz a kvantumstatisztikák határesetben (magas energiaszinteken) visszaadják a klasszikus fizikában tapasztalt eredményeket.

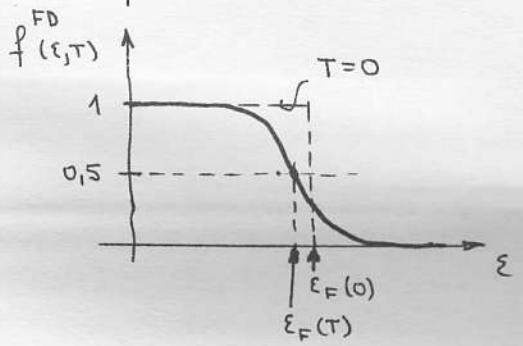
A μ kémiai potenciál meghatározása:

FERMI-DIRAC statisztika esetén:



$\mu(T) \equiv \varepsilon_F(T)$ (neve: FERMI energia)

$n(\varepsilon) = g(\varepsilon) \cdot f^{FD}(\varepsilon, T)$

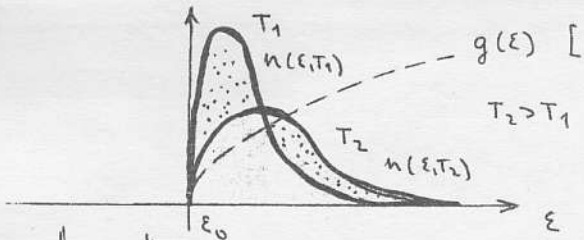


$$N = \int_0^\infty n(\varepsilon)\,d\varepsilon = \underbrace{\int_0^\infty g(\varepsilon) \cdot f^{FD}(\varepsilon, T)\,d\varepsilon}_{N = \text{állandó}\ !} =$$

$$\downarrow$$

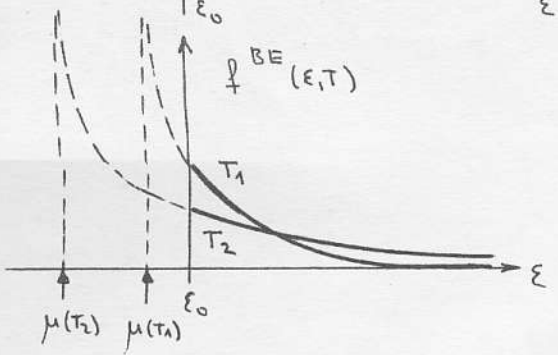
$$\varepsilon_F(T)$$

BOSE-EINSTEIN statisztika esetén:

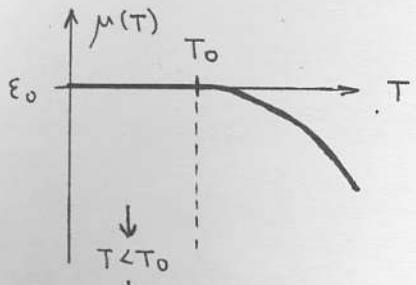


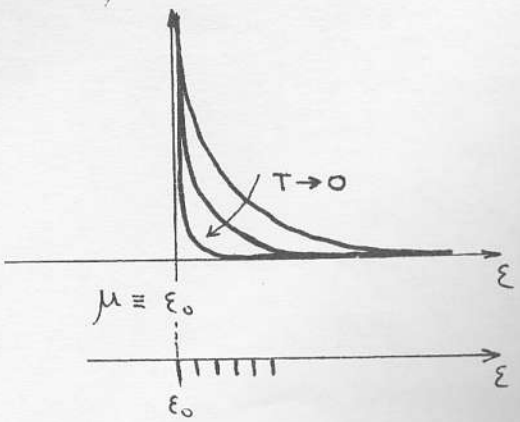
$n(\varepsilon) = g(\varepsilon) \cdot f^{BE}(\varepsilon, T)$

$$N = \underbrace{\int_0^\infty g(\varepsilon) f^{BE}(\varepsilon, T)\,d\varepsilon = \text{állandó}}_{\rightarrow \mu(T)}$$



$f^{BE} \geq 0$ Ha $\mu(T) \leq \varepsilon_0$





$g(\varepsilon)d\varepsilon \rightarrow d(\varepsilon_i)$

$$N = \underbrace{N_0(T)}_{\varepsilon_0} + \underbrace{N_g(T)}_{} = \text{állandó}$$

MODELL: A bozonok száma változik

$[N = N(T)]$

A μ kémiai potenciál fizikai tartalmának a megértése nagyon lényeges a kvantumstatisztikák alkalmazása szempontjából. Ezért ezt egyszerű modellrendszerek példáján keresztül próbáljuk tisztázni.

A Fermi-Dirac statisztika, mint azt láttuk, fermionokra érvényes. Az elektronok fermionok. Ezért a szilárd testek elektromos tulajdonságainak a tárgyalásánál mindig ezzel a statisztikával találkozunk. Tekintsünk egy olyan elektronrendszert, amelynek az állapotsűrűségét egy monoton növekedő $g(\varepsilon)$ függvény írja le. Ha a rendszer alapállapotban van, azaz a hőmérséklete T=0 Kelvin, akkor az állapotok betöltöttségét megadó $f^{FD}(\varepsilon, T=0)$ Fermi-Dirac eloszlásfüggvény egy lépcsőfüggvény lesz. Ez azt jelenti, hogy alapállapotban az elektronok egy bizonyos $\varepsilon_F(0)$ energiaszintig minden állapotot betöltenek azon felül pedig minden állapot üres lesz. Ennek az energiaszintnek a neve "Fermi-szint" vagy "Fermi energia". Látható, hogy éppen ez a Fermi energia felel meg a μ kémiai potenciálnak. Az $\varepsilon_F(0)$ meghatározása abból a feltételből adódik, hogy az állapotokat betöltő elektronok száma N.

Ha növekszik a rendszer hőmérséklete, akkor ez azt jelenti, hogy az elektronok az alacsonyabb energiájú állapotokból magasabb energiájú állapotokba ugranak. Ez tükröződik az $f^{FD}(\varepsilon, T)$ eloszlásfüggvény alakjában is. Fermi energiának most azt az $\varepsilon_F(T)$ energiaszintet hívjuk, amelynél az eloszlásfüggvény 1/2 értéket vesz fel. Az eloszlásfüggvény "szimmetrikus" a Fermi szint környezetében. Ez azt jelenti, hogy ha a $g(\varepsilon)$ állapotsűrűség állandó volna, akkor a hőmérséklet emelkedésével az $\varepsilon_F(0)$ Fermi szint alatt kiürülő állapotok száma éppen megegyezne az $\varepsilon_F(0)$ fölött betöltődő állapotok számával. Az elektronok N száma tehát nem változna, ahogyan annak lennie is kell. Ha a $g(\varepsilon)$ állapotsűrűség (mint a mi példánkban is) egy monoton növekvő függvény, akkor a Fermi szintet csökkenteni kell ahhoz, hogy a kiürülő és az újonnan betöltődő állapotok száma megegyezzen. Azaz ahhoz, hogy az N összelektronszám állandó maradjon az kell, hogy az $\varepsilon_F(T)$ csökkenjen az $\varepsilon_F(0)$ -hoz képest.

Tekintsünk most egy bozonokból álló rendszert! Legyen a $g(\varepsilon)$ (spinpálya)állapotsűrűség függvény olyan, hogy az egy bizonyos ε_o érték alatt zérus, felette pedig monoton növekedő. Az ε_o érték akár zérusnak is választható. Hogyan töltődnek be ezek az állapotok? Vizsgáljuk meg először az $f^{BE}(\varepsilon, T)$ Bose-Einstein eloszlásfüggvény matematikai tulajdonságait! Látható, hogy ha az ε energia a μ kémiai potenciálnál kisebb, akkor az eloszlásfüggvény értéke negatív (!). Ez azonban az eloszlásfüggvény fizikai jelentése miatt lehetetlen. Negatív számú részecske ugyanis értelmetlen dolog! Mindebből következik, hogy a μ kémiai potenciálnak mindig kisebbnek (!) kell lennie mint az ε_o érték.

Tegyük fel, hogy a bozonok száma a rendszerben a T hőmérséklet csökkenésével nem változik. Ekkor a μ kémiai potenciál értékét növelnünk kell ahhoz, hogy ezt a feltételt teljesíteni tudjuk. Tegyük fel, hogy a kémiai potenciál éppen a T_o hőmérsékleten éri el az ε_o értéket azaz $\mu(T_o) = \varepsilon_o$! Mivel a kémiai potenciál nem emelkedhet az ε_o fölé, ezért a kémiai potenciál értékét továbbra is az ε_o értéken kell tartanunk azaz $\mu(T \le T_o) = \varepsilon_o$ Tehát a T_o hőmérséklet alatt a bozonszám állandóságát matematikailag már nem tudjuk teljesíteni.

Ezek után a továbblépéshez két lehetőség kínálkozik.

Az első az, hogy keresünk olyan bozonrendszereket, amelyekben a bozonok száma a hőmérséklet csökkenésével szintén csökken. Mint azt majd a következő fejezetekben részleteiben is látni fogjuk ilyenek valóban léteznek, sőt a mindennapi életben találkozunk is velük (bár eddig ezt még nem tudtuk).

A másik lehetőség talán még érdekesebb és különösen az alacsony hőmérsékletű fizikában van jelentősége. Tételezzük fel ugyanis, hogy a bozonok nem tűnhetnek el a rendszerből, azaz a számuk állandó kell, hogy maradjon. Ha most megvizsgáljuk az $f^{BE}(\varepsilon, T)$ eloszlásfüggvény viselkedését az $\varepsilon \ge \varepsilon_o$ értékekre a $T_o \ge T \to 0$ esetén, akkor azt látjuk, hogy az eloszlásfüggvény az ε_o pontban igen "élesen" a végtelenhez tart. Ez a meredek növekedés az ε_o érték igen kis környezetére korlátozódik. Tudjuk azonban azt, hogy a kvantumstatisztikáknál bevezetett folytonos energiaskála használata valójában csak nagy energiákon indokolt. Alacsony energián az energiaszintek kvantáltsága már nem mosható el. Ez igaz most is. Azaz az ε_o környezetében vissza kell térnünk a diszkrét energiaskálára. Ez pedig azt jelenti. hogy ha a hőmérséklet eléri a 0 értéket, akkor minden bozon az ε_o energiájú alapállapotba kerül (ahogyan azt a 77.oldalon található bevezetőben már említettük is). A $T_o \ge T \to 0$ folyamat során bozonok az ε_o energiájú alapállapotba kezdenek felhalmozódni, tehát az összmennyiségük nem változik. A folyamat hasonlít egy fázisátalakuláshoz, ahol az egyik fázist (pl. a folyadékot) az ε_o energiájú bozonok, a másik fázist (pl. a gázt) az ennél nagyobb energiájú bozonok alkotják. A jelenség neve Bose kondenzáció. A Bose kondenzáció alapján érthető meg pl. az abszolút zérus fok közelében fellépő szupravezetés, vagy a szuperfolyékonyság jelensége.

1.5.5. Bozonokból álló rendszer

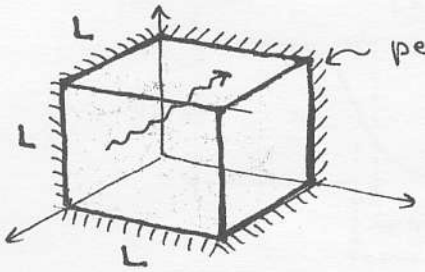
Elektromágneses hullámok → FOTONOK

Rugalmas közegben fellépő hullámok → FONONOK

FOTONOK, FONONOK → BOZONOK

KLASSZIKUS FIZIKA → KVANTUM FIZIKA

Modell:



peremfeltételek → állóhullámok → módusok

$\overline{k}\ (k_x, k_y, k_z)$

$\boxed{\omega = ck}$ diszperziós reláció

$$c = \frac{\omega}{k} = \frac{d\omega}{dk}$$

$$\psi(\vec{r}) = A \cdot \begin{matrix}\sin\\ \cos\end{matrix}\left(\underbrace{u_x \tfrac{\pi}{L} x}_{\equiv k_x}\right) \begin{matrix}\sin\\ \cos\end{matrix}\left(\underbrace{u_y \tfrac{\pi}{L} y}_{\equiv k_y}\right) \begin{matrix}\sin\\ \cos\end{matrix}\left(\underbrace{u_z \tfrac{\pi}{L} z}_{\equiv k_z}\right)$$

$$\omega^2 = c^2 (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)$$

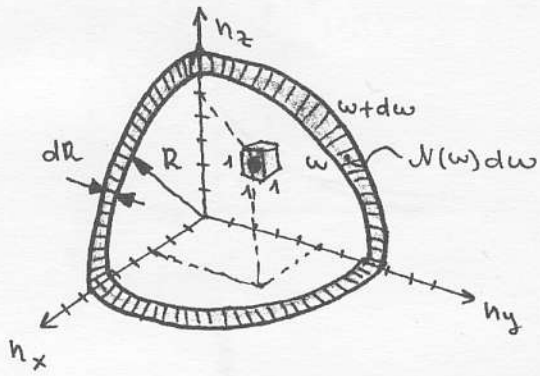
$$\boxed{\omega^2 = c^2 \frac{\pi^2}{L^2} (u_x^2 + u_y^2 + u_z^2)}$$

módus $\Rightarrow (u_x, u_y, u_z)$

↓

módussűrűség (≡ állapotsűrűség)

$$g(\omega) = \underbrace{d_p}_{\text{polarizációk száma}} \cdot \underbrace{\mathcal{N}(\omega)}_{\text{térbeli állapotsűrűség}}$$

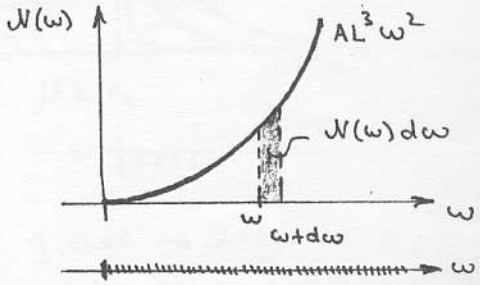


$$u_x^2 + u_y^2 + u_z^2 = \frac{L^2}{c^2\pi^2}\omega^2 \equiv R^2$$

$$dR = \frac{L}{c\pi} d\omega$$

$$\mathcal{N}(\omega)d\omega = \frac{1}{8} 4\pi R^2 dR = \frac{\pi^2}{2} \frac{L^2\omega^2}{c^2\pi^2} \cdot \frac{L}{c\pi} d\omega = A \cdot L^3 \omega^2 d\omega$$

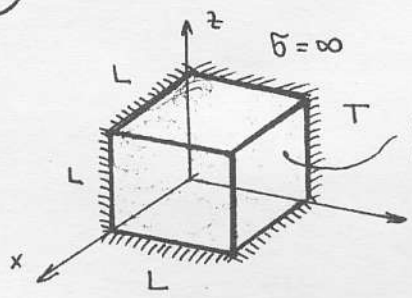
$$\boxed{\mathcal{N}(\omega) = A \cdot L^3 \cdot \omega^2}$$



1.5.5. Bozonokból álló rendszer

A elektromágneses hullámok és a kvantummechanikai foton fogalma azt sugallja, hogy bármilyen klasszikus fizikai hullámjelenség a kvantummechanikában bozonokból álló rendszerként írható le. Most arra fogunk példákat látni, hogy a sejtésünk valóban helytállónak bizonyul. Ezt a szilárd testekben fellépő mechanikai (ezen belül is az akusztikus) hullámok esetében fogjuk megvizsgálni. Mind az elektromágneses, mind pedig az akusztikus hullámok közös jellemzője az, hogy eleget tesznek az $\omega = ck$ diszperziós összefüggésnek. Ez egyben azt is jelenti, hogy pontosan ugyanolyan típusú hullámegyenletet elégítenek ki. Ezért (nagyrészt) közös módon tárgyalhatók. A különbségek az esetleg eltérő speciális perem- illetve mellékfeltételekben lehetnek. Tekintsünk egy kocka alakú zárt rendszert, amelyben a fenti tulajdonságú állóhullámok (ún. módusok) alakulhatnak ki. Ez lesz a rendszer egy rezgési állapota. A peremfeltételekkel megadjuk a "rezgő fizikai mennyiség" (elektromos tér, vagy elmozdulás) értékét a kocka felülete mentén. A diszperziós reláció és a peremfeltételek együttesen meghatározzák azt, hogy adott frekvencián hányféle módus lehetséges ebben a kocka alakú rendszerben. Az adódik, hogy egy módust három nem negatív egész számmal az (n_x, n_y, n_z)-vel tudunk jellemezni. Ezért az $\{n_x, n_y, n_z\}$ koordináta rendszerben egy módust egy pont reprezentál. Bevezethető az $N(\omega)$ (térbeli)állapotsűrűség fogalma. Az $N(\omega)\ d\omega$ kifejezés megadja az $(\omega, \omega + d\omega)$ frekvenciatartományban lévő térbeli módusok számát. Tekintsük az ezeket a módusokat reprezentáló pontok halmazát az $\{n_x, n_y, n_z\}$ koordináta rendszerben. A diszperziós reláció következtében ezek a pontok egy gömbhéj nyolcadban fognak elhelyezkedni. Mivel az (n_x, n_y, n_z) számok csak nemnegatív egész számok lehetnek, így egy egységnyi térfogatban csak egy "móduspont" található. Ezért tehát az $(\omega, \omega + d\omega)$ frekvenciatartományban lévő térbeli módusok száma pontosan a gömbhéjnyolcad térfogatával lesz egyenlő. Ez pedig éppen az $N\ (\omega)$ (térbeli) állapotsűrűséget határozza meg. Eredményül azt kaptuk, hogy lineáris diszperziós törvény esetén az állapotsűrűség a frekvencia négyzetes függvénye lesz, azaz $N(\omega) \propto \omega^2$. Ez az összefüggés tehát mind az elektromágneses hullámokra, mind pedig az makroszkopikus akusztikus mechanikai hullámokra érvényes. Minden térbeli módus még különféle polarizációjú is lehet (hiszen mind az elektromágneses tér, mind pedig az elmozdulás vektor mennyiség!) Ezért a tényleges $g(\omega)$ állapotsűrűséget úgy kapjuk meg, hogy az $N\ (\omega)$ térbeli módussűrűséget megszorozzuk a lehetséges polarizációs állapotok d_s számával.

1.5.5.1. Fotongáz



elektromágneses mező" $(\vec{E}, \vec{B})$ → állóhullámok → módusok

az ω frekvenciájú módusok száma:

$$g(\omega)\,d\omega = \frac{d_p \cdot N(\omega)\,d\omega}{2 \cdot A L^3 \omega^2}$$

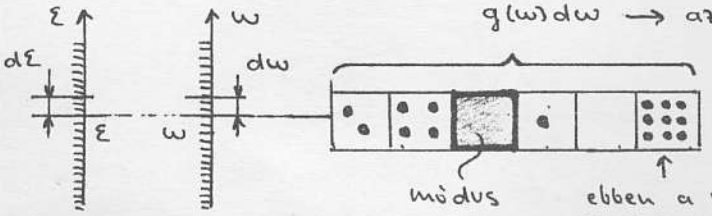
Egy ω frekvenciájú módus energiája:

Modell ↓

$$\varepsilon_{mod} = \underbrace{\frac{1}{2}\hbar\omega}_{\text{nullaponti energia}} + n \cdot \underbrace{\hbar\omega}_{\text{FOTON}} \qquad (n = 0, 1, 2, \ldots)$$

FOTON ≡ "energia adag (kvantum)"

Egy ω frekvenciájú módus "n (db) FOTONT tartalmaz"



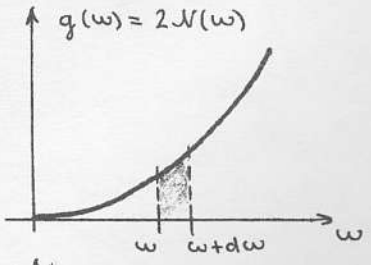
$g(\omega)\,d\omega$ → az "ω frekvenciájú" módusok száma

→ $n(\omega)\,d\omega$ (a FOTONOK száma összesen)

módus — ebben a módusban 9 FOTON van } → ennek a módusnak az energiája: $\left(\frac{1}{2}\hbar\omega\right) + 9\hbar\omega$

$f^{BE}(\varepsilon, T) \leftrightarrow f^{BE}(\omega, T)$

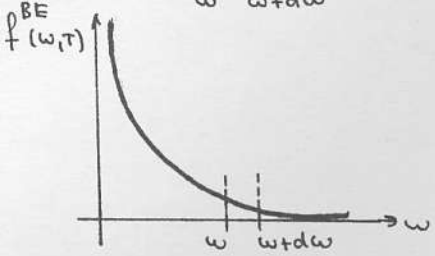
BOSE-EINSTEIN statisztika (FOTONOK ≡ bozonok száma változik : $\mu \equiv 0$, a nullaponti energiától eltekintünk)



Az összenergia:

$$E = \int_0^\infty (\hbar\omega) \cdot n(\omega)\,d\omega = \int_0^\infty (\hbar\omega) \cdot g(\omega) f^{BE}(\omega, T)\,d\omega =$$

$$= \int_0^\infty \hbar\omega \cdot 2AL^3\omega^2 \cdot \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1}\,d\omega \equiv L^3 \int_0^\infty g(\omega)\,d\omega$$

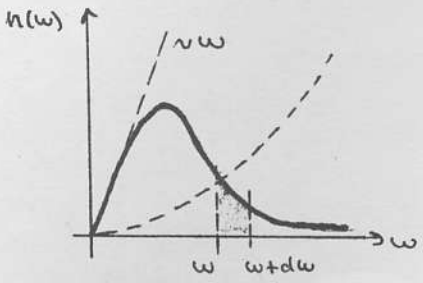


azaz

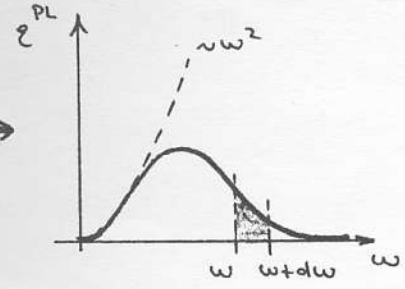
$$g(\omega) = 2A \frac{\hbar\omega^3}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1} \sim \varepsilon^{PL}(\omega) \qquad \text{(PLANCK)}$$

↓

Fekete test (hőmérsékleti) sugárzása.



→



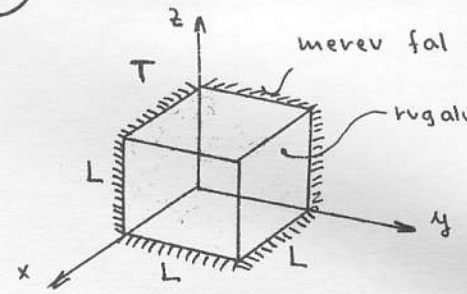
1.5.5.1. Fotongáz

Alkalmazzuk az eddigieket egy kocka alakú üregben gerjesztett elektromágneses állóhullámok kvantummechanikai leírására! (A probléma a hőmérsékleti sugárzás elméleti vizsgálatánál már szerepelt, ezért ismerős kell, hogy legyen!)
Az elektromágneses tér kvantummechanikai tárgyalására vezettük be a foton fogalmát. Eszerint az elektromágneses tér energiája csak $\hbar\omega$ energiaadagokban változtatható. Ezt az energiaadagot neveztük el fotonnak. A "T" hőmérsékletű falban ω frekvenciával rezgő töltések (mint atomi sugárzó "antennák") hatására, az üregben ω frekvenciájú elektromágneses állóhullámok (módusok) alakulnak ki. Egy ω frekvenciájú módus energiája attól függ, hogy a kis atomi oszcillátorok mennyi $\hbar\omega$ fotont adtak át az üregnek. Ezért az üregben lévő módusok energiája kvantált és két szomszédos energiaszint közötti különbség $\hbar\omega$. Ha az ω frekvenciájú módus energiája $\frac{1}{2}\hbar\omega + n\hbar\omega$, akkor ez azt jelenti, hogy a rendszerben "n" darab foton van jelen. Tehát az ω frekvenciájú módusok energiáját a $\hbar\omega$ energiájú fotonok számával fejeztük ki.

Egy adott ω frekvencián a lehetséges módusok számát az $N(\omega) \propto \omega^2$ állapotsűrűség határozza meg. A kvantumstatisztika szerint, a $\hbar\omega$ energiájú fotonok számát T hőmérsékleten a Bose-Einstein féle eloszlásfüggvény adja meg. Az üregbe fotonok lépnek be, illetve távoznak el annak megfelelően, hogy az egyes (elektromágneses hullám) módusok energiája csökken vagy növekszik. Tehát a rendszerben a fotonok száma nem állandó. Mint azt az előzőekben láttuk, így a kémiai potenciálnak állandónak kell lenni. Az $N(\omega) \propto \omega^2$ állapotsűrűség miatt a kémiai potenciál értékét zérusnak kell választani. Kvantumstatisztikai fogalmakban gondolkodva szemléletesen azt mondhatjuk, hogy az üregben T hőmérsékletű, zérus kémiai potenciálú fotongáz van jelen, amelynek tulajdonságait a Bose-Einstein féle statisztikai törvények határozzák meg.

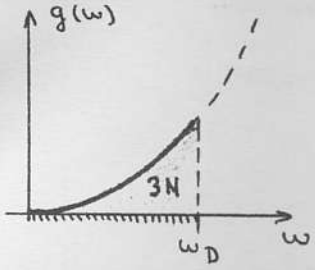
Ezek után a rendszer összenergiája, azaz az ω frekvenciájú módusok energiája egyszerűen meghatározható. Eredményül a már jól ismert Planck féle összefüggésre jutottunk, ahogyan az várható is volt.

1.5.5.2. Fonongáz



merev fal (makroszkópikus értelemben!)

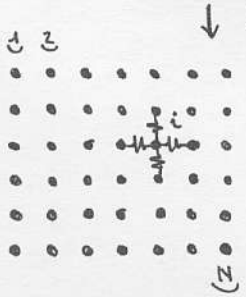
rugalmas közeg → állóhullámok → módusok

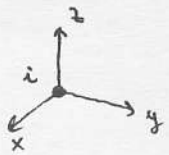


$g(\omega) = d_p \cdot \underbrace{N(\omega)}_{3 \cdot AL^3\omega^2}$

$\begin{cases} 1 \text{ longitudinális} \\ 2 \text{ transzverzális} \end{cases}$

↓ ATOMI SZERKEZET





N db atom → 3N szabadságfokú rendszer

3N különböző rezgési állapot (módus) létezik (DEBYE)

$$3N = \int_0^{\omega_D} g(\omega)\,d\omega = 3AL^3 \int_0^{\omega_D} \omega^2\,d\omega = 3AL^3 \frac{\omega_D^3}{3} \rightarrow 3A = \frac{9N}{L^3\omega_D^3}$$

Tehát:

$$g(\omega) = \begin{cases} 9N\dfrac{\omega^2}{\omega_D^3} & \text{ha } \omega \le \omega_D \\ 0 & \text{ha } \omega > \omega_D \end{cases}$$

Kvantummechanika

kvantálás:

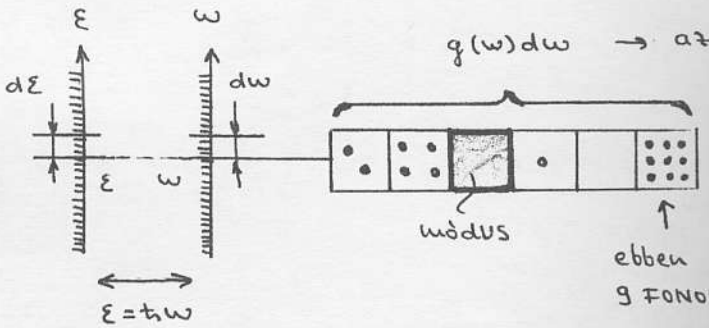
Egy ω frekvenciájú módus energiája:

$$\varepsilon_{mod} = \underbrace{\frac{1}{2}\hbar\omega}_{\text{nullaponti energia}} + n \cdot \underbrace{\hbar\omega}_{\text{"FONON"}} \qquad (n = 0,1,2,3,\dots)$$

"FONON" ≡ "energia adag (kvantum)"

Modell ↓

Egy ω frekvenciájú módus "n (db)" FONONT tartalmaz"



$g(\omega)d\omega$ → az "ω frekvenciájú" módusok száma

→ $n(\omega)d\omega$ (a FONONOK száma összesen)

ebben a módusban 9 FONON van → ennek a módusnak az energiája: $\left(\frac{1}{2}\hbar\omega\right) + 9\hbar\omega$

$f^{BE}(\varepsilon,T) \leftrightarrow f^{BE}(\omega,T)$

BOSE-EINSTEIN statisztika:

(FONONOK ≡ bozonok száma változik: $\mu \equiv 0$;
a nullaponti energiától eltekintünk)

1.5.5.2. Fonongáz

Tekintsünk egy kocka alakú merev fallal határolt, rugalmas, szilárd anyagot. Külső gerjesztés hatására az anyagban rugalmas állóhullámok alakulnak ki. A $g(\omega)$ állapotsűrűséget úgy kapjuk meg, hogy az $N(\omega) \propto \omega^2$ térbeli módussűrűséget megszorozzuk d_s =3 -al a lehetséges polarizációs állapotok számával. Ugyanis kétféle transzverzális és egyféle longitudinális hullám terjedhet egy szilárd anyagban. Ha a kvantummechanikai tárgyalásra akarunk áttérni, akkor már valahogyan figyelembe kell venni a szilárd test atomos szerkezetét is. Ha a szilárd test N darab atomból áll, akkor a mechanika szerint 3N féle rezgési állapota létezhet, hiszen egy 3N szabadságfokú rendszerről van szó. Ez azt jelenti, hogy a $g(\omega) \propto \omega^2$ állapotsűrűségnek egy maximális ω_D frekvencia felett zérusnak kell lenni. Az ω_D ún. Debye [kiejtése: ”döbáj”] frekvencia értékét úgy kell megadnunk, hogy az összes lehetséges módusok száma éppen 3N legyen. Azt, hogy kell léteznie egy maximális frekvenciaértéknek (azaz, hogy egy módus frekvenciája nem lehet akármekkora) fizikailag egyszerűen belátható. Ugyanis, az atomi szerkezet miatt egy rugalmas hullám fél-hullámhossza nem lehet kisebb az atomok közötti rácstávolságnál (szemléletesen szólva két atom között nincsen ami hullámzana). A lehetséges minimális hullámhossz egy maximális frekvenciának felel meg.

A rendszer kvantummechanikai tárgyalásának a gondolatmenete ezek után teljesen megegyezik az elektromágneses hullámoknál tanultakkal. Az egyetlen különbség az, hogy most a rugalmas (hullám) módusok egy $\hbar\omega$ energiaadagját "fononnak" nevezzük.

Kvantumstatisztikai fogalmakban gondolkodva szemléletesen azt mondhatjuk, hogy T hőmérsékletű szilárd testben, zérus kémiai potenciálú fonongáz van jelen, amelynek tulajdonságait a Bose-Einstein féle statisztikai törvények határozzák meg.

A rendszer összenergiája:

$$E_R = \int_0^\infty (\hbar\omega)\, n(\omega)\, d\omega = \int_0^\infty (\hbar\omega)\cdot g(\omega)\, f^{BE}(\omega,T)\, d\omega =$$

$$= \int_0^{\omega_D} \hbar\omega \left(9N\frac{\omega^2}{\omega_D^3}\right)\frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}}-1}\, d\omega = 9N\frac{\hbar}{\omega_D^3}\underbrace{\int_0^{\omega_D}\frac{\omega^3}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}}-1}\, d\omega}_{?}$$

matematika:

$$x \equiv \frac{\hbar\omega}{kT} \quad \rightarrow \quad dx = \frac{\hbar}{kT}\, d\omega$$

$$x_D \equiv \frac{\hbar\omega_D}{kT} \quad \rightarrow \quad \boxed{\hbar\omega_D \equiv k\Theta_D}$$

Θ_D: 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 (rezgési) energiája így függ a hőmérséklettől.

Legyen

$T \ll \Theta_D$ azaz $\frac{\Theta_D}{T} \to \infty$

$$E_R(T) = \underbrace{9NkT}_{\uparrow}\left(\frac{T}{\Theta_D}\right)^3 \cdot \underbrace{\int_0^\infty \frac{x^3}{e^x-1}\, dx}_{\frac{\pi^4}{15}} \longrightarrow E_R(T) \approx 3RT\left(\frac{T}{\Theta_D}\right)^3 \cdot \frac{\pi^4}{5}$$

mólnyi mennyiség esetén $R = Nk$

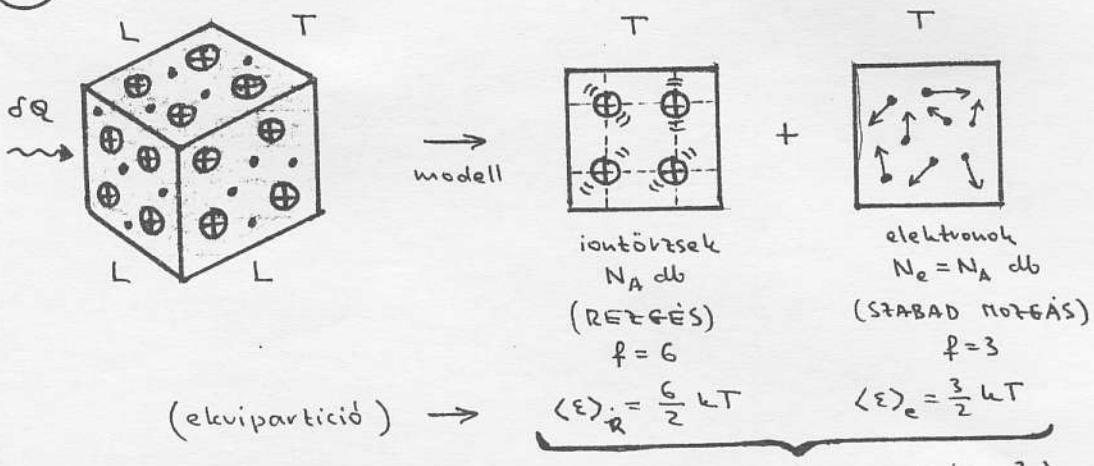
ha $T \ll \Theta_D$

Jellegzetes Θ_D adatok:

	Pb	Ag	Zn	Cu	Al	C
Θ_D [K]	88	215	308	345	398	1850

Ezek után a T hőmérsékletű fonongáz összenergiája kiszámítható. Az összenergia értéke függeni fog a $g(\omega)$ állapotsűrűségben megjelenő ω_D Debye frekvenciától is. Ezen frekvencia helyett inkább a $\hbar\omega_D = k\theta_D$ összefüggéssel definiált θ_D ún. Debye hőmérsékletet szokás használni. Ha a T hőmérséklet sokkal kisebb mint a Debye hőmérséklet, akkor az összenergia a T hőmérséklet 4-ik hatványával lesz arányos.

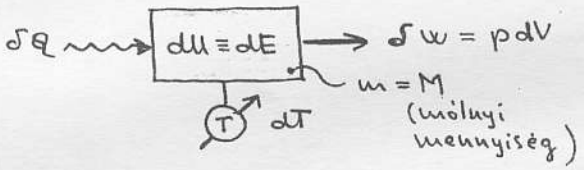
87 Szilárd testek fajhője (moláris hőkapacitás)



(ekvipartíció) → $\langle\varepsilon\rangle_R = \frac{6}{2}kT$ $\langle\varepsilon\rangle_e = \frac{3}{2}kT$

A rendszer energiája : $E = N_A\langle\varepsilon\rangle_R + N_e\langle\varepsilon\rangle_e = N_A kT\left(3+\frac{3}{2}\right) = RT\left(3+\frac{3}{2}\right)$

A fajhő (moláris hőkapacitás) fogalma



$\delta Q = dE + pdV \quad | dV = 0$

$\delta Q = c_v M\, dT$

$dE = c_v M\, dT \equiv C_v\, dT \rightarrow$

$$\boxed{C_v = \left[\frac{dE}{dT}\right]_V}$$

A klasszikus fizikai modell :

$E = RT\left(3+\frac{3}{2}\right) \rightarrow C_v = \left(3+\frac{3}{2}\right)R$?

MÉRÉS: $C_v = 3R$ $T \approx 300\,K$

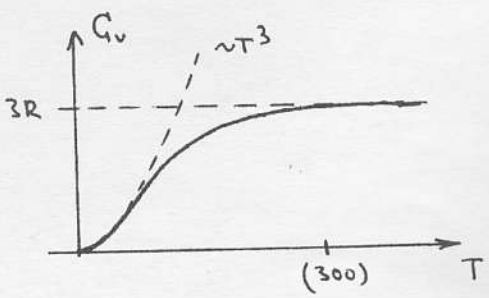
DULONG PETIT törvény

A kvantummechanikai modell esetén :

$$\boxed{C_v = C_{vR} + C_{ve}}$$

$$C_{vR} = \frac{dE_R}{dT} = \begin{cases} 3R\,\frac{4\pi^4}{5}\left(\frac{T}{\theta_D}\right)^3 & \left[\text{ha } T \ll \theta_D\right] \\ f^{BE} \rightarrow f^{MB} \text{ (ekvipartíció tétel) } E_R = 3RT & \left[T \gg \theta_D\right] \end{cases}$$

$$\boxed{C_v \cong C_{vR} = 3R \cdot F(T) \Rightarrow \begin{cases} \sim \left(\frac{T}{\theta_D}\right)^3 & T \ll \theta_D \\ = 3R & T \gg \theta_D \end{cases}}$$



MÉRÉS

$$\boxed{C_{ve} \approx 0}$$ → szabad elektrongáz fajhője

(?)

Az eddigiek segítségével kiszámíthatjuk a szilárd testek fajhőjét. Az ilyen módon kapott elméleti eredmények a kísérleti tapasztálatokkal összehasonlíthatók és így számot adhatunk az elméleti modell helyességéről.

Tekintsünk egy mólnyi mennyiségű szilárd testet. Számítsuk ki ennek a testnek a mólhőjét (moláris hőkapacitását) a klasszikus statisztikus fizika szerint. A szilárd test N_A (Avogadró számnyi) iontörzsből és (az egyszerűség végett) ugyanennyi elektronból áll. Modellezzük a szilárd testünket, mint az iontörzsek és az elektronok egymással termikus egyensúlyban lévő rendszerét. Az ekvipartíció tétele (klasszikus statisztika!) segítségével ki tudjuk számolni a teljes rendszer összenergiáját. Az iontörzsek rezgő mozgást végeznek, tehát a termodinamikai szabadságfokuk 6. Az elektronok közel szabadon mozognak, így a termodinamikai szabadságfokuk 3. A rendszer összenergiájára így 9/2 RT érték adódik. Az állandó térfogaton mért mólhőre ezért 9/2R -et kapunk. A mérések szerint azonban ez az érték 6/2R. Ezt nevezik Dulong-Petit [kiejtése:"dülong-pit"] törvénynek.

A klasszikus statisztikus fizika tehát helytelen eredményt ad. De ez még nem minden! A termodinamika harmadik főtétele szerint minden fajhőnek az abszolút zérus közelében zérushoz kell tartani. Mindezt a mérések is igazolják. Ugyanakkor a klasszikus statisztikus fizika szerint a részecskék szabadságfoka független a hőmérséklettől és így a fajhőnek is állandónak kellene maradnia. Mindezek az ellentmondások már jóval a kvantummechanika megszületése előtt ismeretesek voltak és jelezték azt, hogy valami itt nincsen rendben. A helyes választ mindkét kérdésre csak a kvantumstatisztikák tudtak adni.

A szilárd test mólhőjét az iontörzsekből álló rendszer mólhőjének és a szabadelektronok mólhőjének az összege adja. Határozzuk meg először az iontörzsek mólhőjárulékát. Az előző oldalon már a kvantummechanika segítségével kiszámítottuk a rezgő rendszer összenergiáját. Így a mólhő ennek a hőmérséklet szerinti első deriváltjaként számítható. Az eredmény az, hogy az iontörzsek mólhőjáruléka alacsony hőmérsékleten T^3 hatvány szerint valóban zérushoz tart. Magasan a Debye hőmérséklet fölött pedig a klasszikus 6/2R eredményt adja. Látható, hogy csak akkor kapunk a tapasztalattal egyező eredményt, ha feltételezzük, hogy az elektronok fajhőjáruléka elhanyagolható. Ezt a szilárdtestfizikai részben bizonyítani is fogjuk.

A szilárd testek fajhőjének a helyes kiszámítása a kvantumstatisztikák alkalmazásának egyik igen szép sikere.

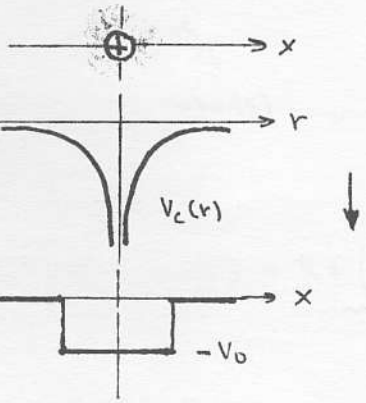
1.6. A kovalens kémiai kötés

1.6.1. A molekulapályák

1.6.1.1. Egydimenziós modell

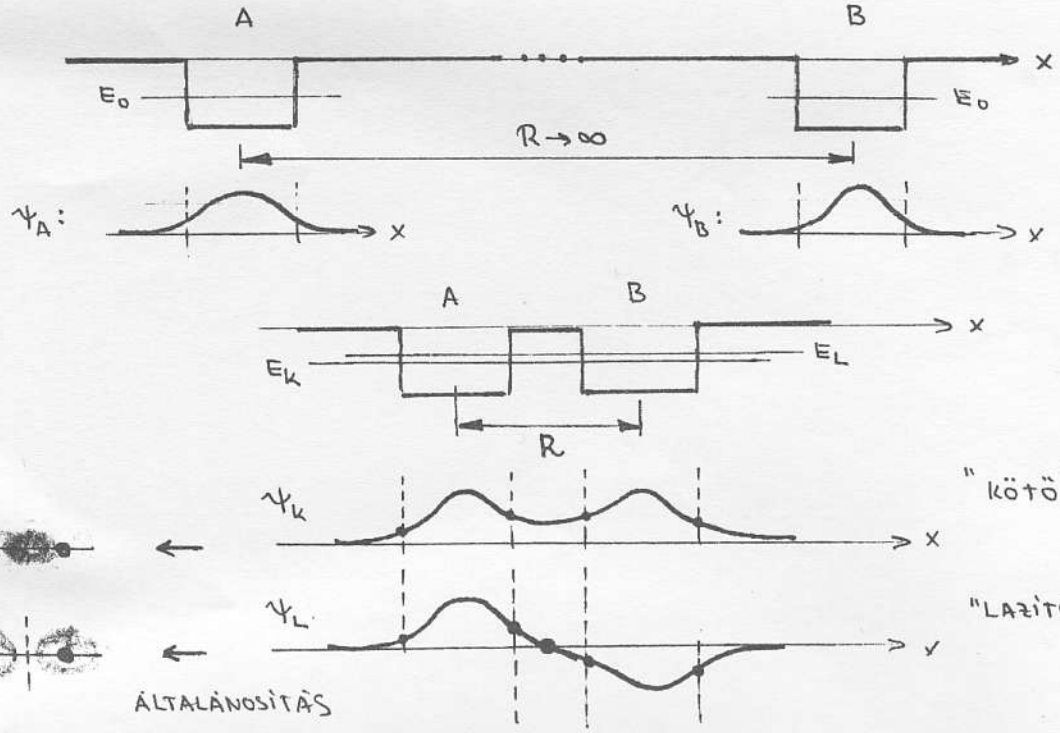
Kettős potenciálvölgy kvalitatív tárgyalása

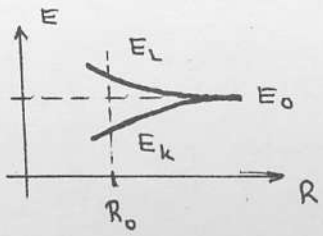
A MODELL definiálása:



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. A kovalens kémiai kötés

A kovalens kémiai kötésről, már a középiskolai (sőt az általános iskolai!) kémia tantárgyban részletesen volt szó. Ennek a fejezetnek az a célja, hogy megteremtse a kapcsolatot az eddig tárgyalt precíz kvantummechanikai ismereteink és a kémiában tanultak között.

1.6.1. A molekulapályák

1.6.1.1. Egydimenziós modell

Két atom között létrejövő kovalens kémiai kötést már egydimenziós modellen is szemléltetni tudjuk. Az egydimenziós atomot egy potenciálgödörrel fogjuk modellezni. Legyen ebben az "atomban" az elektron energiája E_o. Ha két atom egymástól nagyon nagy távolságra van, akkor a két Ψ_A és Ψ_B elektronfelhő nem zavarja egymást, azaz két független atomunk van. Ha a két "atom" elegendően közel kerül egymáshoz, akkor már egy kvantummechanikai rendszernek kell őket tekinteni. Egy kettős potenciálgödröt kapunk. Felrajzolhatjuk a kötött állapothoz tartozó megoldásokat. Az egydimenziós Schrödinger egyenlet általános matematikai tulajdonságainak az ismeretében ez könnyen megtehető.

Látható, hogy lesz egy olyan Ψ_K kötött állapot amelynek az E_K energiája egy kissé az E_o alá fog esni. Ennek az oka a következő. Mivel E_K valamivel kisebb, mint E_o, ezért a potenciál gödörben az elektron impulzusa kisebb, tehát a Ψ_K hullámfüggvény lassabban fog változni. De ez azt jelenti, hogy a két gödröt elválasztó falban a Ψ_K hullámfüggvény a szabad atomi hullámfüggvények (Ψ_A, Ψ_B) felett fog menni. A szimmetria miatt Ψ_K a potenciálgát középpontjára nézve egy páros függvény lesz.

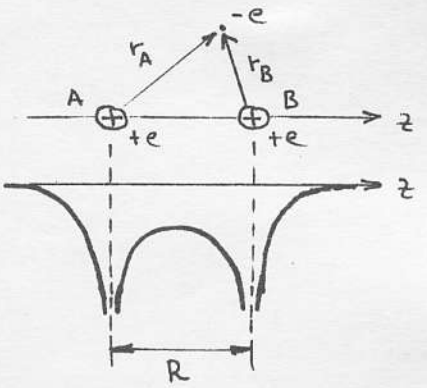
Láthatóan lesz egy Ψ_L állapot is, amelynek az E_L energiája egy kissé az E_K fölé fog kerülni. Ennek az oka a következő. Mivel E_L valamivel nagyobb, mint E_o, ezért a potenciál gödörben az elektron impulzusa nagyobb, tehát a Ψ_L hullámfüggvény gyorsabban fog változni. De ez azt jelenti, hogy a két gödröt elválasztó falban a Ψ_L hullámfüggvény a szabad atomi hullámfüggvények (Ψ_A, Ψ_B) alatt fog menni. A szimmetria miatt Ψ_L a potenciálgát középpontjára nézve egy páratlan függvény lesz .

Ψ_K állapot esetén az elektron felhő a két atom közötti térben (a potenciálgátban) véges értékű, ezért ez egy ún. “kötő pálya” lesz. A Ψ_L állapot esetén az elektron felhő a két atom közötti térben (a potenciálgát középpontjában) zérus értékű, ezért ez nem hozhat létre kötést. Ezt hívják “lazító (vagy nem kötő) pályának”. Mivel mind a Ψ_K mind pedig a Ψ_L állapot mind a két atomra kiterjed, ezért ezeket "molekula pályáknak" is hívják.

Látható, hogy a molekula pályák a molekulát alkotó két atom Ψ_A és Ψ_B atompályáiból alkalmas lineáris kombinációval közelítőleg létrehozhatók.

Általánosságban is elmondhatjuk, hogy két atom közelítésekor a szabad atomi energiaszint két közeli energiaszintre hasad fel. Az alacsonyabb energiájú a kötő pályákat, a magasabb energiájú a lazító pályákat adja.

1.6.1.2. A hidrogénmolekula ion (H_2^+)



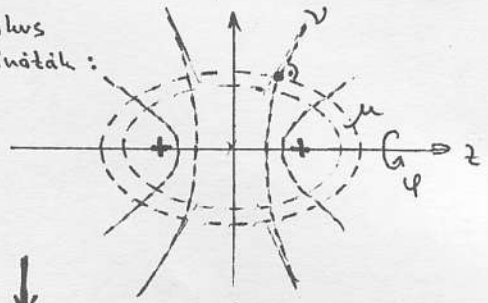
$$\hat{H} = \underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta - V_c(r_A) - V_c(r_B)}_{\equiv \hat{H}_0} + V_c(R)$$

$$V_c(r) \equiv \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{r}$$

Az elektron állapotok (molekulapályák)

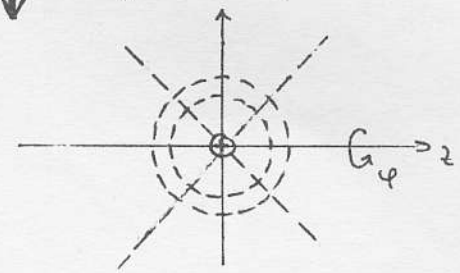
$$\hat{H}_0\psi = E_0\psi \qquad \psi(\vec{r})$$

elliptikus koordináták:



$$\left.\begin{aligned} \nu &\equiv \frac{r_A + r_B}{2} \\ \mu &\equiv \frac{r_A - r_B}{2} \\ \varphi & \end{aligned}\right\} \rightarrow \psi(\nu,\mu,\varphi)$$

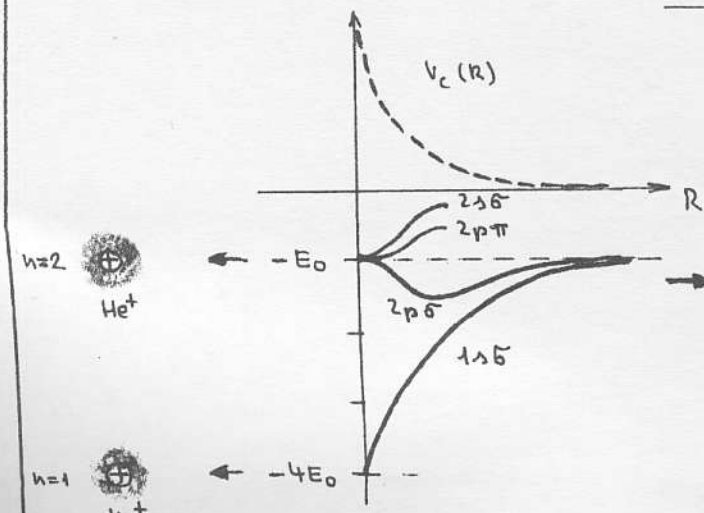
$R \rightarrow 0$ ↓



Egzaktul megoldható (szeparálás)

$$\psi(\nu,\mu,\varphi) = N(\nu)\cdot M(\mu)\cdot \Phi(\varphi)$$

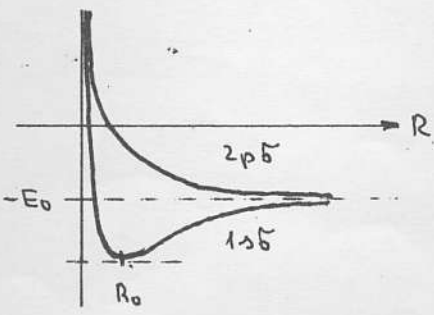
$$\left\{\begin{aligned} n &= 1,2,3,\dots \\ l &= 0,1,2,3,\dots \\ m_l &= 0,\pm1,\pm2,\dots \pm l \rightarrow L_z \end{aligned}\right.$$



JELÖLÉSEK:

$$l = \begin{cases} 0,1,2,\dots \\ s,p,d,\dots \end{cases} \qquad |m_l| = \begin{cases} 0,1,2,\dots \\ \sigma,\pi,\delta,\dots \end{cases}$$

$1s\sigma$
$2s\sigma$
$2p\sigma$
$2p\pi$
⋮



→ LAZÍTÓ PÁLYA:



→ KÖTŐ PÁLYA:



1.6.1.2. A hidrogén molekula ion

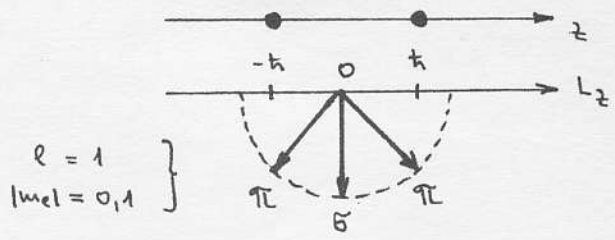
Most egy reális fizikai feladat kapcsán bevezetjük a kémiában gyakran használt és a molekulapályákkal kapcsolatos, fontosabb jelöléseket és elnevezéseket. A lehető legegyszerűbb, a természetben létező molekula a H_2^+ hidrogén molekula ion. Ez két atommagot (jelesül protont) tartalmaz (ettől lesz molekula) de csak egyetlen elektronja van (ezért tudjuk elvileg pontosan kiszámolni). Az elektron két, egymástól R távolságra lévő proton terében mozog. Kezdetben tekintsük R értékét adottnak. Az elektron Hamilton operátora egyszerűen megadható. Az ennek alapján felírt Schrödinger egyenlet megoldásai lesznek a keresett molekulapályák.

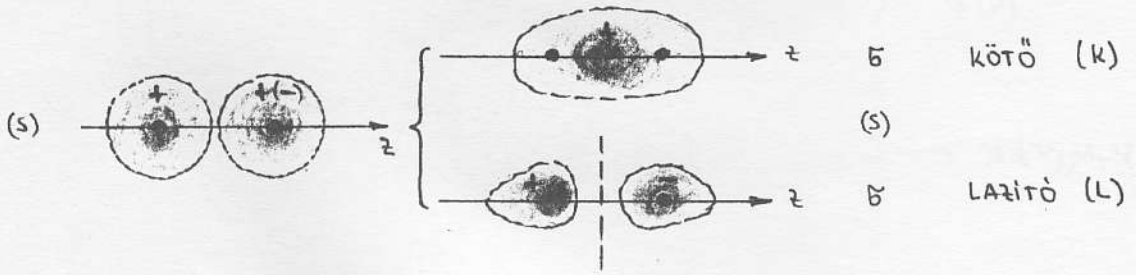
A feladat pontosan megoldható, ha ún. hengerszimmetrikus konfokális koordináta rendszerben dolgozunk. Itt a koordináta felületek konfokális (=azonos fókuszú) forgási ellipszoidok illetve forgási hiperboloidok. A koordinátákat pedig $\{\nu, \mu, \varphi\}$ betűkkel jelöljük. Látható, hogy R→0 esetben a koordináta rendszerünk a gömbi koordináta rendszerbe megy át.

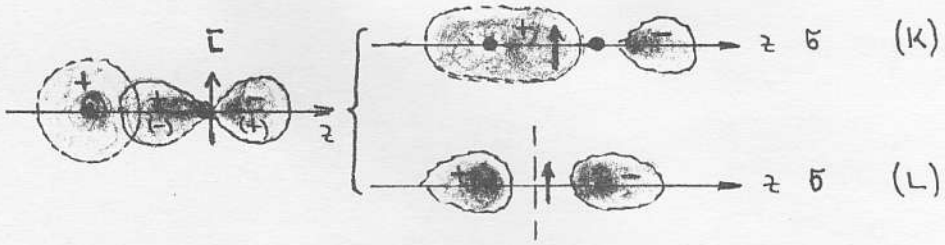
A hullámfüggvény szeparálható és a Schrödinger egyenlet a polinom módszerrel megoldható. A megoldás során három kvantumszám jelenik meg, az (n, l, m_l). Ezek ugyanolyan értékeket vesznek fel mint a hidrogén atom esetén és a fizikai tartalmuk is ugyanaz. Van azonban egy lényeges különbség. Ez pedig az, hogy amíg a hidrogén atom gömbszimmetrikus, addig a hidrogénmolekula ion egy hengerszimmetrikus molekula. A két proton által definiált egyenes lesz a "z" tengely. Így a perdület vektornak e tengely irányába számított vetülete lesz az L_z komponens. Az $|m_l| = 0,1,2,...$ különböző értékeinél fellépő állapotokat most betűjellel látjuk el, ezek lesznek (sorrendben) a $\sigma, \pi, \delta, ...$ pályák.

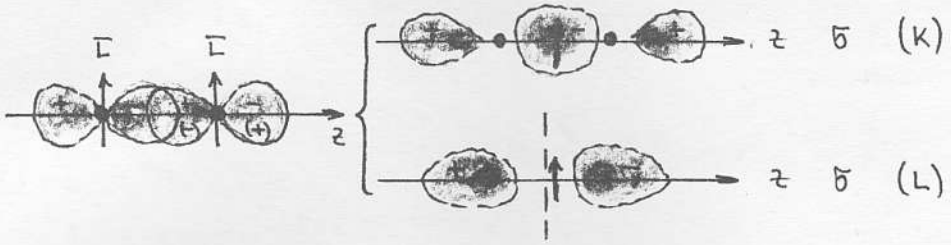
A különböző molekulapályák energiáját a R protontávolság függvényében felrajzolva ellenőrizhetjük az eredményeink helyességét. Ugyanis R=0 esetén a két proton egy helyen van, tehát egy hélium iont kapunk. Az $R \to \infty$ esetén pedig egy hidrogén atomból és egy tőle független protonból álló rendszerhez jutunk. Mindkettő megoldásait már az előzőekből is merjük. Ezeket kell, hogy visszakapjuk most is. A H_2^+ molekula ion teljes energiáját úgy kapjuk meg, hogy az elektron energiájához hozzáadjuk a két proton között fellépő taszításból származó potenciális energiát is. Ezek után felrajzolható a rendszer összenergiája mint a protonok közötti R távolság függvénye. A két legalacsonyabb energiájú ($1s\sigma$ és $2p\sigma$) állapothoz tartozó jellegzetes görbe az $R \to \infty$ esetén ugyanahhoz az energiaszinthez tart. Ennek a fizikai tartalma könnyen megérthető. Helyezzünk el egymástól nagyon nagy R (kb. végtelen) távolságra egy hidrogén atomot és egy protont. Ekkor a két objektum olyan távol van egymástól, hogy közöttük nem lép fel kölcsönhatás. A rendszer energiája a hidrogén atom alapállapoti energiájával fog megegyezni. Ha csökkentjük az R távolságot, akkor az elektron érzékelni kezdi a másik proton hatását is. A kezdeti szabad atomi energiaszint felhasad (ugyanúgy, ahogyan azt az egydimenziós és eléggé "mesterkélt" bevezető modellben láttuk). Tovább csökkentve az R távolságot az $1s\sigma$ kötőpálya esetén a rendszer egy minimális energia értéket vesz fel. Ez lesz a rendszer (stabil) alapállapota. Ha megvizsgáljuk a két pályához tartozó elektronfelhőt, akkor azt tapasztaljuk, hogy lazító pálya esetén a két protont összekötő egyenes felezősíkjában az elektronfelhő zérus lesz. Ugyanígy, mint az egydimenziós modell esetén.

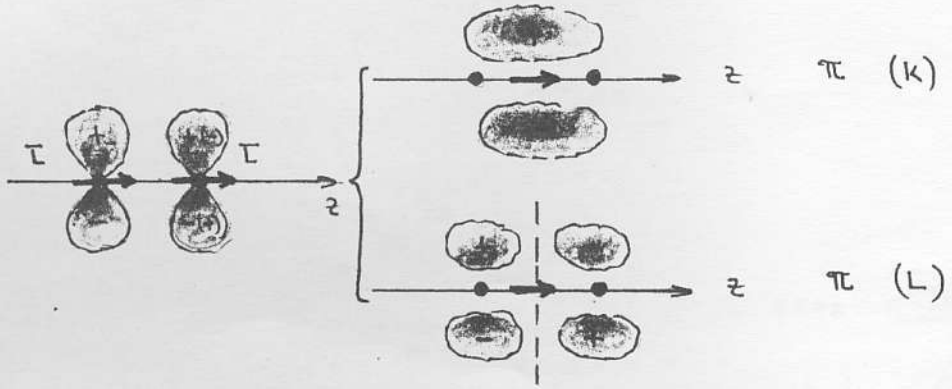
1.6.2. A molekulapályák felépítése atompályákból











1.6.2. A molekulapályák felépítése atompályákból

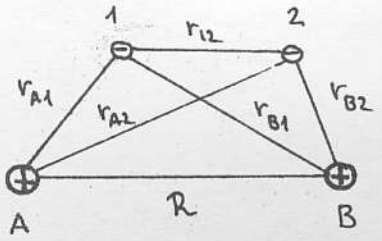
A molekulapályák kiszámítása legtöbbször igen nehéz feladat. Ezért közelítő módszereket szoktunk használni. Már az egydimenziós modell esetén láttuk, hogy a molekulapályák atomi pályákból közelítőleg felépíthetők. Ezt szoktuk használni a reális molekula számítások esetén is.

Az ábrán azt mutattuk be, hogy hogyan lehet atomi "s" és "p" állapotokból kötő és lazító "σ" és "π" molekulapályákat létrehozni.

A lazító pályák jellegzetessége az, hogy a molekulát alkotó két atom közötti felezősíkban az elektronfelhő zérus lesz.

Kémiai tanulmányainkból ismeretes, hogy a "π" kötés fontos szerepet játszott a benzolmolekula (szabályos hatszög alakú) szerkezetének a magyarázatában.

1.6.3. A hidrogénmolekula (H_2)



$\hat{H}$

$E = ?$

Coulomb kölcsönhatások:

$$V_c(r) = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\cdot\frac{1}{r}$$

$$\hat{H}\,\Phi(\bar{x}_1,\bar{x}_2) = E\,\Phi(\bar{x}_1,\bar{x}_2)$$

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

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

$$\hat{H} = \underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_1 - V_c(r_{A1}) - V_c(r_{B1})}_{\equiv \hat{H}_0(1)\ (H_2^+)} \underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_2 - V_c(r_{A2}) - V_c(r_{B2})}_{\equiv \hat{H}_0(2)\ (H_2^+)} + \underbrace{V_c(r_{12})}_{\text{elektronok közötti kölcsönhatás}} + V_c(R)$$

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 elhanyagoljuk $\rightarrow$ $\Phi(\bar{x}_1,\bar{x}_2) = \Psi(\bar{r}_1,\bar{r}_2)\cdot\chi(\xi_1,\xi_2)$

$$\Phi_a(\bar{x}_1,\bar{x}_2) = \begin{cases} \Psi_a(\bar{r}_1,\bar{r}_2)\cdot\chi_s(\xi_1,\xi_2) & \uparrow\uparrow \\ \Psi_s(\bar{r}_1,\bar{r}_2)\cdot\chi_a(\xi_1,\xi_2) & \uparrow\downarrow \end{cases}$$

A sajátérték egyenlet szeparálható

$$\left[\hat{H}_0(1) + \hat{H}_0(2)\right]\Psi_s(\bar{r}_1,\bar{r}_2) = \underbrace{\left(E - V_c(R)\right)}_{\equiv E'}\cdot\underbrace{\Psi_s(\bar{r}_1,\bar{r}_2)}_{\Psi_k(\bar{r}_1)\,\Psi_k(\bar{r}_2)}$$

$\rightarrow E' = \min$

Az elektronok közötti kölcsönhatás (közelítő) figyelembevétele (pl: Hartree)

$$E \approx \langle \Psi_s(\bar{r}_1,\bar{r}_2) \,|\, \hat{H} \,|\, \Psi_s(\bar{r}_1,\bar{r}_2)\rangle$$

$\uparrow$

$\Psi_k(\bar{r}_1)\,\Psi_k(\bar{r}_2)$ $\rightarrow$ SCF megoldások!

EGYÉB MÓDSZEREK $\rightarrow$ KVANTUMKÉMIA

1.6.3. A hidrogénmolekula

A hidrogénmolekula számításánál ismét felmerül ugyanaz a súlyos nehézség, amely minden többelektront tartalmazó rendszernél fellép. Nevezetesen az, hogy az elektronok közötti kölcsönhatás miatt a rendszer állapotfüggvénye nem szeparálható. Ha az elektronok közötti kölcsönhatást elhanyagoljuk, akkor a szeparálás ugyan végrehajtható, de a számolásunk igencsak pontatlan lesz.

Ha a spinpálya kölcsönhatástól eltekintünk, akkor csak a pályaállapotokat kell meghatározni. A szeparálás során kiszámolt egyelektron molekulapályákkal lehet a rendszer teljes (antiszimmetrikus) állapotfüggvényét megadni. Ez vagy a pályaállapot függvényben, vagy pedig a spinállapot függvényben lesz antiszimmetrikus. A rendszer energiája akkor lesz minimális, ha a legkisebb energiájú molekulapálya állapotban van mind a két elektron, de a spinjük ellentétes (Pauli elv).

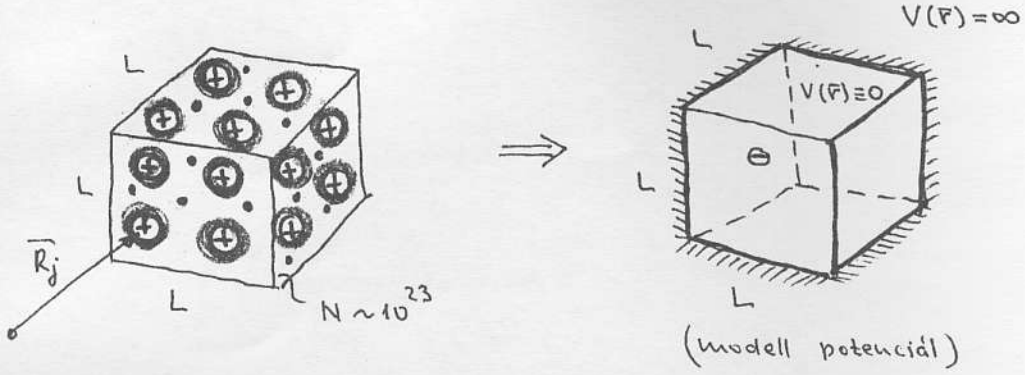
Az elektronok közötti kölcsönhatás közelítő figyelembevételére a kvantumkémiában számtalan módszert és eljárást fejlesztettek ki. Ezek segítségével bámulatos pontosságokat érnek el még viszonylag bonyolult molekulák esetén is.

A kvantumkémia ma az alkalmazott kvantummechanika külön tudománya. Az elmúlt évtizedekben hatalmasat fejlődött, köszönhetően a hatalmas gyógyszergyártó cégek anyagi támogatásának, amelyet kvantumkémiai számítások igen sikeres gyakorlati felhasználhatósága motivált.

2. SZILÁRDTESTFIZIKA

2.1. A fémek szabadelektron elmélete

2.1.1. A SOMMERFELD féle fémmodell



(modell potenciál)

N elektronból álló rendszer → egy-elektron közelítés →
egy-elektron állapotok →
egy-elektron Hamilton operátor

$$\hat{H}_i \equiv -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_i + \sum_{j=1}^{N} V_c(\vec{r}_i, \vec{R}_j) + \sum_{j\neq i}^{N} U_j(\vec{r}_i) \qquad (i = 1,2,3,\ldots,N)$$

az ionтörzsek hatása — a többi elektron hatása

$V(\vec{r}_i)$ modell potenciál (minden elektronra ugyanaz) → potenciál doboz (SOMMERFELD)

Csak egy egyenlet van:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\vec{r})\right]\psi = \varepsilon\psi \qquad (+\text{PAULI elv})$$

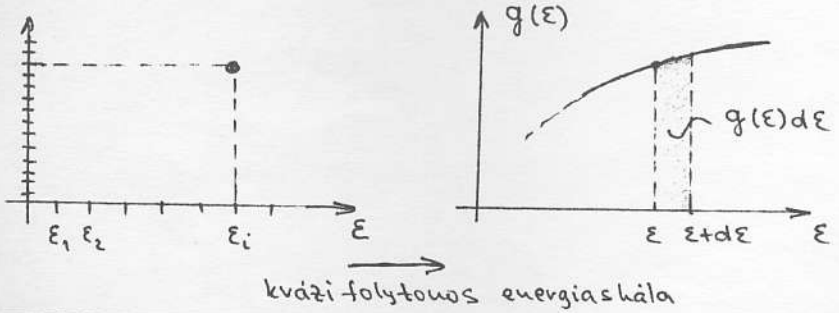
A már megismert megoldások:

$$\psi_{n_x,n_y,n_z} = \sqrt{\frac{8}{L^3}}\sin\frac{n_x\pi x}{L}\cdot\sin\frac{n_y\pi y}{L}\cdot\sin\frac{n_z\pi z}{L}$$

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

$$(n_x, n_y, n_z) = 1,2,3,4,\ldots$$

(degeneráció) d_i



kvázifolytonos energiaskála

2. SZILÁRDTESTFIZIKA

2.1. A fémek szabadelektron elmélete

A fémek jól vezetik az elektromos áramot. Tehát az elektromos áramot alkotó elektronok viszonylag „könnyedén" tudnak mozogni a fém belsejében. A fémes kötés ugyanis úgy alakul ki, hogy a fématomok egyesülésekor a vegyérték elektronok „közössé válnak". Ez azt jelenti, hogy nincsenek a fémet alkotó atomokhoz kötve, hanem azokról mintegy „leszakadva" a fém teljes makroszkópikus térfogatában mozoghatnak. Első közelítésként azt mondjuk, hogy a fém elektronjai ún. „szabadelektron gázt" alkotnak.

Az elkövetkezőkben a nagyszámú, N>>1, elektront tartalmazó szabadelektron gáz kvantummechanikai tárgyalásával foglalkozunk. Ezt a modellt pár évvel a Schrödinger egyenlet felfedezése (1926) után Sommerfeld már kidolgozta (1928). Egyszerű volta ellenére választ tudott adni egy-két olyan mérési tapasztalatra (kontakt potenciál, fémek fajhője, stb…), amelyek magyarázatánál a klasszikus fizika csődöt mondott.

2.1.1. A Sommerfeld fémmodell

A fém vezetési elektronjai a fémrácsot alkotó iontörzsek terében mozognak, ugyanakkor egymással is kölcsönhatásban vannak. Ezt az igen bonyolultnak tűnő kvantummechanikai problémát alkalmas modellválasztással, egyszerűen meg lehet oldani.

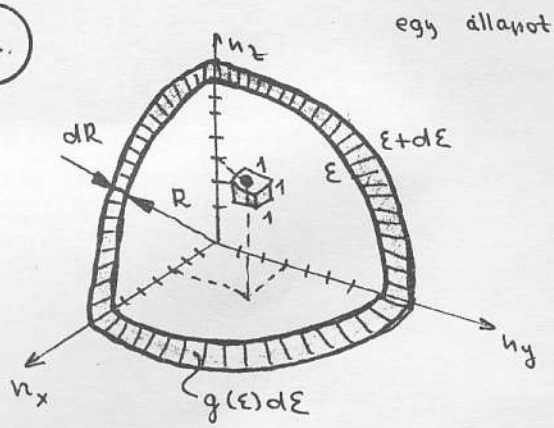
Mint azt már tanultuk, sokelektronos rendszerek esetén mindig egyelektron közelítést alkalmazunk. Az egyelektron állapotokat meghatározó Schrödinger egyenletben figyelembe kell vennünk az elektronok közötti kölcsönhatást is. Jelen esetbe ennek a legegyszerűbb módja a következő. Bármelyik fémelektron egyrészt az iontörzsekkel, másrészt a többi elektronnal van kölcsönhatásban. Vegyünk egyszerűségképpen egy egy-vegyértékű fémet! Ekkor az iontörzsek száma megegyezik a fémes kötést létrehozó elektronok számával. Tehát bármelyik elektront tekintve a pozitív töltésű iontörzsek és a többi, negatív töltésű elektron száma gyakorlatilag megegyezik ($N \approx N-1,\ N >> 1$), ezért semlegesítik egymást. Tehát az elektron szabadon mozoghat az egész fém belsejében. Ugyanakkor tapasztalati tény, hogy normál körülmények között az elektron nem lép ki a fémből Ezt úgy fogjuk modellezni, hogy az elektront egy potenciáldobozba tesszük. A doboz mérete a fém makroszkopikus méretével egyezik meg és az egyszerűség végett kocka alakú. (2.füzet, 75.oldal.)

Az egyelektron pályaállapotokat tehát egy dobozba zárt elektron Schrödinger egyenlete határozza meg. A kvantummechanikai tanulmányaink során ezt az egyenletet már megoldottuk (1.füzet, 19-20.oldal). Eszerint egy pályaállapot három kvantumszámmal az $\{n_x, n_y, n_z\}$-vel jellemezhető. Az energiaszinteket pedig e három kvantumszám négyzetösszege határozza meg. A pályaállapotok degeneráltak.

Ezeket a pályaállapotokat kell, a Pauli-elv szerint, az N számú elektronnal betölteni. Mivel az N nagyon nagy (Avogadro számnyi!) ezért a betöltött állapotok majd mindegyike relatíve magas energiaszintekhez fog tartozni. Ez azt jelenti, hogy az ε_i kvantált energiaszintek relatív távolsága igen kicsi lesz. (1.füzet, 18.oldal.) Azaz folytonos energiaskálára térhetünk át. Ekkor a „d_i" degeneráció helyett bevezetjük az $g(\varepsilon)$ állapotsűrűség fogalmát. (2. Füzet, 80.oldal.) Eszerint a $g(\varepsilon)d\varepsilon$ azon állapotok számát jelenti, amelyek energiája az $(\varepsilon, \varepsilon + d\varepsilon)$ tartományba esik. A Pauli elv szerint minden pályaállapothoz két spin-állapot is tartozik.
Tehát a teljes (spinpálya) $g(\varepsilon)$ állapotsűrűség az $N(\varepsilon)$ pályaállapot sűrűség kétszerese lesz.

2.

egy állapot → (n_x, n_y, n_z) (pálya állapot!)



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

$$n_x^2+n_y^2+n_z^2 = \underbrace{\frac{2m}{\hbar^2\pi^2}L^2\cdot\varepsilon}_{\equiv R^2}$$

$$\mathcal{N}(\varepsilon)d\varepsilon = \frac{1}{8}4\pi R^2 dR$$

$$\left.\begin{aligned} R &= \text{áll}\cdot L\cdot\sqrt{\varepsilon} \\ dR &= \text{áll}\,\frac{L}{\sqrt{\varepsilon}}\,d\varepsilon \end{aligned}\right\} \rightarrow R^2 dR = \text{áll}\cdot L^3\cdot\sqrt{\varepsilon}\,d\varepsilon$$

$$\mathcal{N}(\varepsilon)d\varepsilon = A\cdot L^3\cdot\sqrt{\varepsilon}\,d\varepsilon$$

pálya állapot sűrűség $\boxed{\mathcal{N}(\varepsilon) = AL^3\cdot\sqrt{\varepsilon}}$

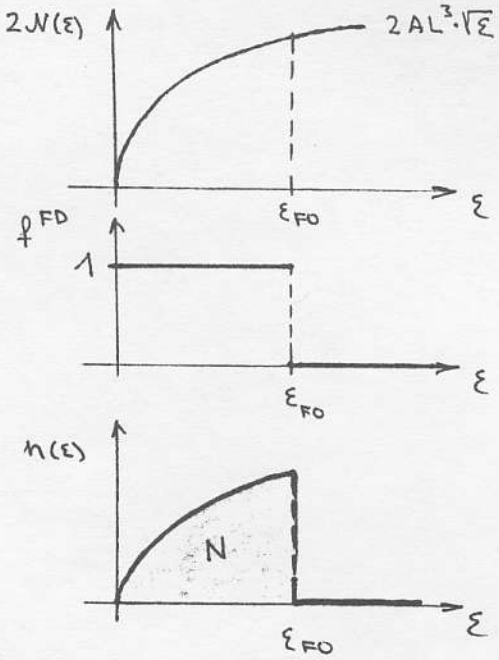
d_i → spin-pálya állapot sűrűség $\boxed{g(\varepsilon) = 2\cdot\mathcal{N}(\varepsilon)}$

Az állapotok betöltése : FERMI-DIRAC statisztika

$$f^{FD} = \frac{1}{e^{\frac{\varepsilon-\varepsilon_F}{kT}}+1}$$

$\varepsilon_F(T)$ meghatározható (N = állandó feltételből)

Az elektrongáz alapállapotban van ha $T=0$.



$$N = \int_0^\infty n(\varepsilon)d\varepsilon = \int_0^\infty 2\mathcal{N}(\varepsilon)f^{FD}(\varepsilon,0)d\varepsilon =$$

$$= \int_0^{\varepsilon_{F0}} 2\mathcal{N}(\varepsilon)d\varepsilon = 2AL^3\underbrace{\int_0^{\varepsilon_{F0}}\sqrt{\varepsilon}\,d\varepsilon}_{\frac{2}{3}\varepsilon_{F0}^{\frac{3}{2}}}$$

$$N = \frac{4}{3}AL^3\,\varepsilon_{F0}^{\frac{3}{2}}$$

$$\boxed{\varepsilon_{F0} = \text{áll}\left(\frac{N}{L^3}\right)^{\frac{2}{3}}}$$

a fémben lévő (vezetési) szabad elektronok sűrűsége.

Határozzuk meg az $N(\varepsilon)$ pályaállapot sűrűséget! Minden pályaállapotot három kvantumszám az (n_x, n_y, n_z) határoz meg. Ezért az $\{n_x, n_y, n_z\}$ koordinátarendszerben egy pont egy pályaállapotot fog reprezentálni. A kvantumszámok értéke csak pozitív egész szám lehet. Egy adott állapothoz tartozó energiaszint értéke $\varepsilon_i = E_0\left(n_x^2 + n_y^2 + n_z^2\right)$.

Tekintsük azokat az állapotokat, amelyek energiája az $(\varepsilon, \varepsilon + d\varepsilon)$ tartományba esik! Ezen állapotokat reprezentáló pontok az $\{n_x, n_y, n_z\}$ koordinátarendszerben egy gömbhéj nyolcadban vannak. Mivel az n_i kvantumszámok csak pozitív egész számokat vehetnek fel, ezért minden egyes egységnyi térfogatban csak egy reprezentáns pont van. Ezért az $(\varepsilon, \varepsilon + d\varepsilon)$ tartományban lévő állapotok száma megegyezik az említett gömbhéj-nyolcad térfogatával. Így meghatározható a pályaállapot sűrűség, amelyre az adódik, hogy $N(\varepsilon) \propto \sqrt{\varepsilon}$.

Az állapotok betöltését az $f^{FD}(\varepsilon, T)$ Fermi-Dirac eloszlásfüggvény határozza meg. Bevezetjük az elektronok energia szerinti eloszlását megadó $n(\varepsilon)$ függvényt. Eszerint az $n(\varepsilon)d\varepsilon$ megadja azon elektronok számát, amelyeknek az energiája az $(\varepsilon, \varepsilon + d\varepsilon)$ tartományban van.

Az alapállapoti (nulla Kelvin hőmérsékletű) elektrongázban az ε_{F0} Fermi-energia szint alatt minden állapot be van töltve fölötte pedig minden állapot üres. A betöltött állapotok száma tehát éppen N kell, hogy legyen. Ez a feltétel a Fermi szintet egyértelműen meghatározza. Eredményül az adódik, hogy az ε_{F0} értéke az illető fém térfogati elektronsűrűségétől függ.

3

Az elektronok átlagos energiája:

$$\langle \varepsilon \rangle = \frac{E}{N} = \frac{1}{N}\int_0^{\infty} \varepsilon\, n(\varepsilon)\, d\varepsilon = \frac{1}{N}\int_0^{\varepsilon_{F0}} 2\,\varepsilon\, N(\varepsilon)\, d\varepsilon = \frac{2AL^3}{N}\underbrace{\int_0^{\varepsilon_{F0}} \varepsilon\sqrt{\varepsilon}\, d\varepsilon}_{\frac{2}{5}\,\varepsilon_{F0}^{\frac{5}{2}}}$$

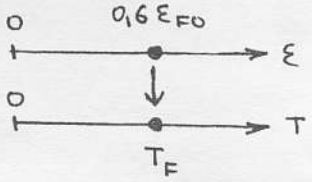
$$\langle \varepsilon \rangle = \frac{4}{5}\,\frac{A\cdot L^3}{N}\,\varepsilon_{F0}^{\frac{5}{2}} = \frac{3}{5}\,\varepsilon_{F0}$$

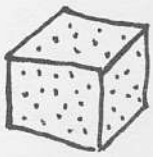
$$\uparrow \quad N = \frac{4}{3}\,AL^3\,\varepsilon_{F0}^{\frac{3}{2}}$$

$$\boxed{\langle \varepsilon \rangle = 0{,}6\ \varepsilon_{F0}}$$

Az alapállapotban lévő (0 Kelvin fokos) elektrongáz átlagos energiája.

Nagyságrendi becsléseknél hasznos fogalom : A FERMI hőmérséklet

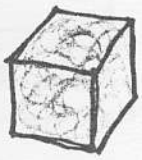




$T = T_F$

ideális gáz

$\langle \varepsilon \rangle_g = \frac{3}{2}\,kT_F$

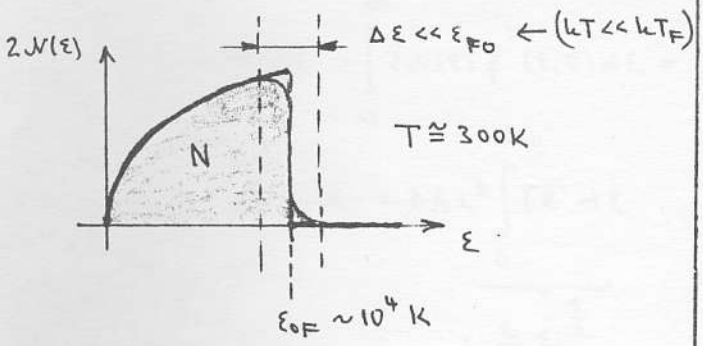


$T = \phi\ K$

elektron gáz

$\langle \varepsilon \rangle_e = 0{,}6\ \varepsilon_{0F}$

$\langle \varepsilon \rangle_g = \langle \varepsilon \rangle_e \rightarrow \boxed{T_F \approx 10^4\ K}$



↓

egzakt levezetés

Érdemes megvizsgálni azt, hogy az imént kapott ε_{F0} érték a "hétköznapi" energiákhoz képest mekkora? Az összehasonlítást azonban nem az energia skálán, hanem a nála sokkal szemléletesebb hőmérséklet skálán fogjuk elvégezni. Erre szolgál a T_F az ún. „Fermi hőmérséklet" fogalma. Ismeretes, hogy a klasszikus ideális gáz átlagenergiája, az ekvipartíció törvénye szerint, a gáz hőmérsékletével arányos.

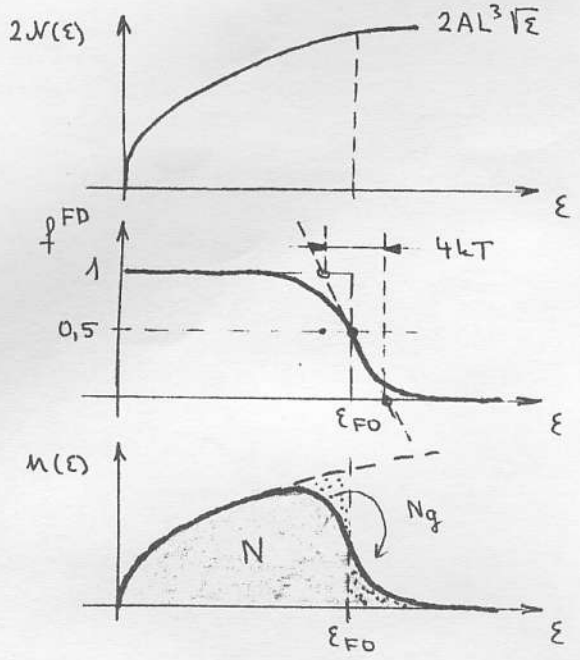
A T_F Fermi hőmérsékleten értjük **annak az ideális gáznak a hőmérsékletét, amelynek az átlagenergiája megegyezik a nulla Kelvin fokos elektrongáz átlagenergiájával**.

A fémek esetén a T_F kb. 10 000 Kelvinnek adódik. (Összehasonlításul, a napkorona hőmérséklete kb. 6000 Kelvin). Tehát a Pauli elvből adódó Fermi energia a klasszikus fizikai energiaskálán meglehetősen nagy érték. Ez azt is jelenti, hogy ha a fém hőmérséklete (pár száz fokkal) megemelkedik, akkor a vezetési elektronjainak az átlagenergiája relatíve alig változik. Tehát a szobahőmérsékletű fém vezetési elektronjait nulla Kelvin fokos elektrongáznak lehet tekinteni. (Ugyanis a 300 Kelvin sokkal kisebb mint a 10 000 Kelvin!)

2.1.2. A szabad-elektron modell alkalmazásai

2.1.2.1. A szabad elektrongáz fajhője

Elektrongáz $T > \phi$ K hőmérsékleten.



$$\varepsilon_F(T) = \varepsilon_{F0}\left[1 - \underbrace{\frac{\pi^2}{15}\left(\frac{T}{T_F}\right)^2}_{\ll 1}\right] + \dots$$

$$\downarrow$$

$$\varepsilon_F(T) \approx \varepsilon_{F0}$$

$$\left[\frac{d}{d\varepsilon} f^{FD}\right]_{\varepsilon_F} = \left[\frac{-1}{\left(e^{\frac{\varepsilon-\varepsilon_F}{kT}}+1\right)^2} \cdot e^{\frac{\varepsilon-\varepsilon_F}{kT}} \cdot \frac{1}{kT}\right]_{\varepsilon_F} = -\frac{1}{4kT}$$

$$N_g \approx N\,\frac{2kT}{\varepsilon_{F0}} \longrightarrow \boxed{N_g \approx N\,\frac{T}{T_F}}$$

a gerjesztődött elektronok száma T hőmérsékleten.

Az elektrongáz energiája T hőmérsékleten tehát

$$\boxed{E \cong E_0 + N_g \cdot kT}$$

Az elektrongáz fajhője (moláris hőkapacitás)

$$C_{ve} = \left[\frac{dE}{dT}\right]_V \qquad \text{ahol} \quad E \cong E_0 + \underbrace{Nk}_{R}\,\frac{T^2}{T_F}$$

$$C_{ve} \cong 2R\,\frac{T}{T_F} \ll R$$

Tehát szilárd testek fajhőjének számításakor $T \approx 300$ K -on

$$C_V = \underbrace{C_{Vi}}_{\text{iontörzsek rezgéséből adódó}} + C_{ve} \cong 3R + \underbrace{C_{ve}}_{\ll R} \approx 3R$$

DULONG-PETIT törvény

2.1.2. A szabadelektron modell alkalmazásai

A Sommerfeld féle szabadelektron modell mai szilárdtestfizikai ismereteinkhez képest nagyon primitívnek tűnhet. Megszületése (1928) mégis rendkívül nagy jelentőségű volt. Először sikerült ugyanis segítségével olyan jelenségeket megmagyarázni, amelyekkel szemben a klasszikus fizika tehetetlennek bizonyult.

2.1.2.1. A szabad elektrongáz fajhője

Az elektronok $n(\varepsilon)$ energia szerinti eloszlását a $2N(\varepsilon)$ állapotsűrűség függvény és az $f^{FD}(\varepsilon,T)$ Fermi-Dirac eloszlásfüggvény szorzata adja meg. Az előzőekből következik, de a részletes számítás is azt bizonyítja, hogy a T hőmérsékletű szabad elektrongáz $\varepsilon_F(T)$ Fermi energiája a "hétköznapi" hőmérsékleti tartományban gyakorlatilag ε_{F0} értékűnek vehető. A Fermi Dirac eloszlásfüggvény nulla Kelvinen egy lépcsőfüggvény. A T hőmérsékleten ez kissé "lekerekedik". A változás azonban az ε_{F0} értéknek csak körülbelül a 4kT nagyságú környezetére korlátozódik. Ez fizikailag azt jelenti, hogy csak azok az elektronok kerülhetnek magasabb energiájú állapotba (azok gerjesztődnek), amelyeknek a kezdeti energiája a Fermi szint közelében volt. A T hőmérsékleten a gerjesztett elektronok N_g száma az N összelektron számnak csak a töredéke, közelítőleg a
T/T_F hányada. A T hőmérsékletű elektrongáz energiája tehát az alapállapoti energiától csak kevéssé (N_gkT - vel) tér el. Ez azt is jelenti, hogy fémekben az elektronok fajhője elhanyagolható az iontörzsek fajhőjéhez képest.
A Dulong-Petit törvénynek tehát ez a kvantummechanikai magyarázata.(II. füzet 87.oldal)

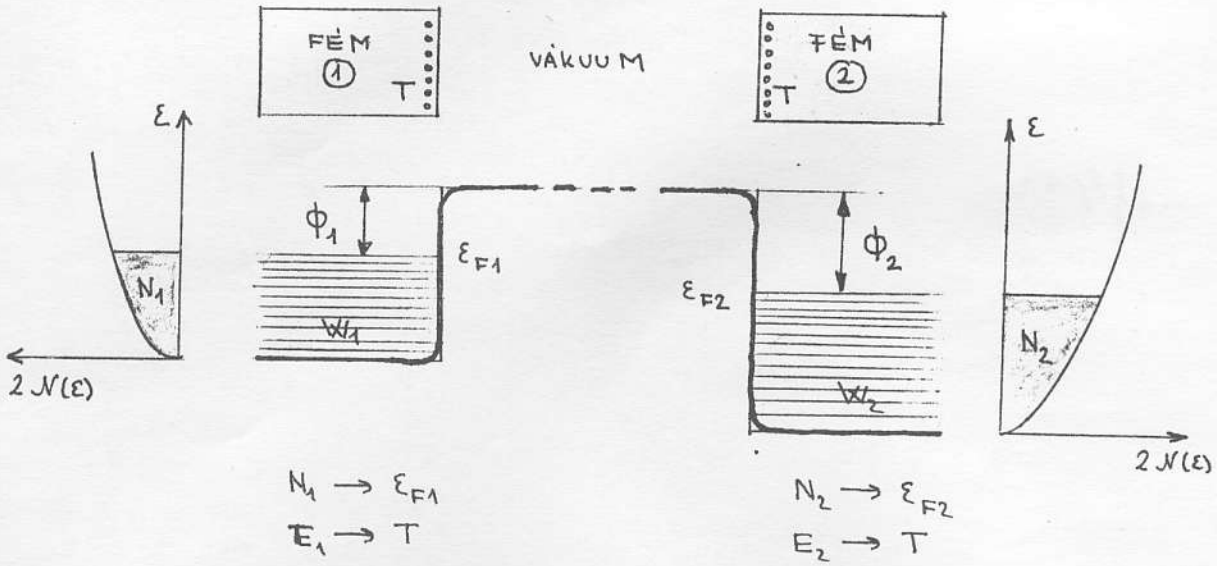
2.1.2.2. A kontakt potenciál

Két azonos hőmérsékletű, de különböző fém szoros összeillesztésekor a két fém között potenciálkülönbség (az ún. kontakt potenciál) lép fel.

A két fém kilépési munkája (I. füzet 5.oldal) legyen különböző: $\Phi_2 > \Phi_1$. Amíg a két fém egymástól távol van, addig két külön rendszerről beszélhetünk. Ha a fémeket "szorosan" összeillesztjük, akkor az atomi skálán a két fém elektronjait csak egy "keskeny" potenciálgát fogja elválasztani egymástól. Ezen a potenciálgáton keresztül, alagúteffektus révén a két elektrongáz kapcsolatba lép egymással. Azaz a két fém egyetlen kvantummechanikai rendszert alkot. A fémelektronokat nulla Kelvin fokos elektrongáznak lehet tekinteni. Kezdetben, az egyik fémben (abban, amelynek a kilépési munkája a kisebb) magasabb kinetikus energiájú elektronok is lesznek mint a másikban. Így ΔN számú, nagyobb energiájú elektron átmegy az egyik fémből a másikba. Ezért az egyik fémben elektron hiány a másikban elektron felesleg lép fel. Ennek hatására a két fém között egy (elektrosztatikus) potenciálkülönbség lép fel. Mivel a ΔN sokkal kisebb mint a fémelektronok teljes száma, ezért a még betöltött maximális energiaszintek (ε_{F1} és ε_{F2}, a független Fermi szintek) helyzete egy-egy fémen belül gyakorlatilag nem változik meg. A két fém között fellépő potenciálkülönbség hatására az eredeti Fermi szintek egymáshoz képest eltolódnak. Éppen annyi ΔN elektron fog átmenni az egyik fémből a másikba, hogy a két Fermi szint egyenlő legyen. Egy kvantummechanikai rendszerben ugyanis csak egyetlen Fermi szint van, amit a rendszerben lévő összes elektronok száma határoz meg.

A két fém között fellépő kontakt potenciál tehát $\Delta U = \frac{1}{e}(\Phi_2 - \Phi_1)$

2.1.2.2. A kontakt potenciál

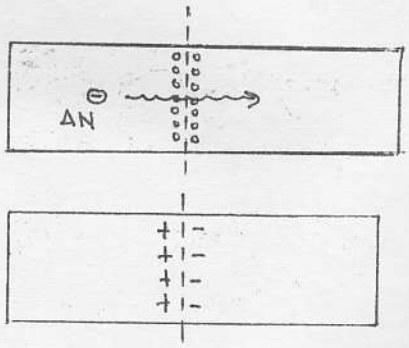


$N_1 \rightarrow \varepsilon_{F1}$
$E_1 \rightarrow T$

$N_2 \rightarrow \varepsilon_{F2}$
$E_2 \rightarrow T$

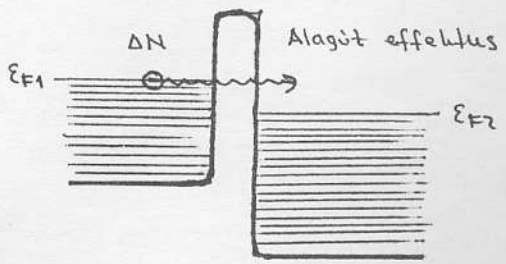
$W = W_1 \cdot W_2$

$W = max$



$E = E_1 + E_2 \rightarrow T$

$N = N_1 + N_2 \rightarrow \varepsilon_F$



Ha $\Delta N << N_1, N_2$

akkor

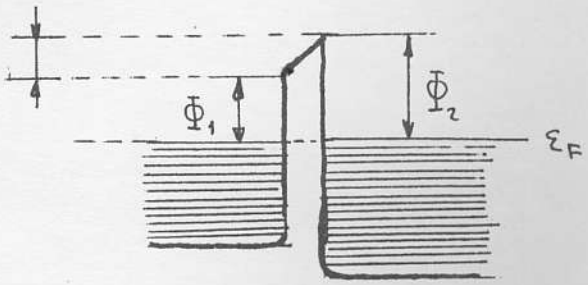
$\varepsilon_{F1}, \varepsilon_{F2}$ helyzete állandónak tekinthető (az adott fémhez képest)

↓

N = állandó

ε_F a RENDSZER FERMI szintje

$e\Delta U \equiv \Phi_2 - \Phi_1$



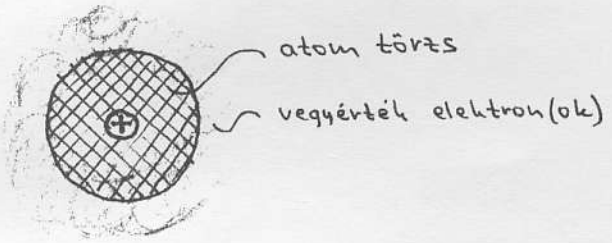
$\varepsilon_{F1} = \varepsilon_{F2} = \varepsilon_F$

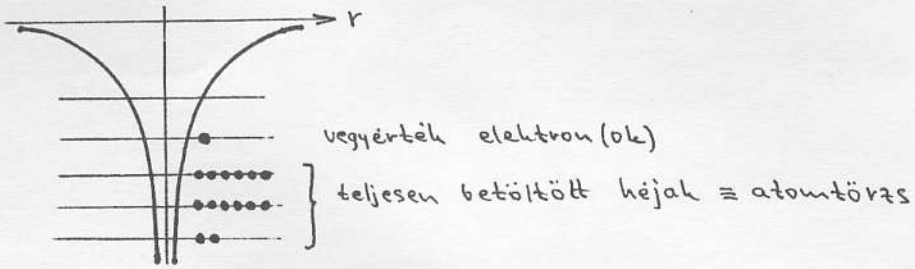
A Fermi szintek kiegyenlítődnek!

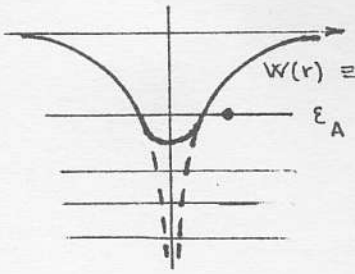
$W = max$

2.2. Szilárdtestek energiasáv elmélete

2.2.1. A periódikus potenciálú tér egy-dimenziós modellje

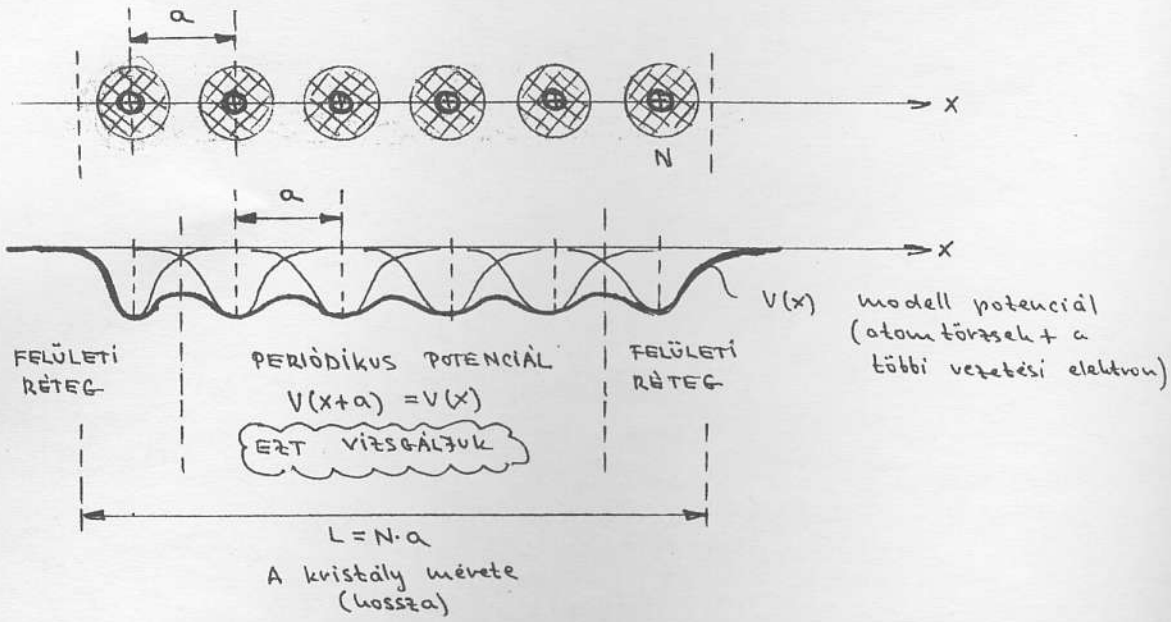






$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + \left[V_c(r) + \sum_i u_i(r)\right]\right\}\chi = \varepsilon_A \chi$$

$V_c(r)$: az atommag hatása; $\sum_i u_i(r)$: a törzselektronok hatása; együtt: $W(r)$ modell potenciál



2.2. Szilárd testek energiasáv elmélete

A fémek szabadelektron modellje túl egyszerű ahhoz, hogy a szilárd testek elektromos tulajdonságait részleteiben is leírja. Láttuk, hogy a fémelektronok dinamikai viselkedése csak az ε_F Fermi-szint környezetében számít. Szabadelektron gázról lévén szó könnyen meghatározható a Fermi szinthez tartozó elektronállapotok k_F Fermi-hullámszáma és így a λ_F Fermi-hullámhossz is. Ez utóbbira az adódik, hogy gyakorlatilag az atomi rácstávolsággal egyezik meg. Ugyanakkor ismeretes az is, hogy a fémek fizikai tulajdonságait éppen a Fermi-szint közelében lévő elektronok dinamikai tulajdonságai határozzák meg. Ez pedig azt jelenti, hogy pont ezen elektronok szempontjából nem hanyagolható el az atomi rácsszerkezet jelenléte. Ezért tehát a szabadelektron modellünket tovább kell fejleszteni. Ennek egyik lehetséges módja az, hogy valami módon figyelembe vesszük azt is, hogy a szilárd test atomjai szabályosan (kristályrácsot alkotva) helyezkednek el térben.

Ennek a szabályos rendnek az elektronokra gyakorolt hatása már egydimenziós modellben is megnyilvánul. Minden, e jelenségkörrel kapcsolatos fogalom már itt is megjelenik. Nagy előnye ugyanakkor az, hogy matematikailag könnyen kezelhető és így a modell viszonylag egyszerűen végigszámolható. Ezért a tárgyalásunkat ezzel a modellel kezdjük. Az alapfogalmak tisztázása után térünk át a reálisabb (háromdimenziós) modellekre.

2.2.1. A periodikus potenciálú tér egydimenziós modellje

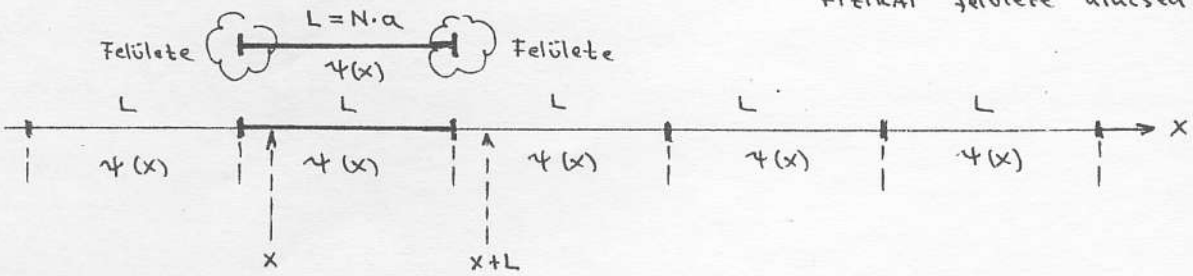
Egy szabad atom (a kémiai tulajdonságait tekintve) atommagból, törzselektronokból és vegyérték elektronokból áll. Mint láttuk, törzselektronoknak a teljesen betöltött (zárt) (al)héjakon lévő elektronokat nevezzük. A atommag és a törzselektronok együtt alkotják az iontörzset. Kémiai kölcsönhatások során (vegyüléskor) az iontörzsek nem változnak. A kémiai kötések létrejötte során csak a be nem töltött (al)héjakon lévő vegyérték elektronok állapota változik meg (mint azt láttuk, molekulapályákká alakulnak). Célszerű ezért az iontörzset egységesen kezelni, és a vegyérték elektronokra kifejtett hatását egy egyszerű modellpotenciállal leírni. Első közelítésben ez egy alkalmasan megválasztott potenciálgödörrel lehetséges.

Helyezzünk el az x tengely (mint egyenes) mentén „N-db”, nagyon nagy számú atomot, egymástól (atomnyi) "a" ún. rácstávolságra. Ezzel egy L=Na hosszúságú "egydimenziós kristályt" kaptunk. A vegyérték elektronfelhők átfedik egymást, azaz "kollektivizálódnak". Így a vegyérték elektronok az egész kristályhoz, nem pedig csak egy iontörzshöz fognak tartozni. Ezeket a kollektivizálódott, (volt) atomi vegyértékelektronokat kristályelektronoknak fogjuk nevezni. Az iontörzsek eredő potenciálja (a kristály belsejében) egy egydimenziós $V(x)$ periodikus potenciál lesz. Ez a térbeli periodicitás a kristály két végének a környezetében (a kristály "felületi" rétegében) elromlik.

Véges hosszúságú kristály (felülete van!)
$(L = Na)$

⇓ MODELLALKOTÁS

Véges hosszúságú periódikus potenciál : geometriai határa van
Fizikai felülete nincsen.



A végtelen hosszú kristály bármelyik L hosszúságú darabja modellezi az L hosszúságú reális kristályt.

— BORN-KÁRMÁN periódikus határfeltétele: $\boxed{\psi(x+L) = \psi(x)}$

— Periódikus potenciál (TRANSZLÁCIÓS SZIMMETRIA) hatása a $\psi(x)$ hullámfüggvényre :

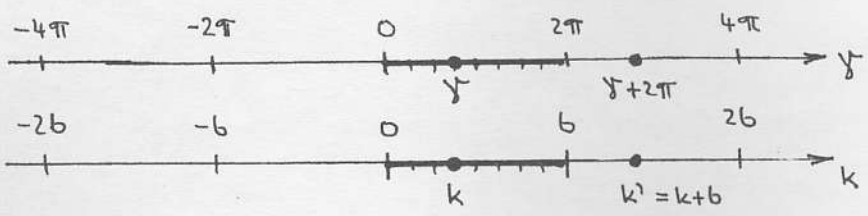
$$V(x+a) = V(x) \quad \rightarrow \quad \underbrace{|\psi(x+a)|^2 = |\psi(x)|^2}$$

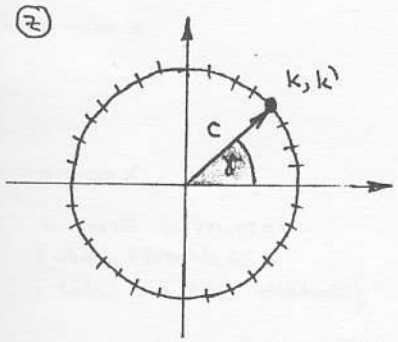
$$\boxed{\psi(x+a) = c \cdot \psi(x)} \qquad |c| = 1$$

A "c" állandó meghatározható :

$$\psi(x+L) = \psi(x + N\cdot a) = \underbrace{c^N} \cdot \psi(x) = \psi(x)$$

$$c^N = 1 \quad \rightarrow \quad c = \sqrt[N]{1} \quad \rightarrow \quad \boxed{c = e^{j\frac{2\pi}{N}n} \qquad n = 1,2,3,4,\ldots N}$$





$$\gamma \equiv \frac{2\pi}{N}n = \underbrace{\frac{2\pi}{N\cdot a}}_{k} n \cdot a \equiv ka \quad \rightarrow \quad \gamma + 2\pi = ka + 2\pi = a\underbrace{\left(k + \frac{2\pi}{a}\right)}_{k'} \equiv a\cdot k'$$

$$k \equiv \underbrace{\frac{2\pi}{a}}_{\equiv b}\frac{n}{N} = b\frac{n}{N}$$

$$\downarrow$$

$$(k' = k + b)$$

A felületi réteg mérete elhanyagolható a kristály teljes térfogatához képest. Így az elektron kristálybeli tulajdonságait elsősorban a periodikus potenciálú tartomány fogja meghatározni. Ezért egy olyan modellt fogunk kidolgozni, amelyik a kristály felületének a hatásait elhanyagolja. Tehát egy véges méretű (geometriai felülettel bíró), de fizikai felülettel nem rendelkező kristálymodellt kell konstruálnunk. Ennek módja igen egyszerű. Rakjunk szorosan egymás mellé az x tengely mentén végtelen sok *„L=Na”* hosszúságú kristályt. Ennek a végtelen atomsornak bármelyik *L* hosszúságú szakasza fogja modellezni a vizsgálandó egydimenziós kristályunkat. Ezzel elértük azt, hogy a felület közelében ugyanazok a fizikai viszonyok uralkodjanak, mint a kristály belsejében. A kristályelektronok $\psi(x)$ állapotfüggvényének minden *L* hosszú szakaszra ugyanannak kell lennie, hiszen minden *L* hosszú szakasz ugyanazt a kristálymodellt valósítja meg. Azaz teljesülnie kell a $\psi(x+L)=\psi(x)$ ún. Born-Kármán féle periodikus határfeltételnek .

A következőkben olyan általános eredményekre foguk jutni, amelyek függetlenek a kristályrács egyedi fizikai tulajdonságaitól, például attól, hogy konkrétan milyen atomokból áll a kristály. Pusztán a kristályrács geometriai tulajdonságainak az ismerete alapján nagyon alapvető és jellegzetes fizikai következtetésekre juthatunk. Az egyik ilyen fontos tulajdonság éppen (a félvezetők elektronikájában alapvetően fontos) ún. "energiasávok" létezése lesz.

A kristályban fellépő $V(x+a)=V(x)$ atomi periodicitásnak az a következménye, hogy minden iontörzs környezetében ugyanolyan fizikai viszonyok uralkodnak. Mindezt másképpen úgy szoktuk mondani, hogy a kristály "transzlációs" szimmetriával rendelkezik. (transzláció=átvitel) Hiszen a kristályt egy "a" atomi rácstávolsággal eltolva az önmagába megy át, azaz fizikailag semmiféle változás nem következik be. Mindezekből az következik, hogy egy kristályelektron minden iontörzs környezetében ugyanolyan valószínűséggel lesz jelen. Azaz a kristályelektronokhoz rendelt (valószínűségi) elektronfelhő is periodikus lesz, tehát $|\psi(x+a)|^2=|\psi(x)|^2$. Magára a hullámfüggvényre nézve ebből csak az következik, hogy $\psi(x+a)=c\psi(x)$, ahol $|c|=1$. Azaz egy „*a*” rácstávolsággal arrébb menve a hullámfüggvény egy egységnyi abszolút értékű komplex számmal (c) szorzódik. Így „*L=Na*”val arrébb menve a hullámfüggvény c^N-el fog szorzódni. De a $\psi(x+L)=\psi(x)$ periodikus határfeltétel miatt ennek éppen egynek kell lennie. Mint az a matematikai tanulmányainkból ismeretes, a c^N=1 egyenletnek *N* darab komplex megoldása van, amelyek a komplex síkon egy egységsugarú körön helyezkednek el. Ezen komplex számok jellemzésére a γ Euler szög helyett a $\gamma=ka$ összefüggéssel definiált k mennyiséget fogjuk használni. A $c=e^{j\cdot\gamma}=e^{j\cdot ka}$ komplex egységvektorra vonatkozó periodicitás $\left(e^{j(\gamma+2\pi)}=e^{j\cdot\gamma}\right)$ tehát „*k*”-val is kifejezhető. Éppen „*N*” darab különböző „*k*” érték van.

Összefoglalva tehát:

$$\psi(x+a) = e^{jka} \cdot \psi(x) \qquad \text{(BLOCH tétel)}$$

$$k \equiv \frac{2\pi}{a}\frac{n}{N}$$

$$n = 1,2,3,\ldots,N$$

$$a \cdot b = 2\pi \rightarrow b \equiv \frac{2\pi}{a}$$ (neve: reciprok rácspont)

Elektron állapotok → BLOCH tételt kielégítő állapotfüggvények →

↓

BLOCH állapot(ok)

$$\psi(x) = u(x) \cdot e^{jkx}$$

$$u(x+a) = u(x)$$

(amplitúdó modulált síkhullám)

Bizonyítás: $\psi(x+a) = u(x+a)\, e^{jk(x+a)} = \underbrace{u(x) \cdot e^{jkx}}_{\psi(x)} \cdot e^{jka}$

Az elektron állapotok meghatározása:

$$\hat{H}\psi = \varepsilon\psi \qquad (0 \le x \le L)$$

$V(x+a) = V(x)$ periódikus potenciál



$L = N \cdot a$

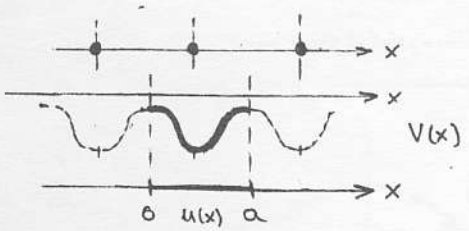
$N \sim 10^{23}$ (!)

$\psi(x)$ értékét több mint N helyen (!) kell kiszámítani.

EZ NEM MEGOLDHATÓ !

A BLOCH állapotok meghatározása:

$$\psi(x) = \underbrace{u(x)}_{?} \cdot e^{jkx} \qquad (0 \le x \le a)$$



$$\psi'' = (u'' + 2jku' - k^2u) \cdot e^{jkx}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi'' + V\cdot\psi = \varepsilon\psi \rightarrow \underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m}(u'' + 2jku' - k^2u)}_{\frac{1}{2m}(\hat{p}+\hbar k)^2 \cdot u} + V\cdot u = \varepsilon \cdot u$$

(Feladat: bizonyítsd)

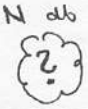
azaz

$$\left[\frac{(\hat{p}+\hbar k)^2}{2m} + V\right] u = \varepsilon u \qquad 0 \le x \le a$$

$$k = \frac{2\pi}{a}\frac{n}{N} \qquad n = 1,2,3,\ldots N$$

Csak $x \in [0,a]$ -ban kell megoldani

DE N db k esetén (!)



Az eddigi eredményeinket matematikailag tömören az ún. Bloch tételben fogalmazhatjuk meg:

$$\psi(x+a) = e^{j \cdot ka} \cdot \psi(x).$$

Tehát a kristály transzlációs szimmetriájának a következményeként a kristályelektronok állapotfüggvényeinek ki kell elégítenie a Bloch tételt. A Bloch tételt kielégítő függvények egy általános osztályát Bloch függvényeknek (illetve Bloch állapotoknak) nevezzük

$$\psi(x) = u(x) \cdot e^{j \cdot kx}, \text{ ahol } u(x+a) = u(x).$$

Láthatóan ezek olyan „*k*" hullámszámú síkhullámok, amelyek amplitúdója rács-periodikus függvény. Ezért röviden csak "amplitúdó-modulált síkhullámnak" hívjuk őket. A Bloch állapotfüggvények fizikailag igen szemléletesen tükrözik egyrészt a kristály nagyléptékű homogenitását (ezt jelenti a síkhullám rész) másrészt pedig az atomrács jelenlétét (ezt az amplitúdó modulációja fejezi ki).

A Bloch állapotok bevezetése matematikailag is igen nagy előnnyel jár. Ennek oka a következő. Próbáljuk meg a $\psi(x)$ állapotfüggvényt közvetlenül (numerikusan) kiszámolni a (*0,L*) teljes kristály tartományban. Azokat a $0 \le x_i \le L \quad \{x_i | i = 1,2,3,...,N_o\}$ pontokat, amelyekben a hullámfüggvényt ki akarjuk számolni "osztópontoknak" nevezzük. Ahhoz, hogy a számolás valóban tükrözze a *V(x)* potenciálmenetet, az osztópontok távolságának sokkal kisebbnek kell lennie, mint az „*a*" rácstávolság. Azaz az osztópontok „N_0" száma sokkal nagyobb kell, hogy legyen mint a rácsban lévő atomok száma. Avogadro számnyi rácsatom esetén a feladat megoldhatatlan.

Ha ugyanezt a feladatot a Bloch állapotok halmazán akarjuk megoldani, akkor csak az *u(x)* amplitúdó-függvényt kell meghatározni. Mivel azonban, az *u(x)* egy rács-periodikus függvény, ezért elegendő azt csak a *(0,a)* tartományban kiszámítani. Így a numerikus számításokhoz szükséges osztópontok száma (pl.) 100-1000-re csökken.

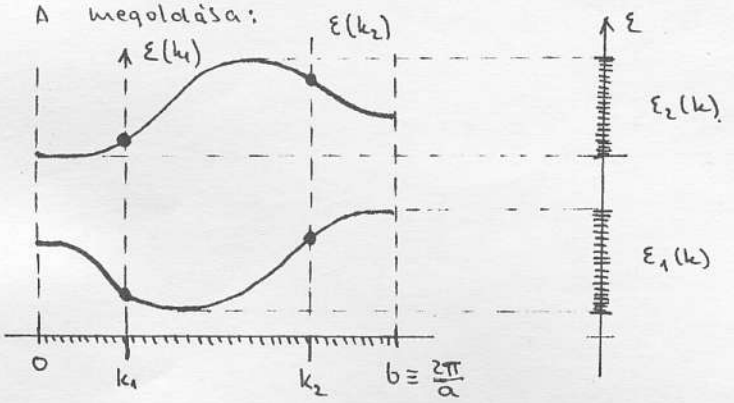
Ha a $\psi(x)$ állapotfüggvényre vonatkozó Schrödinger egyenletbe beírjuk a Bloch-féle alakot, akkor megkapjuk az *u(x)* amplitúdó-függvényre vonatkozó egyenletet. Az igaz ugyan, hogy ezt csak a (0,a) tartományban kell megoldani, de ezeket a megoldásokat minden egyes „*k"* értékre meg kell keresnünk. Ezek száma pedig éppen a rácsatomok számával egyezik meg. Látszólag tehát „nem nyertünk semmit"! Valójában azonban, mint az a következőkben ki fog derülni, a numerikus számításokat egyáltalán nem szükséges minden lehetséges „k"-értékre elvégezni. Éppen ebben rejlik a Bloch-állapotok bevezetésének az egyik nagy (praktikus) előnye.

Tehát adott egy energia – sajátérték probléma:

$$\hat{H}(k)\cdot u = \varepsilon \cdot u \qquad k = k_1, k_2, k_3, \ldots k_N \qquad \left(k_n \equiv \frac{2\pi}{a}\frac{n}{N}\right)$$

$$(0 \le x \le a)$$

A megoldása:



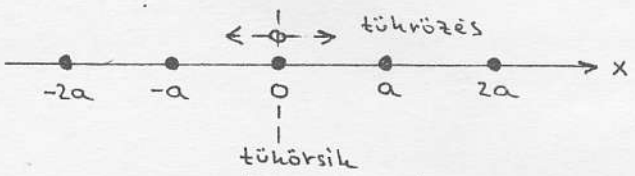
$\rightarrow \varepsilon_\nu(k)$

$\nu = 1,2,3,\ldots$ (sávindex)

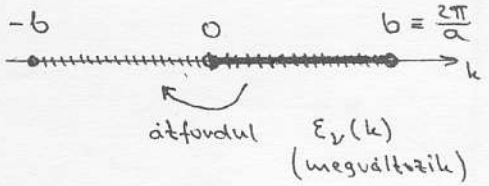
A kvantált energiaszintek jól elkülöníthető sávokban helyezkednek el. Minden sávban N db energiaszint van $(N \sim 10^{23} \gg 1)$.

↓ (kvázi) folytonos

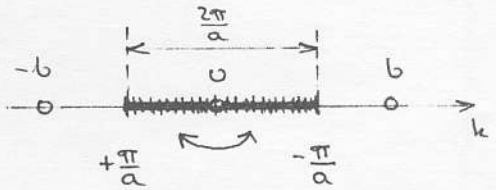
Az u.n. "TÜKRÖZÉSI" szimmetria következménye



A potrács önmagába transzformálódik azaz $V(x) \rightarrow V(x)$

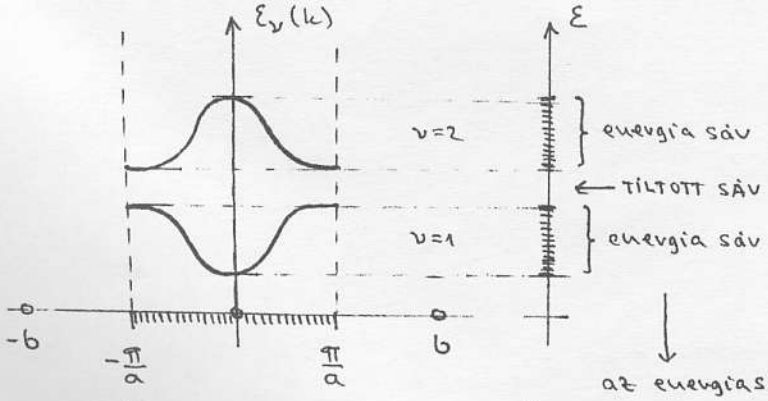


átfordul $\varepsilon_\nu(k)$ (megváltozik)



önmagába transzformálódik

$\varepsilon_\nu(k)$ nem változik



BRILLOUIN ZÓNA

↓

tulajdonsága:

- különböző Bloch állapotokat meghatározó k pontokat tartalmaz
- A potrács tükrözésekor nem változik (→ általánosítás 3 dim)

az energiasávok betöltése

(az energiasáv energiaszintjeihez tartozó elektron állapotok betöltése)

↓

PAULI elv → FERMI-DIRAC statisztika

Valójában minket az érdekel, hogy egy elektron mekkora energiával rendelkezhet a kristályban. Ezek az egyelektron energiaszintek az *u(x)* amplitúdó-függvényre vonatkozó egyenlet sajátértékei. Az egyenletben paraméterként szerepel a Bloch állapotok „*k*" hullámszáma is. Mint láttuk ez a $(0,2\pi/a)$ tartományban N különböző diszkrét értéket vehet fel. Mivel az N nagyon nagy szám így a keresett egyelektron energia a *k* hullámszámnak $\varepsilon(k)$ (kvázi)folytonos függvénye lesz. Ugyanekkor egy adott *k* érték esetén a sajátérték egyenletnek az $\varepsilon_\nu(k)$ megoldásai diszkrét $\nu = 1,2,3,\ldots$energiaszintek lesznek Ha az első ($\nu = 1$), a második ($\nu = 2$), a harmadik ($\nu = 3$), ..stb. energiaszintekhez tartozó energiákat a „*k*" paraméter függvényeként felrajzoljuk, akkor elegendően sima görbéket kapunk. Ez azt is jelenti, hogy egyáltalán nem szükséges minden egyes *k* értékre a számolásokat elvégezni. Már viszonylag kevés pontból a $\varepsilon_\nu(k)$ görbék megrajzolhatók. Ez pedig óriási számolástechnikai előny ! (8.oldal)

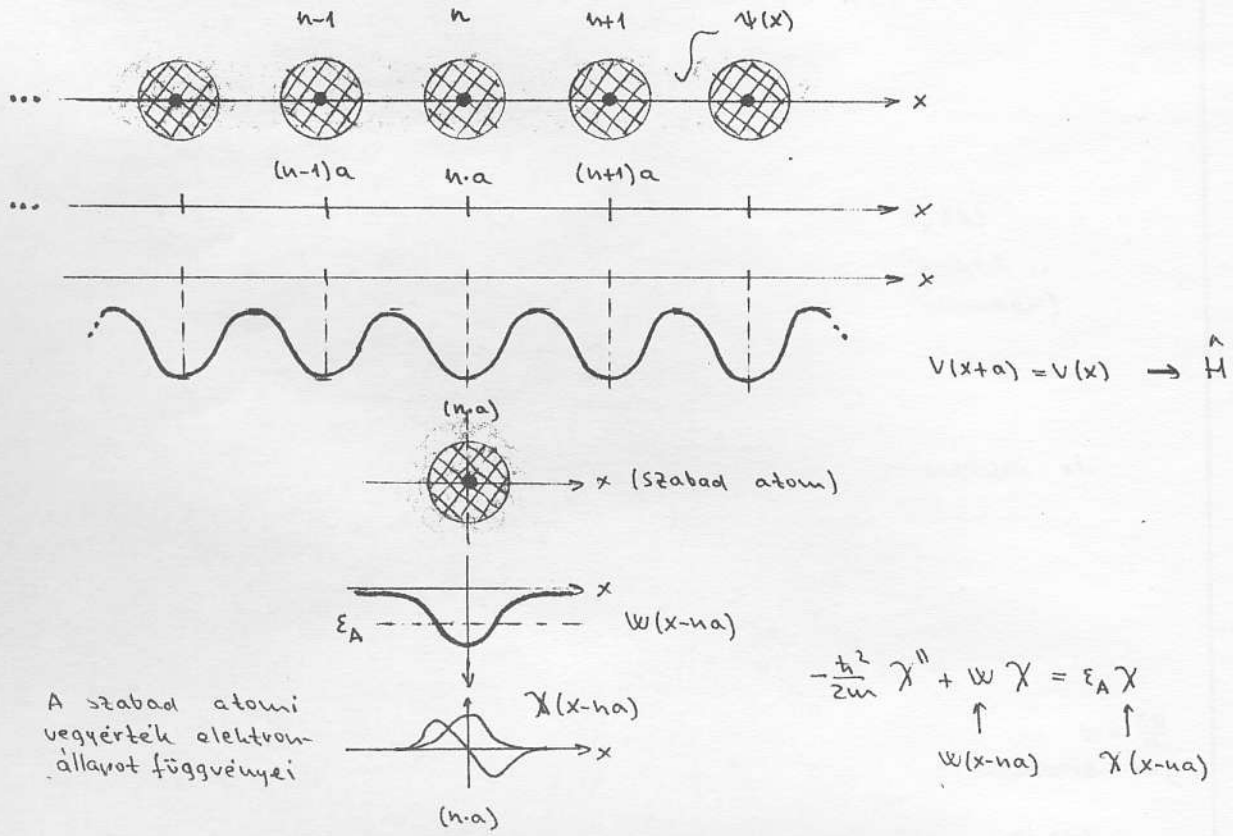
Megkaptuk tehát a kristályrácsban mozgó elektronok lehetséges energiáit. Azt tapasztaljuk, hogy az energiaskálán az energiaszintek egymástól jól elkülönülő csoportokba rendeződnek. Egy csoporton belül az azonos ν indexhez tartozó energiaszinteket találjuk. Ezeket hívjuk energiasávoknak. Egy ilyen energiasávon belül *N* számú (különböző *k* értékhez tartozó) energiaszint van. A ν indexet sávindexnek nevezzük. Az energiasávokat elválasztó tartományokat "tiltott sávoknak" hívjuk.

Mint azt láttuk (7.oldal), definíció szerint, a "*k*" az $\sqrt[N]{1}$ művelet eredményével van kapcsolatban. Azaz a "*k*" és a "*k+b*" (ahol $b = \frac{2\pi}{a}$) ugyanannak a komplex egységvektornak az Euler szögét határozza meg. Ezért a (*0,b*) azaz a $\left(0, \frac{2\pi}{a}\right)$ tartomány ugyanazokat a Bloch állapotokat meghatározó „*k*" paramétereket tartalmazza, mint a $\left(-\frac{\pi}{a}, +\frac{\pi}{a}\right)$ tartomány. Tehát az $\varepsilon_\nu(k)$ görbék ez utóbbi tartományban is felrajzolhatók. Ennek az ábrázolásnak az az előnye, hogy tükrözi a kristályrács egy másik szimmetria tulajdonságát is. A transzlációs szimmetrián kívül ugyanis a kristályrács rendelkezik egy ún. "pontszimmetriával" is. Ide tartozik minden olyan tükrözés vagy forgatás, amely a kristályrácsot önmagába viszi át, de a kristályrács egy pontját helyben hagyja. Egydimenziós kristály esetén egyetlen ilyen transzformáció létezik. Ez pedig egy (a „0" indexűnek nevezett) rácspontra való tükrözés. Ekkor az "*na*" rácspont a *"-na*" rácspontba megy át és viszont ($n = \pm 1, \pm 2, \pm 3, \ldots$). Ez azt is jelenti, hogy a $(-\pi/a, +\pi/a)$ tartomány a $(+\pi/a, -\pi/a)$ tartományba, azaz önmagába transzformálódik. Mivel a pont-transzformáció semmiféle fizikai változást nem jelent, ezért változatlannak kell maradnia az $\varepsilon_\nu(k)$ görbéknek is.

A $(-\pi/a, +\pi/a)$ tartományt Brillouin zónának hívjuk. Fontos tulajdonságai a következők:

- egyrészt csak különböző Bloch állapotokat meghatározó, N darab "k" pontot tartalmaz,
- másrészt a kristályrács tükrözésekor önmagába transzformálódik.

2.2.2. Az energiasávok és az atomi energiaszintek kapcsolata



A szabad atomi vegyérték elektron állapot függvényei

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\chi'' + W\chi = \varepsilon_A\chi$$

$W(x-na)$ $\quad$ $\chi(x-na)$

A N db atomból álló rendszerben a kötést létrehozó delokalizált elektronállapotokat kell meghatározni → egy elektron közelítés.

LCAO (Linear Combination of Atomic Orbitals) módszer.

Megoldandó : $\hat{H}\psi = \varepsilon\psi$

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

közelítő megoldás (LCAO) $\psi \approx \tilde{\psi} \equiv A\sum_n e^{jkna}\,\chi(x-na)$.

$\tilde{\psi}$ BLOCH állapot kell, hogy legyen; azaz

$$\tilde{\psi} = A\sum_n e^{jkna}\,\chi(x-na) = A\cdot e^{jkx}\cdot\underbrace{\sum_n e^{-jk(x-na)}\,\chi(x-na)}_{\equiv u(x)}$$

↓

BLOCH állapot, ha $u(x+a) = u(x)$

2.2.2. Az energiasávok és az atomi energiaszintek kapcsolata

Az energiasávok létezése kétségtelenül a szilárd testek egyik érdekes és a makroszkopikus viselkedésük szempontjából fontos tulajdonsága. Meg szeretnénk mutatni, hogy ez azonban korántsem olyan meglepő! Ugyanis igen szoros kapcsolat van az atomi energiaszintek és a kristályokban fellépő energiasávok között. Nevezetesen, a sávszerkezet gyökereit a szabad atomok kvantált energiaszintjeiben kell keresnünk.

A kovalens kémiai kötés egydimenziós modelljénél láttuk (II. füzet 88.oldal), hogy ha két atomot közel viszünk egymáshoz, akkor az atomi energiaszintek két, egymáshoz közeli szintre hasadnak fel. Kézenfekvő a feltételezés, hogy ha 3,4,.... vagy N darab azonos atomot közelítünk (pl. egy egyenes mentén) egymáshoz, akkor az atomi energiaszintek 3,4,... illetve N közeli szintre hasadnak fel. Megmutatjuk, hogy a sejtésünk igaznak bizonyul. Az ötlet megvalósítható és az egydimenziós modell viszonylag egyszerűen végigszámolható.

Az egydimenziós $V(x+a)=V(x)$ periodikus potenciál a szabad atomok vegyérték elektronjainak $W(x)$ modellpotenciáljából épül fel. A rácspontokba helyezett iontörzsek által létrehozott eredő potenciál a szabad atomi $W(x+na),(n=0,1,2,...,N-1)$ potenciálok összege lesz. Ebből a kristályelektronok $\hat{H}$ Hamilton operátora definíció szerint felírható.

Az energiára vonatkozó $\hat{H}\psi=\varepsilon\psi$ sajátérték egyenletet most nem oldjuk meg. Helyette a kristályban lévő kristályelektronok delokalizált (az égész kristályra kiterjedő) $\psi(x)$ állapotait egy $\tilde{\psi}(x)$ állapotfüggvénnyel közelítjük. Ezt a közelítő függvényt a rácspontokban lévő atomok $\chi(x-na)$ szabad atomi állapotfüggvényeiből építjük fel. Az ötlet a kovalens kötés molekulapályáinak az atompályákból való előállításánál tanultakból adódik (II. füzet 90.oldal) és a kvantumkémiában LCAO módszernek hívják. (Linear Combination of Atomic Orbitals = Atompályák lineáris kombinációja)

Az egzakt $\psi(x)$ egyelektron állapotfüggvényt tehát a $\tilde{\psi}(x)$ LCAO függvénnyel közelítjük.

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

Az $\chi(x-na)$ atompályák együtthatóit úgy kell megválasztanunk, hogy a $\tilde{\psi}(x)$ az előzőkben tanultak értelmében teljesítse a Bloch tételt, azaz egy normált Bloch állapot legyen.

Bizonyítás:

$$u(x+a) = \sum_n e^{-jk([x+a]-na)} \chi([x+a]-na) =$$

$$= \sum_{\downarrow [n-1]} e^{-jk(x-[n-1]a)} \chi(x-[n-1]a) = u(x)$$

A normálási feltétel (1. 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:

$\hat{H}\psi = \varepsilon\psi \longrightarrow \varepsilon = \langle \psi | \hat{H} \psi \rangle$ (ψ-t kellene tudni)

közelítő megoldás $\varepsilon \approx \langle \tilde{\psi} | \hat{H} \tilde{\psi} \rangle$ (IV. axióma)

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

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

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

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

Tehát:

$$\varepsilon \approx \langle \tilde{\psi} | \hat{H} \tilde{\psi} \rangle = \varepsilon_A \underbrace{\langle \tilde{\psi} | \tilde{\psi} \rangle}_{1} + |A|^2 \sum_{n'} \sum_n e^{jk(n-n')a} \underbrace{\langle \chi(x-n'a) | V_n(x) | \chi(x-na) \rangle}_{\text{ez a skalár szorzat csak } (n-n')\text{-től függ.}}$$

$\downarrow$

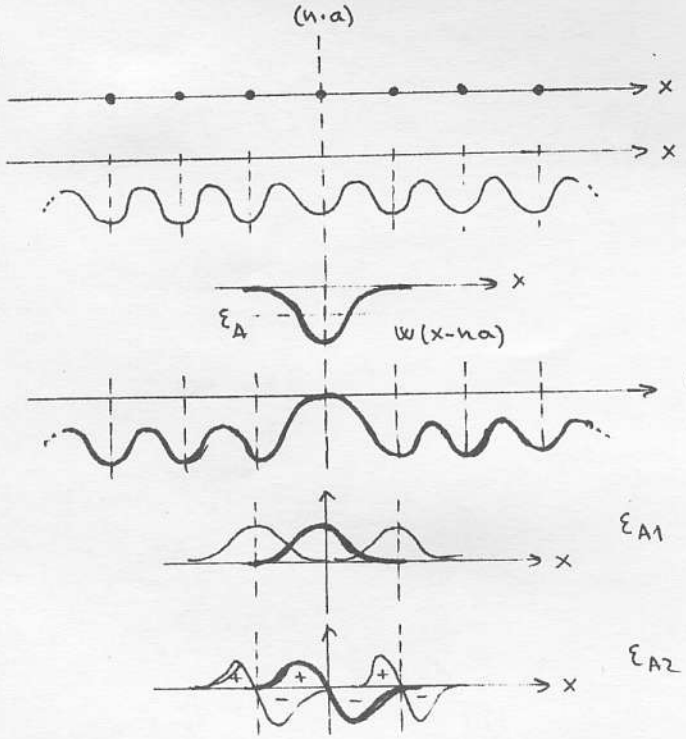
egyszerűsítő feltételezések

A teljes kristálytérfogatra normált közelítő LCAO-Bloch $\tilde{\psi}(x)$ állapotfüggvények ismeretében a kristályban mozgó kristályelektronok energiaszintjei a 4.axióma alapján közelítőleg meghatározhatók. Ennek értelmében ugyanis a $V(x+a)=V(x)$ potenciális energiával rendelkező, $\tilde{\psi}(x)$ állapotú kristályelektronnak az energiáját a megfelelő $\hat{H}$ Hamilton operátornak a $\tilde{\psi}(x)$-val vett $\langle \tilde{\psi} | \hat{H} \tilde{\psi} \rangle$ kvantummechanikai átlaga adja.

A számolás során először a $\hat{H}\tilde{\psi}(x)$ függvényt határozzuk meg. Ennek kapcsán kihasználtuk azt, hogy a $\chi(x-na)$ atomi állapotfüggvény az „*na*" helyen lévő atom „szabad atomi" állapotfüggvénye, azaz:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\chi''(x-na)+W(x-na)\cdot\chi(x-a)=\varepsilon_A\cdot\chi(x-na)$$

Ezután képezzük a $\hat{H}\tilde{\psi}(x)$-nek a $\tilde{\psi}(x)$-val vett skalár szorzatát.



$\varepsilon_{A1} \rightarrow \chi_1(x-na) \rightarrow \varepsilon_1 > 0$

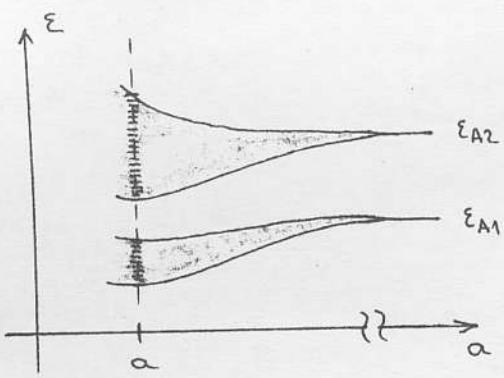
$\varepsilon_{A2} \rightarrow \chi_2(x-na) \rightarrow \varepsilon_1 < 0$

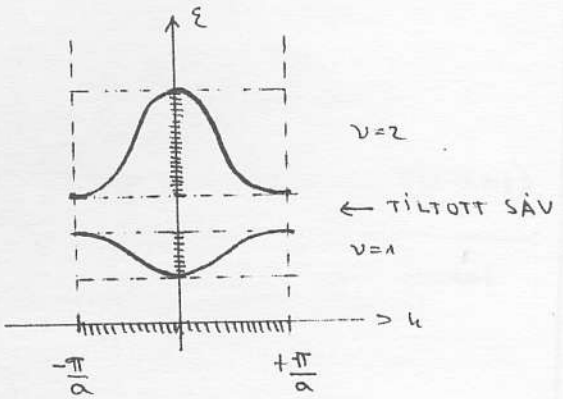
$$\langle \chi(x-n'a) \,|\, V_n(x) \,|\, \chi(x-na) \rangle = \begin{cases} \varepsilon_1 & \text{ha} \quad (n-n') = \pm 1 \\ \varepsilon_0 & \text{ha} \quad (n-n') = 0 \\ \emptyset & \text{egyébként} \end{cases}$$

Tehát

$$\varepsilon \approx \varepsilon_A + N\cdot\varepsilon_0 + N\cdot\varepsilon_1 \left(e^{jka} + e^{-jka} \right) = \varepsilon_A + \underbrace{N\varepsilon_0}_{\equiv E_0} + \underbrace{2N\varepsilon_1}_{\equiv E_1} \cos ka$$

$$\boxed{\varepsilon = \varepsilon_A + E_0 + E_1 \cos ka} \qquad \left(\lim_{a\to\infty} E_0 = 0 \qquad \lim_{a\to\infty} E_1 = 0 \right)$$





↓

általánosítás (3 dim)

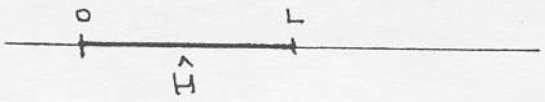
A $\left\langle \tilde{\psi} \middle| \hat{H}\tilde{\psi} \right\rangle$ skalár szorzat számításakor egy újabb közelítést alkalmazzuk. Ennek fizikai tartalma az, hogy (feltételezzük!) az atomok közelítése során egy atomi állapotra csak a közvetlen szomszédos atomok vannak hatással, a távolabbiak nem. Eredményül adódik, hogy:

$$\left\langle \tilde{\psi} \middle| \hat{H}\tilde{\psi} \right\rangle = \varepsilon(k) = \varepsilon_A + E_0 + E_1 \cos(ka)$$

A kapott végeredmény szépen igazolta a várakozásunkat. Azaz a kezdeti ε_A atomi energiaszint, a koszinuszos tagnak megfelelően, „N" szintre hasadt fel. (Mint az ismeretes ugyanis, a „*k*" N-féle különböző értéket vehet fel.)
Azaz a kristályelektronok energiájának „sávos szerkezete" az atomi energiaszintek *N*-szeres felhasadásából származik, és mint ilyen, természetes következménye az atomi kötött állapotok energia kvantálásának.

A számolás eredményeként olyan $\varepsilon_\nu(k)$ $\nu = 1,2,3,\ldots$görbék adódtak, amelyeket az előzőekben (9.oldal) általános elvek alapján megsejtettünk. Most az energiasáv szélessége is szemléletes fizikai taralommal bír, hiszen éppen a szomszédos $\chi(x)$ atomi állapotok "átfedésének" a mértékétől függ. Ez azt jelenti, hogy adott "a" rácstávolság esetén a magasabb energiájú (azaz a magasabb sávindexű) energiasávok szélesebbek. Ugyanis a magasabb energiájú atomi állapotok kiterjedtebbek (az elektronfelhő mérete nagyobb) és így a szomszédos $\chi(x)$ állapotfüggvények átfedése nagyobb mértékű.

2.2.3. Az energiasávok és a szabad elektrongáz kapcsolata



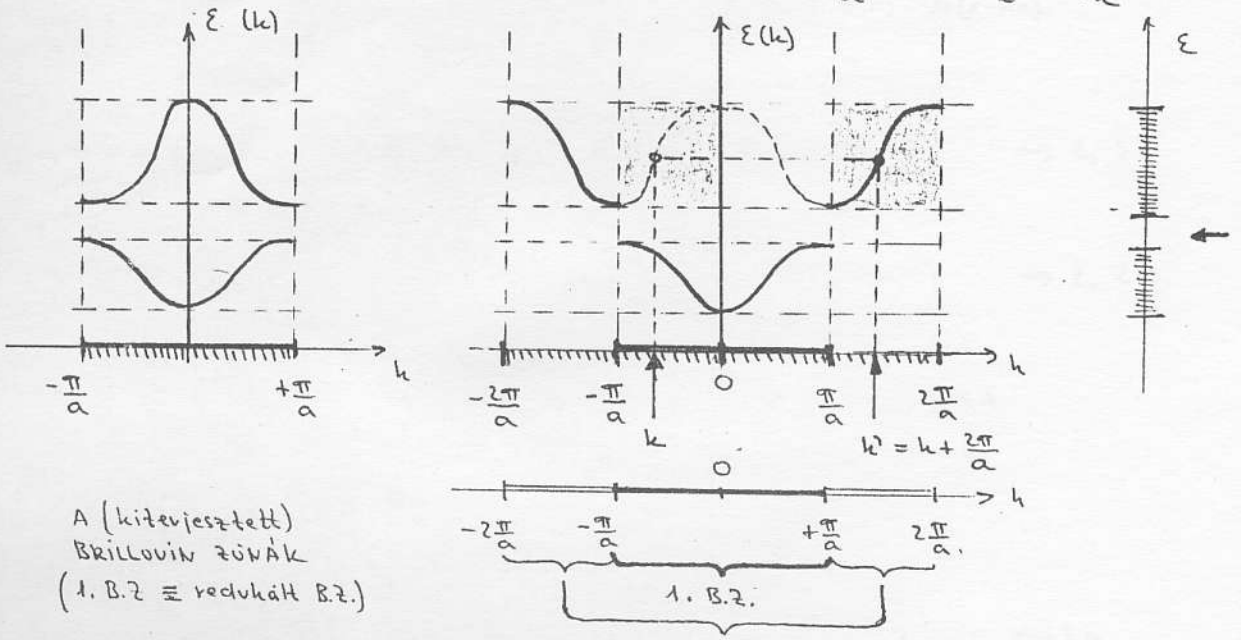
periódikus potenciál : $V(x+a) = V(x)$

Bloch állapotok : $\psi(x) = u(x) \cdot e^{jkx}$

az energia szintek : $\varepsilon(k)$

BRILLOUIN zóna

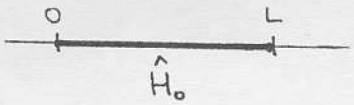
$k' = k + \frac{2\pi}{a} \rightarrow \psi_{k'} \equiv \psi_k$



A (kiterjesztett) BRILLOUIN ZÓNÁK

(1. B.Z ≡ redukált B.Z.)

Az ÜRES-RÁCS modell (szabad elektrongáz)

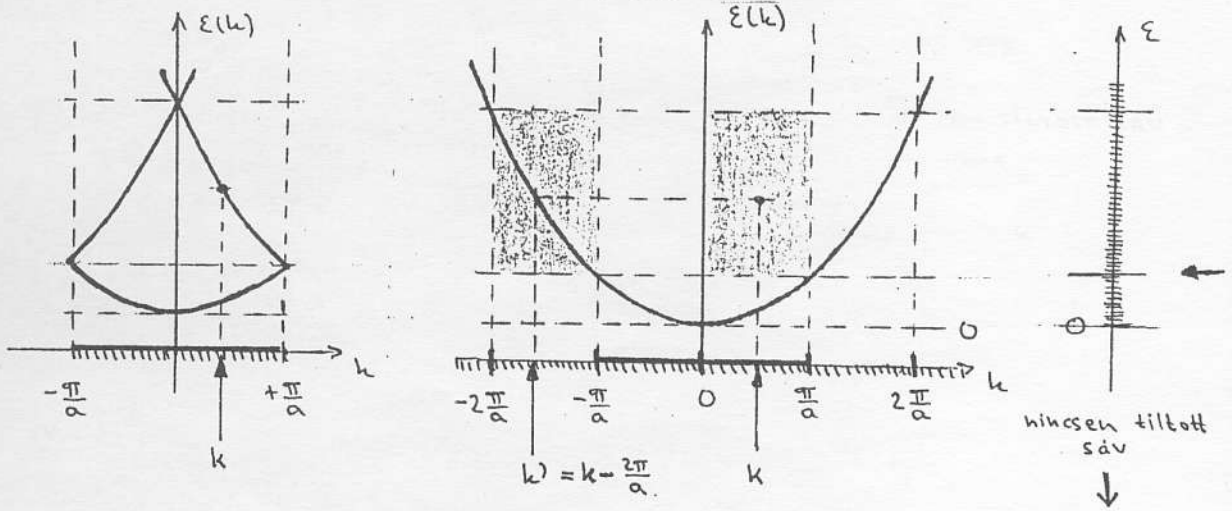


állandó potenciál $V(x) \equiv \phi$ $[V(x+a) = V(x)]$

síkhullám $\psi(x) = u_0 e^{jkx}$ $(u_0 = \text{áll.})$

az energia szintek $\varepsilon = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$

BRILLOUIN ZÓNA



2.2.3. Az energiasávok és a szabad elektrongáz kapcsolata

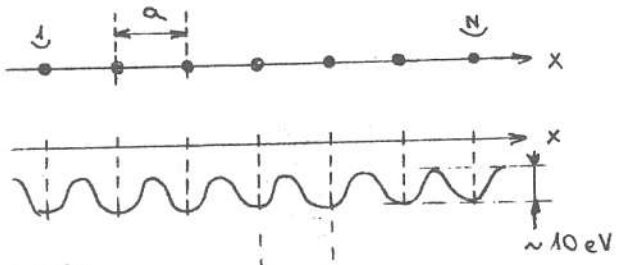
A Bloch állapotban lévő rácselektronokat sokszor Bloch elektronoknak hívjuk. A Bloch elektronok lehetséges energiáit magadó $\varepsilon_\nu(k)$ $\nu = 1,2,3,\ldots$görbék együttesét "sávábrának" nevezzük. A sávábra tehát a $(-\pi/a,+\pi/a)$ Brillouin zónán értelmezett többértékű függvény. Ezt a függvényt az értelmezési tartomány kiterjesztésével egyértékűvé tehetjük. Erre az ad lehetőséget, hogy a "k" és a "k+2π/a" hullámszámok pontosan ugyanazt a Bloch állapotot adják meg (7.oldal). Ezért az első (ν=1) energiasávhoz tartozó $\varepsilon_1(k)$ görbét továbbra is a $(-\pi/a,+\pi/a)$ tartományon értelmezzük, de a második (ν=2) energiasávhoz tartozó $\varepsilon_2(k)$ görbét a nem összefüggő $(-2\pi/a,-\pi/a)\cup(+\pi/a,+2\pi/a)$ tartományon fogjuk definiálni. Könnyen belátható, hogy ez az utóbbi tartomány is rendelkezik a Brillouin zónákra kötelezően előírt tulajdonságokkal (9.oldal). Ezért ezt második Brillouin zónának nevezzük, míg a kiindulásul használt középső tartomány neve első Brillouin zóna lesz. Az eljárás a ν=3,4,... esetekre értelemszerűen folytatható. Eredményül végül is egy egyértékű $\varepsilon(k)$ függvény adódik, amelynek értelmezési tartománya az egész "k" tengely és szakadása (ugrása) van a Brillouin zónák határain, azaz a $\{n\pi/a \mid n = \pm1,\pm2,\pm3,\ldots\}$pontoknál. Ennek az eljárásnak a neve a "kiterjesztett Brillouin zónás" ábrázolás.

Az $\varepsilon(k)$ sávábrának a "kiterjesztett Brillouin zónás" ábrázolása nem pusztán formális matematikai játék volt, hanem mélyebb fizikai tartalommal is bír. Lehetőségünk nyílik ugyanis arra, hogy matematikailag is precíz kapcsolatot teremtsünk a bevezetőben tárgyalt szabadelektron modell és a Bloch modell között. Ennek az alapja az, hogy az egydimenziós L hosszúságú kristály szabadelektron modelljében a feltételezett, azonosan zérus potenciál is rendelkezik a transzlációs szimmetriából adódó "periodicitással". Ugyanis a $V(x) = V(x+a) \equiv 0$ minden x-re teljesül. Ezt fizikailag úgy lehet elképzelni, hogy geometriai pontokkal kijelöljük a rácsatomok helyét, de iontörzseket oda nem teszünk. Ezáltal a transzlációs szimmetria pusztán "geometriai" tulajdonság lesz, a potenciál mindenhol azonosan zérus marad. A modellt találóan "üres rács modellnek" nevezik. A transzlációs szimmetriát tükröző $\psi(x)$ Bloch állapotok amplitúdója most $u(x) = u_0$=állandó lesz. Azaz maguk a Bloch állapotok egyszerű síkhullámok lesznek. Ennek megfelelően a sávábra (természetesen) a szabadelektronokra jellemző jól ismert $\varepsilon(k) \propto k^2$ parabola. A "sávok" összeérnek, ezért nincsen tiltott energia tartomány.

A rácsatomok jelenléte módosítani fogja ezt a parabolát. Az $\varepsilon(k)$ a Brillouin zóna határain mintegy "megszakad és kitöredezik". Mindez elvezet a már jól ismert $\varepsilon_\nu(k)$ függvényhez.

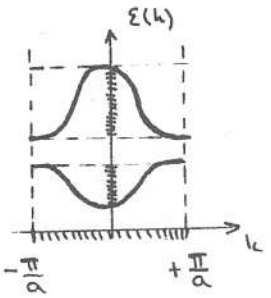
2.3. Az "effektiv tömeg" közelítés

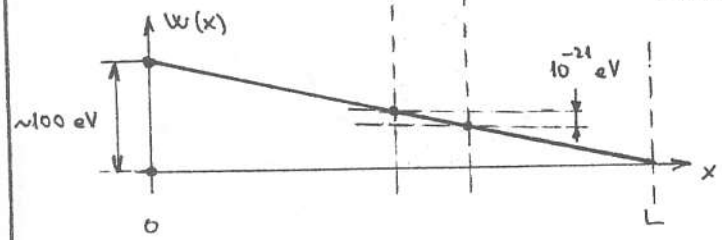
2.3.1. Az effektiv tömeg fogalma

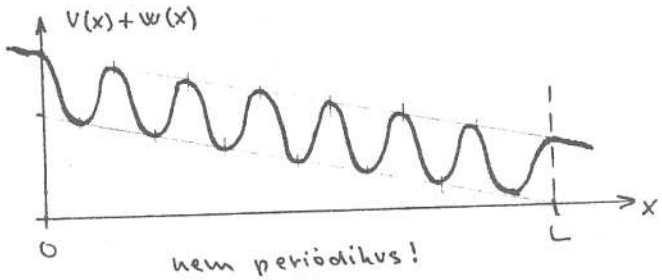


$N \sim 10^{23}$

$\hat{H}\psi = \varepsilon\psi$ → ↑ BLOCH állapotok







nem periódikus!

$\hat{H}\varphi = \varepsilon\varphi$

$-\frac{\hbar^2}{2m}\varphi'' + [V(x)+W(x)]\varphi = \varepsilon\varphi$

kvantum-mechanika

↓

Klasszikus mechanikai modell

(lassan változó potenciál)

↓

EHRENFEST tétel

↓

analógia: szabadelektron modell.

Példa:

$\underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''}_{\text{kvantum-mechanika}} + \underbrace{W(x)}_{\downarrow\ \text{EHRENFEST}}\psi = \varepsilon\psi \longrightarrow -\frac{\hbar^2}{2m}\psi'' = E_k\psi$

$E_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ ← (szabadelektron)

↓

Klasszikus mechanika ↕ EHRENFEST

$\frac{dE_k}{dt} = F \cdot v$

$\frac{d}{dt}\langle E_k\rangle = \left[-\frac{dW}{dx}\right]_{\langle x\rangle} \cdot \frac{1}{m}\langle p\rangle$

(1.2.6.2.) Feladat

2.3. Az effektív tömeg közelítés

2.3.1. Az effektív tömeg fogalma

A kristályrácsban lévő elektronok kvantummechanikai tárgyalást rendkívüli módon megkönnyíti az, hogy a periodikus potenciál miatt az elektron lehetséges állapotai Bloch féle állapotok. Az ezekhez az állapotok tartozó energiaszinteket a sávábra adja meg. Mivel a sávábra $\varepsilon(k)$ függvénye eléggé sima görbe, ezért a konkrét számításokat elegendő csak "néhány" "k" pontban elvégezni.

Az elektronok kristálybeli állapota önmagában nem túl érdekes. Sokkal izgalmasabb annak a vizsgálata, hogy mi történik akkor, ha a kristályelektronokkal kölcsönhatásba lépünk? Például a makroszkopikus szilárd testre elektromos vagy mágneses teret kapcsolunk. Az elektronikus eszközökben pontosan ez történik. Így gyakorlati szempontból a kérdés igencsak indokolt. Hiszen az erre adott válasz alapján érthetők meg a félvezető alkatrészekben lezajló azon alapvető fizikai folyamatok, amelyek a makroszkopikus elektromos tulajdonságokat határozzák meg. Ez pedig minden leendő és gyakorló villamosmérnökök számára fontos dolog.

Ha egy egydimenziós kristályra külső homogén (makroszkopikus) elektromos teret kapcsolunk, akkor a kristályelektronok $V(x)$ periodikus potenciálja megváltozik. A $V(x)$ atomi és a $W(x)$ külső (csak makroszkopikus léptékben változó) potenciálok szuperponálódnak. Az eredő potenciál már nem periodikus. Elvész az ebből származó előny és a megfelelő Schrödinger egyenlet (a 8.oldalon részletezett okok miatt) gyakorlatilag megoldhatatlanná válik.

A kiutat az a felismerés adja, hogy amíg a kristályatomok okozta potenciálváltozás atomi távolságokon belül történik, addig a külső potenciál nagyon lassan (csak makroszkopikus távolságokon) változik meg. Ez pedig lehetőséget nyújt arra, hogy a kétféle hatást egymástól elkülönítve (de nem egymástól függetlenül!) kezeljük. A rácsatomok hatását továbbra is a megtanult módon (Bloch állapotokon keresztül) tárgyaljuk, míg a külső potenciál hatását az Ehrenfest tétel alkalmazásával vesszük figyelembe. Mint azt láttuk ez a tétel adja meg az átmenetet a kvantummechanikából a klasszikus mechanikába (II. füzet 49.-50.oldal). Ezért tehát igen alkalmas arra, hogy a makroszkopikus léptékű mechanikai jelenségeket kvantummechanikai fogalmakkal írhassuk le. A kristályelektronok fent vázolt dinamikájánál pontosan ez a helyzet.

A klasszikus mechanikai "munka tételt" kell adaptálnunk a jelenlegi problémára.
(Adaptál=alkalmassá tesz.)

Az (általánosított) munkatétel szerint, egy mechanikai rendszer energiájának a megváltozása a rendszeren ható külső erők munkájával egyenlő. Mindez tetszőleges kicsiny „dt” időtartamokra is érvényes! Tekintsük most "rendszernek" a $V(x+a)=V(x)$ periodikus potenciálú térben mozgó kristályelektront. Ennek az $\varepsilon(k)$ energiáját az előzőekben a kvantummechanika segítségével már meghatároztuk. A munkatétel szerint a kristályelektronnak ez az $\varepsilon(k)$ energiája fog a külső elektromos tér hatására megváltozni.

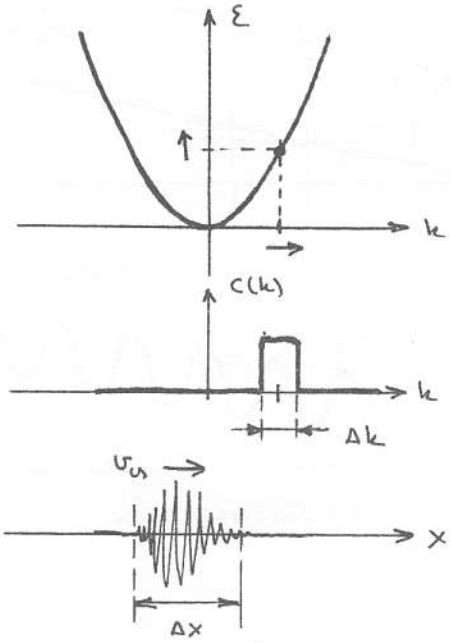
Szabadelektron állapotok

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}$$

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

$$\psi = A \cdot e^{jkx} \cdot e^{-j\frac{\varepsilon}{\hbar}t}$$

$$\varepsilon = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \equiv \hbar\omega(k)$$



$$\Delta x \cdot \Delta k = \pi \longrightarrow \Delta x = \frac{\pi}{\Delta k}$$

BLOCH állapotok

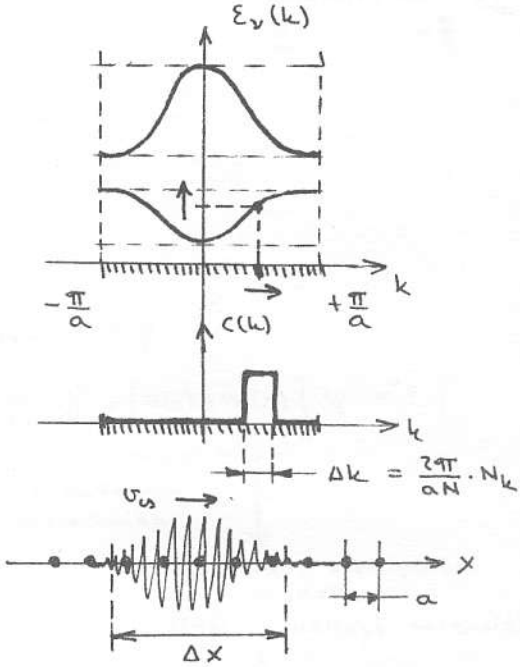
$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)$$

$$V(x+a) = V(x)$$

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

$$\psi = u(x)\, e^{jkx} \cdot e^{-j\frac{\varepsilon}{\hbar}t}$$

$$\varepsilon = \varepsilon_\nu(k) \equiv \hbar\omega(k)$$



$$\Delta x \cdot \Delta k = \pi \longrightarrow \Delta x = \frac{\pi}{\Delta k} = \frac{a}{2}\frac{N}{N_k}$$

"BLOCH csomag" : $\boxed{a \ll \Delta x \ll L}$

EHRENFEST tétel

$$\frac{d\varepsilon}{dt} = F \cdot v_{cs} \qquad \left(F = -\frac{dw}{dx} \;,\; v_{cs} \equiv \frac{dw}{dk} \right)$$

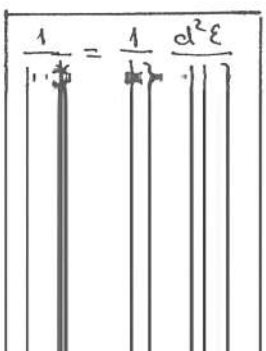
$$\frac{d\varepsilon}{dk}\cdot\dot{k} = F\,\frac{1}{\hbar}\frac{d\varepsilon}{dk}$$

$$\boxed{F = \hbar\cdot\dot{k}}$$

a csoport gyorsulás:

$$a_{cs} \equiv \frac{d}{dt}v_{cs} = \frac{d}{dt}\left(\frac{1}{\hbar}\frac{d\varepsilon}{dk}\right) = \frac{1}{\hbar}\frac{d^2\varepsilon}{dk^2}\cdot\dot{k} = \underbrace{\frac{1}{\hbar^2}\frac{d^2\varepsilon}{dk^2}}_{?}\cdot\underbrace{\hbar\dot{k}}_{F} \equiv \frac{1}{m^*}\cdot F$$

az effektiv tömeg:



Az Ehrenfest tétel szerint a dinamikai változók kvantummechanikai átlagai között pontosan a klasszikus mechanikában érvényes összefüggések állnak fenn. A kvantummechanikában a potenciált, a klasszikus fizikában az erőt használjuk a részecskék dinamikai viselkedésének a tárgyalásánál. Láttuk azt is, hogy az Ehrenfest tétel segítségével az erő fogalmát csak lassan változó potenciálok esetén lehet bevezetni (II. füzet 49.oldal). Ezért most a kristályelektron állapotát nem (az egész kristályra kiterjedt) Bloch függvényként fogjuk megadni, hanem e helyett Bloch függvényekből összerakott (lokalizált) hullámcsomagokkal fogunk dolgozni. Ez azért tehető meg, mert a Kvantummechanika 1.axiómája szerint, ha a Bloch állapotok lehetséges állapotokat adnak meg, akkor azok lineáris kombinációja (ezek a hullámcsomagok) szintén lehetséges állapotok lesznek. Mivel pedig ezek e „hullámcsomag" állapotok (az adott esetben) sokkal kényelmesebben kezelhetők, így célszerű ezek segítségével megismerni a kristályelektronok dinamikai tulajdonságait. Egy ilyen hullámcsomag olyan, hogy a Δx kiterjedése az L makroszkopikus testméretnél sokkal kisebb (szinte "pontszerű"), de ugyanakkor az "a" rácstávolságnál sokkal nagyobb (azaz a hullámcsomag nagyon sok rácsatomot fed le). Ezzel az eljárással a kristályelektron olyan modelljéhez jutottunk, amely makroszkopikus viselkedésében pontszerű, atomi skálán azonban a kvantummechanika törvényeit követi.

A pontszerű kristályelektron sebessége nyilvánvalóan a Bloch csomag csoportsebességével lesz egyenlő. Az $\varepsilon(k)=\hbar\omega(k)$ ismert összefüggés felhasználásával a csoportsebesség az általános hullámtani definíció alapján számolható, azaz $v_{cs}=\frac{d\omega}{dk}=\frac{1}{\hbar}\frac{d\varepsilon}{dk}$. Emiatt az $\varepsilon(k)$ függvényt "diszperziós relációnak" is nevezik

A Bloch csomag spektrális tulajdonságai ugyanazok, mint amit e tárgyunk bevezetőjében a hullámcsomagokról általában elmondtunk (I.füzet 2.oldal). A Bloch csomag spektrumát most természetesen a Brillouin zónán kell értelmeznünk. A fentiekben megkívánt lokalizációval rendelkező csomag spektruma (hála a sávábra simaságnak) már elegendően keskeny ahhoz, hogy azon belül az $\varepsilon(k)$ gyakorlatilag már ne változzon. Így a kristályelektronhoz egy maghatározott $\varepsilon(k)$ energiaértéket lehet rendelni. Valójában ez az energia fog változni a külső tér hatására.

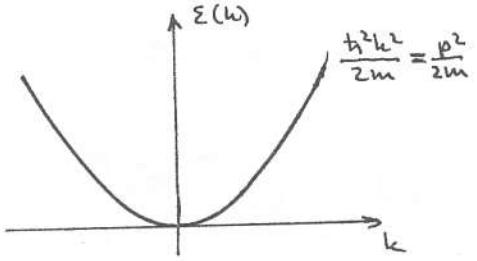
A Bloch csomaggal számolt Ehrenfest tétel szerint a (makroszkopikusan pontszerűnek tekintett) rácselektronra ható külső (makroszkopikus) erő a hullámcsomag spektrumát fogja mozgatni.

A keskenynek tekinthető Δk szélességű spektrum közepe kegyen "k". A Δk értékének a megválasztását két célszerű szempont határozza meg. Az egyik az, hogy Δk legyen elegendően kicsi a Brillouin zóna méretéhez képest (azaz $\Delta k << \frac{\pi}{a}$). Ez azért kell, hogy a („pontszerűnek" tekinthető) spektrum helyzetét a zónában a „k" vektorral lehessen azonosítani. A másik szempont az, hogy a Δk legyen elegendően nagy ahhoz, hogy az így előállított hullámcsomag mérete (lokalizáltsága) sokkal kisebbnek adódjék, mint a kristály makroszkopikus mérete (azaz $\Delta x << L$). Ugyanakkor fontos az is, hogy a hullámcsomag már sok rácspontot fedjen le ($\Delta x >> a$) azért, hogy azok hatása mintegy kiátlagolódjék. Mindezek eredményeként a makroszkópikus skálán egy „pontszerű" elektron kvantummechanikai modelljéhez juthatunk.

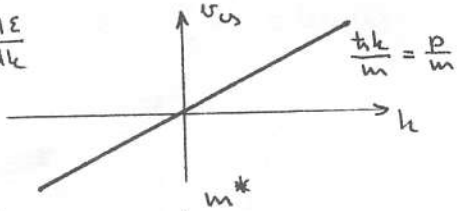
Végül is a munkatételben szereplő külső F erő ismeretében az $F=\hbar\dot{k}$ egyenlet adódik. Azaz, mintha dinamikai szempontból a Bloch hullámcsomag spektrumának a közepéhez rendelt $\hbar k$ "impulzusra" felírt newtoni mozgástörvény lenne előttünk. Ennek hatása a hullámcsomag térbeli mozgásában úgy nyilvánul meg, hogy a hullámcsomag gyorsulni fog. A hullámcsomag a_{cs} gyorsulása és a kristályelektronra ható külső erő között egy lineáris kapcsolat van. Ez pedig az ún. effektív tömeg (m^*) fogalmának a bevezetését teszi lehetővé: $F=m^*\cdot a_{cs}$.

Végezetül ide kívánkozik egy fontos megjegyzés. Az $F=\hbar\dot{k}$ egyenletben szereplő „$\hbar k$" kifejezés szabadelektron esetén valóban az elektron impulzusát adná. Most azonban a „k" a Bloch állapotot meghatározó hullámszámot jelenti. A Bloch állapot pedig nem elégíti ki a $\hat{p}\psi=p\cdot\psi$ impulzus sajátérték egyenletet. Ezért Bloch állapotok esetén a „$\hbar k$" kifejezést „kváziimpulzusnak" nevezzük.

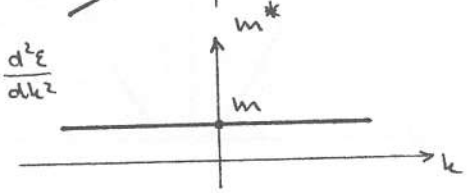
Szabadelektron állapotok



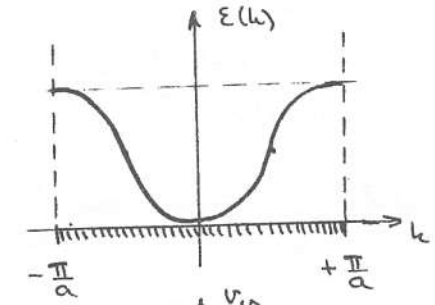
$$v_{cs} = \frac{1}{\hbar}\frac{dE}{dk}$$

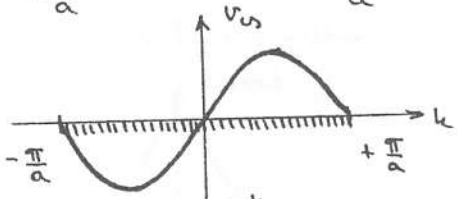


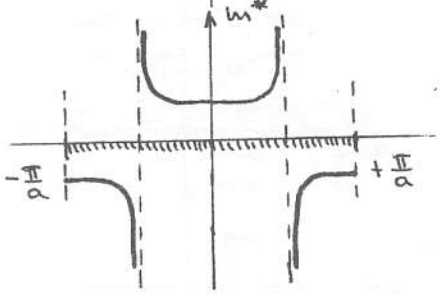
$$\frac{1}{m^*} = \frac{1}{\hbar^2}\frac{d^2E}{dk^2}$$



BLOCH állapotok





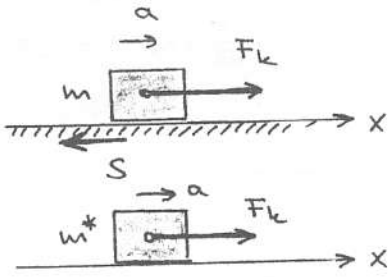


$$m^* a_{cs} = -\frac{dW}{dx} \equiv F_{külső}$$

↑ az E(k)-n keresztül benne van a V(x) potenciál hatása azaz az ionrörzsekkel (kristállyal) való kölcsönhatás.

analógia ←

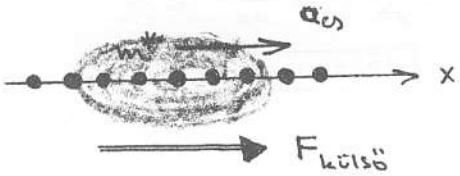
Szemléltető példa:



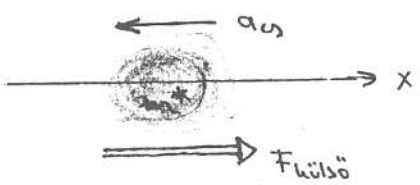
$$ma = F_k - S$$

$$\underbrace{ma + S}_{\equiv m^* \cdot a} = F_k$$

m^* tartalmazza az S erő hatását, mert az a gyorsulást csak az F_k erő hatásának tulajdonítottuk.



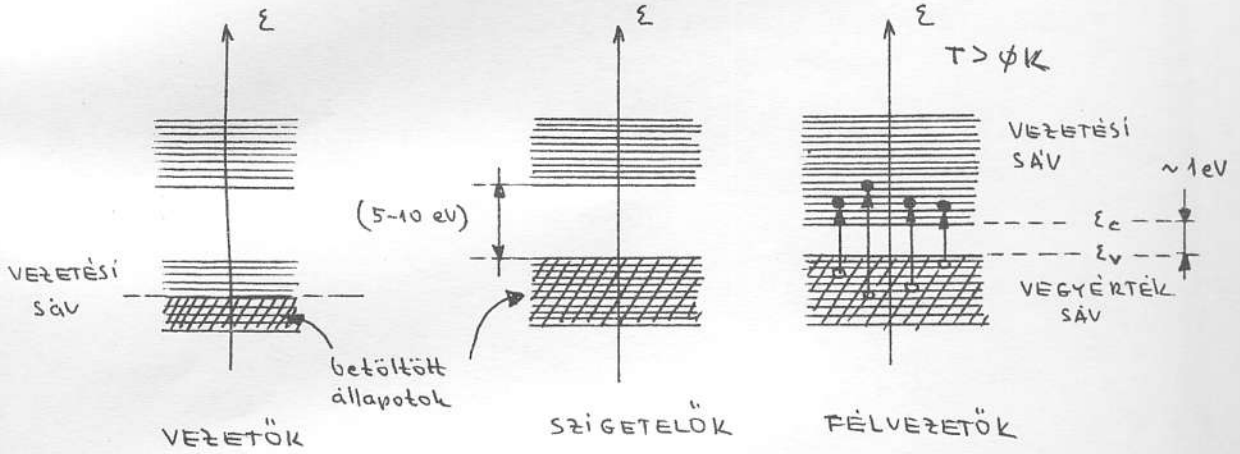
Ha $m^* < 0$



Az $m^*(k)$ effektív tömegnek szemléletes jelentése van. Definíció szerint ugyanis a (pontszerű) kristályelektronra ható külső erőnek és a (csoport)gyorsulásnak a hányadosával egyenlő. Tehát a gyorsulást egyedül a külső erőnek tulajdonítjuk. Ugyanakkor az elektron a kristályráccsal is kölcsönhatásban van. A kristályrács hatását az effektív tömegben az $\varepsilon(k)$ diszperziós reláción keresztül vettük figyelembe.

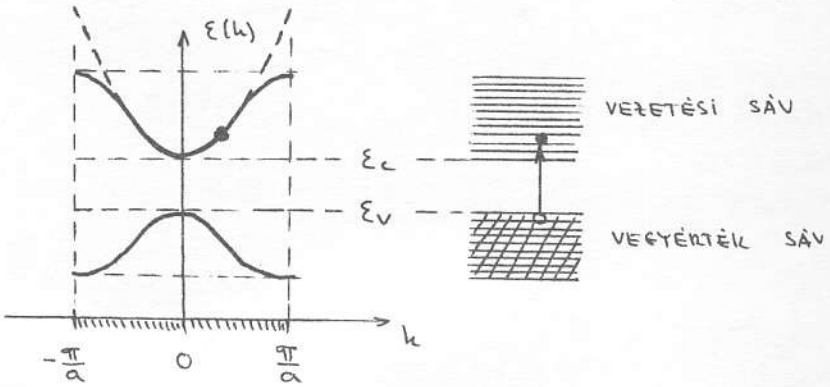
Az $\varepsilon(k)$ ismeretében az $m^*(k)$ effektív tömeg kiszámolható. Látszik, hogy ez negatív értéket is felvehet. Ez azonban a fizikai jelentése ismeretében, már nem meglepő. Azt jelenti ugyanis, hogy vannak olyan hullámcsomag állapotok, amely esetén a hullámcsomag a külső F erővel ellentétes irányban gyorsul. Azaz az elektronra a rácsatomok olyan hatást fejtenek ki, hogy az a külső erővel szembe fog gyorsulni.

2.3.2. Szilárd testek sávszerkezete és az elektromos vezetési tulajdonságok kapcsolata



szerkezeti félvezetők
↓
adalékolt félvezetők
↓
TECHNIKAI ALKALMAZÁSOK.

A vezetési sávban lévő elektronok dinamikai modellje:



$$\varepsilon(k) \cong \varepsilon_c + \underbrace{\left[\frac{d\varepsilon}{dk}\right]_0 k}_{\emptyset} + \frac{1}{2}\underbrace{\left[\frac{d^2\varepsilon}{dk^2}\right]_0}_{\equiv \frac{\hbar^2}{m^*}} k^2 + \dots \cong \varepsilon_c + \underbrace{\frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}}$$

m^* tömegű szabadon mozgó részecske

SZEMLÉLETES !

Ezen egyszerű klasszikus mechanikai tömegpont modell mögött azonban igen bonyolult kvantummechanikai effektusok vannak. Ezek az m^* effektív tömegben vannak "elrejtve".

↓

ez a MODELL ÉRVÉNYESSÉGI KÖRÉT is megszabja !

2.3.2. Szilárd testek sávszerkezete és az elektromos vezetési tulajdonságok kapcsolata

Láttuk tehát, hogy a kristályelektronok lehetséges energiaszintjei sávokba rendeződnek. Minden sávban N darab (azaz éppen rácsatom számnyi) különböző Bloch állapotnak megfelelő energiaszint van. A Pauli-elv miatt minden Bloch (pálya)állapotban maximum két elektron lehet. Ezért egy energiasávban 2N elektron számára van hely. Mint ismeretes az "*N*" a kristályrácsot felépítő atomok (iontörzsek) számát jelenti. Ezeket az elektronállapotokat kell a kristályelektronokkal (azaz a kollektivizálódott vegyérték elektronokkal) betölteni. Ha a kristály "*v*" vegyértékű atomokból épül fel, akkor a kristályelektronok száma "*vN*" .

Egydimenziós kristálymodell esetén , ha a "*v*" páratlan szám, akkor lesz olyan sáv, amelyik csak félig lesz betöltve . Az ilyen kristály elektromos vezető lesz. Ennek az az oka, hogy ha a kristályra külső elektromos teret kapcsolunk, akkor a félig töltött sáv elektronjai a tér hatására a sávon belül magasabb energiaszintekre tudnak kerülni. Azaz a térben az elektron gyorsulni fog (15.oldal). Ezt a félig betöltött sávot "vezetési sávnak" hívjuk.

Ha a "*v*" páros szám, akkor alapállapotban (0 Kelvin hőmérsékleten) minden sáv teljesen be van töltve. (Egydimenziós modellről van most szó!) Ha a tiltott sáv "nagy" (5-10 eV), akkor az elektronok, normális körülmények között, nem tudják a tiltott sávot "átugrani". Tehát külső elektromos tér hatására az elektronok állapota nem fog megváltozni. Ezek a kristályok elektromos szigetelők lesznek

Ha a "*v*" páros szám és a tiltott sáv "elegendően" kicsi (kb. 1 eV), akkor 0 Kelvin hőmérsékleten a kristály az előzőek szerint elektromosan szigetelő lesz. Szobahőmérsékleten azonban, a Fermi-Dirac eloszlásnak megfelelően, a keskeny tiltott sávot átugorva, elektronok kerülnek az eddig üres sávba. Ennek a sávnak "vezetési sáv" (konduktancia sáv) a neve, míg az alatta lévőt "vegyérték sávnak" (valencia sávnak) hívjuk. A vegyérték sáv legmagasabb ε_v energiaszintjét a „vegyérték sáv tetejének” nevezzük. A vezetési sáv legalacsonyabb ε_c energiaszintjének a megnevezésére a „vezetési sáv alja” kifejezést használjuk.

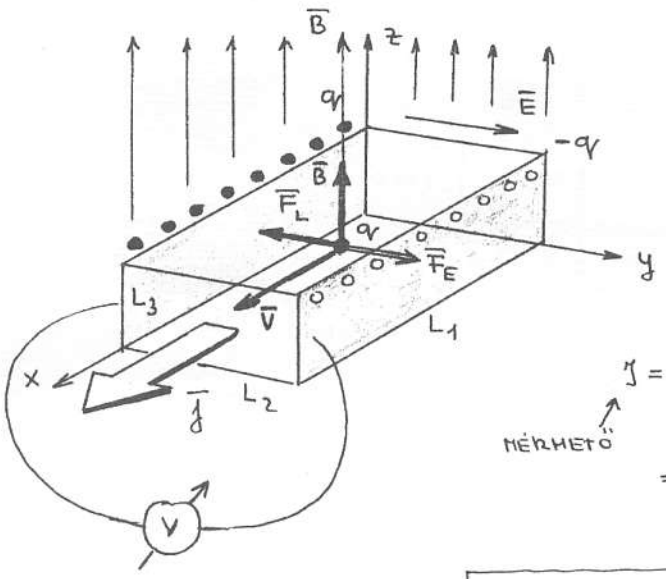
A kristályra elektromos teret kapcsolva a vezetési sáv elektronjai a tér hatására magasabb energiaszintre tudnak jutni. A kristály elektromos vezető lesz. A hőmérséklet növelésével nő a vezetési sávban lévő elektronok száma és így a vezetőképesség is .Mindez elmondható a vegyértéksáv elektronjairól is. Ezeket az kristályokat "félvezetőknek" hívjuk.

A vezetési sávba felkerült elektronok a sáv alján helyezkednek el. A sáv alján az $\varepsilon(k)$ diszperziós összefüggésnek minimuma van és így ott k^2-el közelíthető. Az $\varepsilon(k) \approx k^2$ parabolikus kapcsolat pedig olyan, mintha m^* tömegű szabad elektronok mozognának a térben. Sikerült tehát a klasszikus fizikából jól ismert "tömegpont" modellt, kissé "átlényegült " formában, visszacsempészni a kvantummechanikai tárgyalást igénylő szilárdtestfizikába. Ez a megszokott szemléletesség nagy előny, de vigyázni kell, nehogy elaltassa kvantummechanikai gondolkodásunkat.

Nyilvánvaló fontosságuk miatt a félvezetők elektromos tulajdonságaival az elkövetkezőkben még részletesebben is fogunk foglalkozni

2.4. Pozitiv töltéshordozók szilárd testekben : a "lyukak"

2.4.1. A HALL effektus



egyensúlyi állapotban

$$F_L = F_E$$

$$qvB = qE$$

$$J = j\,L_2 \cdot L_3 \quad \text{(az ÁRAM)}$$

$$j = q \cdot n \cdot v$$

$$J = q \cdot n \cdot v \cdot L_2 \cdot L_3 = q \cdot n \cdot \underbrace{v \cdot B}_{E} \frac{L_2 L_3}{B} =$$

(MÉRHETŐ)

$$= \frac{q \cdot n}{B} L_3 \cdot \underbrace{E \cdot L_2}_{u} = \frac{qn}{B} L_3 \cdot u$$

(u: MÉRHETŐ)

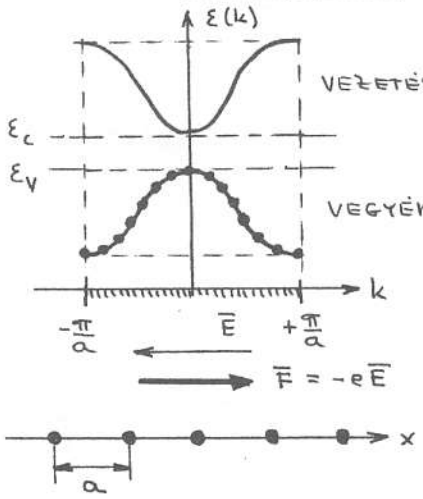
$$\boxed{u = \underbrace{\frac{B}{L_3 q n}}_{\equiv R_H} \cdot J} \rightarrow \underline{u = R_H \cdot J}$$

(R_H: HALL állandó)

$$\boxed{R_H \sim \frac{1}{q}} \rightarrow \begin{cases} <0 & \text{elektronok } (q=-e) \\ >0 & \text{(?) pozitiv töltéshordozók} \end{cases}$$

(Be, Cd, Zn, Pb, ...)

2.4.2. A "lyukak"



VEZETÉSI SÁV (ÜRES) :

VEGYÉRTÉK SÁV (TELE) :

$$\sum k = 0$$

$$\sum_k \varepsilon(k) = \varepsilon_0$$

$$j = -e \underbrace{\sum_k v(k)}_{\varnothing} \cdot \frac{1}{L}$$

(legyen $L=1$ [...])

$$\frac{dj}{dt} = -e \sum_k \dot{v}(k) =$$

$$F = \hbar \dot{k}$$

$$= -e \sum_k \underbrace{\frac{dv}{dk}}_{\frac{1}{\hbar}\frac{d^2\varepsilon}{dk^2}} \dot{k} = -e \sum_k \frac{1}{m^*(k)} \hbar \dot{k} = +e^2 E \underbrace{\sum_k \frac{1}{m^*}}_{\varnothing}$$

2.4. Pozitív töltéshordozók szilárd testekben: a "lyukak"

2.4.1. A Hall effektus

Tekintsünk egy téglatest alakú kristályt! Rögzítsünk az éleihez egy $\{x, y, z\}$ koordináta rendszert! Tegyük a testet egy "z" irányú B mágneses térbe! Kapcsoljunk a rendszerre egy "x" irányú I áramot hajtó áramgenerátort! Ekkor a testnek az "y" irányra merőleges két szomszédos lapja között egy U potenciál különbség mérhető. A jelenség neve Hall effektus. A mért U feszültség arányos az átfolyó I árammal, azaz $U = R_H \cdot I$. Az arányossági tényezőt R_H-val jelöltük és Hall állandónak hívjuk. A jelenség a klasszikus "pontszerű töltéshordozó modellel" egyszerűen értelmezhető. Az "x" irányban mozgó „q" ponttöltésre, a homogén mágneses tér hatására, "y" irányú Lorentz erő hat. Ennek következtében valamennyi „q" töltéshordozó halmozódik fel a test egyik oldalán. Mivel a test semleges kell, hogy maradjon, ezért ugyanennyi (-q) töltéshordozó "hiány" lép fel a szemközti oldalon. A felhalmozódott ellentétes töltések a test belsejében egy homogén elektromos teret hoznak létre. Ez az elektromos tér a mágneses Lorentz erővel ellentétes erőt fejt ki a mozgó töltéshordozókra. Ha a két erő egyenlő, akkor beállt az egyensúlyi állapot. Az U és az I időben állandó marad.

Az R_H Hall állandó a "q" töltéstől függ. Ezért adott B mágneses tér és I áram esetén, a mért U feszültség polaritásából a töltéshordozók előjelére lehet következtetni. Ha a Hall állandó negatív, akkor ez elektronok áramlását jelenti a szilárd testben, és ez természetes is. Vannak olyan anyagok (ún. „félfémek", pl.: Berillium, Kadmium, Cink, Ólom) amelyek esetében a Hall állandó pozitívnek (!) adódik és ez pozitív töltéshordozók jelenlétére utal. Az eredmény azért meghökkentő, mert tudjuk, hogy szilárd testekben csak az elektronok képesek elmozdulni és így áramot produkálni.

A jelensége csak kvantummechanikai modellel magyarázható

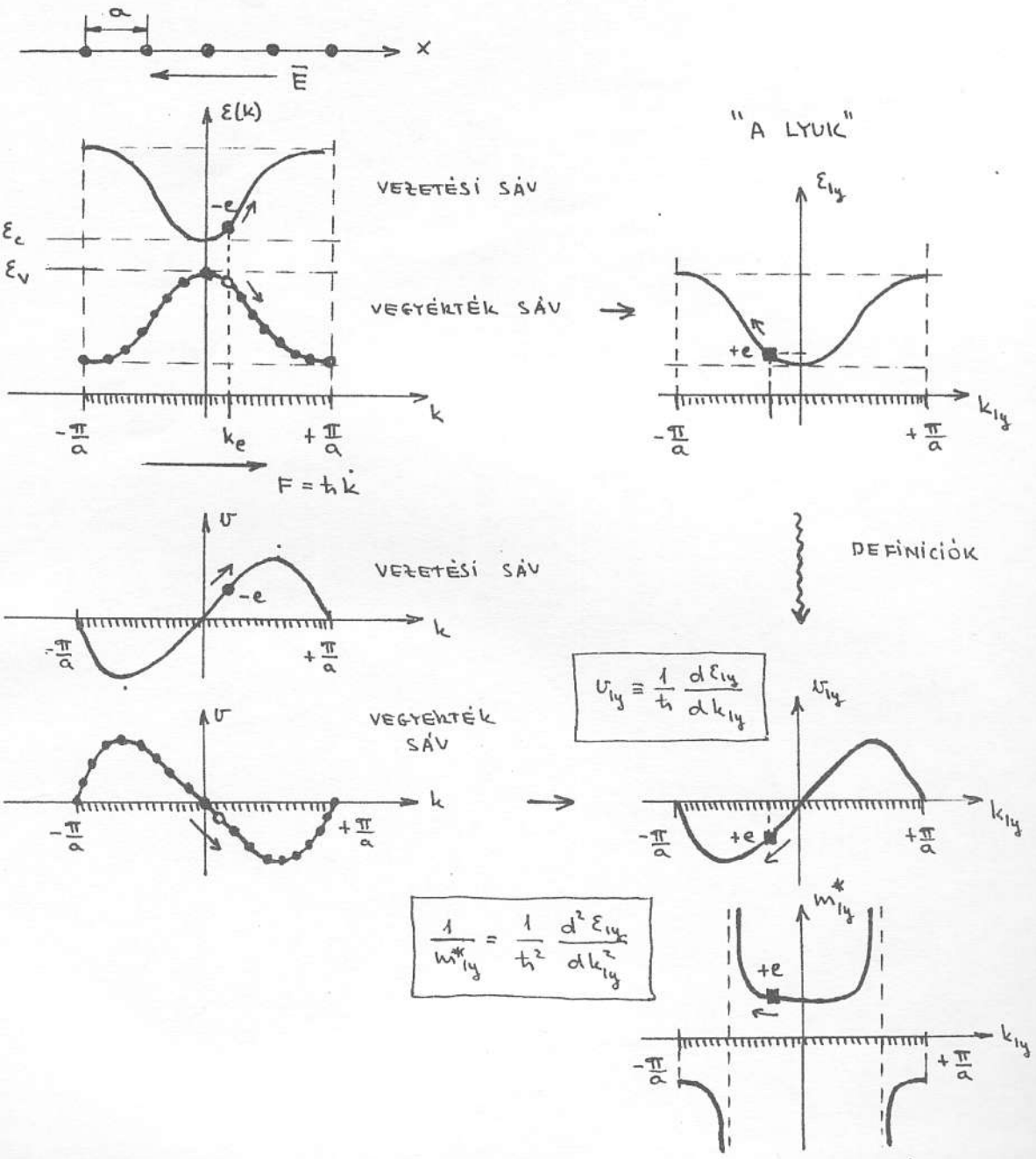
2.4.2. A lyukak

Egy egydimenziós kristálymodellt fogunk vizsgálni. A Bloch állapotokat illetve az ezekből felépíthető Bloch-csomag állapotok rendszerét adottnak tekintjük. Ugyancsak adottnak vesszük az energiaszintek sávstruktúráját megadó $\varepsilon_v(k)$ függvényeket is. Az energiasávokhoz tartozó állapotokat a kristályelektronok a Fermi-Dirac statisztikának megfelelően töltik be. Röviden (de pongyolán!) azt szoktuk mondani, hogy: "a sávban elektronok vannak" vagy "elektronok mennek át egyik sávból a másikba".

Egy sáv betöltöttségének a mértékét két adattal fogjuk jellemezni. Ezek a sáv betöltött állapotait definiáló "*k*" hullámszámok $\sum k$ összege és a sávban lévő elektronok $\sum \varepsilon(k)$ összenergiája. A sávban lévő elektronok kollektív (együttes) elektromos viselkedésére az általuk létrahozott „*j*" áram(sűrűség) és annak időbeli változása a jellemző. Egydimenziós esetben az áram és az áramsűrűség fogalma összemosódnak, hiszen nincsen értelme "egységnyi keresztmetszetű felületről" beszélni. Ezért, az egyszerűsítés végett, némi formális pongyolaság itt és most megengedhető. Majd a háromdimenziós általánosításkor mindent pontosítani fogunk. Ennek értelmében az áramsűrűség, definíció szerint, a (betöltött Bloch-csomag állapotokban lévő) kristályelektronok (csoport)sebességeink az összegéből számolható, azaz $j \approx -e\sum_k v(k)$. A külső „*E*" elektromos tér hatására bekövetkező áramsűrűség változás pedig a sávban lévő elektronok effektív tömegének (pontosabban azok reciprokának) az összegével fejezhető ki $\frac{d}{dt} j = +e^2 \cdot E \cdot \sum_k \frac{1}{m^*}$.

Tekintsünk tehát egy egydimenziós modellkristályt. Legyen a vegyérték sáv teljesen tele, és a vezetési sáv teljesen üres. Az üres vezetési sávban fenti adatok értelemszerűen mind zérussal egyenlők. A teljesen betöltött vegyérték sávban a szimmetria miatt az összenergián kívül a többi három jellemző adat szintén zérus értékű lesz.

A legalacsonyabb gerjesztett állapot:



$$v_{ly} \equiv \frac{1}{\hbar}\frac{d\varepsilon_{ly}}{dk_{ly}}$$

VEZETÉSI SÁV

$$\sum_k{}' k = k_e$$

$$\sum_k{}' \varepsilon(k) = \varepsilon(k_e)$$

$$j = -e\sum_k{}' v(k) = -e\,v(k_e)$$

$$\frac{dj}{dt} = +e^2 E \sum_k{}' \frac{1}{m^*(k)} = +e^2 E \frac{1}{m^*(k_e)}$$

(egyetlen töltéshordozó –elektron– van a vezetési sávban)

Vigyünk át egy elektront a vegyérték sávból a vezetési sávba!

Határozzuk meg először a vezetési sáv előbb definiált tulajdonságait! Egyetlen vezetési elektronról lévén szó a sávot jellemző négy adat megegyezik magának a vezetési elektronnak a megfelelő adataival.
Azaz: a hullámszámra $\sum k = k_e$, az energiára $\sum \varepsilon(k) = \varepsilon(k_e)$, az áramsűrűségre $j = -e\sum v(k) = -ev(k_e)$, az áramsűrűség időbeli megváltozására pedig a $+e^2 E \sum \frac{1}{m^*(k)} = e^2 E \frac{1}{m^*(k_e)}$ érték adódik.

VEGYÉRTÉK SÁV

$$\sum_k{}' k = \underbrace{\sum_k{}' k + k_e - k_e}_{\emptyset} = -k_e \equiv k_{ly}$$

$$\sum_k{}' \varepsilon(k) = \underbrace{\sum_k{}' \varepsilon(k) + \varepsilon(k_e)}_{\equiv \mathcal{E}_0} - \varepsilon(k_e) = \mathcal{E}_0 - \underbrace{\varepsilon(k_e)}_{\varepsilon(-k_e)} \equiv \mathcal{E}_0 + \varepsilon_{ly}(k_{ly})$$

$$j = -e \sum_k{}' v(k) = \underbrace{-e \sum_k{}' v(k) - e\, v(k_e)}_{\emptyset} + e\, v(k_e) = +e\, v(k_e) =$$

$$= +e\left[-v(-k_e)\right] \equiv +e\, v_{ly}(k_{ly})$$

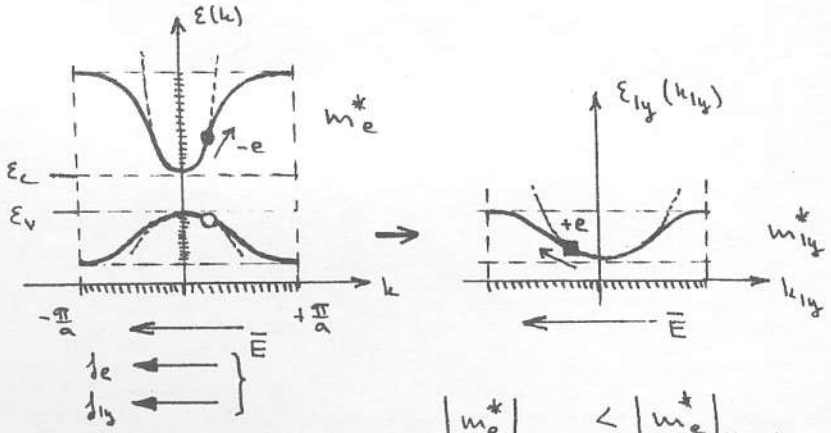
$$\frac{dj}{dt} = +e^2 E \sum_k{}' \frac{1}{m^*(k)} = +e^2 E \left[\underbrace{\sum_k{}' \frac{1}{m^*(k)} + \frac{1}{m^*(k_e)}}_{\emptyset} - \underbrace{\frac{1}{m^*(k_e)}}_{}\right] =$$

$$= +e^2 E \frac{-1}{m^*(-k_e)} \equiv e^2 E \frac{1}{m^*_{ly}(k_{ly})}$$

$$\boxed{m^*_{ly}(k_{ly}) \equiv -m^*(k_e)}$$

(A vegyérték sávban lévő elektronok együttes viselkedésének a hatása modellezhető egyetlen +e töltéshordozóval → neve: "lyuk")

Áramvezetés félvezetőkben:



$$|m^*_e|_{\text{VEZ. SÁV}} < |m^*_e|_{\text{VEGY. SÁV}} \rightarrow \boxed{m^*_e < m^*_{ly}}$$

(A vezetésben résztvevő töltéshordozókra !)

$$j = j_e + j_{ly} = -e\, v(k_e) + e\, v_{ly}(k_{ly})$$

$$\dot{j} = \dot{j}_e + \dot{j}_{ly} = e^2 E \frac{1}{m^*_e} + e^2 E \frac{1}{m^*_{ly}} > 0 \rightarrow$$

az áram állandóan nő (ue) = = az ellenállás zérus

↓

VALÓJÁBAN AZ ELLENÁLLÁS > 0

Térjünk át a vegyérték sávra! A vegyérték sávban egy híján minden állapot be van töltve. A szükséges összegezések formális végigszámolása igen nehéz lenne, és a sávábra pontos ismeretét követelné meg. A feladat ennek ellenére igen egyszerűen megoldható. Ennek lényege az, hogy matematikai átalakításokkal elérjük, hogy az összegezésekben a teljesen betöltött sáv adatai jelenjenek meg. Így azután ezek (ha nullák) az összegzésből kiesnek. Ezt úgy érjük el, hogy a megfelelő összeghez hozzáadjuk és le is vonjuk a betöltetlen állapotnak megfelelő adatot.

Az egyszerű számolás végül is ugyancsak egyszerű eredményre vezet. Az egy híján betöltött sáv minden jellegzetes tulajdonságában úgy viselkedik , mintha egyetlen töltéshordozót tartalmazó vezetési sáv lenne. Azaz: a hullámszámra $\sum k = -k_e$, az energiára $\sum \varepsilon(k) = \varepsilon_0 - \varepsilon(k_e)$, az áramsűrűségre $j = -e\sum v(k) = +ev(k_e)$, az áramsűrűség időbeli megváltozására pedig $+e^2E\sum \frac{1}{m^*(k)} = e^2E\frac{-1}{m^*(-k_e)}$ értéket kapunk.

Látható, hogy ennek a „fiktív” töltéshordozónak a töltése pozitívnak(!) adódik, hiszen $j = +ev(k_e)$. Ezt a fiktív töltéshordozót találóan "lyuknak" nevezzük. Alkalmas definíciókkal konzekvens módon megadhatjuk a lyukakra jellemző k_{ly} hullámszámot, az $\varepsilon_{ly}(k_{ly})$ energia függvényt, a $v_{ly}(k_{ly})$ sebesség függvényt és az $m^*_{ly}(k_{ly})$ effektív tömeg függvényt. Ennek megfelelően például az adódik, hogy a lyuk effektív tömege az őt generáló üres elektronállapotban számítható effektív tömeg negatív szorosa.

Vigyázzunk azonban, a lyuk NEM(!) azonos a be nem töltött üres állapottal (ez különben minden jellemző adatából is látszik). A lyuk egy olyan "fiktív" részecske, amely minden tekintetben egymaga reprezentálja (képviseli) az egyetlen állapot híján betöltött sáv nagyon nagyszámú elektronjának együttes viselkedését. Azaz fizikai viselkedésében a lyuk és az általa reprezentált elektronegyüttes semmi mérhető különbséget nem mutat. Paradox módon a lyuk "létezésében fiktív" ugyan, de fizikai megnyilvánulásaiban igenis valódinak tekinthető.

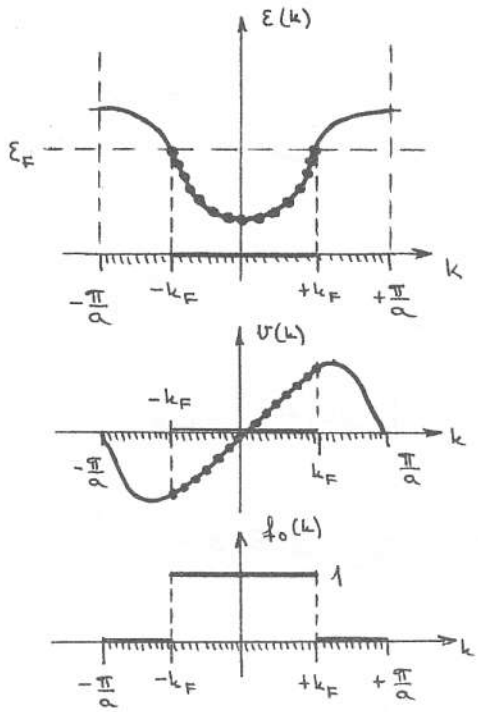
Mivel a félfémek vezetési sávja "majdnem" teljesen betöltött, ezért a vezetési elektronok együtt úgy viselkednek, mintha kevés számú pozitív töltéshordozó vezetné az áramot. A töltéshordozók viszonylag kis száma miatt nem jó elektromos vezetők és többek között ezért is hívják őket félfémeknek.

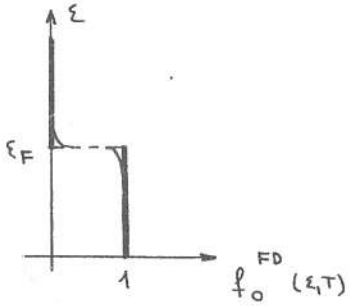
A félvezetők elektromos vezetési tulajdonságainak a tárgyalása a lyuk fogalmának a bevezetésével némileg leegyszerűsödik. A vegyérték sáv nagyszámú elektronja helyett az itt definiálható kevés számú lyukakkal lehet számolni. Tehát a félvezetőkben negatív elektronok és pozitív lyukak vezetik az elektromos áramot, jóllehet a valóságban(?) csak elektronok mozognak!

Mivel (egydimenziós modellben) a vegyérték sáv keskenyebb, mint a vezetési sáv (12.oldal), ezért itt az $\varepsilon(k)$ görbe laposabb, és így az effektív tömeg nagyobb mint a vezetési sávban. Ezért a vezetésben résztvevő lyukak (vegyértéksáv alapján számított) effektív tömege nagyobb, mint a vezetésben résztvevő elektronok (vezetési sáv alapján számított) effektív tömege. Egydimenziós modellben a lyukak mindig lomhábbak, mint az elektronok. A valóságot jobban közelítő háromdimenziós modellben ez nincsen egészen így.

2.5. Az elektromos vezetés fizikai alapjai szilárd testekben. Az OHM törvény.

2.5.1. A relaxációs idő közelítés





$$f_0(k) = f_0^{FD}\left(\varepsilon(k)\right)$$

Külső elektromos tér nincsen : $E = 0$

az áramsűrűség (1 dim ! → általánosítható 3 dim)

$$j = -\frac{e}{L}\sum_k{}' v(k) = 0$$

$$-e\,\frac{N}{L}\cdot\frac{1}{N}\sum_k{}' v(k) \xrightarrow{\text{általánosítás}} j = -e\cdot n\cdot\langle v\rangle$$

$\equiv n$ $\equiv \langle v\rangle$

n: elektron sűrűség; $\langle v\rangle$: átlagos sebesség

$$j = -\frac{e}{L}\sum_k{}' v(k) = -\frac{e}{L}\sum_k v(k)\cdot f_0(k) = 0$$

$v(k)$: a szilárdtest modelltől függ

$f_0(k)$: a külső elektromos értől és a hőmérséklettől függ

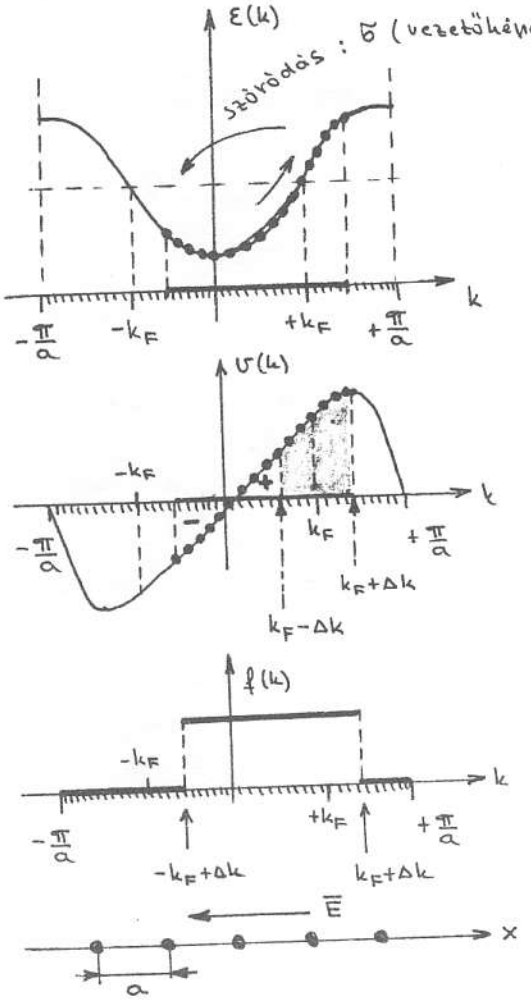
2.5. Az elektromos vezetés fizikai alapjai szilárd testekben, az Ohm törvény

Az eddigi modellben a kristályelektronok egy teljesen szimmetrikus hibamentes "merev" rácsban mozogtak. A Bloch állapotok tökéletesen alkalmazkodnak a kristály transzlációs szimmetriájához és ezt lényegében „öröklik" a Bloch-csomagok is. Külső elektromos tér hatására a kristályelektronok akadály nélkül mozoghatnak. A kristálynak nincs elektromos ellenállása. Ez a válóságban azonban egyáltalán nincsen így. Szükség van tehát (az egydimenziós) modellünk továbbfejlesztésére.

2.5.1. A relaxációs idő közelítés

Tekintsük egy egydimenziós fém vezetési sávját. Mint azt már megbeszéltük a fémelektronok esetében mindig 0 Kelvin fokos betöltöttséggel számolhatunk (3.oldal) Tehát az állapotok a Fermi szintig be vannak töltve. A sávábrát tekintve ez azt jelenti, hogy a Brillouin zóna $\left(-k_F,+k_F\right)$ tartományába tartozó N_e számú állapot van betöltve. A betöltött Bloch csomag állapotok $v(k)$ csoportsebessége adja meg (a kristályelektronok dinamikai modelljében) az elektronok makroszkopikus léptékben definiálható sebességét. Ez pedig a makroszkopikus áramsűrűséget határozza meg. Ezért meg kell vizsgálnunk a $v(k)$ sebességek "betöltöttségét" is. Célszerű ezért az $f^{FD}(\varepsilon,T)$ Fermi-Dirac eloszlásfüggvényt a "k" függvényének tekinteni, azaz a Brillouin zónán értelmezni. Az így kapott $f_0(k)$ eloszlásfüggvény adja meg formálisan azt, hogy mely "k" hullámszámú Bloch(csomag) állapotok vannak betöltve. Ha külső elektromos tér nincsen jelen, akkor ugyanannyi kristályelektron megy jobbra, mint balra. Az eredő áram(sűrűség) tehát zérus. Ahogyan annak lennie is kell.

Külső elektromos tér van ($E \neq 0$)



$$\left.\begin{aligned} F &= \hbar\dot{k} \\ F &= -eE \end{aligned}\right\} \quad \dot{k} = -\frac{eE}{\hbar}$$

$$j = -\frac{e}{L}\sum_k{}' v(k) > 0$$

(az eredő áramsűrűség nem zérus !)

$f(k)$: időben állandó (a tranziensek már lezajlottak)

↓

egyensúlyi állapot

Egyensúlyi állapotban:

$$\frac{\partial f}{\partial t} = 0 \quad \longrightarrow \quad \frac{\partial f}{\partial t} = \left[\frac{\partial f}{\partial t}\right]_\sigma - \left[\frac{\partial f}{\partial t}\right]_{\bar{E}} = \phi$$

Tehát

$$\underbrace{\left[\frac{\partial f}{\partial t}\right]_{\bar{E}}}_{\frac{\partial f}{\partial k}\cdot\dot{k} \;=\; \frac{F}{\hbar}\frac{\partial f}{\partial k}} = \left[\frac{\partial f}{\partial t}\right]_\sigma \quad \longrightarrow \quad \boxed{\frac{F}{\hbar}\frac{\partial f}{\partial k} = \left[\frac{\partial f}{\partial t}\right]_\sigma}$$

BOLTZMANN egyenlet (1 dim)

(stacionér állapot, homogén anyag)

Megjegyzés:

$\left[\frac{\partial f}{\partial t}\right]_\sigma$: fizikailag az f változási sebességét adja, matematikailag NEM DERIVÁLÁSI MŰVELETTEL lehet kiszámítani.

↓

közelítő meghatározása: RELAXÁCIÓS IDŐ fogalma

Kapcsoljunk a kristályra egy homogén $\vec{E}$ elektromos teret. Ennek hatására (15.oldal) a betöltött állapotok az egyik irányba eltolódnak. A kezdeti betöltöttség szimmetriája megszűnik. Az egyik irányban haladó kristályelektronok száma a másik irányban haladók rovására megnő. Az eredő áramsűrűség már nem lesz nulla. Tökéletes kristály esetén a betöltött állapotok ilyen értelmű eltolódása tovább folytatódna. Azonban a valóságban tökéletes és merev kristály nincsen . Mindig vannak jelen különféle típusú rácshibák, idegen atomok (=szennyeződések) , egyéb rácstorzulások. Ugyanakkor (adott hőmérsékleten) a rácsatomok folytonos rezgőmozgást is végeznek, amelynek következtében a rács minden pillanatban eltér egy kissé az ideális geometriai kristályszerkezetétől. Ennek következtében megbomlik a harmónia a Bloch állapotok és a kristályrács között. A Bloch hullámok szóródnak a szabálytalan kristályon. A kristályelektronok szempontjából ez azt jelenti, hogy az elektronok a külső térből nyert energiájukat átadják a rácsatomoknak (Joule hő formájában). Az elektronállapotok szintjen ez úgy nyilvánul meg, hogy a betöltött elektronállapotok fent említett „eltolódása” megáll és az elektronrendszer felvesz egy ún. „stacionárius” (azaz az időben már nem változó) állapotot.

Az új $f(k)$ egyensúlyi eloszlás úgy adódik, hogy a kezdeti $f_0(k)$ eloszlás egy Δk értékkel eltolódik. A $v(k)$ sebesség függvény és az $f(k)$ ismeretében az eredő j áramsűrűség kiszámítható. Nyilvánvaló, hogy a Δk eltolódás mértéke a külső $\vec{E}$ térerősségtől függ és ezért az áramsűrűség az elektromos térrel lesz arányos (ez az ún. differenciális Ohm törvény).

Az $f(k)$ eloszlás dinamikáját (és így a Δk eltolódást) az ún. Boltzmann egyenlet határozza meg. Mi ennek most az egyszerűsített, egydimenziós változatát fogjuk használni. Az egyenlethez a következő gondolatmenettel juthatunk el.

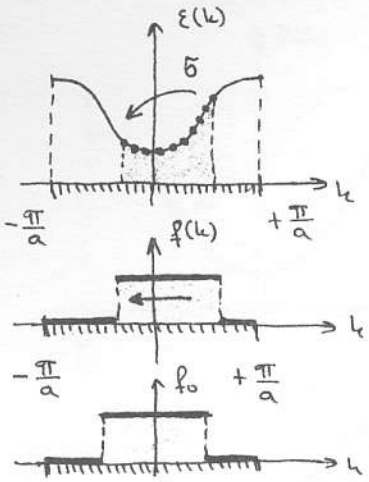
Az $f(k)$ időbeli megváltozását két hatás okozza. Az egyik a külső elektromos tér $\left[\frac{\partial f}{\partial t}\right]_E$, a másik az ezzel ellentétes "visszaszóródás" $\left[\frac{\partial f}{\partial t}\right]_\sigma$. Ez utóbbi adja meg az elektronrendszer és a kristályrács (fent részletezett) termikus kölcsönhatását. Ha a két effektus éppen kiegyenlíti egymást, akkor beáll a kívánt (termikus) egyensúlyi (stacionárius) állapot és az $f(k)$ az időben már tovább nem változik, azaz

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \left[\frac{\partial f}{\partial t}\right]_\sigma - \left[\frac{\partial f}{\partial t}\right]_E = 0$$

Mivel a külső elektromos tér a betöltött állapotok halmazát tolja el a Brillouin zónában, ezért az eloszlásfüggvény időbeli változása a "k"-kon keresztül érvényesül. Azaz az $f(k)$ eloszlás az $f(k(t))$ alakba írható.

A szóródást megadó időderivált csak formálisan jelölhető ki. Részletes számítása túlhaladja e tárgy kereteit, számunkra elegendő lesz egy globális (átfogó, részleteket nem tartalmazó) leíró jellegű közelítés használata is. Ennek a neve a "relaxációs idő" közelítés.

A relaxációs idő :



EGYENSÚLYI ÁLLAPOT
($\bar{E}=0$)

Külső tér nincsen : $\bar{E}=0 \rightarrow \bar{F}=0$

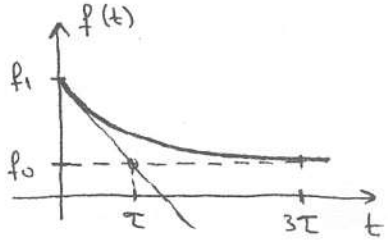
$f(k,t) \longrightarrow f_0(k)$

A rendszer NINCSEN EGYENSÚLYBAN

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \left[\frac{\partial f}{\partial t}\right]_v - \underbrace{\left[\frac{\partial f}{\partial t}\right]_E}_{\equiv \phi}$$

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \underbrace{\left[\frac{\partial f}{\partial t}\right]_v \equiv \frac{f_0 - f}{\tau}}_{\text{az u.m. RELAXÁCIÓS idő definíciója}}$$

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \frac{f_0 - f}{\tau}$$



A BOLTZMANN egyenlet ha külső tér is van ($E \neq 0$)

$$\boxed{\frac{F}{\hbar}\frac{\partial f}{\partial k} = \frac{f_0 - f}{\tau}} \longrightarrow f(k) \text{ számítható : RELAXÁCIÓS IDŐ közelítés}$$

A relaxációs idő meghatározása:

$$\boxed{\frac{1}{\tau} = \frac{1}{\tau_1} + \frac{1}{\tau_2} + \cdots}$$

pl: τ_1 termikus hatás ; τ_2 szennyezések hatása

Az $f(k)$ számítása:

$$\frac{F}{\hbar}\frac{\partial f}{\partial k} = \frac{f_0 - f}{\tau} \longrightarrow f = f_0 - \frac{\tau F}{\hbar}\underbrace{\frac{\partial f}{\partial k}}_{\downarrow}$$

$$\boxed{f = f_0 - \frac{\tau F}{\hbar}\frac{\partial f_0}{\partial k}}$$

LINEÁRIS KÖZELÍTÉS

$\equiv \Delta k$ (bevezetésével)

$$f = f_0 + \frac{\partial f_0}{\partial k}(-\Delta k) \approx f_0(k - \Delta k)$$

Tehát az $f_0(k)$ Δk-val jobbra tolódik :

$$\boxed{f \cong f_0(k - \Delta k) \;;\; \Delta k \equiv \frac{\tau e |E|}{\hbar}}$$

A relaxációs idő fogalmához a következő gondolatmenettel juthatunk el.

Tekintsük a homogén elektromos térben lévő egydimenziós modellkristályunkat. A betöltött állapotok időben nem változnak, a rendszer egyensúlyi állapotban van. Kapcsoljuk ki az elektromos teret. Ekkor az $f(k(t))$ eloszlásfüggvény időbeli megváltozása nem lesz zérus, hiszen a szóródást nem kompenzálja a külső tér, tehát

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \left[\frac{\partial f}{\partial t}\right]_{\sigma}.$$

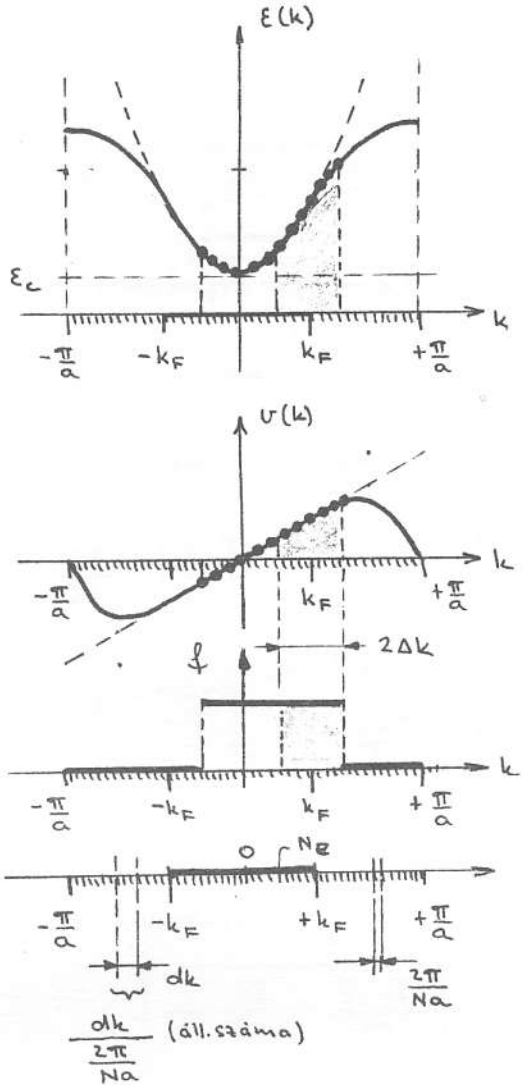
A külső tér kikapcsolása után a rendszer „hamar" felveszi az $f_0(k)$-val jellemezhető alapállapotát. Ha ismernénk a szórási tagot, akkor az egyenletet meg tudnánk oldani. Mivel azonban ezt nem ismerjük így csak általános feltételezéseket tehetünk. Tegyük fel, hogy az „f" eloszlásfüggvény változási sebessége annál nagyobb, minél távolabb van a rendszer pillanatnyi állapota az ismert „f_0" egyensúlyi végállapottól, azaz:

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \left[\frac{\partial f}{\partial t}\right]_{\sigma} = \frac{f_0 - f}{\tau}$$

E feltételezésünket az eloszlásfüggvényre alkalmazva, annak matematikai megfogalmazásban egy „τ" arányossági tényező jelenik meg. Ennek neve a "relaxációs idő". Az elnevezés eredete rögtön világossá válik, ha megoldva az egyenletet felrajzoljuk az f(t) függvényt. Most csak az időbeli változás érdekel minket, ezért a „*k*"-tól eltekinthetünk. Látható, hogy az eloszlásfüggvény exponenciális időfüggéssel közelít a végső egyensúlyi állapotához és kb. 3τ idő alatt gyakorlatilag "eléri" azt. Tehát minél erősebb a szórási effektus , a „τ" relaxációs idő annál kisebb. Ha nincsen szóródás, akkor a τ végtelen. Azaz a rendszer marad a kezdeti állapotában, hiszen nincsen olyan hatás, ami ezt az állapotot megváltoztatná. Ha több, különböző szóródást előidéző effektus hat egyszerre, akkor az eredő hatásra jellemző relaxációs időt a relaxációs idők reciprokainak összege szolgáltatja.

A Boltzmann egyenletbe a szórási tagot relaxációs idő közelítésben beírva az egyenlet lineáris közelítésben megoldható. A lineáris közelítés azt jelenti, hogy $\frac{\partial f}{\partial t} \approx \frac{\partial f_0}{\partial t}$. Eredményül megkapjuk az eloszlásfüggvény Δk eltolódását. Ez a külső elektromos térrel és a relaxációs idővel arányos, ahogyan azt vártuk is.

2.5.2. A vezetőképesség számítása



$$\varepsilon(k) \approx \varepsilon_c + \underbrace{\left[\frac{d\varepsilon}{dk}\right]_0}_{0} \cdot k + \frac{1}{2}\underbrace{\left[\frac{d^2\varepsilon}{dk^2}\right]}_{\frac{\hbar^2}{m^*}} k^2 + \dots$$

$$\varepsilon(k) \approx \varepsilon_c + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}$$ (effektiv tömeg közelítés)

$$v(k) = \frac{1}{\hbar}\frac{d\varepsilon}{dk} \approx \frac{\hbar k}{m^*}$$

$$j = -\frac{e}{L}\sum_k{}' v(k) = -\frac{e}{L}\sum_k f(k)\, v(k) =$$

$$= -\frac{e}{L}\frac{\hbar}{m^*}\sum_k k \cdot f(k)$$

(az áramsűrűség)

matematika:

$$\sum_k \dots \equiv \frac{Na}{2\pi}\int \dots dk$$

Tehát:

$$j = -\frac{e}{L}\frac{\hbar}{m^*}\cdot\frac{Na}{2\pi}\int_{-\frac{\pi}{a}}^{+\frac{\pi}{a}} k\cdot f(k)\,dk = -\frac{e}{L}\cdot\frac{\hbar}{m^*}\cdot\frac{Na}{2\pi}\int_{k_F-\Delta k}^{k_F+\Delta k} k\cdot dk$$

$$\left[\frac{k^2}{2}\right]_{k_F-\Delta k}^{k_F+\Delta k} = 2k_F\Delta k$$

$$j = -\frac{e}{L}\frac{\hbar}{m^*}\cdot\underbrace{\frac{Na}{2\pi}2k_F}_{\equiv N_e}\cdot\Delta k$$ (N_e: a vezetési sávban lévő elektronok száma)

$$j = -e\frac{N_e}{L}\cdot\frac{\hbar}{m^*}\underbrace{\Delta k}_{\frac{\tau F}{\hbar} \equiv -\frac{\tau e E}{\hbar}} = -e\frac{N_e}{L}\frac{\hbar}{m^*}\frac{\tau(-eE)}{\hbar} = +\frac{e^2\tau}{m^*}\underbrace{\frac{N_e}{L}}_{\equiv n_e}\cdot E = \frac{e^2 n_e \tau}{m^*}E$$

(n_e: a vezetési sávban lévő elektronok sűrűsége)

2.5.2. A vezetőképesség számítása

Minden a rendelkezésünkre áll ahhoz, hogy a kristály vezetőképességét kiszámítsuk.

A külső $\vec{E}$ elektromos tér hatására létrejött j áramsűrűség meghatározásához szükség van még a $v(k)$ sebesség függvényre. Egy újabb közelítés alkalmazásával erre egy egyszerű összefüggés adódik. Feltehetjük ugyanis, hogy a Δk eltolódás normális körülmények között csak akkora, hogy a betöltött állapotok nem hagyják el az $\varepsilon(k)$ diszperziós reláció parabolikus tartományát. Ezt nevezik "effektív tömeg" közelítésnek, hiszen az $\varepsilon(k) = \varepsilon_c + \frac{\hbar^2}{2m^*}k^2$ összefüggés az m^* effektív tömegű szabadon mozgó részecskékre jellemző. Ekkor a $v(k) = \frac{\hbar k}{m^*}$ sebesség függvény „k”-ban lineáris lesz, és a „j” áramsűrűség egyszerűen meghatározható. A számításokban megjelenik a vezetési elektronok „n” sűrűsége. Eredményül az adódik, hogy:

$$j = \frac{e^2 n \tau}{m^*} \cdot E$$

Tehát:

$$j = \frac{e^2 n_e \tau}{m^*} E \equiv \sigma E \qquad \text{(OHM törvény differenciális alakja)}$$

(1 dim → 3 dim)

$$\boxed{\sigma = \frac{e^2 \tau n_e}{m^*}}$$ (fajlagos) vezetőképesség

Az alkalmazott közelítések:

- STACIONER ÁLLAPOT
- HOMOGÉN ANYAG
- RELAXÁCIÓS IDŐ
- LINEÁRIS
- EFFEKTIV TÖMEG

A mozgékonyság:

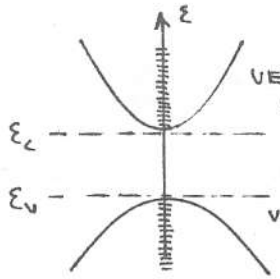
$$j = \sigma E \equiv -e \cdot n_e \cdot \langle v \rangle$$

$$\frac{(-e)(-e) n_e \tau}{m^*} E = (-e) n_e \cdot \langle v \rangle \rightarrow \underbrace{\frac{(-e)\tau}{m^*} E = \langle v \rangle}$$

$$\boxed{\mu_e = \frac{(-e)\tau}{m^*}} \leftarrow \boxed{\mu_e \cdot E = \langle v \rangle}$$

a mozgékonyság definíciója

Általánosítás félvezetőkre:



VEZETÉSI SÁV → m_e^* → μ_e (elektronok)

VEGYÉRTÉK SÁV → m_{ly}^* → μ_{ly} (lyukak)

$$\rightarrow \boxed{m_e^* < m_{ly}^* \quad |\mu_e| > |\mu_{ly}|}$$

$$j = j_e + j_{ly} = (\sigma_e + \sigma_{ly}) E = +e \underbrace{(n_e \mu_e + n_{ly} \mu_{ly})}_{|n_e| \cdot |\mu_e|} E$$

$$j = e \left(\frac{|n_e| e\tau}{m_e^*} + \frac{n_{ly} e\tau}{m_{ly}^*} \right) \cdot E$$

$\frac{m^2}{Vs}$	$\lvert\mu_e\rvert$	μ_{ly}
Ge	0,36	0,17
Si	0,18	0,04

A számolás eredményeképp megkaptuk az Ohm törvény differenciális alakját, valamint a „σ” vezetőképesség konkrét kifejezését is. Érdekes összehasonlítani ez utóbbit a klasszikus Drude-modell által kapott vezetőképesség kifejezésével. Formálisan ugyanaz a képlet adódott. De az elektron m_e tömege helyett az m^* effektív tömeget és az átlagos ütközési idő helyett a τ relaxációs időt kell használnunk.

Látható tehát, hogy a szilárd testben mozgó töltéshordozók úgy viselkednek, mintha klasszikus tömegpontok volnának. Ez a fizikai kép nagyon egyszerű és szemléletes. De tudnunk kell, hogy az alkalmazhatóságának korlátai vannak.

Foglaljuk ezért össze a felhasznált közelítéseket:

1. Az elektronrendszer **stacioner állapotban** van. Beállt az egyensúly, az elektronok állapotbetöltése időben már nem változik
2. Az **anyag homogén**. A kristályban nincsenek olyan inhomogenitások, amelyek diffúziós effektusokat hoznának létre
3. **Relaxációs idő** közelítés. A kristályatomok és a kristályelektronok között fellépő bonyolult kvantummechanikai szórási folyamatokat kiátlagolva, csupán egyetlen paraméterrel, a relaxációs idővel vesszük figyelembe .
4. **Lineáris közelítés**. A Boltzmann egyenlet közelítő megoldása, amelyben matematikai eszközökkel biztosítjuk, hogy az eloszlásfüggvény csak eltolódjék, de az alakja ne változzon
5. **Effektív tömeg** közelítés. Az elektromos vezetési folyamat során a kristályelektronok mindvégig a diszperziós összefüggés parabolikus tartományában maradnak

Az elektronikus alkatrészekben lezajló vezetési folyamatoknál gyakran használt fogalom a m mozgékonyság. Ez az alkalmazott külső elektromos térerősség és a kristályelektron rendszer $\langle v \rangle$ (statisztikai) átlagsebességének a kapcsolatára jellemző $\langle v \rangle = \mu \cdot E$. Ha az effektív tömeg nagy, akkor a mozgékonyság kicsi és viszont. Az elektronikai számításokban a differenciális Ohm törvényt gyakran a mozgékonyság felhasználásával írjuk fel.

2.6. Szilárd testek háromdimenziós modellje

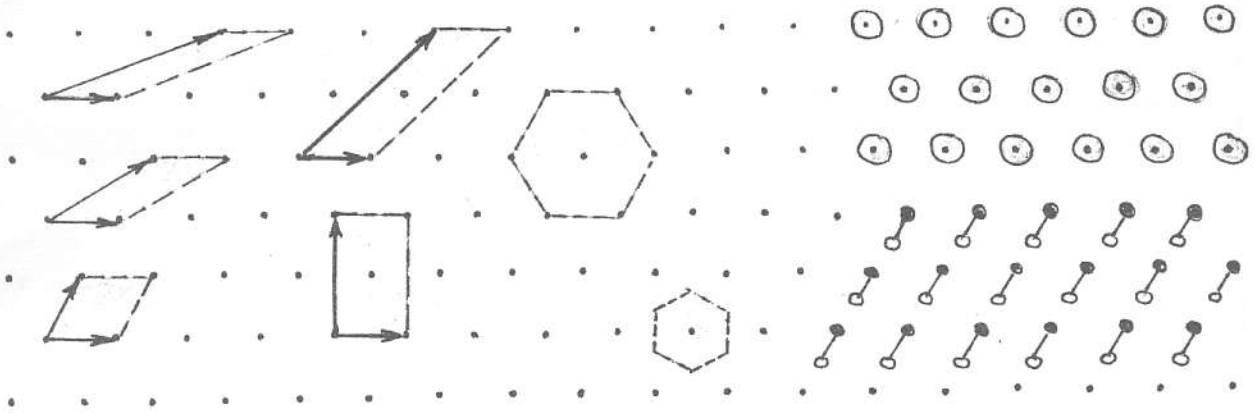
2.6.1. Ideális kristályok leírása

GEOMETRIA → Pontrács
- Transzlációs szimmetria (eltolás) → Elemi cella → Primitív cella
- Pont(csoport) szimmetria (forgatások, tükrözések, inverzió) → Bravais cella (konvencionális) [7 osztály : 14 cella]

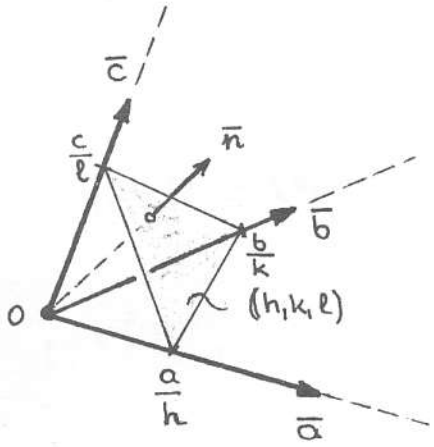
} Wigner-Seitz cella

FIZIKA (kristályszerkezetek) → Rácspont + atom(csoport)ok (= bázis)

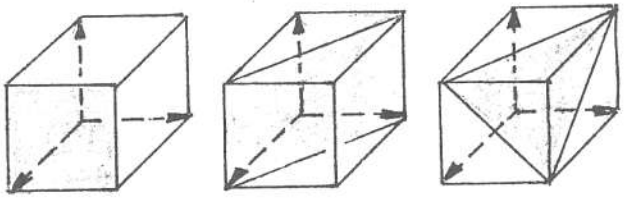
Példák : (2 dimenzió)



Kristály-síkok és irányok megadása : Miller indexek



(h,k,ℓ : egész számok)

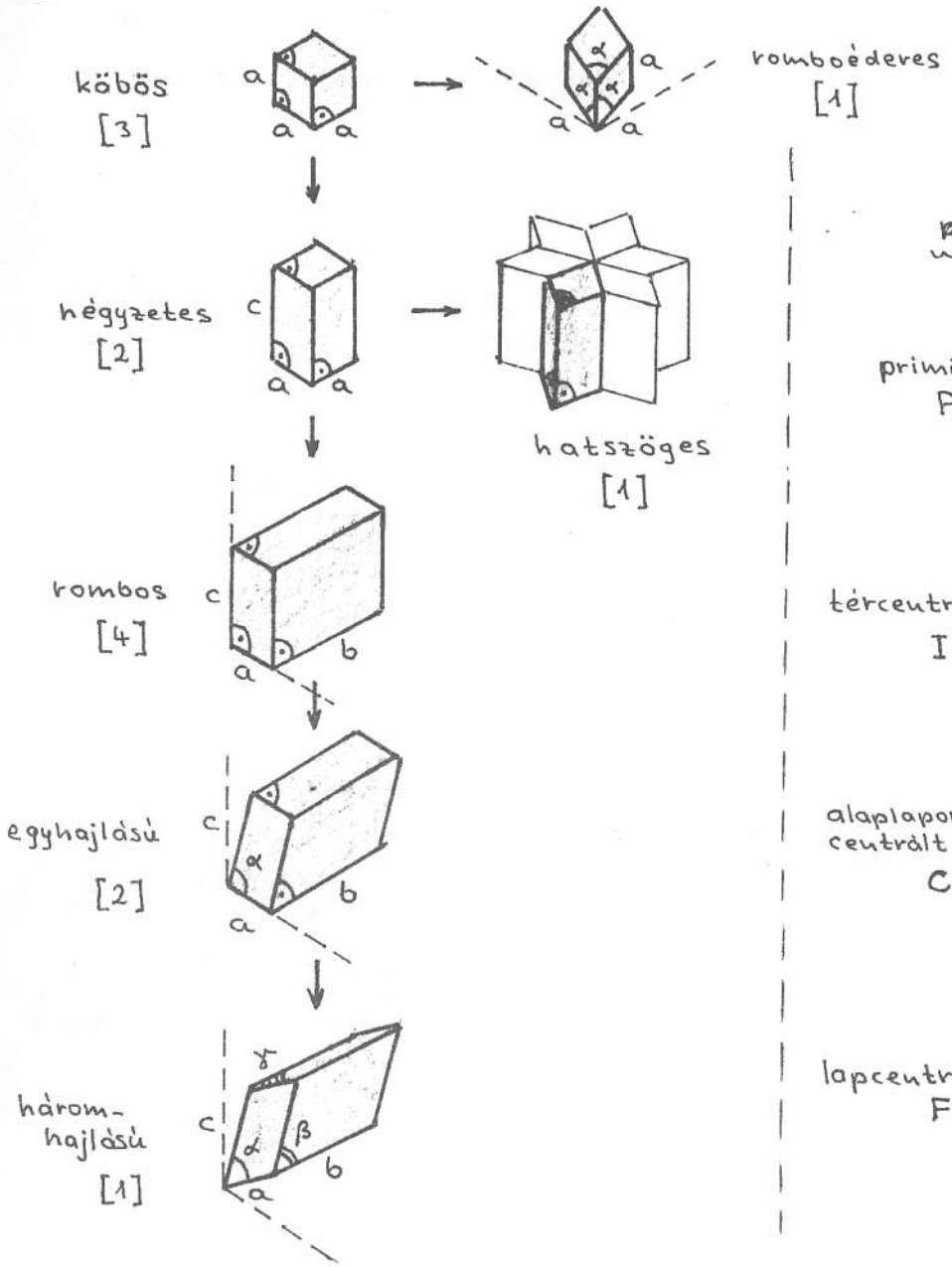


Irány kijelölése : $\bar{n}$, $|\bar{n}| = 1$

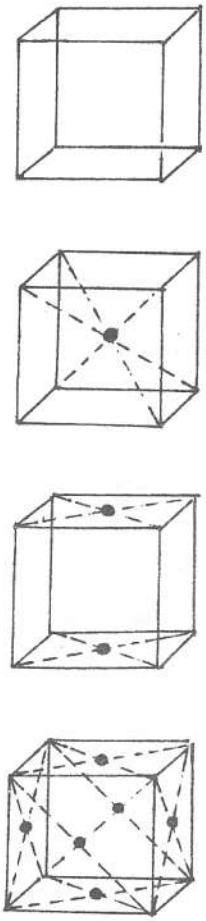
$\bar{n}\cdot\bar{a} \rightarrow h$
$\bar{n}\cdot\bar{b} \rightarrow k$
$\bar{n}\cdot\bar{c} \rightarrow \ell$
} $[h,k,\ell]$

köbös rendszerben :
$[h,k,\ell]$ merőleges (h,k,ℓ) -re

Kristályrendszerek (7 osztály)

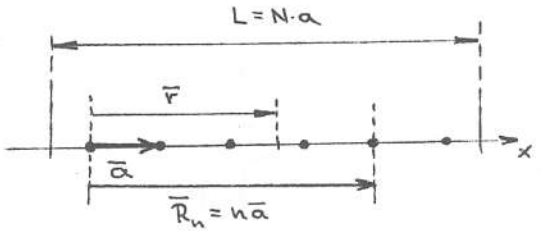


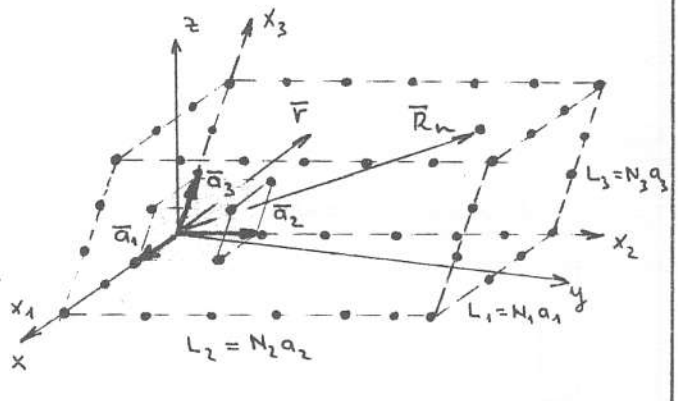
Rács típusok :



Osztály	oldalak			szögek			típusok
köbös	a	a	a	90°	90°	90°	P, I, F
négyzetes	a	a	c	90°	90°	90°	P, I
rombos	a	b	c	90°	90°	90°	P, I, F, C
egyhajlású	a	b	c	α	90°	90°	I, C,
háromhajlású	a	b	c	α	β	γ	P
hatszöges	a	a	c	90°	90°	60°	P
romboéderes	a	a	a	α	α	α	P ≡ R

2.6.2. Az elektron-állapotok számítása





Pontrács és elemi cella

$\{\bar{a}\} \rightarrow a$

$\bar{R}_n \rightarrow na$

$n = 1,2,3,4,\ldots$

x

$\{\bar{a}_1, \bar{a}_2, \bar{a}_3\}$ (bázisvektorok)

$\bar{R}_n = \sum_{i=1}^{3} n_i \bar{a}_i$

$n_i = 1,2,3,4,\ldots$

$\bar{r}$

A kristály (makroszkópikus) mérete

$L = N \cdot a$

N (rácspontok száma)

$L_i = N_i a_i \quad (i=1,2,3)$

$N = N_1 \cdot N_2 \cdot N_3$

A transzlációs szimmetria

$V(x+na) = V(x)$

$V(\bar{r}+\bar{R}_n) = V(\bar{r})$

(BORN-KÁRMÁN) féle periódikus határfeltétel

$\psi(x+Na) = \psi(x)$

$\psi(\bar{r}+N_i\bar{a}_i) = \psi(\bar{r}) \quad (i=1,2,3)$

BLOCH tétel és a BLOCH állapotok

$\psi(x+na) = e^{jkna}\,\psi(x)$

$\psi(\bar{r}+\bar{R}_n) = e^{j\bar{k}\bar{R}_n} \cdot \psi(\bar{r})$

(k) $\psi(x) = e^{jkx} \cdot u(x)$

$\psi(\bar{r}) = e^{j\bar{k}\bar{r}}\,u(\bar{r})$ (k̄)

$e^{jkNa} = 1$

$e^{j\bar{k}N_i\bar{a}_i} = 1 \quad (i=1,2,3)$

$kNa = 2\pi n$

$\bar{k}N_i\bar{a}_i = n_i \cdot 2\pi \quad (i=1,2,3)$

$ka = 2\pi\frac{n}{N}$

$\boxed{\bar{k}\bar{a}_i = 2\pi\frac{n_i}{N_i}} \quad (i=1,2,3)$

$k = \underbrace{\frac{2\pi}{a}}\,\underbrace{\frac{n}{N}}$

$\equiv b \cdot \varkappa$

reciprok bázis: $\{\bar{b}_1, \bar{b}_2, \bar{b}_3\}$

$\bar{k} \equiv \sum_j \bar{b}_j \varkappa_j$

$\sum_j \varkappa_j \underbrace{\bar{b}_j\bar{a}_i} = 2\pi\frac{n_i}{N_i} \quad (i=1,2,3)$

$\equiv 2\pi\delta_{ij}$

$\varkappa_i \equiv \frac{n_i}{N_i} \quad (i=1,2,3)$

2.6.2. Az elektronállapotok számítása

Az egydimenziós kristálymodell olyan egyszerű volt, hogy csak két szimmetria transzformációt (egy eltolást és egy tükrözést) lehetett definiálni rajta. Ez azonban már elegendő volt arra, hogy bemutassuk azt, hogy az elektronállapotokban és a sávábrában hogyan nyilvánul meg e két fajta szimmetria hatása. Mindez magában rejti az általánosítás lehetőségét. Ezért először megkeressük az analógiát az egy- és a (két)háromdimenziós pontrács között, majd ennek ismeretében megkonstruáljuk a (két)háromdimenziós elektronállapotokat és a sávábrát.

Egy háromdimenziós pontrácsot három bázisvektor az $\{\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_2\}$ segítségével építünk fel.

Egy $\vec{R}_n = n_1\vec{a}_1 + n_2\vec{a}_2 + n_3\vec{a}_3$ rácspontot a bázisvektorokkal adunk meg $(n_i = \text{egész szám})$.

A tér egy tetszőleges pontját egy $\vec{r}$ helyvektor jelöli ki.

A kristály makroszkopikus méretét a három éle mentén elhelyezkedő atomok száma $(N_i \mid i = 1,2,3)$ adja meg. A rácsot így $N = N_1 N_2 N_3$ számú atom építi fel.

A rácsszerkezetnek megfelelően fellép a $V(\vec{r} + \vec{R}_n) = V(\vec{r})$ transzlációs szimmetria.

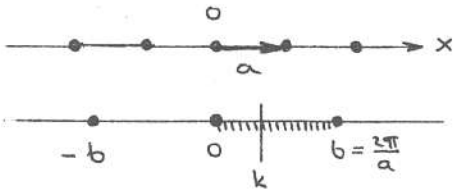
A felületi hatások elhanyagolására szolgáló Born-Kármán féle periodikus határfeltételt értelemszerűen mindhárom irányban teljesíteni kell, azaz $\psi(\vec{r} + N_i\vec{a}_i) = \psi(\vec{r})$ $(i = 1,2,3)$.

A transzlációs szimmetria következtében az elektronállapotokhoz most is Bloch függvények rendelhetők, amelyek egy $\vec{k}$ hullámszám vektorral (I. füzet 1.oldal) jellemezhetők $\psi(\vec{r}) = u(\vec{r}) \cdot e^{j\vec{k}\vec{r}}$.

A $\vec{k}$ (hullámszám)vektor meghatározása a skalár komponenseinek a megadásával történik. Ez azonban általános esetben (ha az $\vec{a}_i$ kristály bázisvektorok nem ortonormáltak) eléggé nehézkes volna. Ezért a $\vec{k}$ vektorokat egy ún. reciprok bázis $\{\vec{b}_1, \vec{b}_2, \vec{b}_3\}$ bázisvektoraival adjuk meg. Ennek az a nagy előnye, hogy a $\vec{k} = \kappa_1\vec{b}_1 + \kappa_2\vec{b}_2 + \kappa_3\vec{b}_3$ vektor skalár együtthatói (a Born-Kármán féle periódikus határfeltételek alkalmazásával) igen egyszerűen számíthatók ki.

A reciprok bázist a kristály pontrácsának az $\{\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_2\}$ bázisvektorai segítségével definiáljuk az $\vec{b}_j\vec{a}_i = 2\pi\delta_{ji}$ összefüggés szerint.

A reciprok pontrács

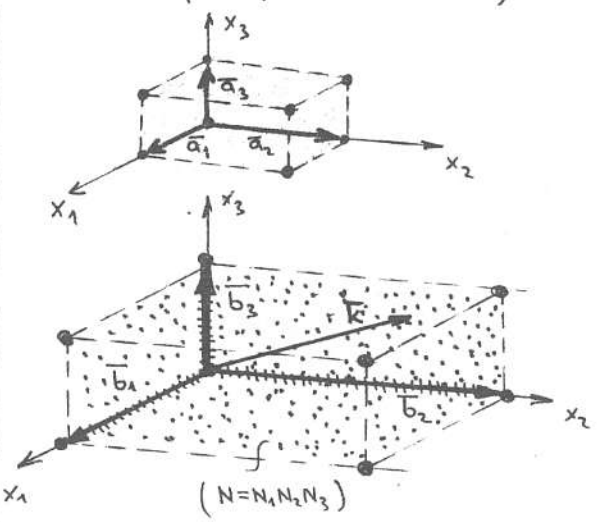


$\{a\} \longrightarrow \{b\}$

(definíció:) $a \cdot b = 2\pi$

$b = \frac{2\pi}{a}$

pl: (rombos rendszer)



$(N = N_1 N_2 N_3)$

$\{\bar{a}_1, \bar{a}_2, \bar{a}_3\} \longrightarrow \{\bar{b}_1, \bar{b}_2, \bar{b}_3\}$

(definíció:) $\bar{a}_i \bar{b}_j \equiv 2\pi \delta_{ij}$

$$\begin{cases} \bar{b}_1 = 2\pi \dfrac{\bar{a}_2 \times \bar{a}_3}{\bar{a}_1 \bar{a}_2 \bar{a}_3} \\ \bar{b}_2 = \dots \\ \bar{b}_3 = \dots \end{cases}$$

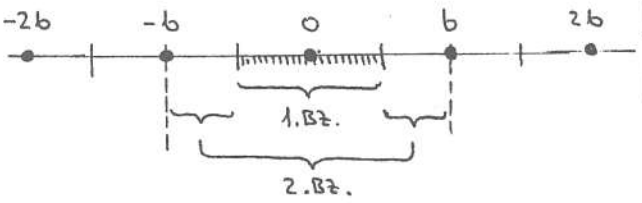
$K_m = m \cdot b$

$$\left.\begin{aligned} k' &= k + m\tfrac{2\pi}{a} \\ \psi_{k'} &\equiv \psi_k \end{aligned}\right\}$$

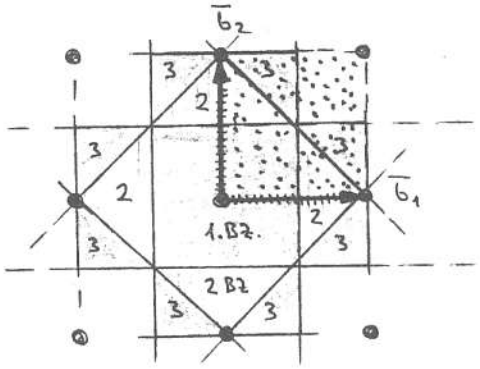
$\bar{K}_m \equiv \sum_j^3 m_j \bar{b}_j \qquad (m_j = 1,2,3,\dots)$

$$\left.\begin{aligned} \bar{k}' &= \bar{k} + \bar{K}_m \\ \psi_{\bar{k}'} &\equiv \psi_{\bar{k}} \end{aligned}\right\}$$

Brillouin zóna



pl: (2 dim, négyzetes)



Az BLOCH állapotok energiája

$\varepsilon_n(k)$

$\begin{cases} n = 1,2,3,\dots \\ k \in BZ \end{cases}$

$\varepsilon_n(\bar{k})$

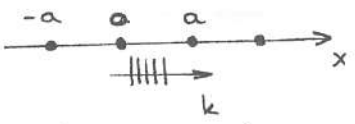
$\begin{cases} n = 1,2,3,\dots \\ \bar{k} \in BZ \end{cases}$

A reciprok bázis egy reciprok pontrácsot definiál, amelyben a rácspontokat a $\vec{K}_m = m_1\vec{b}_1 + m_2\vec{b}_2 + m_3\vec{b}_3$ vektorok adják meg $\left(m_j = \text{egész szám}\right)$. A reciprok pontrács egy primitív cellája csak olyan $\vec{k}$ vektorokat tartalmaz, amelyek különböző Bloch állapotokat határoznak meg. Így tehát a $\vec{k}$ és a $\vec{k} + \vec{K}_m$ hullámszám vektorok ugyanazt a Bloch függvényt adják meg. A reciprok pontrács Wigner-Seitz cellája a kristályrács ponttranszformációi során önmagába megy át, így tehát az egydimenziós estben használt definíció alapján (9.oldal), ez lesz az (első) Brillouin zóna.

Ennek megszerkesztése a következőképpen történik. Kiválasztjuk a reciprok pontrács egyik rácspontját, nevezzük ezt el Γ (gamma) pontnak. Ezek után megkeressük, a gamma pontot a legközelebbi rácspontokkal összekötő, egyenes szakaszokat. Majd felvesszük ezen egyenes szakaszok felező merőleges síkjait. Ezek a síkok fogják határolni az első Brillouin zónát. Mivel a kristályrács ponttranszformációi során a reciprok pontrács valamint az őket összekötő egyenesek rendszere önmagába megy át, ezért a zóna is önmagába fog transzformálódni. Ha ugyanezt az eljárást folytatjuk a második, a harmadik, stb. szomszédokkal, akkor mindig az újabb és a régi síkok által határolt térrész fogja adni a második, a harmadik, stb. Brillouin zónákat. A Bloch állapotú kristályelektronok lehetséges energiáit a $\varepsilon_\nu\left(\vec{k}\right)$ kifejezés adja meg ahol $\nu = 1,2,3,\ldots$ a sávindex. Ezen (többértékű) vektorváltozós skalár függvény (rendszer) szemléletes ábrázolására jól kidolgozott módszerek vannak. Az elkövetkezőkben ezzel fogunk megismerkedni. Ugyanis ez elengedhetetlenül szükséges ahhoz., hogy egy valódi kristály bonyolultnak tűnő sávszerkezetéből kiolvashassuk a minket érdeklő, a mérnöki munkához szükséges adatokat .

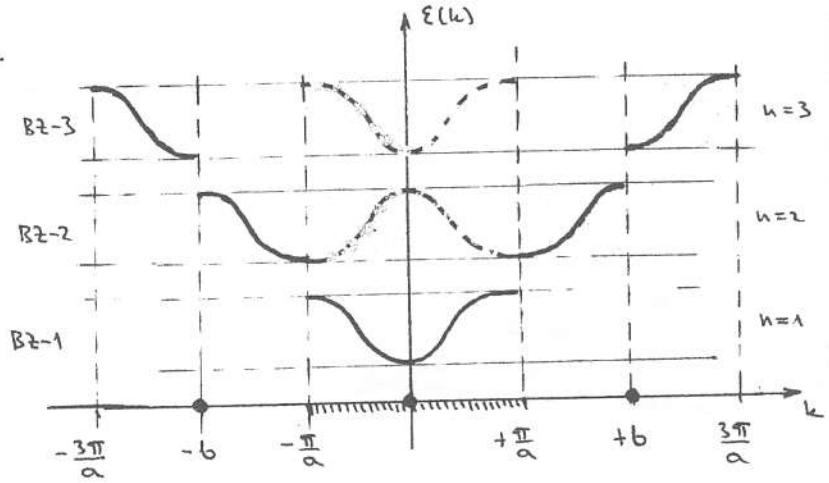
2.6.3. A sávszerkezet (diszperziós reláció)

1 dimenziós modell

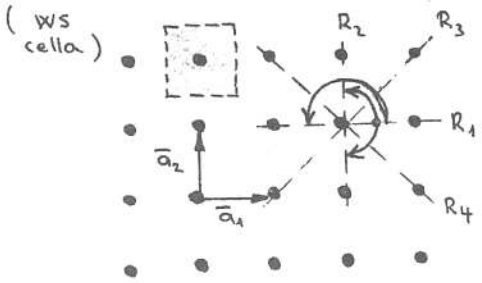


(BLOCH állapot)

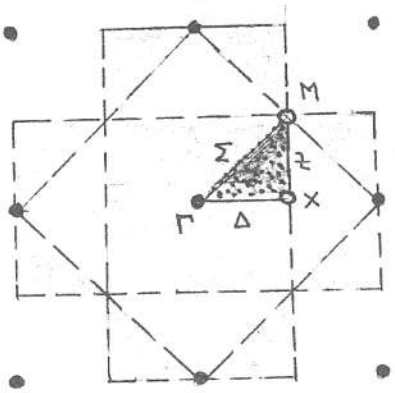
$\psi(x)$



2 dimenziós modell

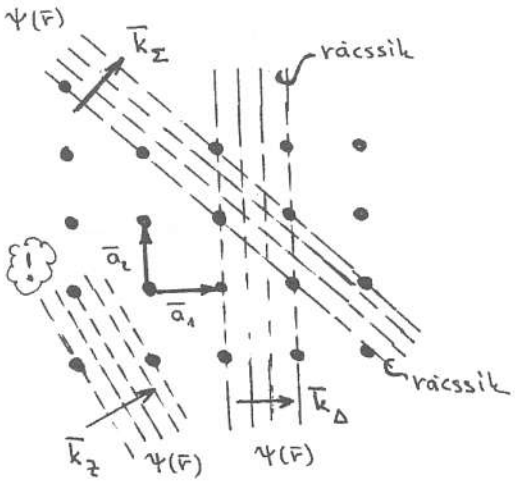


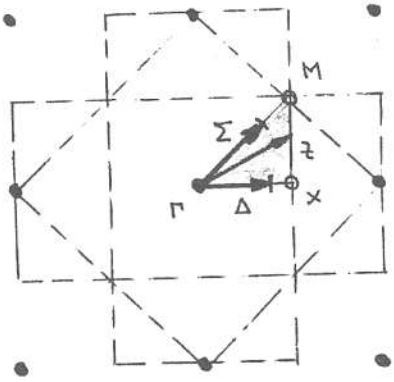
Pont (csoport) TRANSZFORMÁCIÓK



(BRILLOUIN ZÓNÁK)

nevezetes pontok és tengelyek.





$\varepsilon(k_\Delta) \rightarrow$ 1 dim

$\varepsilon(k_\Sigma) \rightarrow$ 1 dim

2.6.3. A sávszerkezet (diszperziós reláció)

A háromdimenziós kristály energia sávszerkezete, sávábrája egyes részletében igen hasonlít az egydimenziós modelléhez, de vannak olyan új vonásai, amelyek a térbeli dimenziószám megnövekedéséből fakadnak. Ezek már kétdimenziós modelleken is megjelennek. Mivel a kétdimenziós modellek szemléltetése egyszerűbb, ezért először ezen mutatjuk be az említett sajátosságokat. A valódi, háromdimenziós kristályok sávszerkezete ezek után már könnyen érthető lesz.

Az egyszerűség végett tekintsünk egy "egyszerű négyzetes" kristályt. (Ez felelne meg a háromdimenziós egyszerű köbös kristályszerkezetnek.) Ennek a reciprok pontrácsa szintén négyzetes lesz. A Brillouin zónák most síkbeli tartományok, amelyek megszerkesztése ez előzőekben elmondottak szerint történik. Azzal az értelemszerű változással, hogy a felező síkok helyett most felező egyenesek alkotják a Brillouin zónák határait.

A négyzetes rács valódi ponttranszformációi: forgatások (3 db.), tükrözések (4 db.) és az inverzió.

Az első Brillouin zóna tartalmazza azokat a $\vec{k}$ vektorokat, amelyekre meg kell határoznunk az $\varepsilon_\nu\left(\vec{k}\right)$ kristályelektron energiákat.

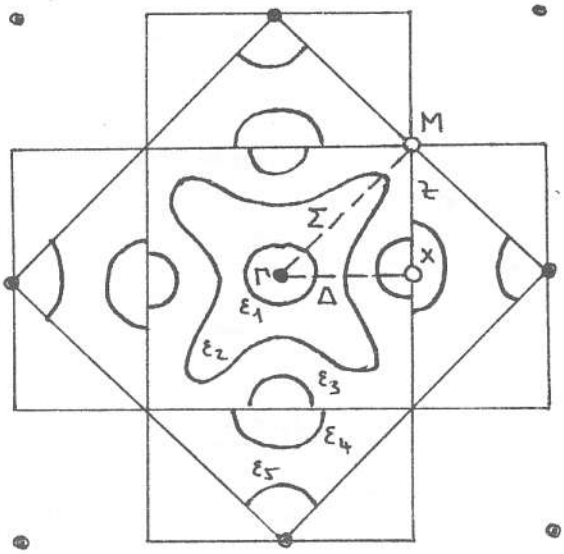
A pontszimmetria miatt könnyen kijelölhető a Brillouin zónának az a legkisebb egyszeresen összefüggő elemi része, amellyel a forgatások és a tükrözések alkalmazásával az egész zóna "lefedhető". Elegendő ezért az energia sajátértékeket csak ebbe a tartományba tartózó elektron állapotokra kiszámítani. A többi már ezekből a pontszimmetria révén kiadódik. Ezt az elemi tartományt nevezetes pontok $\left(\Gamma, X, M\right)$és tengelyek $\left(\Sigma, \Delta, Z\right)$ határolják. Az ezeken lévő pontok bizonyos értelemben "speciális" hullámszám vektorokat jelentenek. Például a Σ és a Δ tengelyek pontjaihoz tartozó Bloch hullámok hullámfrontjai éppen a kristályrács bizonyos rácssíkjaival párhuzamosak. Így ezek viselkedése, érthetően, hasonló lesz az egydimenziós hullámokéhoz, ezért a hozzájuk tartozó sávábra is hasonló jellegű kell, hogy legyen. Ezt a tényt a későbbiekben majd fel is fogjuk használni

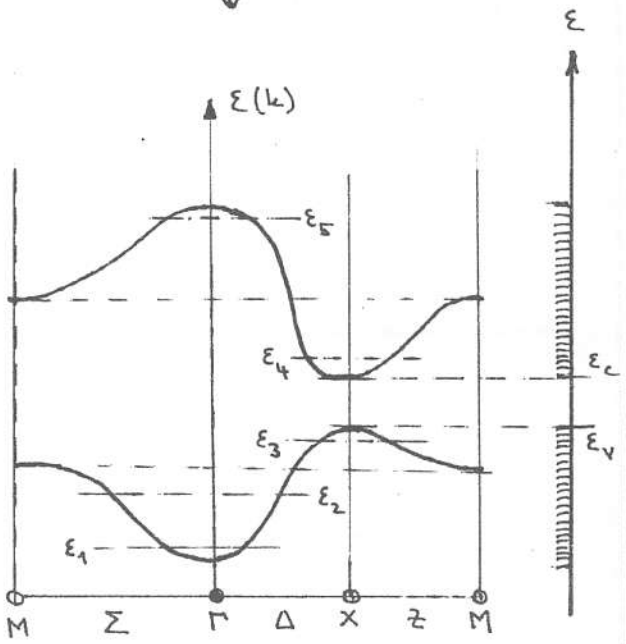
Lehetséges diszperziós relációk (≡ sávszerkezet) 2-dimenziós modellen.

$\mathcal{E}(\vec{k})$ ⟶ $\mathcal{E}(\vec{k}) = \text{állandó}$ (FERMI felület)

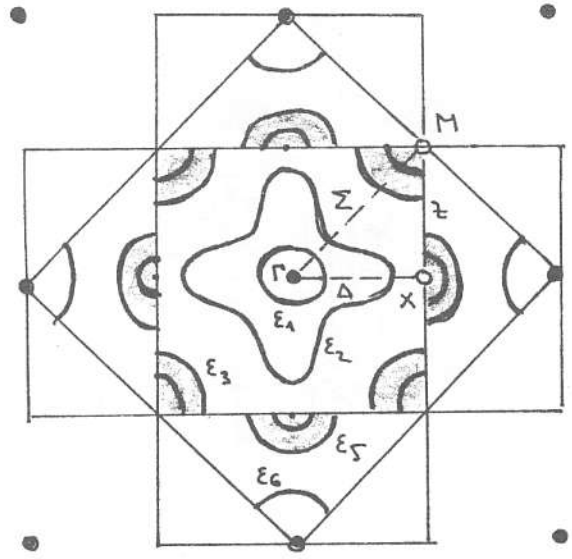
↓ SZEMLÉLTETÉS

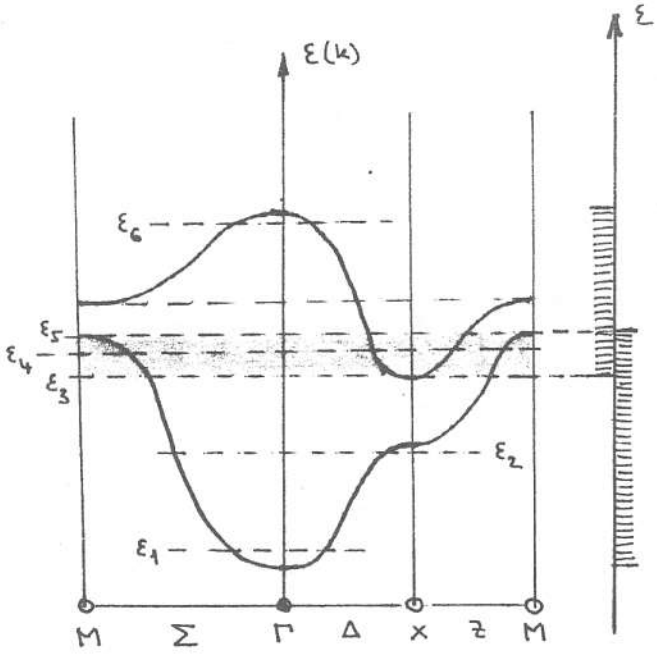
– Tiltott sáv van





– Az u.n. "sávátfedés" → tiltott sáv nincsen





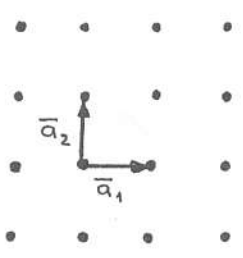
Az $\varepsilon_\nu\left(\vec{k}\right)$ ($\nu = 1,2,3,...$) elektronenergiák szemleltetése két, egymást kiegészítő módon történik. Az egyik módszernél a $\vec{k}$ vektorokat (a kiterjesztett Brillouin zónákon) a teljes reciprok rácsban értelmezzük és az első zónában az $\nu = 1$, a másodikban az $\nu = 2$, stb. sávindexnek megfelelő energia értékeket adjuk meg. Ezáltal már csak egy egyértékű vektorváltozós $\varepsilon\left(\vec{k}\right)$ energia függvényünk van. Ezt pedig a matematikában tanultak szerint ún. "szintfelületekkel" ábrázoljuk. A szilárdtestfizikában ezeket (a Brillouin-zónában definiálható felületeket) Fermi felületeknek hívják. A "szintfelület" (Fermi felület) jelen esetben (a két dimenzió miatt) az a görbe vonal, amelynek minden $\vec{k}$ pontjához ugyanaz az energiaérték tartozik. Ezek, a Brillouin-zónában felvett szintvonalak természetesen eleget tesznek a kristályra jellemző pontszimmetriáknak.

A másik módszernél a Brillouin zóna elemi tartományát határoló tengelyek (élek) mentén kiszámítjuk az $\varepsilon_\nu\left(k\right)$ $\nu = 1,2,3,...$energiákat és azt az illető tengely mentén mint egy egyváltozós többértékű függvényt felrajzoljuk. A kapott két ábra nem független egymástól. A közös pontoknál meg kell, hogy feleljenek egymásnak.

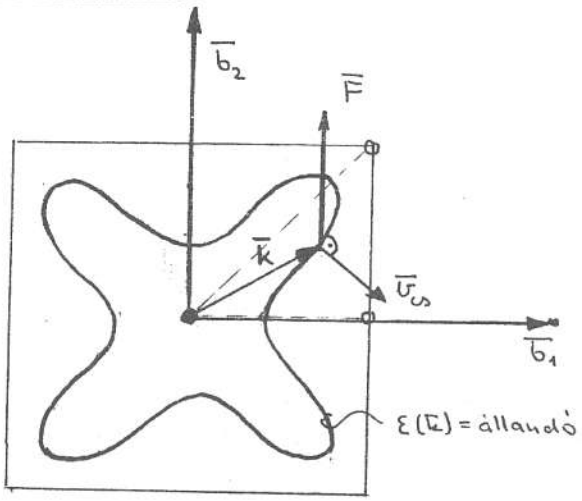
Anélkül, hogy bármit is számolnánk, az eddigi egydimenziós tapasztalatunk is elég már ahhoz, hogy kvalitatíve helyes ábrákat rajzoljunk. Ehhez fogjuk felhasználni azt, a fizikai meggondoláson alapuló észrevételünket, hogy a Σ és a Δ tengelyek mentén az egydimenziós esethez hasonló $\varepsilon_\nu\left(k\right)$ függvényeket kell kapnunk. A Z tengely mentén a két végpont (X és M) között monoton görbéket "kell" (?) rajzolnunk.

Két, egymástól lényegesen különböző sávábra szerkeszthető. Az egyiknél megjelenik a már ismert tiltott sáv. A másik azonban olyan tulajdonságot mutat, ami újdonság az egydimenziós modellhez képest. Ez pedig az ún. "sávátfedés" jelensége. Ekkor a Brillouin zónában olyan szintfelületek jelennek meg, amelyek két zónára is kiterjednek. A bemutatott példán ez az $\varepsilon_3 \le \varepsilon \le \varepsilon_5$ energiához tartozó Fermi–felületek. Az energiaskálán ez a tiltott sáv eltűnéséhez vezet. Ezáltal válik érthetővé az, hogy páros vegyértékű fémek is létezhetnek A egydimenziós modell szerint ez ugyanis lehetetlen volna (III.füzet 17.oldal).

2.6.4. Az elektronok dinamikája



Rajz (2 dim)
↓
Számolás (3 dim)



B.z.

$$\bar{k} = \sum_j \mathcal{K}_j \bar{b}_j \longrightarrow \mathcal{E}(\bar{k}) \equiv \mathcal{E}(\mathcal{K}_1, \mathcal{K}_2, \mathcal{K}_3)$$

$$\bar{F} = \hbar \dot{\bar{k}}$$

$$v_{cs} = \frac{1}{\hbar}\frac{d\mathcal{E}}{dk} \longrightarrow \bar{v}_{cs} = \sum_i^3 v_i \bar{b}_i = \frac{1}{\hbar}\sum_i^3 \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \mathcal{K}_i}\bar{b}_i \equiv \underbrace{\frac{1}{\hbar}\,\mathrm{grad}_{\bar{k}}\,\mathcal{E}(\bar{k})}$$

$$v_i = \frac{1}{\hbar}\frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \mathcal{K}_i}$$

$\bar{v}_{cs}$ merőleges az $\mathcal{E}(\bar{k})$ = állandó (FERMI) felületre

$$a_{cs} = \frac{1}{m^*}F \longrightarrow \bar{a}_{cs} = \sum_i^3 a_i \bar{b}_i = \underline{\underline{\left[\frac{1}{m^*}\right]}} \cdot \bar{F}$$

$$a_i = \sum_j^3 \frac{1}{m^*_{ij}} F_j$$

(az effektiv tömeg tenzor definiciója)

$$\frac{1}{m^*} = \frac{1}{\hbar^2}\frac{d^2\mathcal{E}}{dk^2} \longrightarrow \boxed{\frac{1}{m^*_{ij}} = \frac{1}{\hbar^2}\frac{\partial^2 \mathcal{E}}{\partial \mathcal{K}_i \partial \mathcal{K}_j}}$$

(az effektiv tömeg tenzor (mátrix) komponenseinek meghatározása)

↓ SPECIÁLIS ESETEK

$$\begin{bmatrix} \frac{1}{m^*_1} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{m^*_2} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{m^*_3} \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} \frac{1}{m^*} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{m^*} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{m^*} \end{bmatrix} \equiv \frac{1}{m^*} \cdot \underline{\underline{I}}$$

$$j = \sigma E \longrightarrow \bar{j} = \underline{\underline{\sigma}} \cdot \bar{E} \longrightarrow \text{speciális esetben } \underline{\bar{j} = \sigma \bar{E}}$$

$$\sigma = \frac{e^2 n \tau}{m^*} \qquad \underline{\underline{\sigma}} = e^2 n \tau \underline{\underline{\left[\frac{1}{m^*}\right]}}$$

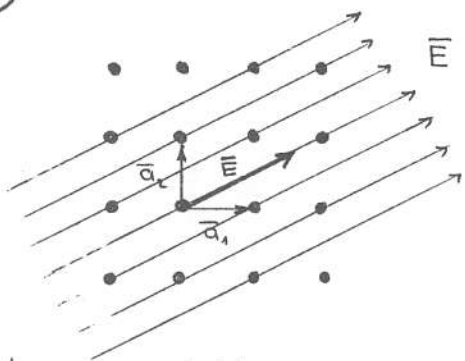
2.6.4. Az elektronok dinamikája

Mint azt már láttuk, ha a kristályra külső (pl.) elektromos teret kapcsolunk, akkor a kristályelektronok dinamikáját effektív tömeg közelítésben szoktuk tárgyalni. Ekkor a kristályelektronok állapotához Bloch-féle hullámcsomagokat rendelünk. Ugyanezt kell csinálnunk a két(három)dimenziós modell esetén is. Ügyelnünk kell azonban arra, hogy most a vektorokkal(!) $\left(\vec{r},\vec{k},\vec{v}_{cs},\vec{a}_{cs},\vec{F},...\text{stb.}\right)$ kell dolgoznunk. Így a $\vec{v}_{cs}$ csoportsebesség definíciójában szerepelő elsőrendű „k”-szerinti deriválás helyett a neki megfelelő gradiens képzés művelete lép. Az $\vec{a}_{cs}$ csoportgyorsulás számításakor szükséges „k”-szerinti másodrendű deriválást a neki megfelelő derivált tenzorral kell helyettesíteni. Láthatóan az effektív tömeg is tenzor mennyiség lesz. (A tenzor a véges dimenziós vektortéren értelmezett lineáris transzformáció) Ez fizikailag azt jelenti, hogy az erő és az általa létrehozott gyorsulás nem fog egy egyenesbe esni. Tudva azt, hogy az effektív tömeg magába foglalja az kristályrács hatását is ezen nem kell csodálkoznunk.

Az effektív tömeg tenzor definíciójából következik, hogy az őt megadó (effektív tömeg) mátrix szimmetrikus lesz. Ugyanis (mint azt a matematikai analízis alapjaiban tanultuk) a vegyes másodrendű deriváltaknál a deriválás sorrendje nem számít. Az is ismeretes, hogy minden szimmetrikus tenzor diagonalizálható. Azaz mindig felvehető egy olyan koordinátarendszer, amelyben csak a (szimmetrikus) tenzor főátlójában vannak véges mennyiségek, a többi elem zérus. Ez a mi esetünkben azt jelenti, hogy legáltalánosabb esetben az effektív tömeg tenzor három különböző effektív tömeggel jellemezhető. A legegyszerűbb esetben egyetlen effektív tömeg van, ami azt jelenti, hogy az effektív tömeg tenzor egy skalárral való szorzást jelent.

Az eddigiek eredményeképpen az Ohm törvényben szereplő σ vezetőképesség is $\underline{\underline{\sigma}}$ tenzor lesz. (Általában két vektort tenzori, azaz lineáris, kapcsolat fog összekötni).

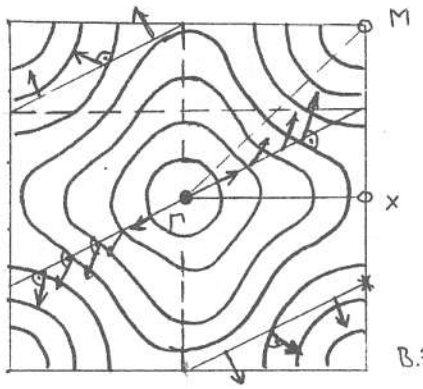
Az elektron mozgása külső elektromos tér hatására



homogén elektromos tér

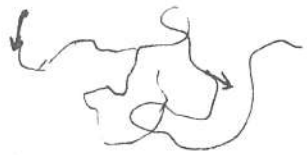
$$\overline{F} = -e\overline{E}$$

$$\overline{F} = \hbar\dot{\overline{k}}$$



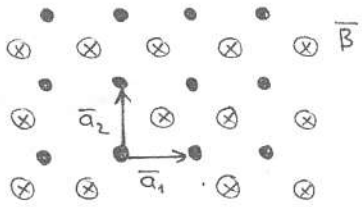
$\overline{v}_{cs}$

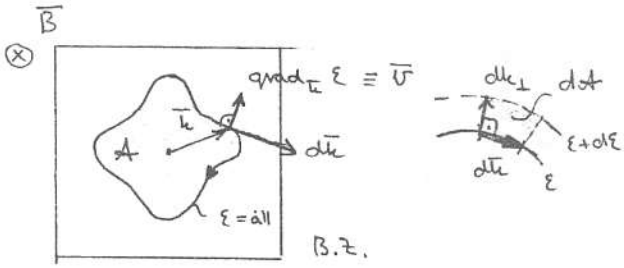
ideális kristály szerkezet ($\vartheta = \infty$) → szóródás nincsen.



(Bonyolult pálya)

Az elektron mozgása homogén mágneses térben





$$\left.\begin{aligned}\overline{F} &= -e\,\overline{v}\times\overline{B}\\ \overline{F} &= \hbar\dot{\overline{k}}\end{aligned}\right\} \quad \hbar\dot{\overline{k}} = -\frac{e}{\hbar}\left(\text{grad}_{\overline{k}}\,\varepsilon\right)\times\overline{B}$$

$$d\overline{k} = -\frac{e}{\hbar^2}\left(\text{grad}_{\overline{k}}\,\varepsilon\right)\times\overline{B}\,dt \qquad \frac{1}{\hbar}\left|\text{grad}_{\overline{k}}\,\varepsilon\right| \equiv v_\perp$$

$$dk = \frac{e}{\hbar}\,v_\perp\cdot B\cdot dt$$

($\overline{k}$ végpontja mindig az $\varepsilon(\overline{k}) = \text{áll}$ görbén van)

$$dt = \frac{\hbar}{eB}\,\frac{dk}{v_\perp}$$

A keringési idő:

$$T_c = \frac{\hbar}{eB}\oint\frac{dk}{v_\perp}$$

körpálya esetén →

$$T_c = \frac{2\pi}{\omega_c} = \frac{2\pi}{\frac{eB}{m^*}}$$

$$\frac{2\pi}{eB}\,m^*_B \equiv \frac{\hbar}{eB}\oint\frac{dk}{v_\perp}$$

$$m^*_B = \frac{\hbar}{2\pi}\oint\frac{dk}{v_\perp}$$

Tehát

$$m^*_B = \frac{\hbar^2}{2\pi}\oint\frac{dk_\perp\,dk}{d\varepsilon} = \frac{\hbar^2}{2\pi}\,\frac{dA}{d\varepsilon} \longrightarrow m^* \quad \text{(körpálya esetén)}$$

$$v_\perp \equiv \frac{1}{\hbar}\,\frac{d\varepsilon}{dk_\perp}$$

Vizsgáljuk meg, hogy milyen "pályán" fog mozogni egy a makroszkopikus skálán pontszerűnek képzelt kristályelektron. A fizikai jelenséget a kétdimenziós modellen mutatjuk be.

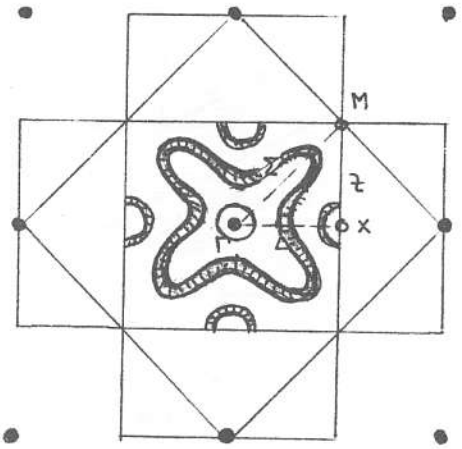
Kapcsoljunk a kristályra egy homogén $\vec{E}$ elektromos teret!

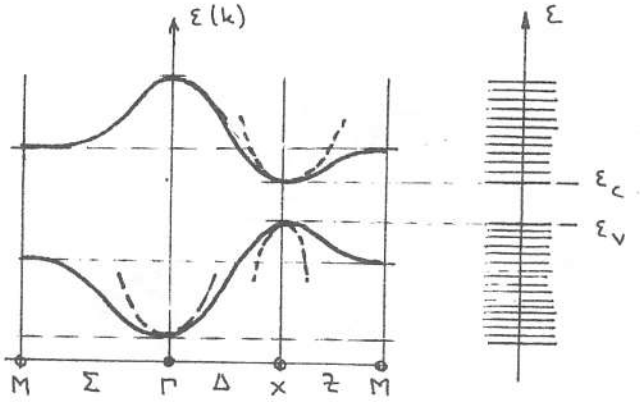
Ez a tér a kristályelektronra állandó $\vec{F} = -e\vec{E}$ erőt fejt ki. A $\vec{v}_{cs}$ csoportsebességet célszerű a Brillouin zónában ábrázolni. Magából a definícióból következik, hogy a csoportsebesség vektor mindig merőleges lesz a Fermi felületekre (a gradiens miatt!). Az állandó külső erő pedig az állapotot reprezentáló "pontszerű spektrumot" egyenletes sebességgel mozgatja a Brillouin zónában, a már jól ismert (III.füzet 15.oldal) $\vec{F} = \hbar\dot{\vec{k}}$ összefüggésnek megfelelően. (Ez a spektrum csak a zóna méretéhez képest "pontszerű", válójában igen sok $\vec{k}$ -vektor végpontját tartalmazza, amelyek előállítják a kristályelektront reprezentáló hullámcsomagot). A sebesség iránya és nagysága pillanatról pillanatra változni fog. Ennek a következtében, a kristály makroszkopikus méretéhez képest „pontszerűnek" tekinthető (hullámcsomaggal megadott) kristályelektron bonyolult, zegzugos mozgást fog végezni a kristályban.

Vizsgáljuk meg mi történik akkor, ha a kristályra merőleges, homogén mágneses teret kapcsolunk be!

Ekkor a kristályelektronra ható Lorentz erő merőleges lesz a mindenkori (csoport)sebességre. Mivel a csoportsebesség merőleges a Fermi felületre (most ezt vonalak jelenítik meg), így a $\vec{k}$ vektor mindvégig a Fermi felületen marad. Tehát a kristályelektron energiája nem fog megváltozni, ahogyan azt az elektrodinamika szerint vártuk is. A Brillouin zónában az elektront reprezentáló pont (ne feledjük, valójában ez egy nagyon kis kiterjedésű "pontszerű" spektrum!) egy zárt görbén mozog és ennek megfelelően a kristályelektron is egy zárt pályán mozog a kristályban. A T_C keringési idő nyilvánvalóan mindkét esetben ugyanakkora. Ha az elektron nem kristályban mozogna, akkor a jól ismert körpályát és a ciklotron frekvenciát kapnánk. Ki lehet számítani annak az elektronnak az m_B^* effektív tömegét, amelyik ciklotron frekvenciája éppen a most kiadódó körfrekvenciával egyenlő. Ez szoros összefüggésben van a Fermi "vonal" által körbezárt területtel.

2.6.5. Az állapotsűrűség

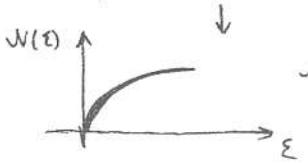




$\{\Gamma, X\}$ pontok környékén

$$\varepsilon(k) \cong \frac{\hbar^2}{2m^*}(k-k_i)^2 \qquad (i=\Gamma, X)$$

(SZABAD ELEKTRON)

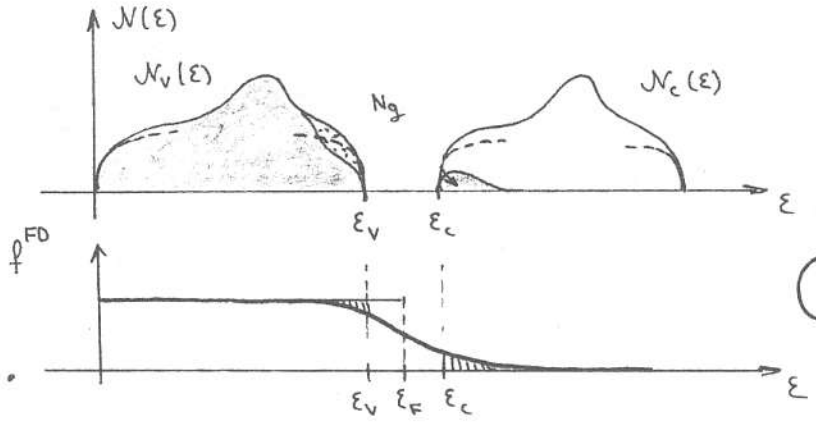


$$N(\varepsilon) = A \cdot m^{\frac{3}{2}} \sqrt{\varepsilon}$$

Félvezetők esetében :

$$N_v(\varepsilon) = A\, m_v^{*\frac{3}{2}} \cdot \sqrt{\varepsilon_v - \varepsilon} \qquad (m_v^* \equiv m_{ly}^*)$$ VEGYÉRTÉK SÁVBAN

$$N_c(\varepsilon) = A\, m_c^{*\frac{3}{2}} \cdot \sqrt{\varepsilon - \varepsilon_c} \qquad (m_c^* \equiv m_e^*)$$ VEZETÉSI SÁVBAN

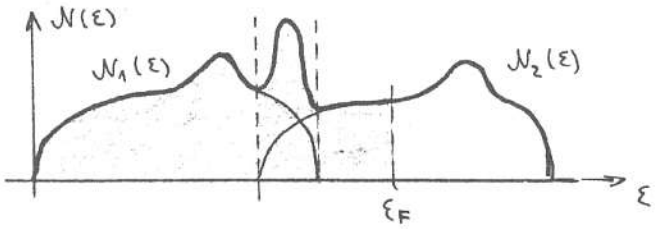


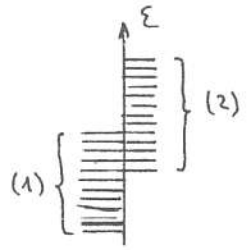
N = állandó

$$m_{ly}^* > m_e^*$$

$$\varepsilon_F > \frac{\varepsilon_v + \varepsilon_c}{2}$$

Vezetők esetén (ha sávátfedés van)





2.6.5 Az állapotsűrűség

Láttuk, hogy kétdimenziós kristálymodell esetén a sávszerkezet (sávábra) bonyolultabb szerkezetű, mint egy dimenzióban volt és mindent tud már, amit a háromdimenziós eset produkál. Ezért a kétdimenziós modell alapján pontos kijelentéseket tehetünk a reális kristályok sávszerkezetének néhány általános tulajdonságára. Az egyik ilyen az állapotsűrűség. Az állapotsűrűséget az elektronok energia szerinti eloszlásának a meghatározásához kell ismernünk.

A kétdimenziós kristály sávábráját tekintve látható, hogy a sáv szélein az $\varepsilon_v(k)$ függvénynek szélső értéke van. Ezért ez parabolával közelíthető. De ez a "parabolikus sávszél" egyben azt is jelenti, hogy itt az effektív tömeg közelítést használhatjuk. Azaz a kristályban mozgó elektronokat (a sávszél környéki energiákon!) szabadon mozgó, de effektív tömeggel rendelkező elektronoknak tekinthetjük. Az egyszerűség végett olyan (szimmetrikus) esetet vizsgálunk, amikor az effektív tömeg egyetlen (m^*) skalárral adható meg! Mint azt már láttuk, a szabadelektronok állapotsűrűsége (három dimenzióban) $\sqrt{\varepsilon}$ -nal arányos (III.füzet 2.oldal). Mivel a Fermi felület a sáv közepén eltér a "gömbtől" (háromdimenziós modell), így ott az állapotsűrűség is eltér a négyzetgyökös függvénytől (megmutatható, hogy nagyobb lesz!)

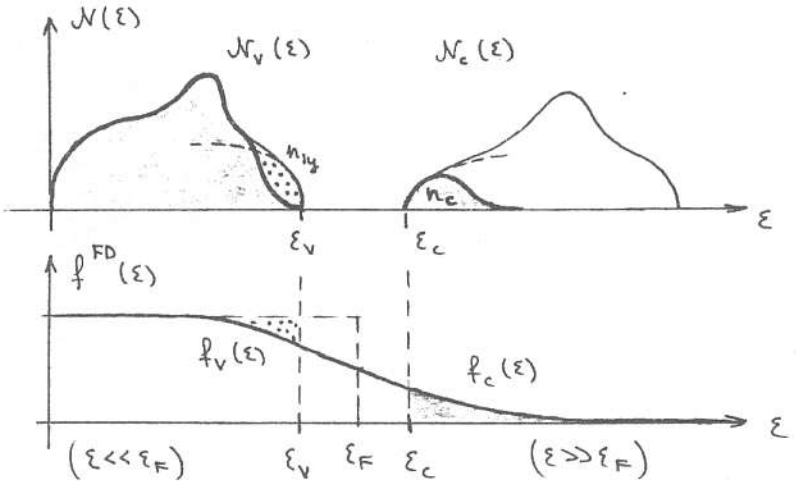
Vegyünk először egy félvezetőt!

A tiltott sáv környékén az állapotsűrűség a "négyzetgyökös" függést követi. A két "gyök" meredeksége azonban az effektív tömegek különbözősége miatt nem lesz egyenlő. Ha a vezetési sáv elektronjainak és a vegyérték sáv lyukainak az effektív tömege megegyezne, akkor a Fermi-szintet (az elektronszám állandósága miatt) pontosan a tiltott sáv közepébe kellene helyezni. Mivel a lyukak effektív tömege (általában) nagyobb mint az elektronoké, ezért a Fermi-szint kissé a felezőpont fölött lesz. A pontos számolással később találkozunk.

Sávátfedés esetén, az állapotok összeadódnak és az eredő állapotsűrűség értelemszerűen megszerkeszthető.

2.7. Félvezetők általános tulajdonságai

2.7.1. A Fermi szint meghatározása szerkezeti félvezetők esetén



$$f_c(\varepsilon) = \frac{1}{e^{\frac{\varepsilon-\varepsilon_F}{kT}}+1} \approx e^{-\frac{\varepsilon-\varepsilon_F}{kT}}$$

$$f_v(\varepsilon) \equiv 1 - f^{FD}(\varepsilon) = 1 - \frac{1}{e^{\frac{\varepsilon-\varepsilon_F}{kT}}+1} = \frac{e^{\frac{\varepsilon-\varepsilon_F}{kT}}}{e^{\frac{\varepsilon-\varepsilon_F}{kT}}+1} \approx e^{\frac{\varepsilon-\varepsilon_F}{kT}}$$

A vezetési sávban lévő elektronok száma:

$$n_c = \int_{\varepsilon_c}^{\infty} N_c(\varepsilon)\cdot f_c(\varepsilon)\,d\varepsilon = A\cdot m_e^{*\frac{3}{2}} \cdot \int_{\varepsilon_c}^{\infty} \sqrt{\varepsilon-\varepsilon_c}\cdot e^{-\frac{\varepsilon-\varepsilon_F}{kT}}\,d\varepsilon$$

legyen:

$$\frac{\varepsilon-\varepsilon_c}{kT} \equiv x \quad \longrightarrow \quad \sqrt{\varepsilon-\varepsilon_c} \equiv \sqrt{kT}\sqrt{x} \quad \longrightarrow \quad d\varepsilon = kT\,dx$$

$$e^{-\frac{\varepsilon-\varepsilon_F}{kT}} \equiv e^{-\frac{\varepsilon-\varepsilon_c}{kT}} \cdot e^{-\frac{\varepsilon_c-\varepsilon_F}{kT}}$$

Tehát:

$$n_c = A\,m_e^{*\frac{3}{2}} \cdot e^{-\frac{\varepsilon_c-\varepsilon_F}{kT}} \cdot (kT)^{\frac{3}{2}} \cdot \underbrace{\int_0^{\infty} \sqrt{x}\,e^{-x}\,dx}_{\equiv \frac{1}{2}\sqrt{\pi}} = \underbrace{\frac{\sqrt{\pi}}{2} A\,(kT m_e^*)^{\frac{3}{2}}}_{\equiv N_c} \cdot e^{-\frac{\varepsilon_c-\varepsilon_F}{kT}}$$

$$\boxed{n_c = N_c\, e^{-\frac{\varepsilon_c-\varepsilon_F}{kT}} \;;\quad N_c \sim (kT m_e^*)^{\frac{3}{2}}}$$

2.7. Félvezetők általános tulajdonságai

2.7.1. A Fermi-szint meghatározása szerkezeti félvezetők esetén

A félvezetők elektromos tulajdonságainak a megértéséhez szükséges tudni, a félvezetőben lévő töltéshordozók (elektronok és lyukak) számát. Ez az állapotsűrűség és a T hőmérséklet ismeretében tehető meg. Mivel a Fermi-Dirac eloszlásfüggvény csak a Fermi szint közelében tér el lényegesen a 0 Kelvin fokos "lépcső függvénytől", ezért elegendő az állapotsűrűséget csak a sávszélek közelében konkrétan ismerni. De tudjuk, hogy effektív tömeg közelítésben az állapotsűrűség az energiának négyzetgyökös függvénye lesz.

A vegyérték és a vezetési sáv energia szintjei $\left(\varepsilon \le \varepsilon_v \text{ és } \varepsilon_c \le \varepsilon\right)$ már elegendően távol vannak a Fermi szinttől ahhoz, hogy a Fermi-Dirac eloszlásfüggvényt ezekben a tartományokban exponenciális függvénnyel lehessen közelíteni. Így már egy egyszerű integrálással (igen jó közelítéssel) meghatározhatjuk a vezetési sávban lévő elektronok n_c számát:

$$n_c = N_c \cdot \exp\left\{-\frac{\varepsilon_c - \varepsilon_F}{kT}\right\}$$ (ahol „k” a Boltzmann állandó!).

Az $N_c \approx \left(m_e^* kT\right)^{\frac{3}{2}}$ mennyiséget az elektronok „effektív számának” hívjuk.

Fontos megjegyzés:

A háromdimenziós elektrongáznál az állapotsűrűség kifejezése valójában tartalmazza a gáz L^3 térfogatát is (III.füzet 2.oldal). Ezért a vezetési elektronok állapotsűrűsége is függ a szilárd test L^3 térfogatától, azaz részletezve:

$N_c(\varepsilon) = \text{állandó} \cdot L^3 \cdot \left(m^*\right)^{\frac{3}{2}} \cdot \sqrt{\varepsilon - \varepsilon_c}$. Így az imént meghatározott „effektív szám” is arányos a térfogattal, azaz $N_c = \text{állandó} \cdot L^3 \cdot \left(m_e^* kT\right)^{\frac{3}{2}}$.

Mindezek a számítások egy L^3 térfogatú, tökéletesen homogén félvezetőre vonatkoztak. A valódi esetben elképzelhető, hogy a makroszkopikus skálán, a félvezetőben a fizikai viszonyok már nem tekinthetők homogénnak. Például a hőmérséklet, vagy az effektív tömeg a hely függvénye lehet, vagy külső elektromos tér van jelen, stb. Ekkor, legtöbbször a félvezető lokálisan (azaz a mikroszkopikus skálán) még homogénnek tekinthető. Ezért az előző számítások lokálisan (azaz a tér egy adott $L^3 = \Delta V$ térfogatelemében) továbbra is helyesek lesznek.

Célszerű ezért a fenti eredményeket „egységnyi térfogatra” vonatkoztatni, azaz a vezetési elektronok n_c (térfogat) sűrűségéről beszélni. A továbbiakban ezt külön nem hangsúlyozzuk ugyan, de mindvégig a „lokálisan homogén” modellt használjuk és így például a töltéshordozók térfogati sűrűségét határozzuk meg.

A vegyérték sávban lévő üres állapotok száma ≡ a "lyukak" száma

$$n_{ly} = \int_0^\infty N_v(\varepsilon)\, f_v(\varepsilon)\, d\varepsilon = A \cdot m_{ly}^{*\frac{3}{2}} \cdot \int_0^{\varepsilon_v} \sqrt{\varepsilon_v - \varepsilon}\cdot e^{\frac{\varepsilon-\varepsilon_F}{kT}}\, d\varepsilon = \dots$$

(hasonló módon számítható mint az előző → Feladat)

$$\boxed{n_{ly} = N_{ly}\, e^{-\frac{\varepsilon_F-\varepsilon_v}{kT}} \quad ; \quad N_{ly} \sim (kT m_{ly}^*)^{\frac{3}{2}}}$$

A FERMI nívó meghatározása:

N = állandó → $n_e = n_{ly}$ →

$$N_e\, e^{-\frac{\varepsilon_c-\varepsilon_F}{kT}} = N_{ly}\, e^{-\frac{\varepsilon_F-\varepsilon_v}{kT}} \rightarrow$$

$$\rightarrow \frac{N_{ly}}{N_e} = e^{\frac{-\varepsilon_c+\varepsilon_F+\varepsilon_F-\varepsilon_v}{kT}} \rightarrow$$

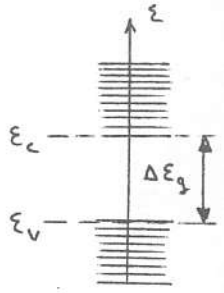
$$\rightarrow \frac{2\varepsilon_F - (\varepsilon_c+\varepsilon_v)}{kT} = \ln\left(\frac{m_{ly}^*}{m_e^*}\right)^{\frac{3}{2}}$$

$$\boxed{\varepsilon_F = \frac{\varepsilon_c+\varepsilon_v}{2} + \frac{3}{4}kT \ln\frac{m_{ly}^*}{m_e^*}}$$

Ahogyan azt vártuk.

A vezetésben résztvevő elektronok és lyukak száma közötti fontos összefüggésre jutunk a következőkben:

$$n_e \cdot n_{ly} = N_e \cdot N_{ly} \cdot \underbrace{e^{-\frac{\varepsilon_c-\varepsilon_F}{kT}} \cdot e^{-\frac{\varepsilon_F-\varepsilon_v}{kT}}}_{e^{-\frac{\varepsilon_c-\varepsilon_v}{kT}} \equiv e^{-\frac{\Delta\varepsilon_g}{kT}}}$$



$$\boxed{n_e \cdot n_{ly} = N_e \cdot N_{ly}\, e^{-\frac{\Delta\varepsilon_g}{kT}}}$$

Független a FERMI (ε_F) szinttől

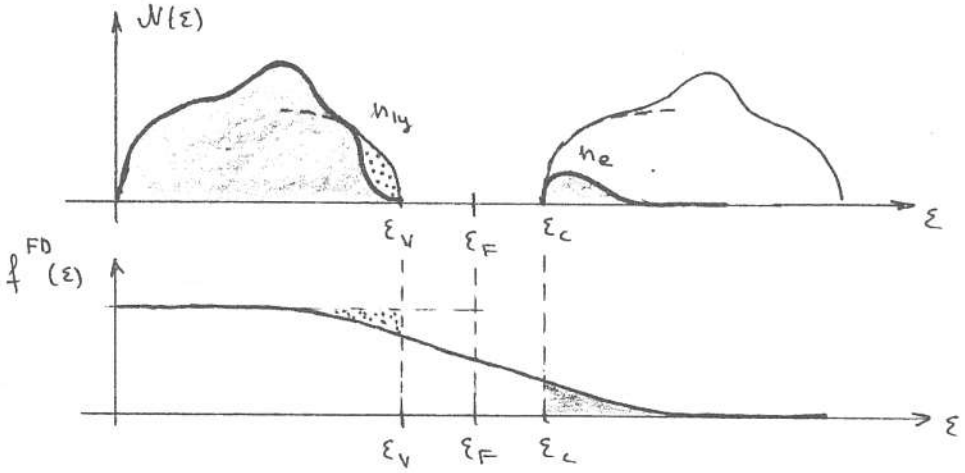
Mint azt tudjuk (III.füzet 18.-20.oldal), a majdnem betöltött vegyérték sávban lévő elektronok együttesen úgy viselkednek, mintha a félvezetőben az üres helyek által definiált pozitív lyukak lennének jelen. Ezért a vegyérték sávban lévő üres helyek száma éppen a pozitív töltéshordozó lyukak n_{ly} számát adja meg. A számolás gondolatmenete és matematikai lépései pontosan megegyeznek azzal, amit vezetési sávban lévő elektronok kiszámításánál követtünk. Ezért az eredmény is igen hasonló:

$$n_{ly} = N_{ly} \exp\left\{-\frac{\varepsilon_F - \varepsilon_v}{kT}\right\}, \text{ ahol } \; N_{ly} \approx \left(m_{ly}^* kT\right)^{\frac{3}{2}} \text{ a lyukak effektív számát jelenti.}$$

A Fermi szintet az a feltétel határozza meg, hogy az elektronok száma a félvezetőben a hőmérséklet változása során mindvégig állandó marad. Ez azt jelenti, hogy az $n_e = n_{ly}$ feltételnek minden T hőmérsékleten teljesülnie kell. Ebből a Fermi szint "helyzete" meghatározható. Pontosan a várt eredmény adódott. Nevezetesen, ha a vezetésben résztvevő elektronok és lyukak effektív tömege megegyezik, akkor a Fermi-szint éppen a tiltott sáv közepén lesz. Ha a kétféle effektív tömeg eltér egymástól, akkor a Fermi szint ennek megfelelően a középről eltolódik.

A másik igen érdekes és fontos eredmény az, hogy az elektronok és a lyukak számának a szorzata nem függ a Fermi szint helyzetétől! Értékét (az egyéb adatokon kívül) a tiltott sáv szélessége $\Delta\varepsilon_g = \varepsilon_c - \varepsilon_v$ határozza meg.

2.7.2. A fajlagos vezetőképesség számítása szerkezeti félvezetők esetén



legyen: $m^*_{lyg} = m^*_e \equiv m^*$

$n_{lyg} = n_e \equiv n$

$$\sigma = e \cdot n \left(\mu_e + \mu_{lyg}\right) = e\left(\mu_e + \mu_{lyg}\right) \frac{\sqrt{\pi}}{2} A \left(kT m^*\right)^{\frac{3}{2}} \cdot e^{-\frac{\Delta\varepsilon_g}{2}}$$

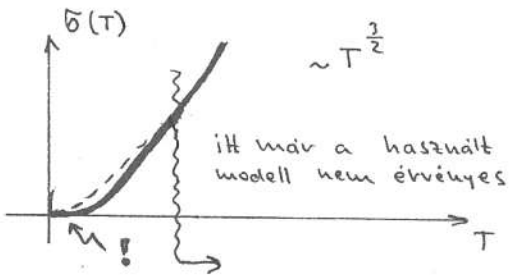
$$n = N_e e^{-\frac{\varepsilon_c - \varepsilon_F}{kT}}$$

$$\varepsilon_c - \varepsilon_F = \varepsilon_c - \frac{\varepsilon_c + \varepsilon_v}{2} = \frac{2\varepsilon_c - \varepsilon_c - \varepsilon_v}{2} = \frac{\varepsilon_c - \varepsilon_v}{2} = \frac{\Delta\varepsilon_g}{2}$$

Tehát

$$\sigma(T) = \text{állandó} \cdot (T)^{\frac{3}{2}} \cdot e^{-\frac{\Delta E_g}{2kT}}$$

Feltéve, hogy: μ_e, μ_{lyg} állandó



$\lim_{T \to 0} \sigma(T) = 0$

ez a "félvezető" elnevezés oka.

2.7. A fajlagos vezetőképesség számítása szerkezeti félvezetők esetén

Minden adat rendelkezésünkre áll ahhoz, hogy kiszámítsuk egy félvezető makroszkopikusan is mérhető σ vezetőképességét. Azt már tudjuk (III.füzet 25.oldal), hogy általános esetben a vezetőképességet milyen fizikai adatok határozzák meg. Eszerint, csak a töltéshordozók száma az, ami a hőmérséklettel változni fog. Figyelembe kell még vennünk azt, hogy kétféle töltéshordozó (elektron és lyuk) vesz részt a vezetésben. Az egyszerűsítés végett tegyük fel, hogy e kétféle töltéshordozó effektív tömege megegyezik. Az előzőekben láttuk azt, hogy a hőmérséklet csökkenésével a töltéshordozók száma is csökken. Mindezek alapján kiadódik az a már előzőleg kvalitatíve felismert effektus (III.füzet 17.oldal), hogy a vezetőképesség a hőmérséklet csökkenésével szintén csökkenni fog.

Alacsony hőmérsékleti tartományra a $\sigma(T)$ függvényt konkrétan is meg tudjuk határozni:

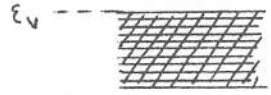
$$\sigma(T) = \text{állandó} \cdot T^{\frac{3}{2}} \cdot \exp\left\{-\frac{\Delta\varepsilon_g}{2kT}\right\}.$$

Ennek a matematikai kifejezésnek van egy érdekessége. Nevezetesen, igaz ugyan, hogy $T \to 0$ esetben $\sigma(T) \to 0$, de nem tudunk egy közelítő hatványfüggvényt megadni, mert T=0 esetén a függvény bármely rendű deriváltja zérus. Azaz a $\sigma(T)$ függvény „nagyon laposan” indul.

2.7.3. Adalékolt félvezetők



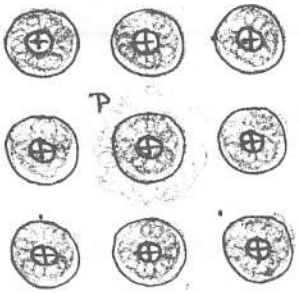
+1 db elektron $\quad N \longrightarrow N+1 \quad$ (Hogyan ?)



N db elektron

$(T = \phi\, K)$

Si



"akceptor" ↘ (Z = 13) Al : $(1s)^2 (2s)^2 (2p)^6 \mid (3s)^2 (3p)$

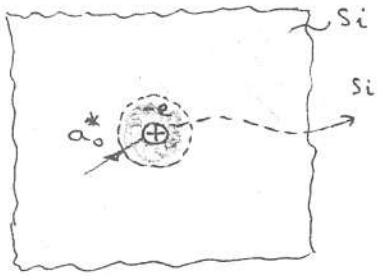
(Z = 14) (Si) : $(1s)^2 (2s)^2 (2p)^6 \mid (3s)^2 (3p)^2$

"donor" ↗ (Z = 15) P : $(1s)^2 (2s)^2 (2p)^6 \mid (3s)^2 (3p)^3$

ATOMTÖRZS | VEGYÉRTÉK ELEKTRONOK

$T = \phi\, K$

↓ MODELL



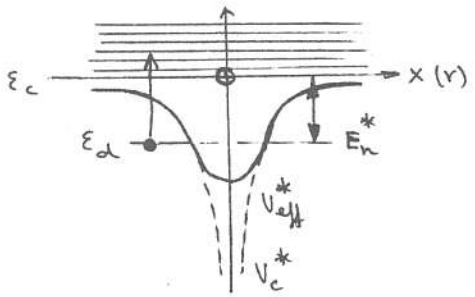
$m \longrightarrow m^*$ (kristály potenciál hatása)

$\varepsilon_0 \longrightarrow \varepsilon = \varepsilon_0 \cdot \varepsilon_r$ (elektromos polarizáció)

Hidrogén szerű modell :

$$E_n^* = -\frac{E_0^*}{n^2} \qquad E_0^* = \frac{m^* e^4}{2(4\pi\varepsilon_0\varepsilon_r)^2 \hbar^2}$$

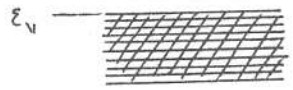
$$E_0^* = \underbrace{\frac{m^*}{m}\frac{1}{\varepsilon_r^2}}_{\sim \frac{1}{400}} \cdot \underbrace{E_0}_{13{,}6\ eV}$$



$$a_0^* = 4\pi\varepsilon_0\varepsilon_r \frac{\hbar^2}{e^2 m^*} = \underbrace{\varepsilon_r \frac{m}{m^*}}_{\sim 30} \cdot \underbrace{a_0}_{0{,}5 \cdot 10^{-10}\ m}$$



N_d db szennyező atom



N db elektron

neve: n-típusú félvezető

2.7.3. Adalékolt félvezetők

Eddig ún. szerkezeti félvezetővel foglalkoztunk.
Ez egy homogén félvezető egykristályt jelentett.

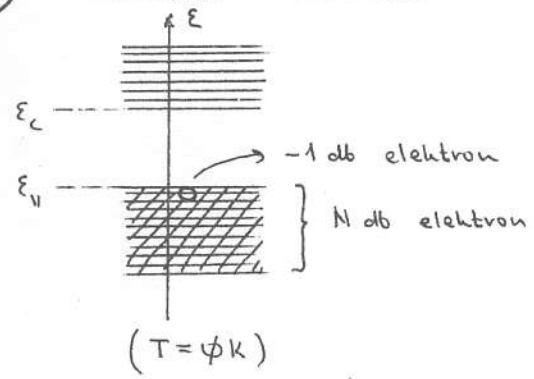
T=0 Kelvin fokos hőmérsékleten a vegyérték sáv teljesen tele van míg a vezetési sáv teljesen üres. Ha a rendszerhez hozzáadnánk egy elektront, akkor az csak a vezetési sávba kerülhetne. A vezetési elektronok számát azonban a gyakorlatban ilyen módon megnövelni nem tudjuk, mert így a félvezető kristály eredő elektromos töltése megváltozna. A kristály feltöltődne, ami makroszkopikus szinten is éreztetné nem kívánatos hatásait. Az ötlet azonban nem elvetendő és egy egyszerű trükkel megvalósítható. Eszerint az elektronnal együtt adjunk egy protont is a rendszerhez! Ezt legegyszerűbben úgy érhetjük el, hogy egy (Si) szilícium atomot pl. egy (P) foszfor atomra cserélünk ki. Ezt nevezzük adalékolásnak (néha szennyezésnek). A kétféle atom elektronszerkezetéből látszik, hogy az iontörzsük felépítése teljesen egyforma. Joggal feltételezhetjük (ismerve a protonok és az atomok egymáshoz viszonyított méretét), hogy a kétféle iontörzs mérete is jó közelítéssel ugyanakkora. Tehát ez az "atomcsere" semmiféle rácsdeformációt nem fog okozni. Mivel ezáltal a kristályba egy többlet elektron került, a foszfor atomokat "donor" atomoknak nevezzük. A többlet elektron neve a "donor elektron".
(Donor = valamit adó.)

A foszfor atom környezetében azonban a fizikai viszonyok megváltoznak. Ennek oka az, hogy a foszfor iontörzs a környezetéhez képest egy protonnyi (pozitív) töltéstöbblettel rendelkezik. Ez az első pillanatra bonyolultnak tűnő rendszer egy egyszerű "hidrogénszerű modellel" közelítőleg egészen jól leírható. Tekintsük, ugyanis a szilícium kristályt folytonos (kontinuum) közegnek. Ekkor a foszfor atom helyén egy pontszerű pozitív (többlet)töltés fog megjelenni. A foszfor atom ötödik (többlet) vegyérték (donor) elektronja pedig ennek a terében kötött állapotba fog kerülni. Ha a donor elektron energiája elegendően nagy, akkor az "leszakadva" a pozitív ponttöltéstől, attól nagyon "eltávolodik". Ha az elektron olyan messze került a pozitív töltéstől, hogy annak hatása már elhanyagolható, akkor ő már csak a tiszta szilícium kristályt érzékeli maga körül. Az elektron ekkor a szilícium kristályban immáron „szabadon” fog mozogni (azaz Bloch állapotban lesz). De mint tudjuk ebben az esetben az energiájának a szilícium kristály vezetési sávjába kell esnie. Ebből következik, hogy a foszfor atom jelenléte a szilícium kristályban úgy modellezhető, mint egy (folytonos) szilícium közegben lévő hidrogén atom, amelynek ionizációs energiaszintje (a vákuum szint helyett) a szilícium kristály vezetési sávjának az alja. Ennek a hidrogén atomnak az elektronja kétféle módon is érzékeli azt, hogy ő egy szilícium kristályba van "beágyazva". Egyrészt az elektromos töltése polarizálja a környezetében lévő kristályt, amit a szilícium dielektromos állandóján keresztül lehet figyelembe venni. Másrészt a szabályos kristályráccsal való kölcsönhatását az effektív tömegébe lehet "beépíteni". Mindez azt jelenti, hogy a foszfor atom körül kialakuló kötött állapotok energiaszintjeit úgy kell meghatározni, hogy a hidrogén atom energiaszintjeit megadó összefüggésbe a vákuum „ε_0” dilelktromos állandója helyett a szilícium „$\varepsilon_0\varepsilon_r$” dielektromos állandóját írjuk, és az elektron „m” tömege helyett a szilícium kristályban adódó „m^* ”effektív tömeget használjuk.

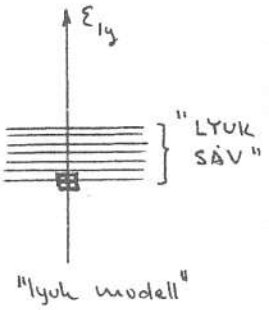
A hidrogén atom energiaszintjeinek az ismeretében az említett módosításokat elvégezve, azt kapjuk, hogy a kötött állapotok energiaszintjei a vezetési sáv alja alatt, ahhoz nagyon közel, a tiltott sávban helyezkednek el. Alapállapotban (0 Kelvin hőmérsékleten) tehát az adalékolt félvezetők elektronszerkezete úgy néz ki, hogy a vegyérték sáv teljesen tele van, a vezetési sáv teljesen üres és a (donor) elektronok a foszfor atomok környezetében kötött állapotban vannak. Már nagyon kis hőmérséklet emelkedésre a kötött állapotban lévő donor elektronok leszakadnak a donor atomokról és felkerülnek a vezetési sávba. Sikerült tehát megnövelni a vezetésben résztvevő elektronok ("n" típusú, negatív töltéshordozók) számát. Ezért ezt a félvezetőt "n-típusú félvezetőnek" szoktuk hívni.

Számoljuk ki a donor atomot modellező hidrogén atom, "méretét". Az ezt jellemző adat lehet az első Bohr sugár. Azt kapjuk eredményül, hogy a "modell hidrogén" atomunk sugara kb. 30-szor akkora mint egy szabad hidrogén atomé. Tételezzük fel, hogy a kristályrácsban az atomok távolsága a szabad hidrogén atom átmérőjének kb. 3-4 szerese. Ebből az következik, hogy a szilícium kristályban lévő hidrogénszerű atom kb. 100 db kristályatomot foglal magába. Ami a modell kiindulásául szolgáló folytonos anyag feltételezésével összhangban van.

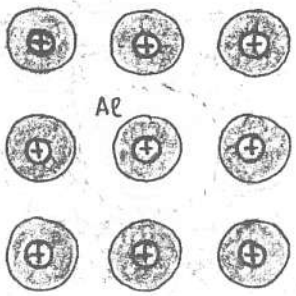
Akceptor adalékolás



$N \longrightarrow N-1$
(Hogyan ?)

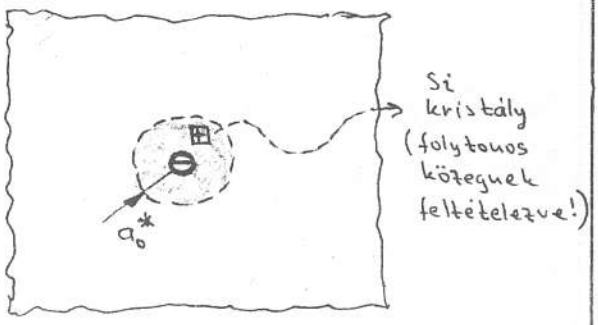


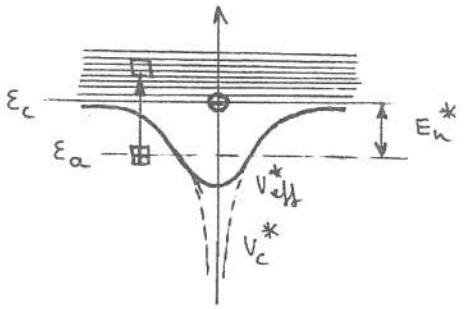
Si



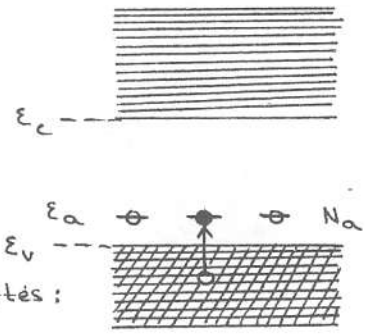
MODELL →

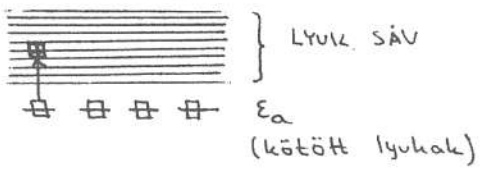
"lyuk modell"





$$E_h^* = -\frac{E_0^*}{h^2} \qquad E_0^* = \frac{m_{lyuk}^*}{m}\frac{1}{\varepsilon_V^2}E_0 \quad (\ll 1)$$





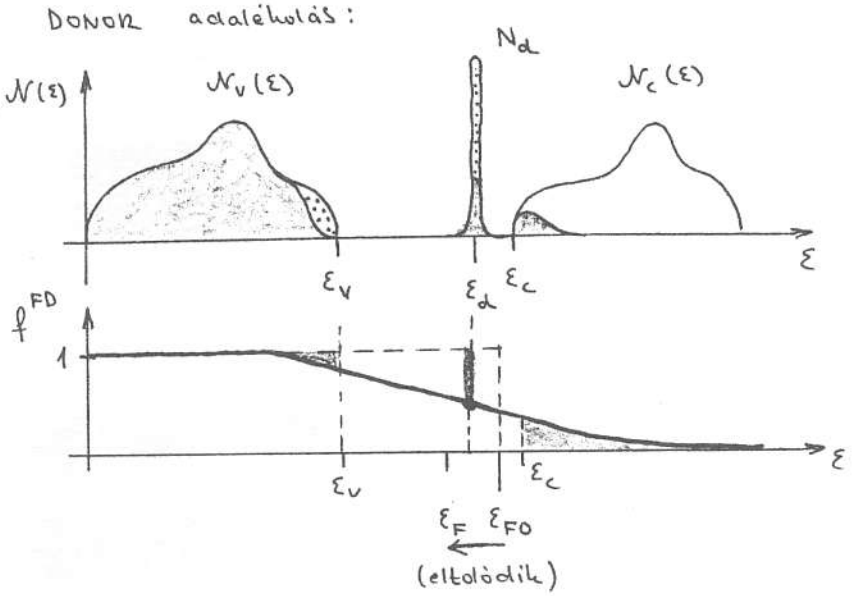
(Az üres lyuk sáv a teljesen betöltött vegyértéksávot modellezi)

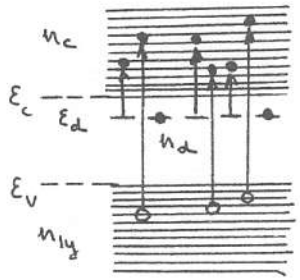
neve: p-típusú félvezető

Teljesen hasonló a helyzet akkor, ha egy szilícium atomot agy alumínium (Al) atomra cserélünk ki. Most a rendszerből elvettünk egy elektront és egy protont is. Ezért az alumínium atomot "akceptor atomnak", a kristályt "akceptor félvezetőnek" nevezzük. (Akceptor = valamit elfogadó, itt elvevő) Az egy elektron elvétele azt jelenti, hogy a vegyérték sávban egy üres hely jelenik meg. Mint azt láttuk, a vegyérték sáv elektronjai együttesen egyetlen pozitív lyukként fognak viselkedni. Ez a pozitív lyuk lép kölcsönhatásba a hiányzó protont modellező negatív ponttöltéssel. A kötött állapotok számítása is pontosan úgy történik mint a donor adalékolás esetén volt. A "lyuk sáv alatt" megjelenő kötött állapotú energiaszinteket az elektron energiaskálára visszatranszformálva (III.füzet 19.oldal) azok a "vegyértéksáv feletti" energiaszintekként jelennek meg. Gerjesztéskor lyukak ("p" típusú, pozitív töltéshordozók) jelennek meg a félvezetőben. Ezért ezt a félvezetőt "p típusú félvezetőnek" szoktuk nevezni.

Az állapotsűrűség (adalékolt félvezetők)

DONOR adalékolás:





ε_F meghatározása : az elektronok száma nem változik

a donor atomok száma : N_d
a donor szinten lévő elektronok száma : n_d
a donor szintről a vezetési sávba került elektronok száma : $(N_d - n_d)$

Tehát:

$$n_{ly} = n_c - (N_d - n_d)$$

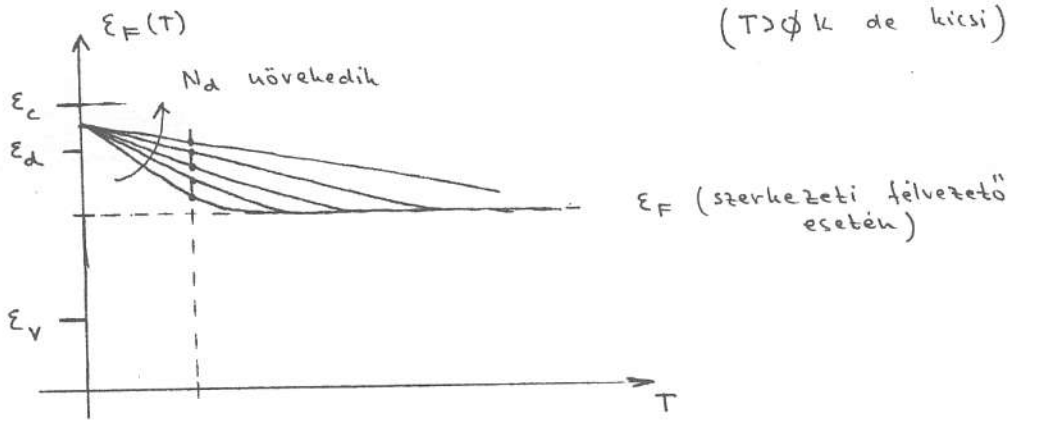
Alacsony hőmérsékleten gyakorlatilag csak a donor nivók ürülnek ki

$$n_{ly} \ll \underbrace{n_c \approx N_d}$$

$$N_c e^{-\frac{\varepsilon_c - \varepsilon_F}{kT}} = N_d \quad \rightarrow \quad \frac{\varepsilon_F - \varepsilon_c}{kT} = \ln \frac{N_d}{N_c}$$

$$\varepsilon_F = \varepsilon_c - kT \ln \frac{N_c}{N_d}$$

$(T > \phi\, K$ de kicsi$)$

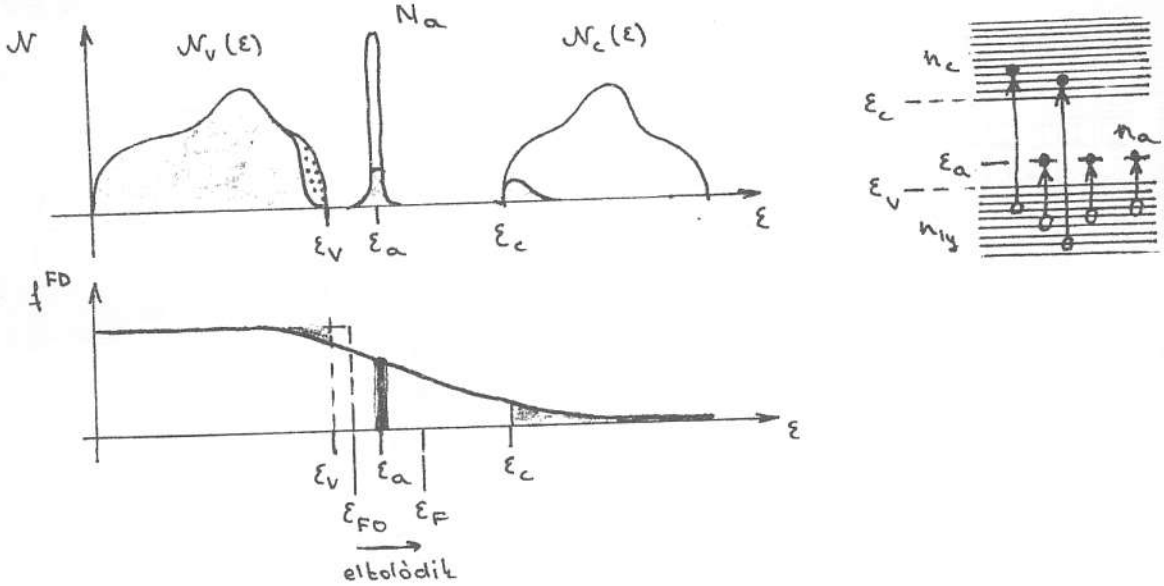


A gyakorlatban szükséges ismerni az adalékolt, szobahőmérsékletű félvezetők makroszkopikus vezetési tulajdonságait. Ehhez pedig tudnunk kell a töltéshordozók számát. A vezetésben résztvevő töltéshordozók számát pedig az energiasáv betöltési viszonyai adják meg. Mint az ismeretes, az elektronok energia szerinti eloszlását a Fermi-Dirac statisztika határozza meg. Ehhez pedig ismerni kell a Fermi szint helyzetét. Ezért tulajdonképpen azt kell tudnunk, hogy adalékolt félvezetők esetén hol van a Fermi szint.

Tekintsük egy n-típusú félvezető állapotsűrűségét. Ez abban különbözik a szerkezeti félvezetőétől, hogy a tiltott sávban megjelenik egy "hegyes" Dirac delta típusú függvény is. Ez az ε_d donor szintekhez tartozó, kötött állapotokat megadó állapotsűrűséget jelenti. T=0 Kelvin fokon a Fermi-szintnek valahol az ε_d donor szint és ε_c a vezetési sáv alja között kell lennie. A pontos helyét az határozza meg, hogy kis hőmérsékleten a donor szintet elhagyó elektronok száma gyakorlatilag meg kell, hogy egyezzen a vezetési sávban lévő elektronok számával, hiszen ekkor még a vegyérték sávból gyakorlatilag egyetlen elektron sem került fel a vezetési sávba.

Ha a hőmérséklet elég magas, akkor tetemesen megnő a vegyértéksávból átjutott elektronok száma és ehhez képest elhanyagolhatóvá válik a donor szintről érkezett elektronok száma. (Ne feledjük el, hogy a donor atomok N_d száma kicsi az összelektronok számához képest!) Ekkor a helyzet nagyon hasonló lesz a szerkezeti félvezetőkéhez, ahol a vezetési elektronok n_e száma megegyezik a lyukak n_{ly} számával. Tehát a hőmérséklet emelésével a Fermi szint a tiltott sáv közepe felé tart. Nyilvánvaló, hogy a Fermi szint annál alacsonyabb hőmérsékleten éri el a tiltott sáv közepét, minél kevesebb a donor atomok száma, azaz minél kisebb vezetési elektronszám esetén válik a donor elektronok száma elhanyagolhatóvá.

AKCEPTOR adalékolás:



Hasonlóan az előzőekhez:

Az elektronok száma nem változik : $n_{ly} = n_a + n_c$

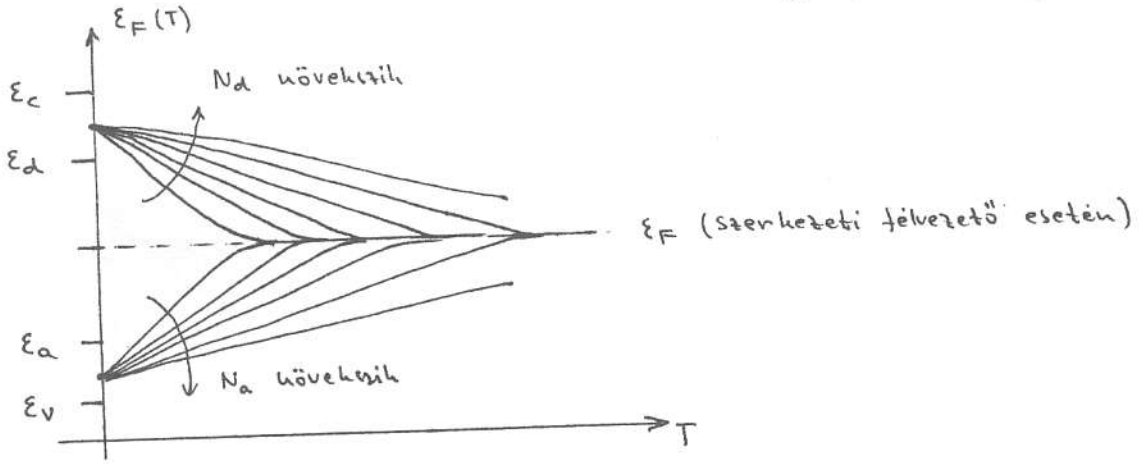
Alacsony hőmérsékleten gyakorlatilag az elektronok csak az akceptor nívóra gerjesztődnek

$$n_c \ll \underbrace{n_{ly} \approx N_a}$$

$$N_{ly}\, e^{-\frac{\varepsilon_F - \varepsilon_v}{kT}} = N_a$$

$$\varepsilon_F = \varepsilon_v + kT \ln \frac{N_{ly}}{N_a}$$

($T > \phi k$ de kicsi)

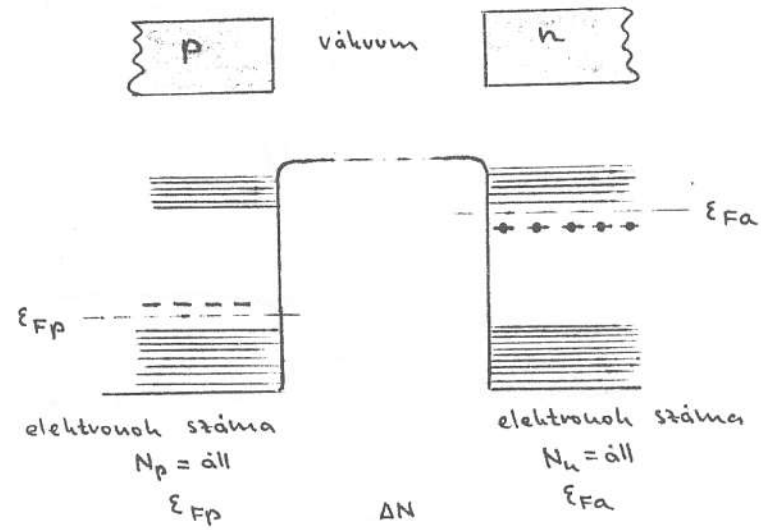


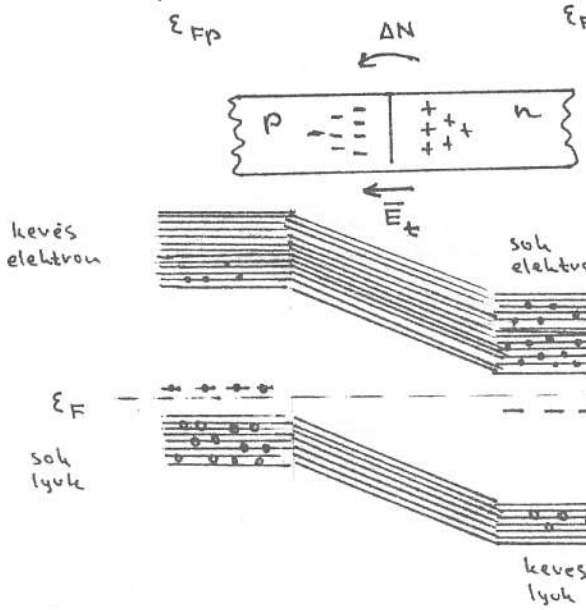
Akceptor adalékolás esetén a gondolatmenet teljesen hasonló. De most T=0 Kelvin hőmérsékleten a Fermi-szint az ε_v vegyérték sáv teteje és az ε_a akceptor szint között kell, hogy legyen.

A Fermi-szint helyzetét T hőmérsékleten megadó $\varepsilon_F(T)$ függvény, adott N_d donor illetve N_a akceptor adalékolás esetén, felrajzolható.

Ezt a függvényt a mérnöki gyakorlatban, az elektronikai alapszámítások során gyakran használják.

2.7.4. A p-n átmenet

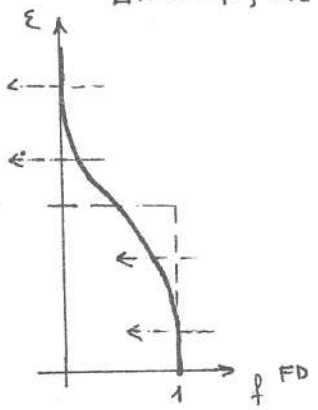




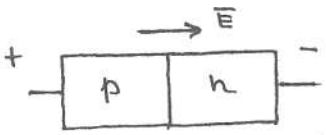
$N_p + N_n = N$ = állandó $\rightarrow \varepsilon_F$

$(N_p + \Delta N) + (N_n - \Delta N) = N$

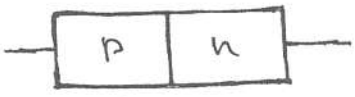
$\Delta N \ll N_p, N_n$



NYITÁS :



ZÁRÁS :



(Feladat)

(Feladat)

2.7.4. A p-n átmenet

A félvezető alapú elektronikai alkatrészekben a működés fizikai alapja az ún. "p-n átmenet".

Ez úgy állítható elő, hogy egy p-típusú és egy n-típusú félvezetőt szorosan összeillesztünk.

Fizikai alapjait tekintve a helyzet nagyon hasonló ahhoz, mint amikor két fém érintkezését vizsgáltuk (III.füzet 5.oldal). Van azonban egy lényeges különbség is a két eset között. Ez pedig a fémek és az adalékolt félvezetők elektronszerkezetének a különbözőségéből adódik. Nevezetesen a tiltott sáv jelenléte tesz alapvető különbséget a fémeknél kialakuló kontakt potenciál és a p-n átmenet potenciálviszonyi között.

A két félvezető összeérintésekor elektronok lépnek át az n-típusú félvezetőből a p-típusúba. Így az érintkező felület két oldala között töltésmegosztás keletkezik, amely potenciálkülönbséget hoz létre a két félvezető között és ez csökkenti az eredeti Fermi szintek közötti különbséget. Ez a töltésmegosztás addig folytatódik, ameddig a rendszer egyensúlyi állapotba nem jut, azaz két Fermi szint egyenlő nem lesz. Ugyanis egyetlen kvantummechanikai rendszerről lévén szó, csak egyetlen Fermi szint lehet. Mivel az átment elektronok ΔN száma sokkal kisebb mint a két félvezetőben lévő elektronok (N_p és N_n) száma, ezért a Fermi szintnek az energiasávokhoz viszonyított helyzete gyakorlatilag nem változik meg.

A fémekkel ellentétben a (pozitív illetve a negatív) többlettöltések nem fognak az érintkező felületeken lokalizálódni, hanem (a dielektrikumoknak megfelelően) a határoló felület környezetében oszlanak el. A kialakult térfogati töltéssűrűség alakítja ki az eredő elektromos teret és így az elektronok potenciális energia függvényét. Ennek közelítő kiszámítására **az Elektronika-c. tantárgy** kereteiben kerül sor.

Az elektronok energia szerinti eloszlását a Fermi-Dirac eloszlásfüggvény határozza meg.

Kapcsoljunk a „p-n” átmenetre egy olyan külső $\vec{E}$ elektromos teret amely a „p”-től az „n” irányába mutat! Ekkor az elektronok vezetési sávbeli energiaszintjei az „n” oldalon (a megadott ábra szerint) „felfelé” tolódnak el. Ezáltal az „n” oldali betöltött energiaszintek a „p” oldali csak kevéssé betöltött (mondhatni üres) energiaszintekkel kerülnek azonos nívóra. Ezáltal az „n” oldali „többségi” töltéshordozók (ezek most az elektronok) átmennek a „p” oldalra. Azaz egy „I” áram lép fel. Ezt a jelenséget „nyitásnak” nevezzük. A „p-n” átmenetre kapcsolt „U” feszültséget „nyitó feszültségnek”, a folyó áramot „nyitó irányú áramnak” hívjuk. Hasonló a helyzet a vegyértéksávban lévő „lyukakkal”. Ugyanis a „nyitó irányú” tér hatására a „p” oldalon többségben lévő lyukak átáramlanak az „n” oldalra, ezzel is növelve a nyitó áram nagyságát.

Ellenkező irányú $\vec{E}$ elektromos tér bekapcsolásakor a vezetési sávban lévő elektronok energiaszintjei az „n” oldalon (az ábra szerint) „lefelé” tolódnak. Ezáltal az „p” oldali kevéssé betöltött energiaszintek az „n” oldali (gyakorlatilag) üres energiaszintekkel kerülnek azonos nívóra. Ezáltal az „p” oldali „kisebbségi” töltéshordozók (ezek most is az elektronok) átmennek a „n” oldalra. Azaz egy igen kicsi „I” áram lép csak fel. Ezt a jelenséget „zárásnak” nevezzük. A „p-n” átmenetre kapcsolt ilyen irányú „U” feszültséget „záró feszültségnek”, a folyó kicsi áramot pedig „záró irányú áramnak” hívjuk. Hasonlóan magyarázható a vegyérték sávban lévő kisebbségi „lyukak” áramlása is.

A tárgyalt „p-n” átmenet az ún. félvezető dióda.

A jellegzetes I(U) dióda (karakterisztika) függvény matematikai formában történő meghatározására szintén az **Elektronika-c. tantárgy** bevezető fejezeteiben kerül majd sor.

2.8. Félvezető kristályok

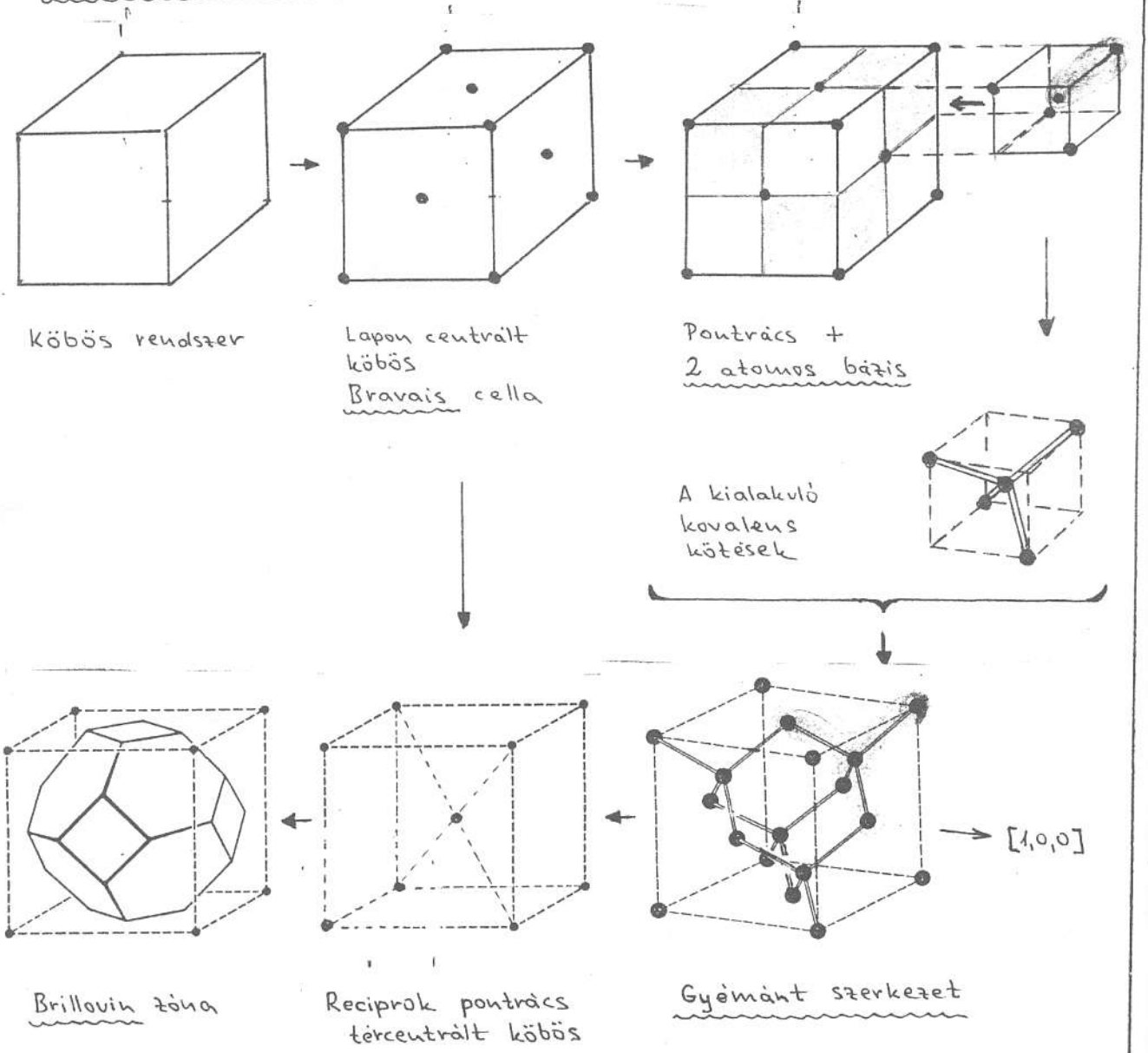
2.8.1. Általános tulajdonságok

Kristály ⟷ Pontrács → gyémánt szerkezet
Kristály ⟷ Atomok → elektron szerkezet $(ns)^2 (np)^2$

} REÁLIS Modell

elméleti és kísérleti TAPASZTALATOK

A gyémánt szerkezet:



Feladat: az atomok elhelyezkedése [1,0,0] és [1,1,1] irányokból nézve.

2.8. Félvezető kristályok

Az eddigiekben egy- és kétdimenziós modellkristályokkal foglalkoztunk. Didaktikai előnyük abban rejlett, hogy az elméleti számításokat egyszerűen el lehetett végezni és az eredmények szemléltetése sem jelentett különösebb gondot. Ezen kívül minden lényeges fogalmat és effektust be tudtunk mutatni a segítségükkel.

A valóságban azonban a kristályok háromdimenziósak. Szükséges tehát megnézni, hogy az eddig tanultakat hogyan lehet felhasználni a valódi kristályok sávszerkezetének és sávábrájának a meghatározására.

2.8.1. Általános tulajdonságok

A minket érdeklő félvezető kristályok ún. "gyémánt" szerkezetűek. Az első pillanatra talán bonyolultnak tűnő rácsszerkezet szépen beleillik a már megtárgyalt osztályzási rendszerünkbe (III.füzet 27.oldal)

A gyémántszerkezet pontrácsa laponcentrált köbös rács. A rácspont minden pontjába egy (adott helyzetű) két atomból álló bázis van. Így kialakul az a szerkezet, amelyben minden atomot négy másik vesz körül és ez a négy atom éppen egy tetraéder négy csúcspontján van.

Mivel a gyémántszerkezet pontrácsa laponcentrált köbös, ezért a reciprok pontrács tércentrált köbös szerkezetű lesz.

A Brillouin zóna a már ismertetett módszerrel megszerkeszthető.

A bázis atomok elektronszerkezete

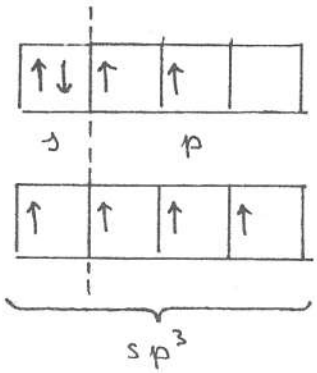
$Z = 6$ C $(1s)^2 (2s)^2 (2p)^2$

$Z = 14$ Si $(1s)^2 (2s)^2 (2p)^6 (3s)^2 (3p)^2$

$Z = 32$ Ge $(1s)^2 (2s)^2 (2p)^6 (3s)^2 (3p)^6 (3d)^{10} (4s)^2 (4p)^2$

↓

Általában : [Atomtörzs] $(ns)^2 (np)^2$ $(n = 2,3,4)$



2 vegyértékű lenne

↓ KÉMIAI TAPASZTALAT

4 vegyértékű

↑ A klasszikus vegyérték fogalom

KVANTUMMECHANIKA → HIBRID PÁLYÁK → irányított kovalens kötések

ψ	függvény	jelölés
$\psi_{n,0,0}$	$R_{n,0}$	s
$\psi_{n,1,-1}$	$R_{n,1} \frac{x}{r}$	p_x
$\psi_{n,1,1}$	$R_{n,1} \frac{y}{r}$	p_y
$\psi_{n,1,0}$	$R_{n,1} \frac{z}{r}$	p_z

jelölés	definíció	ψ
h_1	$s + p_x + p_y + p_z$	ψ_{h1}
h_2	$s - p_x - p_y + p_z$	ψ_{h2}
h_3	$s - p_x + p_y - p_z$	ψ_{h3}
h_4	$s + p_x - p_y - p_z$	ψ_{h4}

$R_n = R_n(r)$

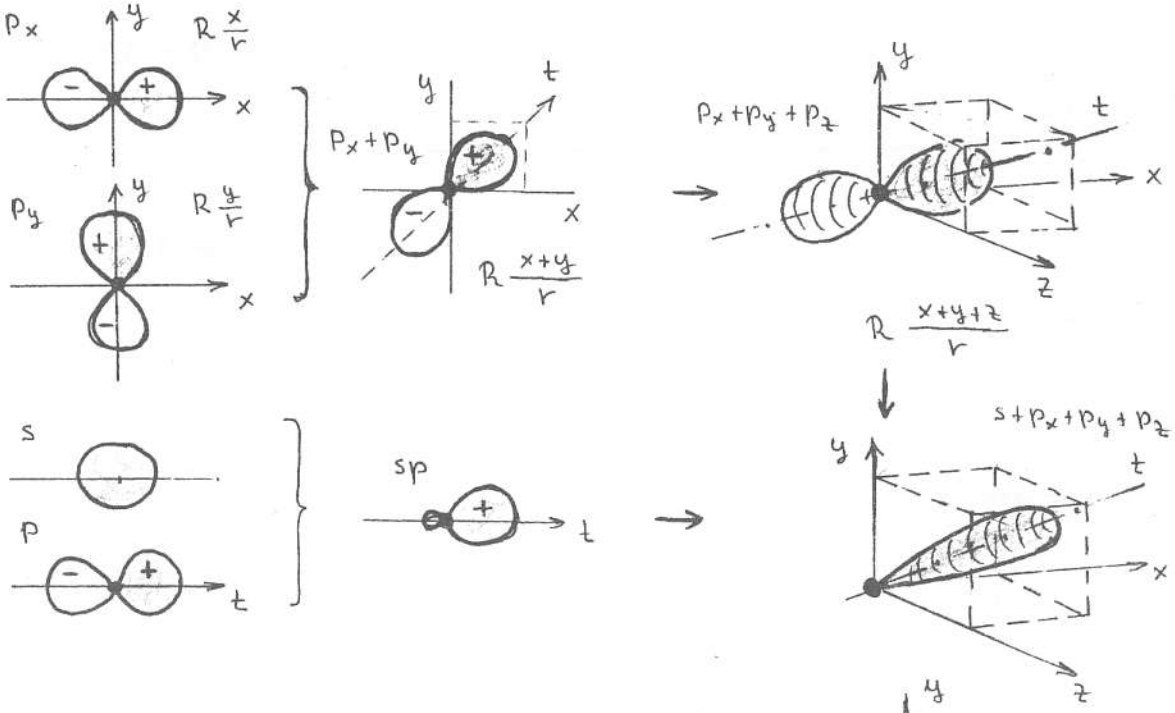
ψ_{h1}	$\frac{1}{\sqrt{2}} \left(R_{n,0} + R_{n,1} \cdot \frac{x+y+z}{r} \right)$
ψ_{h2}	
ψ_{h3}	
ψ_{h4}	

A vizsgált szigetelők és félvezetők (C, Si, Ge) bázis atomjainak elektronszerkezete nagyon hasonló. A négy vegyérték elektron közül kettő "s", kettő pedig "p" állapotban van. (II.füzet 64.-65.oldal) A kémiai tapasztalatok szerint (mivel az „s” és a „p” állapotok energiája közel azonos) vegyüléskor az egyik "s" állapotú elektron "p" állapotba megy át. Ezáltal egy "s" és három "p" állapotú vegyértékelektron adja a "négy vegyértékű" atom elektronszerkezetét. Ezt az effektust nevezzük „hibridizációnak”.

Ebből a négy elektron állapotból szuperpozícióval (1.axióma) olyan ún. hibrid állapotokat lehet előállítani, amelyek térbeli irányítottsága megfelel a tetragonális rácsszerkezetnek. Ezeket nevezik sp^3 hibrid pályáknak.

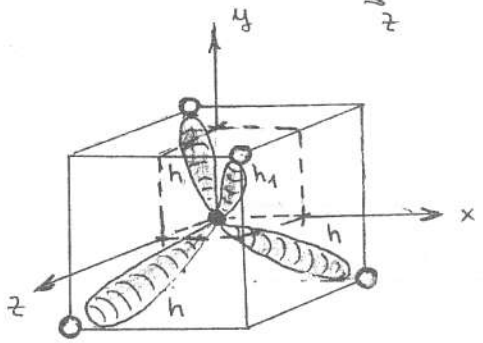
(45) Az sp^3 hibrid pályák ábrázolása

Példa: $h_1 = s + p_x + p_y + p_z \rightarrow \psi_{h1} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(R_{n,0} + R_{n,1} \frac{x+y+z}{r} \right)$

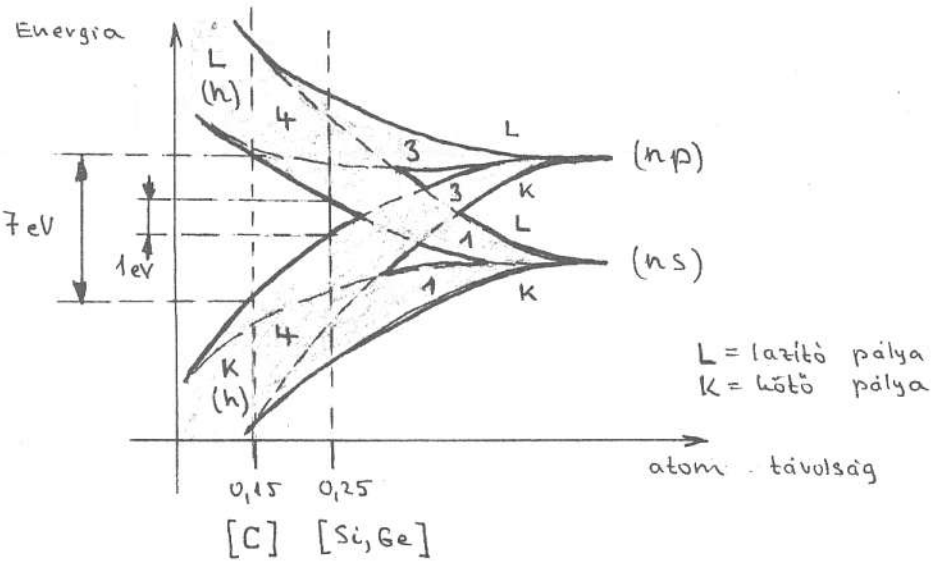


(Feladat: h_2, h_3, h_4)

irányított kovalens kötések:



Az energiasávok kialakulása:



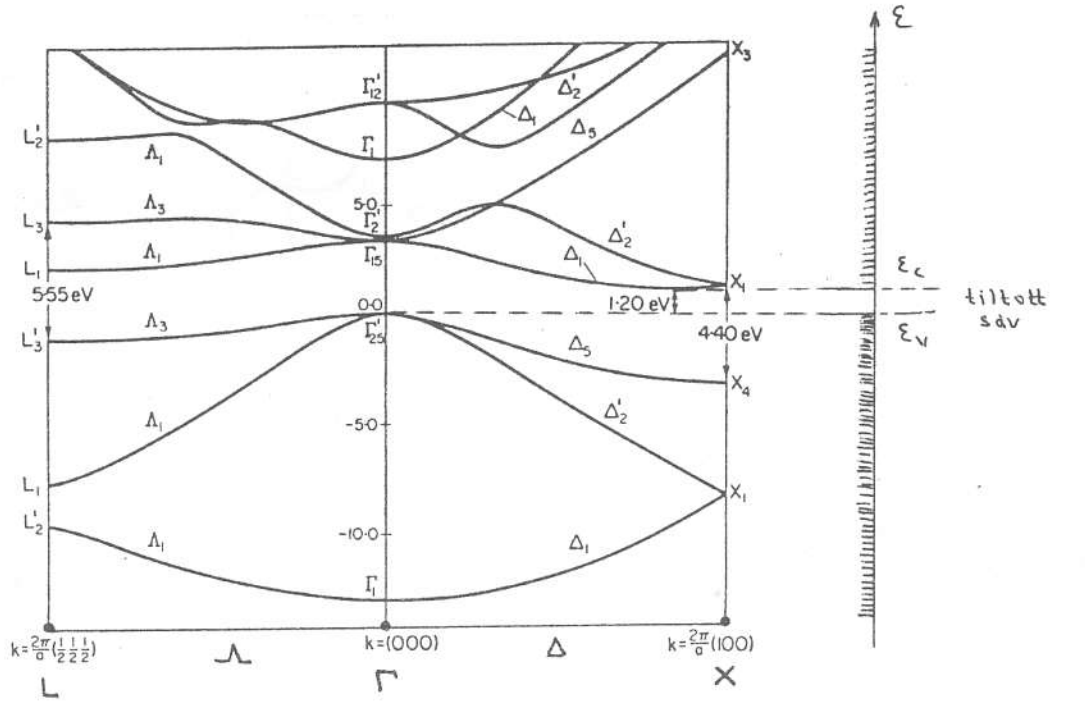
L = lazító pálya
K = kötő pálya

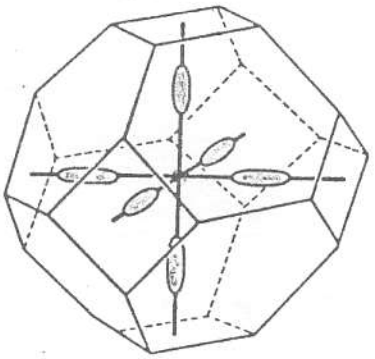
Bármelyik sp^3 hibrid állapotfüggvény az "s" és a három “p" állapotfüggvény megfelelő előjellel vett összege lesz (1.axióma)

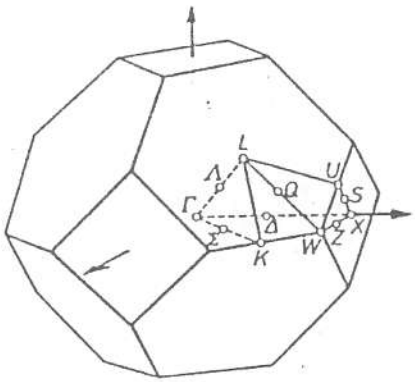
A kristályt most is elő lehet úgy állítani, hogy a rácsatomokat fokozatosan közelítjük egymáshoz (III.füzet 12.oldal) Az energiasávok kialakulása most is az atomi energiaszintek felhasadásából származik. A hibridizáció csak azonos energiájú állapotok között jöhet létre. Az atomok közötti kölcsönhatás megváltoztatja a atomi energiaszinteket, így lehetőség van arra, hogy a kezdetben különböző energiájú "s" és "p" állapotok energiája (II.füzet 63.oldal) egyenlővé váljon. Az atomok hibrid pályái egymáshoz kapcsolódva kötő vagy lazító pályákat alakítanak ki (II.füzet 90.oldal)

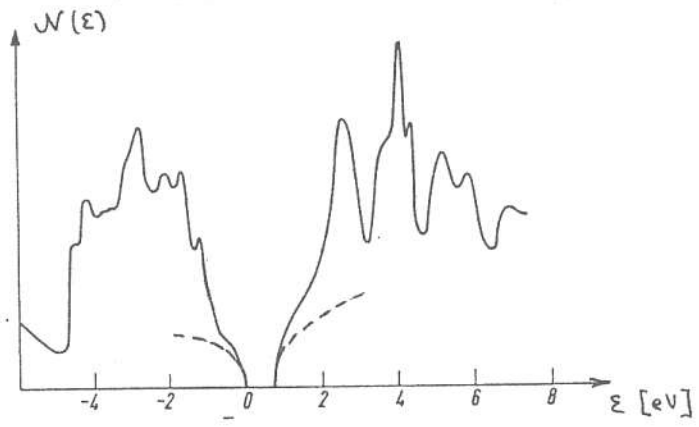
A kötő sp^3 hibrid állapotok adják a vegyérték sávot és a lazító sp^3 hibrid állapotok adják a vezetési sávot. A tiltott sáv szélessége dönti el, hogy szigetelőről (C) vagy pedig félvezetőről (Si, Ge) van szó.

2.8.2. A Szilicium sávszerkezete









2.8.2. A szilícium sávszerkezete

A kristály pontszimmetriájának a következtében ki lehet jelölni a Brillouin zónának azt az elemi tartományát amellyel, a ponttranszformációkat végrehajtva, az egész zóna lefedhető. A tartományt határoló élek (ún. speciális tengelyek) mentén meghatározhatjuk az $\varepsilon_\nu(k)$ sávábrát (diszperziós relációt). Ennek ismeretében megkereshetjük a tiltott sávot.

Eredményül a következők adódnak.

A vegyérték sáv teteje a Brillouin zóna középpontját jelölő Γ pontban van

Termikus gerjesztés során a Γ pont közelében lévő elektronállapotokat elhagyják az elektronok és a vezetési sávba kerülnek. A kiürült állapotok hatására pozitív töltéshordozók, azaz lyukak jelennek meg a félvezetőben. A kiürült állapotokat jellemző $\vec{k}$ -vektorok (a kristály szimmetriája és a parabolikus sávszél következtében) egy Γ pont körüli, gömb alakú Fermi-felület belsejében lesznek. A lyukak egyetlen skalár effektív tömeg értékkel jellemezhetők.

A vezetési sáv alján lévő állapotokat reprezentáló $\vec{k}$ hullámszám vektorok a Brillouin-zóna Δ tengelyein, a zónahatárok (X pontok) közelében lévő pontokban találhatók. A termikus gerjesztés hatására a vezetési sávban megjelenő elektronok a Brillouin-zóna ezen pontjaival definiált Bloch-állapotokat töltik be. Ezen betöltött állapotokat reprezentáló $\vec{k}$ -vektorok egy adott energiához tartozó Fermi felület belsejében lesznek. Ez a Fermi-felület most nem lesz egy „összefüggő" felület. Ugyanis mivel 6db Δ tengely van, így a szóban forgó Fermi-felület is összesen 6db forgási ellipszoidból fog állni.

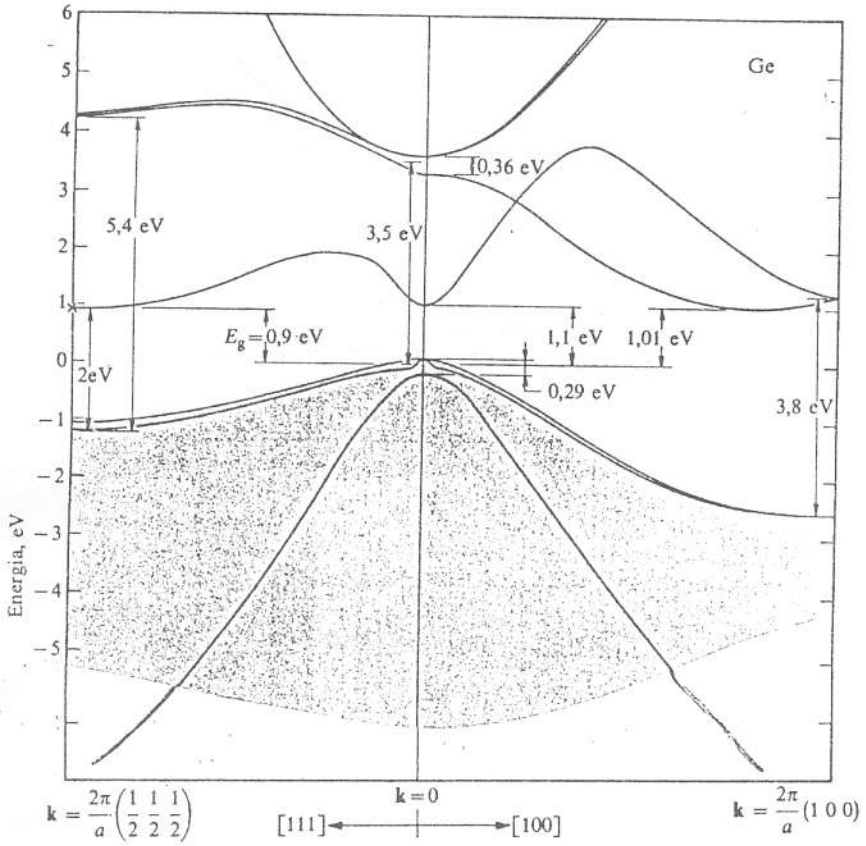
A forgási ellipszoid alakú Fermi-felület azt jelenti, hogy a vezetési elektronok dinamikáját megadó effektív tömeg tenzor két különböző skalár effektív tömeggel jellemezhető (III.füzet 32.oldal)

A vezetési kristályelektronok sebesség vektora erre a Fermi felületre lesz merőleges (III.füzet 33.oldal).

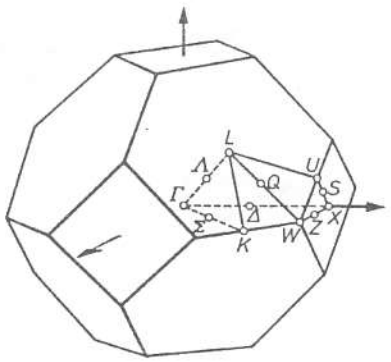
A sávszélek közelében a várt "négyzetgyökös" állapotsűrűséget kapjuk.

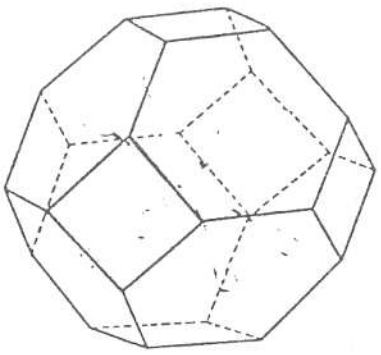
2.8.3. A Germánium sávszerkezete

Feladat:









2.8.3. A germánium sávszerkezete

A szilíciumhoz hasonló módon elemezhető a germánium (Ge) sávszerkezete is.

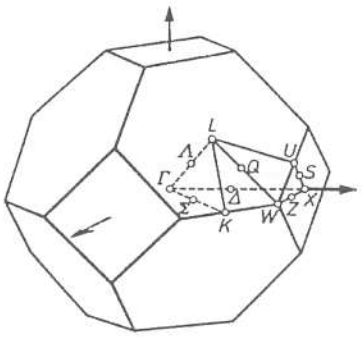
A részleteket, gyakorlás céljából, a Tisztelt hallgatóra bízzuk.

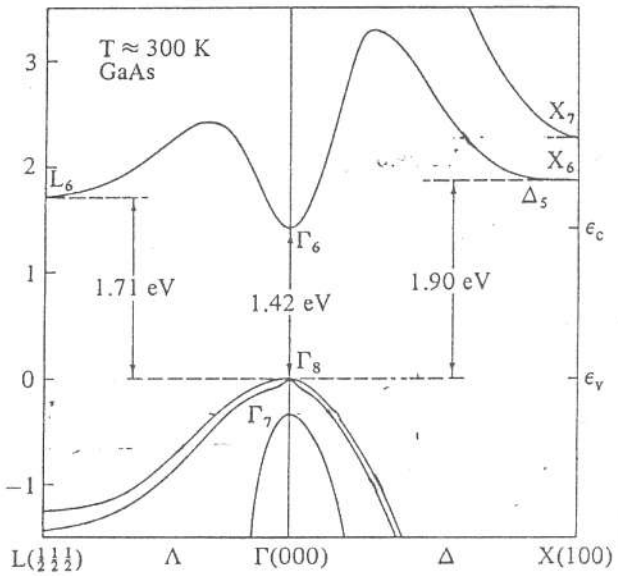
Érdemes azonban egy fontos észrevételt tennünk.

A megadott sávábrából látszik, hogy a vezetési sáv alján lévő elektronállapotok most a Brillouin-zóna „L" határpontjainak a környezetében lesznek. A megadott Brillouin-zóna ábrából látható az is, hogy összesen 8db „L" pont van. Minden (zónahatáron lévő) „L" pont köré egy-egy fél (forgási) ellipszoid alakú Fermi-felület rajzolható. Ebben lesznek a vezetési sávban megjelenő elektronok Bloch-állapotait megadó $\vec{k}$ -hullámszám vektorok. Látható, hogy a 8db fél ellipszoid csak 4db teljes forgási ellipszoidot jelent szemben a szilícium esetén adódó 6db-al.

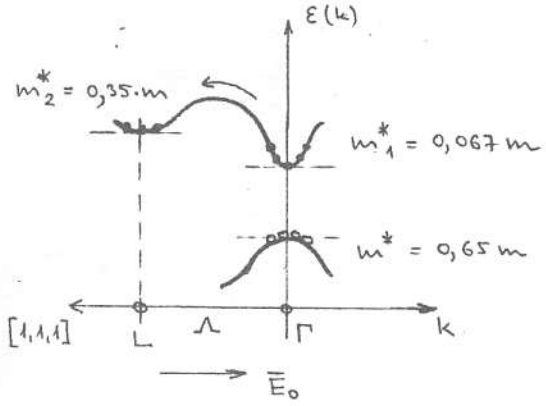
Ez fizikailag azt jelenti, hogy a vezetési sáv alján az állapotsűrűség a szilícium esetén kb. 1.5 szer nagyobb mint a germánium kristályban. Azaz ugyanolyan hőmérsékleten a szilícium kb. másfélszer több vezetési elektront (és ennek megfelelő lyukat) tartalmaz. Így a vezetési tulajdonságai jobbak. Többek között ez is az oka annak, hogy mára már a germánium gyakorlatilag kiszorult a „kommersz" félvezető iparból.

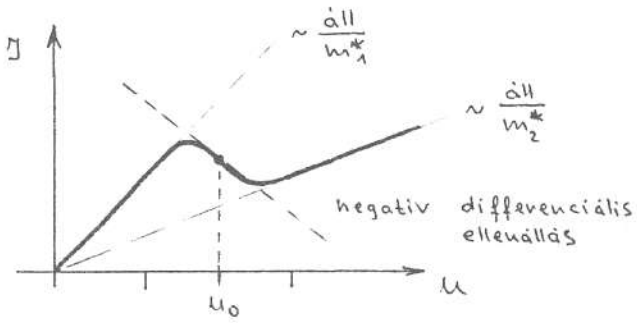
2.8.4. A Gallium – Arzenid kristály





A GUNN effektus :

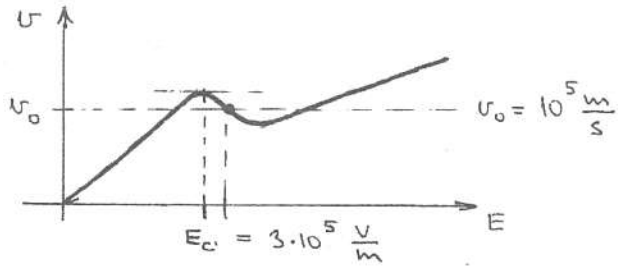




OHM törvény :

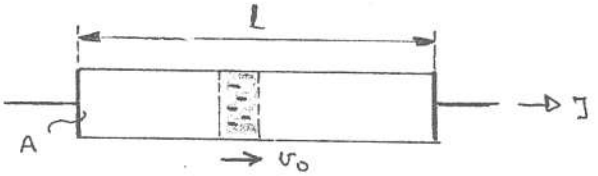
$$j = \frac{U}{R} \sim \sigma \cdot U \sim \frac{dll}{m^*} \cdot U$$

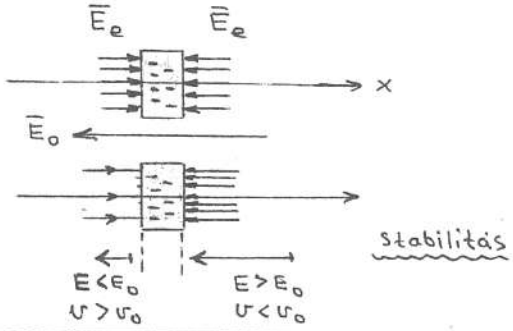
$$\left.\begin{aligned} U &= l \cdot E \\ j &= A \cdot e n v \end{aligned}\right\} \quad \begin{aligned} U &\sim E \\ j &\sim v \end{aligned}$$



Egy töltéssűrűség tartomány (domén) v_0 sebességgel halad

$\left(l = 10\,\mu m \rightarrow \omega = 10\ GHz\right)$





2.8.4. A Gallium-Arzenid kristály

A következőkben arra foguk példát látni, hogy egy kristály adott sávszerkezete hogyan vezethet egészen furcsa és érdekes makroszkopikus jelenségekhez, amelyeket azután az elektronikus alkatrészekben hasznosíthatunk.

A GaAs (gallium-arzenid) kristály pontrácsa szintén laponcentrált köbös rács. A pontrács minden pontjába egy kétatomos bázist teszünk ugyanúgy, mint a gyémántszerkezet esetén. Most azonban a bázis egyik atomja a gallium, a másik atomja az arzén.

Tekintsük meg a GaAs sávábráját!

A vezetési sávban két lokális minimum található. Mindkettő a Λ tengelyen van, az egyik a Γ, a másik az L pontban. Emiatt ezt a félvezetőt "kettős völgyű" félvezetőnek nevezzük. A völgyek alján definiálható effektív tömegek nem egyenlőek. Ez azt jelenti, hogy a különböző völgyekben lévő vezetési elektronok mozgékonysága nem ugyanakkora. Azaz a kristály ellenállása is más, attól függően, hogy a vezetési elektronok az egyik, vagy a másik völgyben vannak.

Mint azt már láttuk, külső térerősség hatására a betöltött állapotok Δk-val "elmozdulnak" az kezdeti szimmetrikus helyzetükhöz képest (III.füzet 23.oldal). Ez makroszkopikus szinten úgy nyilvánul meg, hogy a kristályban „I” áram folyik. A térerősséget a kristály végeire kapcsolt „U” feszültség generátorral tudjuk változtatni. Alacsony feszültség értékeknél a vezetési elektronok a Γ pont körüli völgyben vannak, ahol az effektív tömeg kisebb. Ezért az elektronok mozgékonysága nagyobb, a kristály ellenállása kisebb. Magasabb feszültségeknél a kristályban fellépő térerősség már elegendően nagy ahhoz, hogy a vezetési elektronokat (helyesebben az általuk betöltött állapotokat) "áttolja" a másik, L pont körül lévő völgybe. Itt az effektív tömeg nagyobb, a vezetési elektronok mozgékonysága kisebb, a kristály ellenállása nagyobb lesz. E két helyzet közötti átmenet az áram-feszültség karakterisztikába "mérnöki érzékkel" berajzolható.

Látható, hogy megjelent egy ún. "negatív differenciális ellenállású" tartomány, amely az eszközt speciális áramköri felhasználásra teszi alkalmassá. (Az elnevezés onnan származik, hogy ebben a tartományban az I(U) görbe meredeksége negatív. Azaz az I áramnak az U feszültség szerinti első differenciál hányadosa negatív.)

Mi most egy másik, nem kevésbé érdekes jelenséget fogunk ismertetni. Ez az ún. **Gunn effektus** (1964).

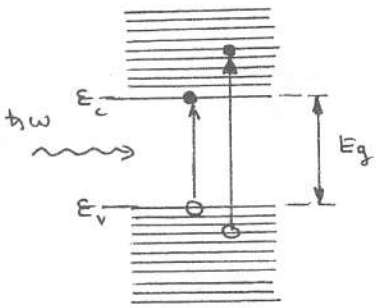
Az I(U) "áram-feszültség" diagram a kristály makroszkopikus elektromos vezetési tulajdonságait adja meg. Ugyanakkor, ennek megfelelően, megkaphatjuk a vezetési elektronok szintjén lezajló folyamatokra jellemző $v(E)$ "sebesség-térerősség" diagramot is. Hiszen az „I” áramerősség a töltéshordozók „*v*” sebességével, az „U” feszültség pedig a félvezetőben jelen lévő „*E*” térerősséggel arányos.

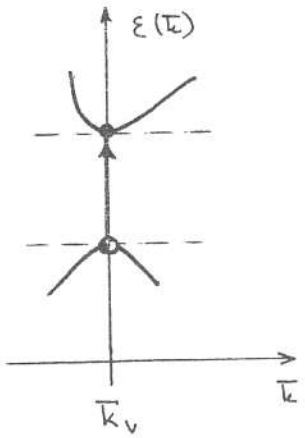
Kapcsoljunk a kristályra akkora E_0 térerősséget, hogy az a "negatív meredekségű" tartományba essék. Ez azt jelenti, hogy a vezetési elektronok sebessége v_0 lesz. Tételezzük fel, hogy valahogyan kialakul a kristályban egy kis "elektron sűrűsödés". Ekkor ez, a környezetéhez képest negatív, kis tértöltés tartomány stabil lesz azaz nem fog "szétdiffundálni". Ennek az az oka, hogy a tértöltés tartomány által keltett elektromos tér hozzáadódik a külső elektromos térhez. Így a sűrűsödés előtt haladó elektronokra a külső térnél nagyobb térerősség hat. Ezért a sebességük kisebb lesz, mint v_0, hiszen a negatív meredekségű $v(E)$ tartományban vagyunk. Hasonló okok miatt a sűrűsödés mögött haladó elektronok a külső térnél kisebb térerősséget érzékelnek és ezért a sebességük nagyobb lesz, mint v_0. Ez az effektus mintegy összetartja ezt a lokalizált tértöltést. Ez a stabil tértöltés tartomány, mint egy "áramimpulzus", állandó v_0 sebességgel végigrohan a kristályon. Ha egy alkalmas elektronikával mindig akkor indítunk el egy újabb áramimpulzust, amikor az előző a kristályból éppen kilép, akkor egy igen stabil mikrohullámú oszcillátorhoz jutottunk. Az oszcillátor frekvenciáját a v_0 sebesség értéke és a kristály hossza határozza meg.

Egy tipikus adat:

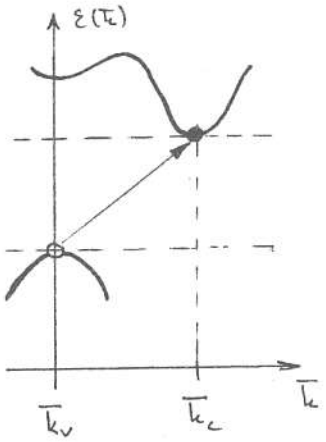
10 μm hosszú kristály esetén 10 GHz frekvenciát kapunk.

2.9. Szilárd testek optikai tulajdonságai és a sávszerkezet

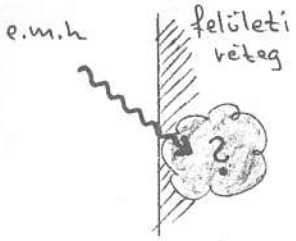


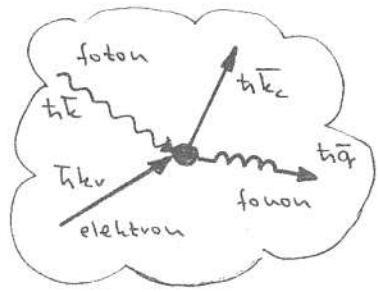


közvetlen (direkt) [GaAs]

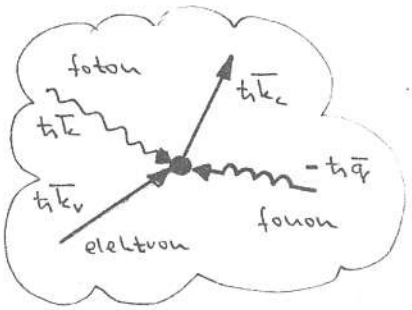


közvetett (indirekt) [Si] [Ge]





fonon gerjesztés (+)



fonon elnyelődés (−)

Az energia megmaradás : $\hbar\omega + \varepsilon_v = \varepsilon_c \pm \hbar\omega_q$

Az impulzus megmaradás : $\hbar\bar{k} + \hbar\bar{k}_v = \hbar\bar{k}_c \pm \hbar\bar{q}$

$\lambda_{foton} \gg a_0 \rightarrow k \approx 0$

$$\hbar\omega = \varepsilon_c - \varepsilon_v \pm \hbar\omega_q$$
$$\hbar\bar{k}_c = \hbar\bar{k}_v \mp \hbar\bar{q}$$

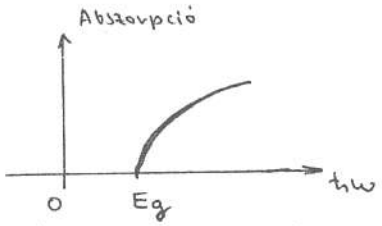
A Γ pontban $\bar{k}_v \equiv 0$

$$\left.\begin{aligned}\hbar\omega &= E_g \pm \hbar\omega_q \\ \hbar\bar{k}_c &= \mp \hbar\bar{q}\end{aligned}\right\}$$

Direkt átmenetnél :

$\bar{k}_c = \bar{k}_v \rightarrow \bar{q} = 0 \rightarrow \hbar\omega_q = 0$

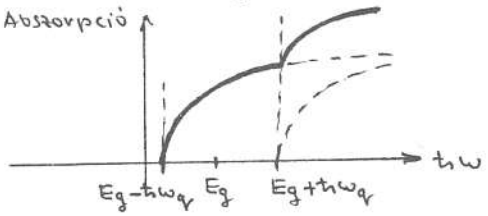
$\hbar\omega = E_g \rightarrow \hbar\omega \geq E_g$



Indirekt átmenetnél :

$\hbar\bar{k}_c = \mp \hbar\bar{q}$

$\hbar\omega = E_g \pm \hbar\omega_q \rightarrow \hbar\omega \geq E_g \pm \hbar\omega_q$



2.9. Szilárd testek optikai tulajdonságai és a sávszerkezet

Ha egy kristályra fény (elektromágneses hullám) esik, akkor annak egy része elnyelődik. Ezt nevezzük fény abszorpciónak. Az elnyelődés mértéke függ a beeső fény frekvenciájától is. Azt fogjuk most megvizsgálni, hogy kristály sávszerkezete hogyan határozza meg az abszorpciós tulajdonságokat. És viszont, az abszorpciós spektrum mérése milyen információkat szolgáltat a kristály sávszerkezetéről.

A szilícium (Si) a germánium (Ge) és a gallium-arzenid (GaAs) sávábráját összehasonlítva egy lényeges különbséget fedezhetünk fel.

Azt mondjuk erre, hogy a GaAs "közvetlen vagy direkt sávú", a Si és a Ge "közvetett vagy indirekt sávú" félvezető. Az elnevezés onnan származik, hogy a GaAs esetén a vegyérték sáv teteje és a vezetési sáv alja a Brillouin zónának ugyanabban a pontjában van, míg a Si és a Ge esetében nem. Ezért GaAs esetében egy elektront "közvetlenül felvihetünk" a vegyérték sávból a vezetési sávba, ugyanakkor Si és Ge esetén az elektronnak még "impulzust is kell kapnia" ehhez.

A vezetési elektronok gerjesztése optikai úton is történhet. A következőkben ezt fogjuk részletesen is megvizsgálni.

Az energiaskálán a folyamat a következőképpen zajlik le. A kristályba belépő elektromágneses hullám kölcsönhatásba lép a vegyérték sáv tetején lévő, ε_v energiájú elektronnal. Az elektron egy $\hbar\omega$ fotonnyi energiát elnyel és ennek hatására felugrik a vezetési sáv aljára, azaz az energiája ε_c lesz. Ugyanakkor az elektron mindvégig kölcsönhatásban van a kristályráccsal is és ennek eredményeképpen egy $\hbar\omega_q$ "fononnyi" energiát (II. füzet 85.oldal) lead vagy felvesz $(\pm)$. Erre a folyamatra természetesen mind az energia, mind pedig az impulzus megmaradás tételének teljesülnie kell. Látható, hogy a foton és a fonon nem megmaradó mennyiségek! (II. füzet 82.oldal) Mivel a foton hullámhossza több ezerszer is nagyobb lehet, mint a kristály rácstávolsága, ezért a $\hbar\vec{k}$ impulzusa elhanyagolható az elektron és a fonon $\hbar\vec{q}$ impulzusa mellett. Továbbá tudjuk azt is, hogy mindkét félvezető típusban a vegyérték sáv teteje a $\left(\vec{k}_\Gamma = 0\right)$ Γ pontban van, ami azt jelenti, hogy itt ez elektron (kvázi)impulzusa nulla, $\hbar\vec{k}_\Gamma = 0$.

Az energia és az impulzus megmaradást kifejező egyenleteket megoldva lényeges különbség adódik a direkt és az indirekt sávú félvezetők között. Nevezetesen:

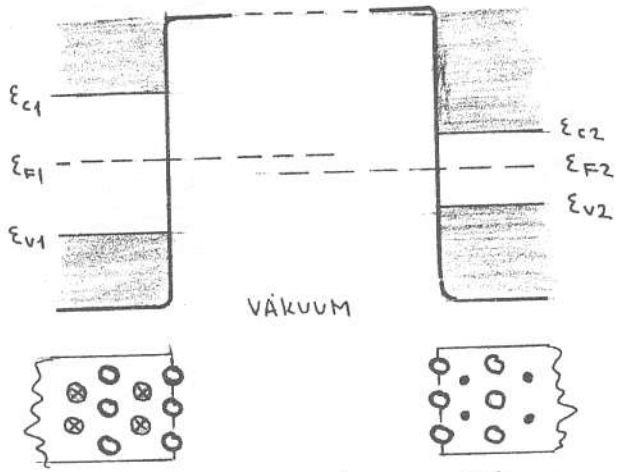
direkt átmenetnél ez elnyelt foton energiája: $\hbar\omega \geq E_g$,

indirekt átmenetnél ez elnyelt foton energiája: $\hbar\omega \geq E_g \pm \hbar\omega_q$.

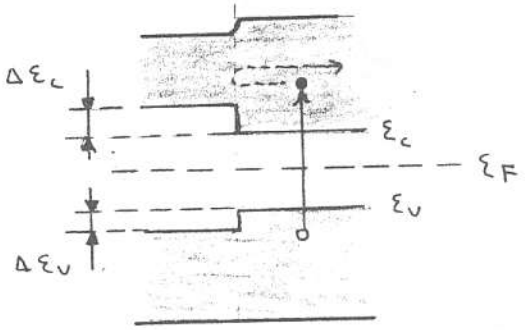
Az abszorpciós spektrumból meghatározható E_g a tiltott sáv szélessége, és indirekt sávú felvezető esetén a vezetési sáv aljának a helye(?) a Brillouin zónában ($\hbar\omega_q$ segítségével).

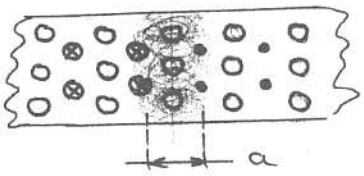
2.10. Mikrostruktúrák : a jövő elektronikája (3)

Kvantum völgyek : Általános elméleti modell



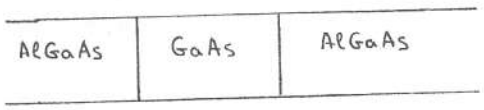
(két "közel hasonló" félvezető)

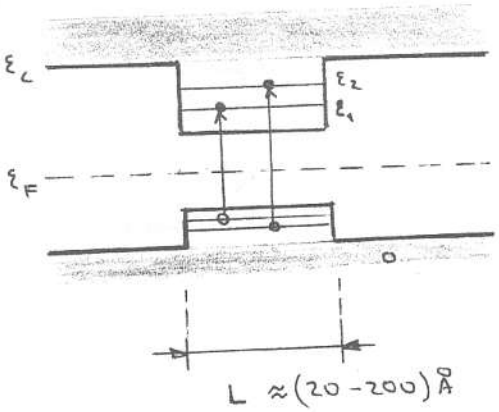


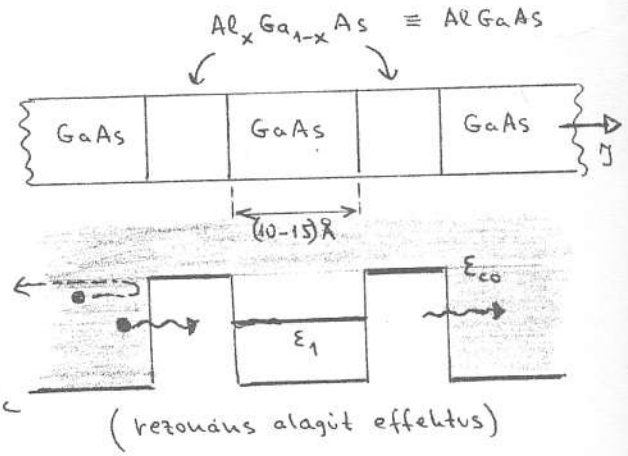


(Heterostruktúra)

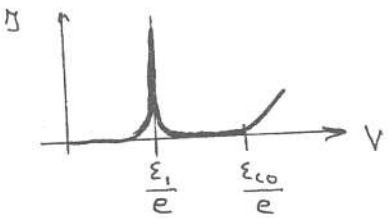
Megvalósítás







(rezonáns alagút effektus)



2.10 Mikrostruktúrák: A jövő elektronikája

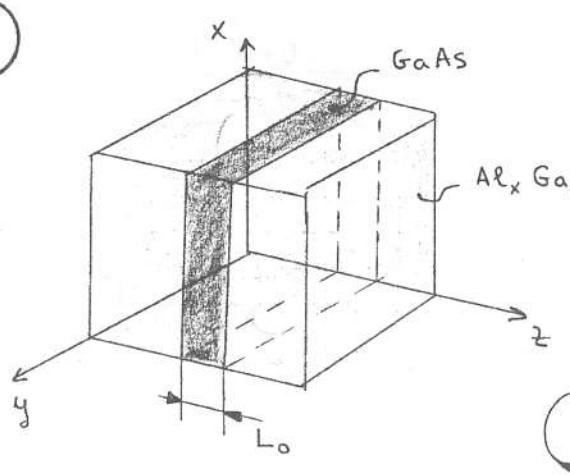
A technológiai haladás és a kvantummechanika.

A elektronikai technológia fejlődése az elmúlt évtizedekben elképesztő méreteket öltött. Ez tette lehetővé azt a szédületes fejlődést, amely olyan eszközök tömeggyártását tette lehetővé, amelyek gyökeresen megváltoztatták a mindennapi gazdasági és társadalmi tevékenységeinket is. Átformálta a világgazdaság arculatát és a politikai mozgások trendjét is befolyásolta. Egy valóban végbemenő ipari forradalom szenvedő de egyben csodáló és reményeink szerint tevékeny részesei vagyunk. Mindennek kiindulópontja egy tisztán elméleti modell a kvantummechanika megszületése volt.

A mai kor mérnöke és fizikusa szemtanúja lehet az "elmélet" és a "gyakorlat" aktív és termékeny kölcsönhatásának. A tények győznek meg minket arról, hogy ez a kétféle tevékenység nem egymást kizáró, hanem egymást kiegészítő területe a modern műszaki tudományoknak. Ma már elő tudunk állítani olyan atomi struktúrákat, amelyek a kvantumos effektusok egész sorát emeli be a gyakorlati alkalmazások sorába. A következőkben ezekről szeretnénk egy-két szót szólni. Koránt sem a teljesség igényével, inkább csak bepillantást engedve a "jövő elektronikája" elvi műhelyébe.

A mai modern technológia lehetővé teszi a kristályok rétegenkénti "növesztését". Ezzel el lehet érni azt , hogy "közel hasonló" kristályok (pl.: $GaAs - AlGaAs$) tetszőleges vastagságú rétegei egyetlen rácssík mentén érintkezve épüljenek egymásra. Ekkor az egyes rétegekben a Fermi szintek egyenlőek, de a tiltott sávok különbözőek lesznek. Ennek következtében például a vezetési sávban lévő elektron (az elválasztó rácssíknál) egy potenciállépcsőt fog érzékelni. Két ilyen átmenet potenciálvölgyet vagy potenciál gátat hoz létre. Így nyernek valódi fizikai realitást a kvantummechanikai bevezetőben megoldott egyszerű, tisztán elvinek hitt feladatok (I. füzet. 16.oldal és 32.oldal). A kettős potenciálgát által létrehozható rezonáns alagúteffektus ma már mérhető makroszkopikus áram-feszültség karakterisztikát produkál.

51

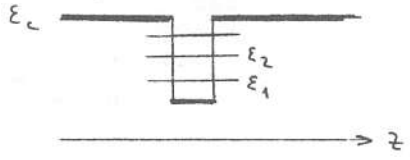


$$\varepsilon = \frac{\hbar^2}{2m^*}\left(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2\right) \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \underbrace{\frac{\hbar^2}{2m^*}\left(k_x^2 + k_y^2\right)}_{\text{szabad mozgás}} + \underbrace{\varepsilon_n}_{\text{potenciál völgy}}$$

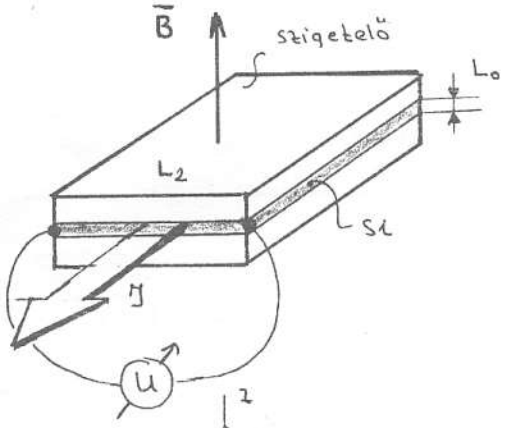
KÖZELÍTÉS

$$\varepsilon_n \approx \frac{\hbar^2}{2m^*}\left(\frac{\pi n}{L_0}\right)^2 \qquad (n = 1,2,3)$$

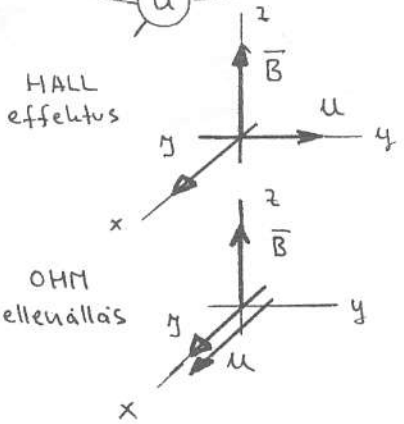


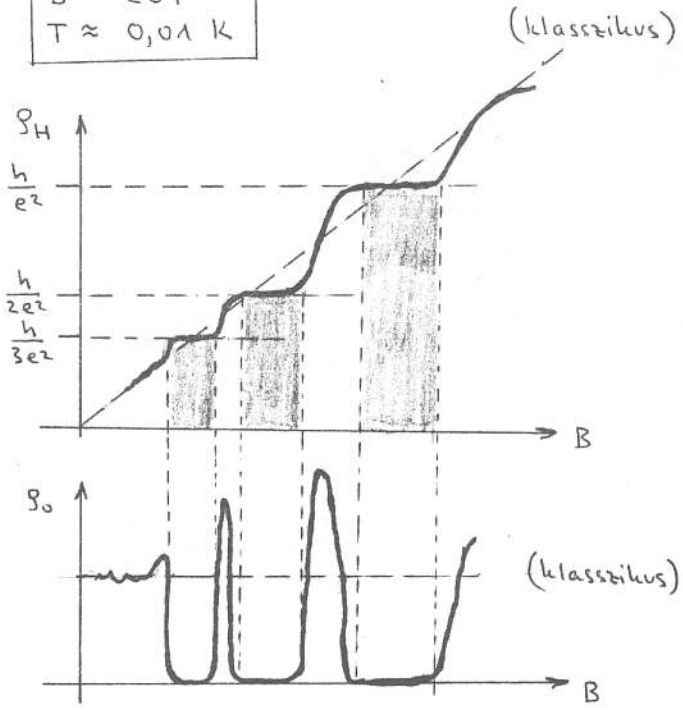
kétdimenziós elektrongáz

A kvantált HALL effektus (1980 Klaus von KLITZING)



$L_0 \approx 100\ \text{Å}$
$B \approx 20\,T$
$T \approx 0{,}01\ K$





$$u = \underbrace{\frac{B}{en}}_{\equiv \varrho_H} \cdot \frac{L_2}{L_0 L_2} \cdot J$$

$$\boxed{\varrho_H = \frac{h}{ie^2}}$$

$i = 1,2,3,4,\ldots$ egész számú HALL effektus

$i = \frac{1}{3}, \frac{2}{3}, \ldots \left(\frac{5}{3}, \frac{2}{5}, \frac{3}{5}, \frac{3}{7}\right)$ tört számú HALL effektus

$$\boxed{\frac{h}{e^2} = 25812{,}8\ldots\ \Omega}$$

(8 tizedesjegy pontossággal MÉRHETŐ)

Meglepő kísérlet-maglepő elmélet: A kvantált Hall-effektus

A potenciálvölgy mélysége adott, azt a $AlGaAs-GaAs-AlGaAs$ sávszerkezete határozza meg. A völgy szélességét (ami a GaAs kristályréteg szélessége) mi választjuk meg. Ha a völgy elegendően keskeny akkor csak egyetlen kötött állapotú energiaszintet fog tartalmazni. Így az (ebben a keskeny kristályrétegben lévő) elektron a rétegre merőlegesen kötött állapotban van és ezért a rétegben tulajdonképpen kétdimenziós mozgást végez. A vezetési elektronok sokasága tehát kétdimenziós elektrongázt alkot. Ennek a kvantummechanikai tulajdonságai és azok makroszkopikus megnyilvánulása eltér a háromdimenziós esettől. Ennek (történetileg) az első példája a kvantált Hall-effektus.

"Ritkán fordul elő, hogy egy fizikai jelenség születésének az óráját olyan pontosan meg lehessen állapítani, mint a kvantumos Hall jelenségét. 1980. február 4-éről 5-ére virradó éjjel 2 óra körül járt az idő a grenoble-i Erős Mágneses Terek Laboratóriumában amikor egyszer csak felvetődött az ötlet, hogy "a" kísérleti eredményeket újféleképpen kellene értelmezni....A különös felismerés az volt, hogy a Si-MOSFET félvezető eszközök bizonyos elektromos tulajdonságait az erős mágneses térben már nem befolyásolják a szilárdtest egyedi részletei. Függetlenül attól, hogy a mérést melyik cég által gyártott mintán végeztük el, újra meg újra ugyanazt az elektromos ellenállást mértük, melynek értékét a Természet határozta meg. A félvezető eszközök eltérő mikroszkopikus tulajdonságainak nyilvánvalóan semmiféle hatásuk nem volt erre az eredményre. " írja visszaemlékezésében Klaus von Klitzing a jelenség felfedezője. Ez előtt a februári nap előtt senki nem sejtette, hogy egy hétköznapi félvezető eszköz extrém körülmények között drámaian új jelenséget képes produkálni. Ráadásul olyat, amelynek magyarázata nem kevés fejtörést okoz majd az elméleti szakembereknek és a szilárdtestfizikai kutatások újabb frontját indítja el.

Mindez kereken 100 évvel a Edwin Hall felfedezése után történt! Mi is tehát ez a "mérnöki eszközön" produkált meghökkentő jelenség?

A klasszikus Hall-effektussal már foglalkoztunk (III.füzet 18.oldal).Végezzük el a Hall kísérletet egy nagyon vékony (kb. 100 Angström = 10 nanométer vastagságú) Si kristály rétegen, nagyon erős mágneses teret alkalmazva (kb. 20 Tesla) és igen alacsony hőmérsékleten (kb. T=0. 01 Kelvin). Ekkor meglepő eredményt tapasztalhatunk! A Hall állandó (szokás Hall ellenállásnak is mondani) a klasszikus mérés szerint arányos az alkalmazott mágneses térrel. Most azonban, a klasszikus egyenes mentén lépcsőszerűn emelkedő görbe adódik. A lépcsők platói jól meghatározott rendben követik egymást: $\frac{h}{e^2}\cdot\frac{1}{i}\ \left(i=1,2,3,...\right)$. A Hall ellenállás platói tehát egy elemi egységnél, annak felénél, harmadánál, stb. ...vannak. Az $\frac{h}{e^2}$ elemi egység értéke 25812.8 Ohm.

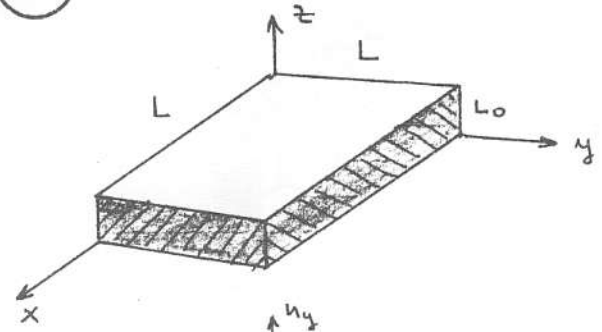
Az ohmikus ellenállás a klasszikus esetben állandó, azaz nem függ a mágneses tértől. Most azonban azoknál a mágneses tereknél, ahol a Hall ellenállás állandó, az ohmikus ellenállás a nullára csökken.

Első pillanatra talán nem érthető az effektus nagyon nagy jelentősége. Mindenesetre az elgondolkoztató, hogy a felfedezője Klaus von Klitzing öt (!) évre rá megkapta a fizikai Nobel-díjat. És ez nem véletlen! A kvantált Hall effektus jelenségének elméleti magyarázatára tett erőfeszítések elősegítették (illetve napjainkban is elősegítik) a kölcsönható elektrongázok igen bonyolult elméletének a fejlődését. Ugyanakkor egy nagyon jól reprodukálható ellenállás etalont lehet a segítségével készíteni, aminek a méréstechnikai előnye óriási.

Röviden megpróbáljuk vázolni az (egész számú!) kvantált Hall-effektus kvalitatív elméleti magyarázatának az elemeit. A szemléletesség miatt sokszor klasszikus fizikai fogalmakat (képeket) használunk, de a kvantummechanika törvényeit alkalmazzuk majd.

A vékony félvezető rétegben egy kétdimenziós elektrongáz van jelen. A szokásos módon (III.füzet 2.oldal) megmutatható, hogy a kétdimenziós elektrongáz (pálya)állapotsűrűsége állandó, azaz független az energiától. Ha erős mágneses teret kapcsolunk a rendszerre, akkor az elektronok ω_c ciklotron körfrekvenciával körpályán fognak mozogni. A mágneses térnek azért kell nagynak lenni, hogy a körpályák sugara lényegesen kisebb legyen, mint a kristály makroszkopikus mérete. A kvantummechanika szerint minden oszcilláló rendszer energiája kvantált. Ezért mágneses térbe helyezett kétdimenziós elektrongáz energiája is kvantált lesz (a diszkrét energia értékeket Landau nívóknak nevezik) Az energiaszintek távolsága az oszcillátor kvantálási törvényének megfelelően $\hbar\omega_c$.A bekapcsolt mágneses tér nem változtatja meg az elektronrendszer energiáját (a Lorentz erő merőleges a sebességre!) Ezért a létrejött Landau nívóknak degeneráltaknak kell lenni. Egy Landau nívóhoz azok a szabadelektron állapotok fognak majd tartozni amelyek energiája egy $\hbar\omega_c$ tartományban vannak. Mivel a kétdimenziós elektrongáz állapotsűrűsége állandó, ezért a Landau-nívók degeneráltsága nem függ az energiától csak az alkalmazott mágneses tértől. Így, adott mágneses tér esetén, minden egyes Landau nívóhoz az elektronoknak ugyanakkora térbeli sűrűsége tartozik.

A kvantált Hall effektus elméletének elemei



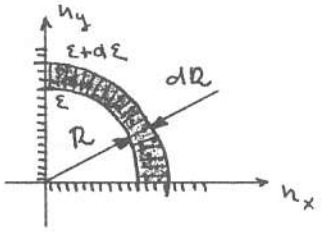
szabad elektrongáz:

$$\varepsilon = \underbrace{\frac{\hbar^2}{2m^*}\left(k_x^2+k_y^2\right)}_{\text{szabad mozgás 2 dimenzióban}} + \underbrace{\varepsilon_n}_{\text{kötött állapot (potenciál völgy)}}$$

(periódikus határfeltétel)

$$\varepsilon = \frac{\hbar^2\pi^2}{2m^*L^2}\left(n_x^2+n_y^2\right) \equiv E_0\left(n_x^2+n_y^2\right)$$

$$\left(n_x, n_y = 1,2,3,4,\ldots\ldots\ N \gg 1\right)$$



Az állapotsűrűség

$$n_x^2+n_y^2 = \frac{\varepsilon}{E_0} \equiv \mathcal{R}^2 \quad \longrightarrow \quad \mathcal{N}(\varepsilon)\,d\varepsilon = \frac{1}{4}\,2\pi\mathcal{R}\,d\mathcal{R}$$

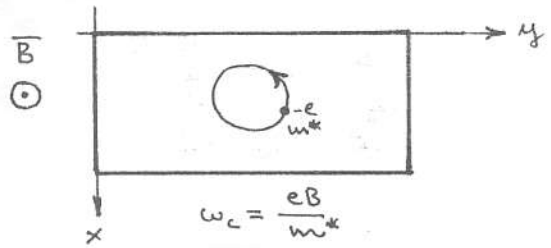
$$\mathcal{R} = \frac{\sqrt{\varepsilon}}{\sqrt{E_0}}$$

$$d\mathcal{R} = \frac{1}{2\sqrt{E_0}}\cdot\frac{1}{\sqrt{\varepsilon}}\,d\varepsilon$$

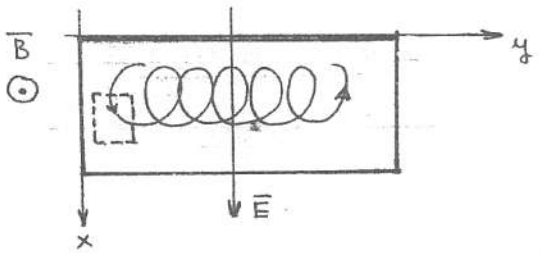
$$\mathcal{N}(\varepsilon) = \frac{\pi}{4E_0}$$

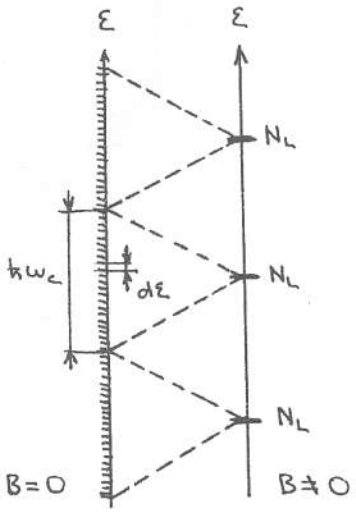
A kétdimenziós elektrongáz állapotsűrűsége : $\boxed{\mathcal{N}(\varepsilon) = \text{állandó}}$

Külső elektromágneses tér hatása:



$\tau\omega_c \gg 1$





Kvantummechanika (LANDAU)

$$\varepsilon = \hbar\omega_c\left(n+\frac{1}{2}\right) \qquad (n=0,1,2,\ldots)$$

degeneráció:

$$N_L = \underbrace{\mathcal{N}(\varepsilon)}_{\text{(állandó!)}}\cdot\hbar\omega_c = \frac{\pi}{4E_0}\,\frac{\hbar eB}{m^*}$$

A töltéshordozó (elektron) sűrűség:

$$n_L \equiv \frac{N_L}{L^2} = \ldots = \frac{eB}{h}$$

(független az energia-szinttől)

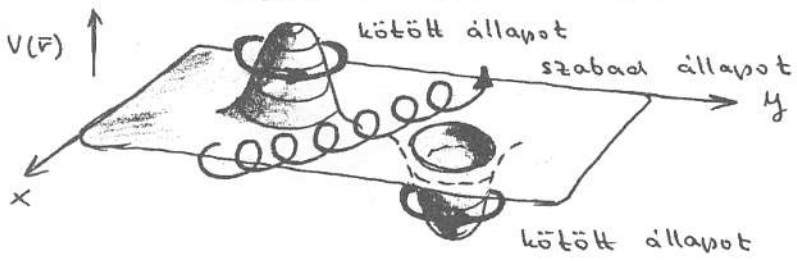
Legyen i db Landau nívó betöltve ⟹
a töltéshordozók (össz) sűrűsége : $n = i \cdot n_L$ $(i = 1,2,3,\dots)$

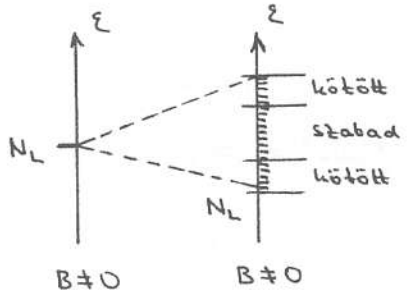
azaz :

$$\varrho_H = \frac{B}{en} = \frac{B}{i e n_L} = \frac{h}{i e^2}$$

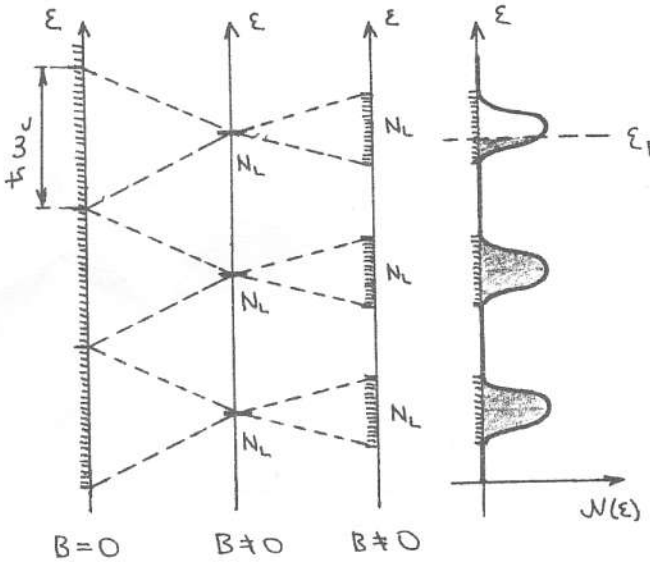
de: $i(B) = ?$

A szennyező atomok hatása :





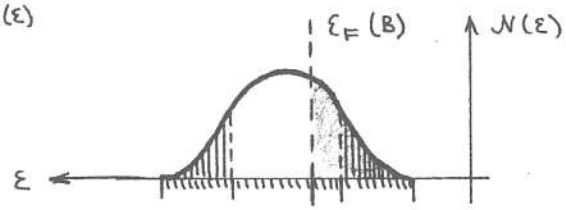
Összegezve :

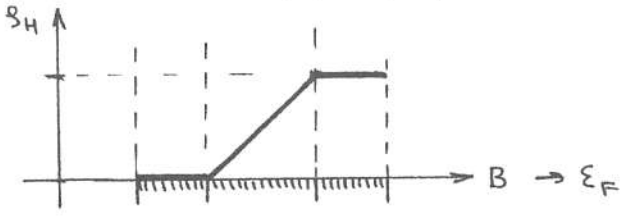


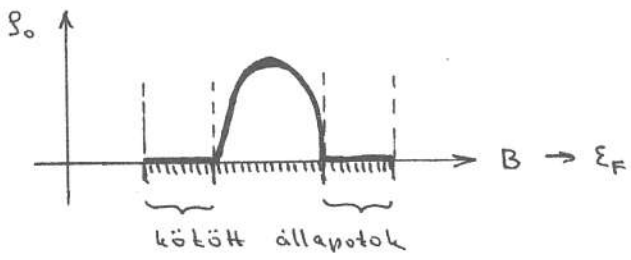
Szabad elektronok
(2 dimenziós)

(Fermi szint) $\varepsilon_F(B) \longrightarrow i(B)$

→ a teljesen betöltött sávokban
stabil szabad állapotok
↓
szóródás nincsen (Pauli elv)
↓
$\varrho_0 = 0$







$B \longrightarrow \varepsilon_F(B) \longrightarrow n(B) \longrightarrow \varrho_H(B)$

Az elektronsűrűség tehát a betöltött Landau nívókhoz tartozó elektronok sűrűségének az összege lesz. A Hall ellenállás így a betöltött Landau nívók számától függ. Ezt pedig az alkalmazott mágneses tér fogja meghatározni a következőképpen.

A kristályban mindig vannak szennyező atomok és rácshibák. Ezek lokalizálni tudják a kétdimenziós elektrongáz "ciklotron" állapotainak egy részét. Tehát szabad és lokalizált állapotok lesznek jelen. (Ennek könnyen belátható topológiai oka van.) Az energia skálán ez úgy jelenik meg, hogy a szennyező atomok és kristályhibák hatására a Landau nívók felhasadnak (sávokká szélesednek), a degeneráltság megszűnik. Az állapotsűrűség függvény jellegzetes, egymástól elkülönülő "púpokból" fog állni. A mágneses tér növelésével az ω_c ciklotron körfrekvencia nagyobb lesz, ezért a Landau nívók közötti $\hbar\omega_c$ távolság növekszik és így az állapotsűrűség "púpjai" ritkábban fognak elhelyezkedni. Tehát a Fermi szint alatt kevesebb betöltött Landau sáv lesz és ezért a Hall ellenállás lépcsőzetesen csökkenni fog. Platókat azokban a térerősség tartományokban kapunk, amikor a Fermi szint két púp közé esik. Ekkor ugyanis a nem változik a Fermi szint alatti betöltött Landau sávok száma. Az ohmikus ellenállás ezekben a tartományokban azért válik nullává, mert a szabad állapotok mind be vannak töltve és a Pauli-elv miatt az elektronok nem mehetnek át alacsonyabb energiájú állapotba és így energia veszteség nélkül haladnak át a kristályon.

A törtszámú kvantum Hall-effektus $\left(i=\frac{m}{n}\right)\left(pl: i=\frac{1}{3},\frac{2}{3},...,\frac{5}{3},...,\frac{2}{5},\frac{3}{5},...,\frac{3}{7},...\right)$ magyarázata lényegesen nehezebb. Ez már jócskán meghaladja (még kvalitatív szinten is) ennek az tantárgynak a színvonalát.

Érdemes azonban ezzel kapcsolatban megjegyezni a következőket.

Láttuk, hogy ez egész számú kvantált Hall-effektusnál (IQHE) lényegében független, kétdimenziós elektrongáz viselkedését vizsgáljuk erős mágneses térben. A törtszámú kvantált Hall-effektusnál (FQHE) a kétdimenziós elektrongáz a kölcsönhatások miatt igen bonyolult „kollektív” mozgást végez, amelynek eredményeképp az egész rendszer úgy viselkedik, mintha törtszámú elemi töltések lennének jelen. Az elmélet során olyan állapotfüggvényeket kellett konstruálni, amelyek gyökeresen különböznek a kvantumfizikában eddig használt valamennyi állapotfüggvénytől. 1980 előtt erre még gondolni sem lehetett!

Az FQHE elmélete alapvetően más, mint az IQHE elmélete volt. Sokan a kvantummechanika (és az elméleti szilárdtestfizika) újabb diadaláról beszélnek és nem is véletlenül. Éppen ezért nem is csodálkozhatunk azon, hogy Klitzing után 13 évvel a Nobel-díj bizottság ismét a kvantált Hall-effektussal kapcsolatban itélte oda a legrangosabb nemzetközi tudományos kitüntetést három amerikai fizikusnak.

Az 1998-as fizikai Nobel-díjat megosztva *Robert B. Laughlin* (Stanford University), *Horst L. Störmer* (Columbia University) és *Daniel C. Tsui* (Princeton University) kapták indoklásul „a törttöltésű gerjesztésekkel rendelkező, új típusú kvantum folyadék felfedezéséért.”

A mai Szilárdtestfizika fejlődése szépen bizonyítja az „elméleti” és a „gyakorlati” kutatások szoros kölcsönhatásának szükségességét és hatékonyságát. Maga Störmer hangsúlyozta, hogy ő nem mérnök, nem ért a mérnöki munkához, de a felfedezésük nem lett volna lehetséges a hihetetlenül magas szintre fejlődött félvezető technika nélkül. Ebben az értelemben a felfedezés sok szakember komoly munkájának az eredménye. Az már „csak” a szerencsétől függ, ha valaki jó időben jó helyen van. Itt érdemes megjegyezni, hogy mindhárom kitüntetett, a jelenség felfedezésekor a Bell-laboratórium munkatársai voltak. Úgy látszik, hogy tényleg „jó helyen” voltak.

UTÓSZÓ

Arccal a jövő elektronikája felé: „Jóslat, beteljesülés, törvény”

Az Electronics-c. műszaki tudományos folyóirat **1965. április 19-i** számában egy cikksorozat jelent meg, amelynek összefoglaló címe :”A szakemberek előretekintenek”

Ezen sorozat egyik, mindössze három és fél oldalas tanulmányának (az első pillanatra meglehetősen unalmasnak tűnő) címe a ”Több komponens integrált áramkörökbe zsúfolása” volt. A szerzője **Gordon E. Moore** a „Fairchild Camera and Instrument Corporation” neves cég félvezető kutatásának a vezetője, villamosmérnök, aki azonban jelentős fizikai és kémiai ismeretekkel is rendelkezett. A cikkben néhány, igen futurisztikusnak tűnő kijelentés volt olvasható:

„Az integrált áramkörök olyan csodákhoz fognak vezetni, mint az otthoni számítógépek, a gépkocsik automatikus vezérlése, hordozható személyi kommunikációs eszközök.” Tehát „ Az integrált elektronika jövője maga a jövő elektronikája.” Ne felejtsük el, hogy **ekkor 1965-öt írunk**! A „szobányi” méretű és a maiakhoz képest igen lassú számítógépek világában a jóslat valóban hihetetlennek tűnt. A szerző később az Intel Corporation (napjaink egyik vezető chip-gyártó cégének) egyik társalapítója lett.

Az akkori merész jóslat mára a mindennapok valóságává vált. Nehéz lenne elképzelni hétköznapi életünket **személyi számítógépek, mobiltelefonok, GPS** szolgáltatások nélkül.

A szerző neve mégsem a látnoki jóslata beteljesülése miatt vált ismertté, hanem a cikkében közölt kis grafikon és az ahhoz fűzött magyarázó megjegyzése révén. Moore azt vette észre, hogy az integrált áramkörök első megjelenése (1959) óta eltelt 6 évben (1959-1965) az egy chipen elhelyezett tranzisztorok száma évente megkétszereződött. Előrejelzése szerint, ha ez a folyamat az elkövetkező tíz évben (1965-1975) folytatódik, akkor ez 1975-ben chipenként 65 000 elemet jelent majd. A valóságban ez a szám 1975-ben „csak” 12 000 volt. Ezért a „megkettőződés” idejét később egy év helyett 18 hónapra módosították. Mindez azonban az exponenciális növekedési törvény lényegét (amit ma már **Moore törvénynek hívnak**) nem érinti.

„A történelem irányt váltott, nemcsak a az új számítás-, kommunikációs- és hírszerzési technika eredményeként, hanem a Moore-törvény által leírt öngyorsulási ráta megjelenésének köszönhetően is. A sűrű számítógépchipeket még sűrűbb chipek előállítására használták, és így tovább a végtelenségig. A chipenkénti komponensek számának 18 havonkénti megkétszereződése megduplázta a számítógépek hatékonyságát és felére csökkentette a költségeket. A számítógépek egyre kisebbek, gyorsabbak, olcsóbbak és okosabbak lettek és még csak nem is egyenletes arányban, hanem gyorsuló mértékben. A robbanás 1975-ben kezdődött, folytatódott 1985-ben 1995-ben és minden jel arra utal, hogy az állandó gyorsulás legalább 2015-ig tart majd. Mindez, 56 év alatt 37 kétszereződést és a teljesítmény 137 milliárdszoros (137 000 000 000) növekedését jelenti. A technika történetében nincsen példa ilyen hosszan tartó, öngerjesztő fejlődésre…….A mérnökök arra a tapasztalati szabályszerűségre jutottak, hogy minden 10-szeres mennyiségi változás minőségi változást jelent, azaz egy egyszerű extrapolálás helyett alapvetően új helyzetet teremt. Moore törvénye kb. 3 évente hoz egy 10-szeres szerkezeti változást így minden egyes évtizedre 3 forradalom jut. Egyik forradalom a másik után hullámzik át a számítógépiparon.” (Stewart Brand: „Amíg világ a Világ”-c műve nyomán.)

Izgalmas korban élünk: durván háromévente avulnak el az elektronikus készülékeink.

Felmerülhet joggal a kérdés, vajon meddig tarthat a Moore törvény érvényessége? Mikor jutunk el olyan elemi alkatrészméretig, amikor már az atomi méretek tartományába jutunk. Ahol már csupán csak néhány atom alkot egy „elemi alkatrészt”. Ma már látjuk ezeket a „furcsa” elemeket. „Kvantum fonalak”, „kvantum pöttyök”, „egyelektron tranzisztorok”, „csöpögő elektronok” mind mind a jövő „nanotechnológiaájának” az elemei. A jövő beláthatatlanul érdekesnek ígérkezik. Kvantummechanika nélkül ebben a világban nemhogy eligazodni nem lehet, de még a problémák lényegét és jelentőségét sem lehet megérteni majd.

Kinyílik-e újra „Pandora szelencéje”?

David Deutsch brit fizikus 1984-ben egy számítógép-elméleti konferencián vett részt. Ekkor gondolkozott el azon, hogy a jelenlegi számítógépeink lényegében a „klasszikus fizika elvei alapján működnek” (már ami a jelek manipulálását illeti). A nagyfokú integráltság csak a használt logikai elemek miniatürizálását jelentik. Deutsch-ban az a gondolat fogalmazódott meg, hogy mi lenne, ha már az elemi műveleteknél is a kvantummechanika elvei működnének.

Egy „két állapotú rendszer” (mint amilyen az elektron spinje is) ideális kvantummechanikai tároló elem lenne. Ezt ma „kvantumbit”-nek vagy „qubit”-nek (kiejtése: kjubit) nevezzük. Egy ilyen tároló elem abban különbözik a klasszikus elemtől, hogy felvehet egy szuperponált állapotot is. Tegyük fel, hogy az elem egyik állapotát (nevezzük ezt a „0” jelű állapotnak) a φ_0 állapotfüggvény és a másik állapotát (nevezzük ezt az „1” jelű állapotnak) a φ_1

állapotfüggvény reprezentálja. A klasszikus fizika szerint egy tárolóelem vagy a „0” vagy az „1” állapotban van. Na mármost, ha ez a tárolóelem a kvantummechanika törvényeit követi, akkor ő felveheti a két kvantumállapot szuperpozícióját is azaz a $\varphi = c_0 \cdot \varphi_0 + c_1 \cdot \varphi_1$ állapotot is. Hogy ez valójában a bitek nyelvén mit is jelent nehéz elképzelnünk, de kialakult kvantummechanikai szemléletünk már adhat némi táppontot. Egy biztos, ha „megnézzük” a tárolót, akkor $|c_0|^2$ valószínűséggel fogjuk őt a „0” állapotban találni (stb..). Ez eddig még olyan lenne, mint egy „pénzdobálás”. Azonban az a dinamika, amely a tárolóelem állapotát meghatározza a kvantummechanika törvényeit követi. És ez már igen lényeges eltérést jelent a jelenleg használt eszközökben lezajló bit-manipulációs eljárásokhoz képest. D. Deutsch 1985-ben publikált dolgozatában részletesen kifejtette egy ilyen, általa elképzelt „kvantumszámítógép” működését.

Rögtön felmerült a kérdés, hogy hogyan kellene programozni egy ilyen „kvantumszámítógépet”?

1994-ben Peter Shor (a New Jersey-beli AT&T Bell Laboratórium munkatársa) készített egy olyan programot, amely segítségével igen nagy számok tényezőkre bontását lehet (elvileg) elvégezni igen rövid idő alatt. Mivel a primszámfelbontás (jelenleg) minden titkosítási eljárás alapja, nem csodálkozhatunk azon, hogy a kriptográfusok rögtön „elszörnyedtek” a kvantumszámítógép lehetőségének még a gondolatára is.

1996-ban Lov Gover kidolgozott egy nagyszerű programot, amelyik hihetetlen nagy sebességgel tud keresni egy nagy listában. Mint tudjuk a „keresési eljárás” kidolgozása az algoritmuselmélet egyik alapvető „problémája”. Egy kód feltöréséhez éppen ez kell, azaz minden lehetséges kulcsot végig kell próbálni. Ismét csak a titkosítás kerül veszélybe, hiszen egy kvantumszámítógép percek alatt képes megoldani egy olyan keresési feladatot, amire a jelenlegi gépeinknek évekre lenne szüksége. (Éppen ez a titkosítás lényege.).

„A kvantumszámítógép egyelőre még csak a fantázia világában létezik, de az egyénre, a nemzetközi üzleti életre és az általános biztonságra nézve egyaránt potenciális fenyegetést hordoz..” (Simon Singh: Kódkönyv)

Egy biztos, a gondolkodó elme (és az Ember) újabb kihívással találta magát szembe.

A kérdés ugyan filozófiainak tűnik, de a feltevése reális: „Szabad-e megalkotni agy valóban jól működő kvantumszámítógépet?” Bár abban, hogy ez gyakorlatilag lehet-e, sokan kételkednek. Az elvi lehetőség azonban megvan és a jól ismert Murphy törvény szerint:.”Ami elromolhat, az el is romlik.” Azaz pusztán a lehetőség magában hordozza a megvalósulás esélyét is.

Egy azonban biztos, igazat kell adnunk Daniel Hillis-nek aki a világ egyik vezető számítógép tervezője és aki szerint :”**Ha valaki abban bízik, hogy egyszer csak meglepi valami újfajta számítógép, akkor érdemes a kvantummechanikán tartania a szemét.”**

Hát úgy legyen!

Mindezekből remélhetőleg kitűnik, hogy az alapvető kvantummechanikai ismeretek megszerzése minden leendő villamosmérnök elemi, szakmai-erkölcsi kötelessége. Bár elgondolkozhatunk azon, hogy a mai Magyarországon, egyáltalán van-e ennek a kijelentésnek valamiféle társadalmilag hitelesített értelme.

Vajon van-e értelme manapság „szakmai-erkölcsi kötelezettségről” beszélni?

Én azt gondolom (O.L.), hogy ez egy létező kategória. Meggyőződésem, hogy egy magasan szervezett társadalomban ennek „társadalmilag preferált” értéknek kell lennie. Főleg egy olyan korban, ahol a technikai fejlettség magas szintje miatt a szakmai döntések korrektsége elemi követelmény kell, hogy legyen.

Mindezek megvalósítása **az új mérnöknemzedék feladata (is) !**

Ehhez kívánok minden hallgatónak sok sikert, erőt és bátorságot!

Ahogy a Költő mondja: **„Ez a mi munkánk és nem is kevés!**”

Orosz László
BME Fizika Tanszék