

2015-ös ZH Kérdések

1. Interferencia, Bragg feltétel, bejövő, kimenő hullámok

Interferencia 1: kristályok szerkezetmeghatározása Röntgen-szórással

(hullámok amplitúdójának lineáris kombinációja)

Bragg-reflexió: diffrakció kristálysíkokon

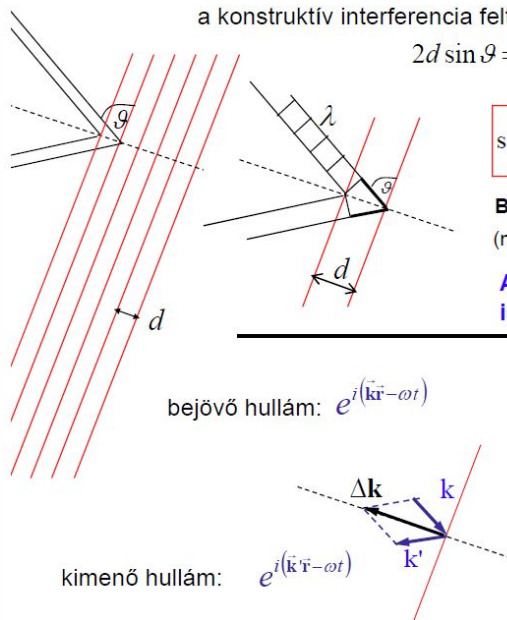
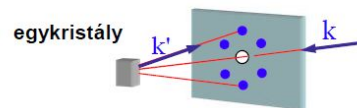
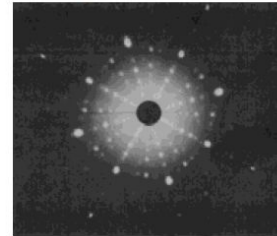
a konstruktív interferencia feltétele:
 $2d \sin \vartheta = m\lambda$

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

Bragg feltétel

($m = 1$ elsőrendű interferencia)

A kristálysíkok távolságának és normálisának ismeretében a szerkezet könnyen rekonstruálható.



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

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

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

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

merőleges a
kristálysíkra

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

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

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

2. Fotoeffektus, foton képletei

A foton fogalma

Ismétlés

Planck féle sugárzási törvény

$$h = 6,626 \times 10^{-34} \text{ Js}$$

A sugárzási tér energiája nem folytonos, hanem $h\nu$ egységekben kvantált.

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

$$I = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} \underbrace{h\nu}_{\text{energia-kvantum}} \underbrace{\frac{1}{e^{\frac{h\nu}{k_B T}} - 1}}_{\text{módusok sűrűsége}}$$

A ν frekvenciájú módus betöltési valószínűsége.
Bose-Einstein statisztika

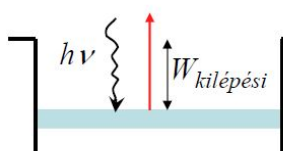
$$\Delta\varepsilon = h\nu$$

energia-kvantum

Azok a módusok, amelyekre a $h\nu$ rezgési energia nagyobb, mint a $k_B T$ termikus energia csak kis valószínűséggel vannak gerjesztve.

Fotoeffektus

$$E_{\text{fotelektron}} = h\nu - W_{\text{kilépési}}$$



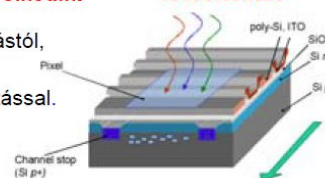
Legnagyobb energiával a leggyengébben kötött elektron lép ki.

A fény energiakvantumokból áll:
a fotoeffektus során egy elektron kilökéséhez egy foton energiája használódik el, a fennmaradó energia pedig a kilépő elektron mozgási energiája.

A fotoemisszió során a fény $h\nu$ energiájú, és $\hbar\mathbf{k}$ impulzusú részecskék sokaságaként viselkedik.

A kilépő elektron energiája nem a fény intenzitástól, hanem a frekvenciájától függ.
A kilökött elektronok száma arányos az intenzitással.

CCD kamera működési elv: fotoeffektus



3. Részecskék interferenciája

Részecskék interferenciája

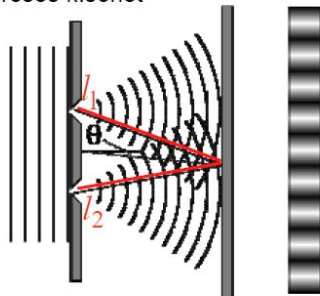
A hullámok amplitúdója összeadódik, az eredő intenzitást detektáljuk.

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

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

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

Két-réses kísérlet



erősítés:

$$l_1 - l_2 = n\lambda$$

kilöktés:

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

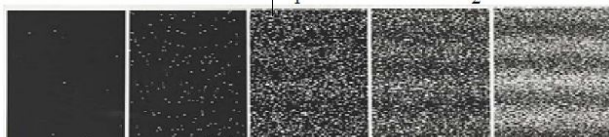
fullerén

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



Zeilinger-Arndt (1999)

$$I = |A_1 e^{i(\vec{k}\vec{r} + \phi_1 - \omega t)} + A_2 e^{i(\vec{k}\vec{r} + \phi_2 - \omega t)}|^2$$



Az interferenciacsíkok kirajzolódása a részecskék detektorba történő "becsapódásából".

4. Valószínűségi értelmezés(Max Born, Schrödinger)

Valószínűségi értelmezés

- az interferenciakép kirajzolja a hullámegyenletekből számolt intenzitást, a kép azonban véletlen felvillanásokból áll össze.
- a kísérlet egyetlen elektronnal is működik: mint "hullám" interferál, de "részecskeként" detektálódik (ebben a kísérletben).

Max Born

a hullámfüggvény intenzitása a részecske megtalálási valószínűségét adja meg, detektálása véletlenszerű.

Schrödinger jelölése:

A részecske hullámszerű terjedését a $\psi(\vec{r}, t)$ hullámfüggvény írja le, a detektorok által mért intenzitást a $|\psi|^2$ határozza meg.

Annak a valószínűsége, hogy a részecske az $\vec{r}$ pozíció körüli $d^3\vec{r}$ térfogatban legyen:

$$|\psi(\vec{r}, t)|^2 d^3\vec{r}$$

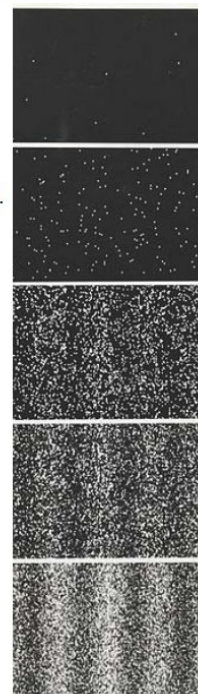
valószínűség-sűrűség függvény

Normálási feltétel:

A részecske valahol mindenképpen megtalálható, ezért

$$\int |\psi(\vec{r}, t)|^2 d^3\vec{r} = 1$$

Born-féle valószínűségi értelmezés



5. Csoportsebesség

Csoportsebesség

$$\begin{aligned} \psi(x, t) &= \int c(k) e^{i\left(kx - \frac{\varepsilon}{\hbar}t\right)} dk = e^{i\left(k_0x - \frac{\varepsilon_0}{\hbar}t\right)} \int c(k) e^{i\left\{(k-k_0)x - \frac{\varepsilon - \varepsilon_0}{\hbar}t\right\}} dk \\ &= e^{i\left(k_0x - \frac{\varepsilon_0}{\hbar}t\right)} \int c(k) e^{i\left\{(k-k_0)x - \frac{1}{\hbar} \frac{\varepsilon - \varepsilon_0}{k - k_0} t\right\}} dk = e^{i\left(k_0x - \frac{\varepsilon_0}{\hbar}t\right)} \int c(k) e^{i(k-k_0)(x-vt)} dk \\ &= e^{i\left(k_0vt - \frac{\varepsilon_0}{\hbar}t\right)} \int c(k) e^{ik(x-vt)} dk \end{aligned}$$

csoportsebesség $v = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \varepsilon}{\partial k}$

1. A hullámcsomag pozíciója időben eltolódik $v t$ -vel

2. A hullámcsomag „szétfolyik” a fázissebesség és a csoportsebesség különbözősége miatt: $v \neq \frac{1}{\hbar} \frac{\varepsilon_0}{k_0}$

csoportsebesség

Becslés az időbeli szétfolyásra

$$\Delta x(t) \approx \Delta v t \approx \left(\frac{1}{m} \hbar \Delta k \right) t$$

$$10^{-4} \frac{m^2}{s} \rightarrow t = 10^{-12} s$$

fázissebesség

6. Alagúteffektus(képlet, plusz mire lehet használni, hol alkalmazzák)

Elektron terjedése potenciál jelenlétében

$$Ae^{i\left(\vec{k}\vec{r}-\frac{\varepsilon}{\hbar}t\right)}$$

kinetikus energia

gyengén helyfüggő potenciál

teljes energia

$$\varepsilon = \frac{p^2}{2m} + V(\vec{r}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + V(\vec{r})$$

$$k(\vec{r}) = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(\varepsilon - V(\vec{r}))}$$

A negatív energia tartományban, azaz ha $\varepsilon - V(\vec{r}) < 0$, akkor a hullámszám tisztán

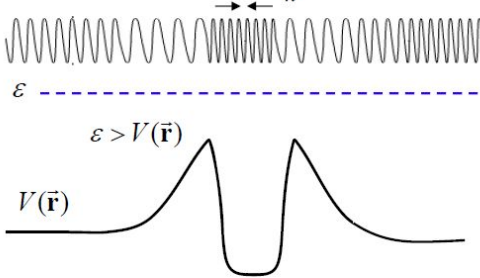
képzetes: $k = i\kappa$

evanescens hullám

$$\psi(r, t) = A e^{i\left(kr - \frac{\varepsilon}{\hbar}t\right)} = A e^{-\kappa r} e^{i\frac{\varepsilon}{\hbar}t}$$

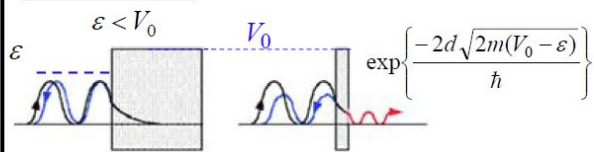
A potenciális energia csökkenésével a hullámszám nő, azaz nő az impulzus

$$\lambda = \frac{2\pi}{k}$$

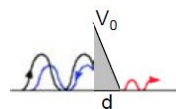


Megfelel a klasszikus fizikai várakozásnak

Alagút-effektus



Fowler-Nordheim tunneling



$$\exp\left\{-\frac{2d\sqrt{2m}}{3\hbar V_0}(V_0 - \varepsilon)^{3/2}\right\}$$

átjutási valószínűség

Tekintsünk egy elektront egy térben lassan változó potenciál jelenlétében (a térbeli változás olyan gyenge, hogy a az impulzus kiolvasásnál alkalmazott gradiens képzésnél a $V(r)$ helyfüggéséből származó járulékok elhanyagolható).

Ha ez elektron teljes energiája meghaladja a potenciálgát magasságát, akkor az elektron hullámfüggvénye továbbra is síkhullámra emlékeztet. Összenergiája elegendő ahhoz, hogy átjusson a potenciálgáton, megtalálási valószínűsége mindkét oldalon hasonló. A síkhullám hullámhossza viszont térben változik: ahol a potenciál magas, ott az elektron kinetikus energiája lecsökken, így hullámhossza megnő, az alacsony potenciálnál pedig a hullámfüggvény rövid periódussal oszcillál. A klasszikus mechanika analóg esetéhez hasonlóan az elektron lassul a potenciál emelkedő szakaszában, és gyorsul az ereszkedő szakaszban, hiszen sebessége (p/m) a potenciál értékétől függően változik:

$$\frac{\hbar k}{m} = \sqrt{\frac{2}{m}(\varepsilon - V(r))}$$

Abban az esetben viszont, amikor az elektron összenergiája kisebb, mint a potenciálgát magassága a klasszikus fizikában értelmezhetetlen jelenséggel találkozunk. A potenciálgát helyén hullámfüggvénye olyan síkhullámként viselkedik, melynek hullámszáma képzetes. Ez exponenciálisan lecsengő megtalálási valószínűségnek felel meg, így a hullámfüggvény amplitúdója a potenciálgát egyik

oldalán jóval kisebb lesz mint a potenciálgát másik oldalán. Kisebb, de nem nulla: ez a kvantummechanikai alagút-effektus.

Alkalmazása: Pásztázó alagútmikroszkóp (STM), Flash Memória

7. Born Kármán periodikus határfeltétel

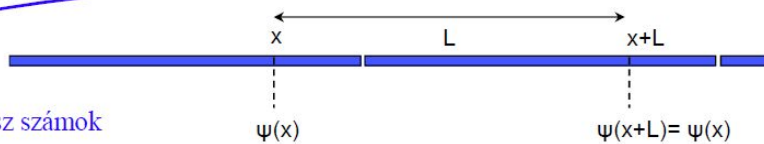
Born-Kármán | periodikus határfeltétel

véges méret → „ciklikus” határfeltétel

$$\psi_n = A e^{i(k_n x - \omega t)} = A e^{\frac{i}{\hbar}(p_n x - \varepsilon_n t)}$$

$$e^{i k x} = A e^{i k (x+L)}$$

$$k = n \frac{2\pi}{L}, \text{ ahol } n = 0, 1, 2, \dots \text{ egész számok}$$



8. Felcserélési reláció

Felcserélési reláció

Operátorok alkalmazása a kvantummechanikában

Operátor műveletek

$$\hat{p} = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \text{ vagy } -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$$

$$\hat{x} = x$$

Számít az operátorok alkalmazásának sorrendje:

$$\left. \begin{aligned} \hat{p} \hat{x} \psi &= \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} (x \psi) = \frac{\hbar}{i} \left(\psi + x \frac{\partial \psi}{\partial x} \right) \\ \hat{x} \hat{p} \psi &= x \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial x} \end{aligned} \right\} \quad \hat{p} \hat{x} \psi - \hat{x} \hat{p} \psi = \frac{\hbar}{i} \psi$$

$$\boxed{\hat{p} \hat{x} - \hat{x} \hat{p} = \frac{\hbar}{i}}$$

Definíció: két operátor **kommutátora**

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

határozatlansági relációk

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

Az impulzus és a hely **kommutátora**:

$$\Delta \hat{p} \Delta \hat{x} \geq \frac{1}{2} \hbar$$

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

ebből következik a rezgések kvantált spektruma (keltő- és eltüntető operátorok bevezetésével)

hullámfüggvényekből leolvasott impulzus $\hbar k$

felcserélési reláció

kvantált spektrum

Einstein

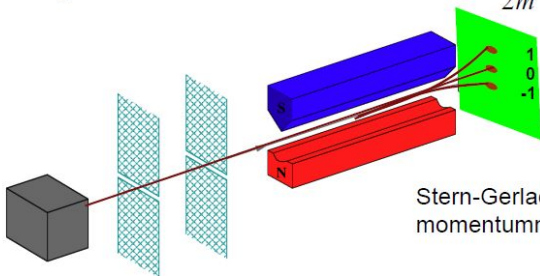
Planck

$\hbar \nu$

9. Spin

Történelmi visszatekintés: a spin felfedezése Stern-Gerlach kísérlet Ag atommal

A $\lambda_z = n\hbar$ pályamomentumhoz tartozó $\mu_z = \frac{e\hbar}{2m} n$ mágneses momentum kimutatása "röptetett" atomokon:



Inhomogén mágneses térben a μ_z momentumra ható eltérítő erő:

Stern-Gerlach kísérlet $n = -1, 0, 1$ a legkisebb pályamomentummal rendelkező atomon.

Pályamomentum esetén a felhasadás mértéke mindig páratlan

$$\lambda_z = n\hbar \quad \mu_z = \mu_B n \quad \mu_B = \frac{e\hbar}{2m}$$

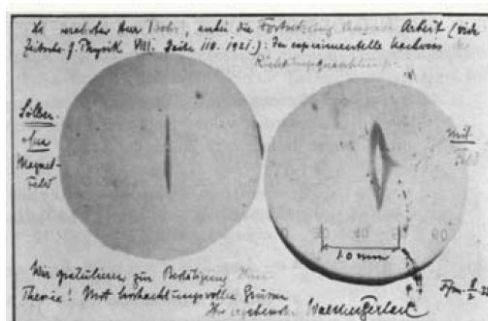
$$n = 2\ell + 1$$

Ezüst atom pályamomentuma nulla, de "kompenzálatlan" **spin**-nel rendelkező elektron van rajta:

a spinhez tartozó impulzusmomentum $\frac{\hbar}{2}$

$$\ell = \frac{1}{2} \leftarrow 2\ell + 1 = 2 \leftarrow \text{két vonal}$$

Friedrich and D. Herschbach, Physics Today 56: 53 (2003)



10. Flash memória, vagy valami mikroszkóp működése, mar nem emlékszek pontosan.

Egy MOSFET kapuelektrodáján kialakított potenciálgát segítségével elektronokat lehet bezárni a kapu tartományába. A mintegy 10^5 db elektron által létrehozott elektromos tér biztosítja a kapufeszültséget. A 0 vagy 1 bit információt a töltés jelenléte vagy hiánya jelenti: a kiolvasás a forrás és a nyelő közti ellenállás mérésével történik.

<http://www.youtube.com/>

Tipikus kérdések az első negyedév anyagából (Fizika 3)+

Elektromágneses hullámok

Az elektromágneses sugárzás rádióhullámú tartományára miért ad jó leírást a klasszikus fizika? (Lásd a "A hőmérsékleti sugárzás mely tartományában elkerülhetetlen a kvantummechanikai leírás?" kérdést.)

Mert a Planck-féle sugárzási törvény

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

kis frekvenciákon (rádióhullámok frekvenciatartománya) értelmezve a Rayleigh-Jeans tv.-re egyszerűsödik, miszerint

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

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

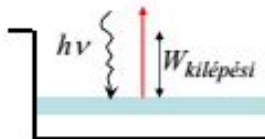
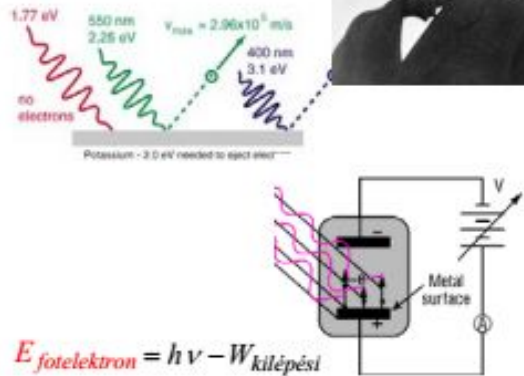
Ez azért van, mert a rádióhullámhoz hasonló "alacsony" frekvenciákon a $h \cdot f$ energiakvantum olyan kicsi, hogy az energia folytonosnak tekinthető. (nagyságrendileg: 1GHz mikrohullám $10^{-15} \cdot 10^9 = 10^{-6}$ eV (1 mikroelektronvolt), látható fénynél $10^{-15} \cdot 10^{15} = 1$ eV)

Kvantum alapok

Lénárd Fülöp - 1901

Nobel-díj 1905

Fényelektromos jelenség



Legnagyobb energiával a leggyengébben kötött elektron lép ki.

Albert Einstein – 1905

Nobel-díj 1921

$E = h\nu$ energia

$$E = \sqrt{(m_0 c^2)^2 + (pc)^2}$$

$$p = \frac{E}{c} = \frac{h\nu}{c} = \frac{h}{\lambda}$$

$p = \hbar k$ impulzus

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



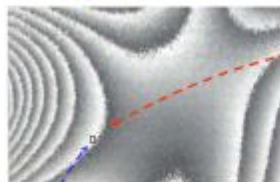
A fény energiakvantumokból áll:
a Lénárd-kísérletben egy elektron kilökéséhez egy foton energiája használdik el, a fennmaradó energia pedig a kilépő elektron mozgási energiája

Foton:

$E = h\nu$ energiájú, $p = \hbar k$ impulzusú részecske.

Klasszikus fénytan

Hullámok amplitudójának fázishelyes összeadódása.



Intenzitás:

$$I = \left| A_1 e^{i(\vec{k}\vec{r} + \phi_1 - \omega t)} + A_2 e^{i(\vec{k}\vec{r} + \phi_2 - \omega t)} \right|^2$$

az adott pixel helyétől függően erősítés vagy kioltás

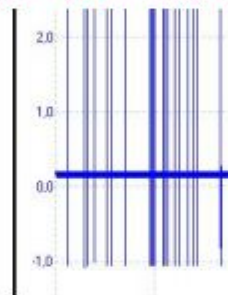
Szuperpozíció elve!

Maxwell-egyenletek: klasszikus fizika

Kvantummechanikai foton

Hogyan rajzolódik ki a kép gyenge megvilágítás esetén?

Fotonok egyenkénti detektálása!



$E = h\nu$ energiájú, $p = \hbar k$ impulzusú részecskéként detektáljuk.

Értelmezés: egy kiszemelt pixelen a **foton detektálásnak valószínűségét** az interferencia eredményeképp kapott **eredő hullám intenzitása** adja meg. Így elegendően sok foton beérkezése esetén a szuperpozíció elve alapján számolt „folytonos interferencia” jelenik meg a CCD által detektált képen.

A fény klasszikus fizikai leírásának helyességét bizonyítja az interferenciakép kialakulása: a hullámok fázishelyes összeadásából számolt intenzitást detektáljuk. A Maxwell-egyenletek pontosan adják meg a CCD kamerával rögzített kép egy-egy pixeljén detektált jel erősségét. A CCD kamera működése a kvantummechanikai fotoemissziós jelenségen alapul.

Gyenge megvilágítás esetén egy adott pixelen az elektronokat egyenként érkező fotonok lökik ki. A detektált töltést a látszólag véletlenszerűen érkező fotonok becsapódásával kilökött elektronok adják. Minden egyes foton csak egy elektront lök ki, a pixel jele ezek összegéből épül fel. Amelyik pixelen nagyobb a jel oda gyakrabban érkeznek fotonok, ahol pedig kisebb, oda ritkábban. Mivel kialakult képpont erőssége arányos a fény intenzitásával ($I=|A|^2$), levonhatjuk azt a következtetést, hogy a fotonok detektálási valószínűsége arányos az elektromágneses hullám amplitúdójának négyzetével. Ez a valószínűségi értelmezés úgy kapcsolja össze a klasszikus fizikát és a kvantummechanikát, hogy mindkét leírás érvényes marad.

Ismertesse a Pozitron Emissziós Tomográf (PET) működési elvét!

A pozitronemissziós tomográfia (PET) az egyik legmodernebb funkcionális képalkotó eljárás. Non-invazív eljárás, melynek segítségével háromdimenziós képet nyerhetünk a test egy adott területéről.

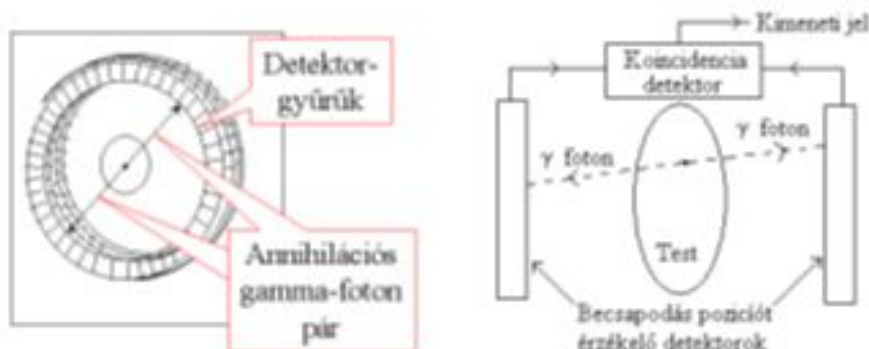
A pozitronemissziós tomográfia működése azon alapul, hogy pozitront sugárzó izotópokkal jelölt molekulák segítségével képes a szervezet biokémiai folyamatait ábrázolni.

Az eljárás lényege, hogy a vizsgált szervbe pozitron kibocsátással bomló radioaktív izotópot tartalmazó molekulát juttatnak. A különböző radiofarmakonokkal különböző funkciók működése mérhető fel, attól függően, hogy az illető molekula a szervezeten belül milyen folyamatokban vesz részt. Elméletileg az élő szervezet anyagcseréjében részt vevő bármilyen szerves molekula jelölhető PET-izotóppal, és a módszer segítségével szinte mindegyik biokémiai, élettani folyamat leképezhető, illetve aktivitása mérhető.

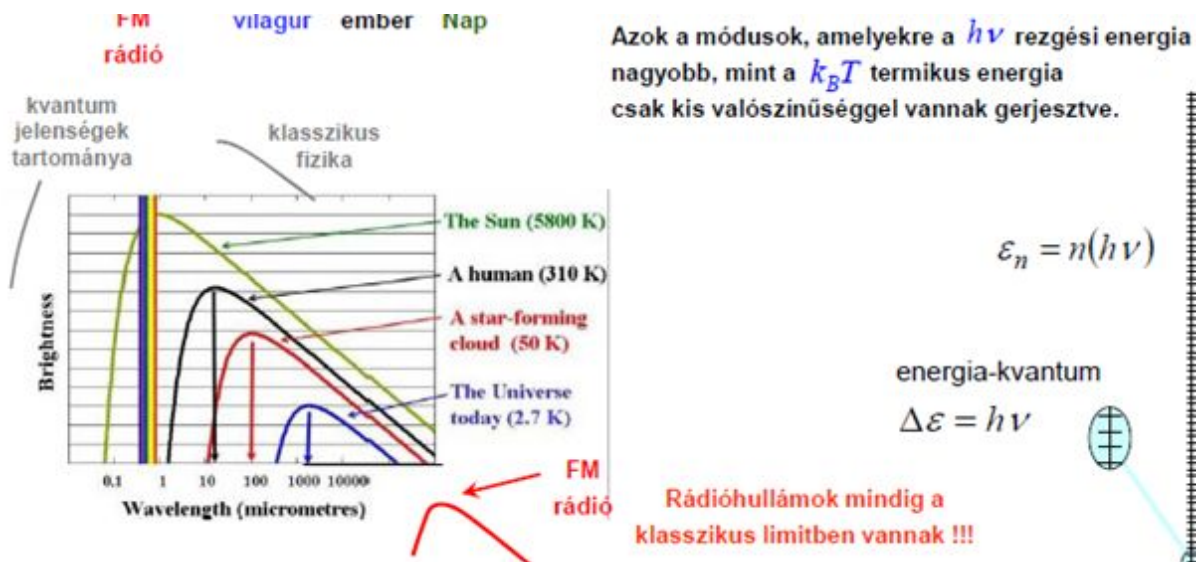
A szervezetbe juttatott marker anyag szöveti eloszlását a PET kamera (egy gyűrű alakú detektor) segítségével lehet detektálni a pozitron-kibocsátást kísérő gamma-sugárzás észlelésén keresztül. A vizsgálat során nyert adatokból számítógép segítségével történik a képek rekonstruálása. A vizsgálattal elsődlegesen a test hossz tengelyére merőleges szeletek nyerhetők (a CT-hez hasonlóan), akár az egész testről. Később a szeletekből tetszőleges irányú, akár háromdimenziós képek állíthatók elő.

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

A két gamma foton az impulzusmegmaradás miatt indul el ellentétes irányba.



A hőmérsékleti sugárzás mely tartományában elkerülhetetlen a kvantummechanikai leírás?



Ahol kicsi a hullámhossz (diagram baloldala) ott nagy az energia, nagyobb, mint a termikus energia, ezért itt csak kis valószínűséggel vannak gerjesztve a módusok. Itt szükséges a kvantummechanika.

Ld.: Planck-féle sugárzási törvény sorbafejtve és csak a Taylor sor első tagját figyelembe véve (kellően kis energiák esete) visszaadja a klasszikus modellt, de nagy energiákra (ahol nem elég egy tagot figyelembe venni a sorfejtésből) eltér.

Mi a lézersugárzás kialakulásának feltétele?

Laser: **L**ight **A**mplification by **S**timulated **E**mission of **R**adiation

Lézerműködés feltételei:

- populáció inverzió: Alkalmasan megválasztott erősítő közeggel és pumpálással
- visszacsatolás: rezonátor tükrök
- indukált emisszió: optikai erősítés (Optikai rezonátorral)

Becsülje meg, hogy 700 lux ($\sim 1 \text{ W/m}^2$) LED megvilágításkor másodpercenként hány foton halad át egy 1 cm^2 -es felületen. (1 lux = 1 lumen/ m^2 , 700 lux $\sim$ egy szobán belüli jó megvilágítás)

Tipikus feladatok

Becsülje meg, hogy 700 lux ($\sim 1 \text{ W/m}^2$) LED megvilágításkor másodpercenként hány foton halad át egy 1 cm^2 -es felületen. (1 lux = 1 lumen/ m^2 , 700 lux $\sim$ egy szobán belüli jó megvilágítás)

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

$$h = 6.6 \times 10^{-34} \text{ Js}$$

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

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

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

Ez honnan van?

2015-ös előadás diáiból

Konziról:

1 m^2 -en 1 másodperc alatt 1 J energia haladna át, de itt 1 cm^2 felületről van szó, amin egy másodperc alatt 10^{-4} J energia halad át. A hullámhossz nélkül a feladat valóban nem meghatározott. A fotonok számát így számoljuk ki:

$$N_{\text{foton}, 1\text{s}} = \frac{E_{1\text{s}}}{h\nu}$$

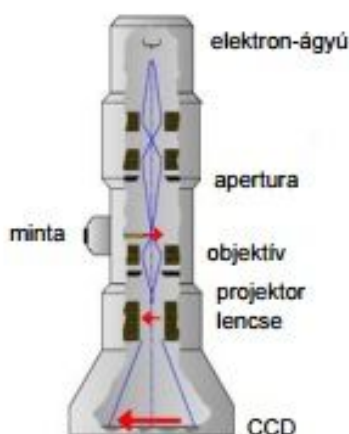
Ha $c = \nu\lambda$ akkor:

$$N_{\text{foton}, 1\text{s}} = \frac{E_{1\text{s}}\lambda}{hc} = \frac{10^{-4} \text{ J} \cdot 6 \cdot 10^{-7} \text{ m}}{6 \cdot 10^{-34} \text{ Js} \cdot 3 \cdot 10^8 \frac{\text{m}}{\text{s}}} = \frac{6 \cdot 10^{-11}}{18 \cdot 10^{-26}} = 0.3 \cdot 10^{15} \text{ foton}$$

Elektronok hullámtermészete

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

Elektronmikroszkóp



képalkotás elektron-optika

Transmission Electron Microscope

Egy ultra vékony mintán keresztül-haladó elektron-nyaláb képét nagyítás után egy képernyő rögzíti. Akár atomi felbontás is elérhető.

Scanning Electron Microscope

Elektronsugár párhuzamos eltolása elektromos térrel: fókuszált elektron-nyaláb pásztázza a mintát, és a visszaszórt elektronok, vagy fotonok anyagspecifikus információt adnak. 1-5 nm felbontás érhető el.

diffrakció elektron-interferencia

Szuperpozíció elve
amplitúdók fázishelyes
összegzése

Bragg-feltétel

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



Az elektronnyalábbal készített felvétel kirajzolódása

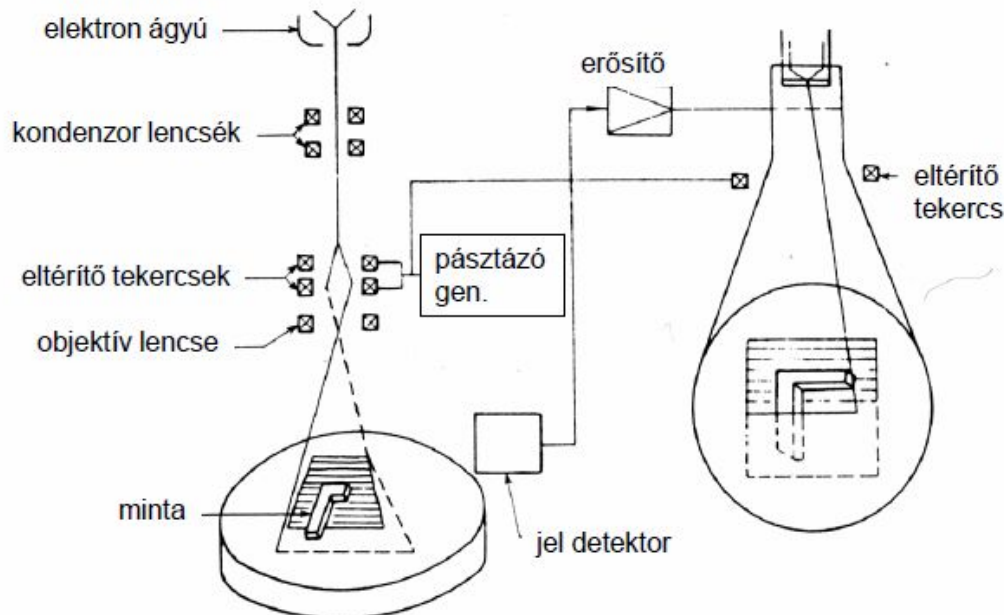
- a leképezésen vagy a diffrakciós felvételen megjelenő kép megfelel a hullámegyenletekből számolt intenzitásoknak, azonban véletlen felvillanásokból áll össze.
- az elektronnal mint "hullám" terjed vagy interferál, de "részecskéként" detektálódik.

Born-féle valószínűségi értelmezés

Az „anyag-hullámok” intenzitása a részecske megtalálási valószínűségét adja meg, detektálása véletlenszerű.

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

SEM:



Név	Működési elv	Előny	Hátrány
Páztázó elektron-mikroszkóp SEM (scanning electron microscope)	Mintából kilépő (vagy visszaszórt, vagy szekunder) elektronok detektálása	- Nagy mélység-élesség („3D kép”) - Spektroszkópiai lehetőség (EDS)	- szigetelő minták esetében mintaelőkészítést igényel - Vákuumot igényel

TEM:	Név	Működési elv	Előny	Hátrány
Transzmissziós elektronmikroszkóp TEM (transmission electron microscope)	Nagyenergiájú elektronokkal világítjuk át a mintát	- Atomi felbontás - Spektroszkópia	- Körülmenyes mintaelőkészítés (ionsugaras vékonyítás) - Költséges - Ultranagy vákuumot igényel	

Mi határozza meg az elektronmikroszkópos képek felbontását?

Transzmissziós elektronmikroszkóp esetén a leképezés felbontását az alkalmazott nyaláb hullámhossza határozza meg, ami akár 50.000-szer kisebb is lehet (~0.1 Angström, 0.01 nm), mint a látható fény hullámhossza (~500 nm). Páztázó elektronmikroszkóp esetén

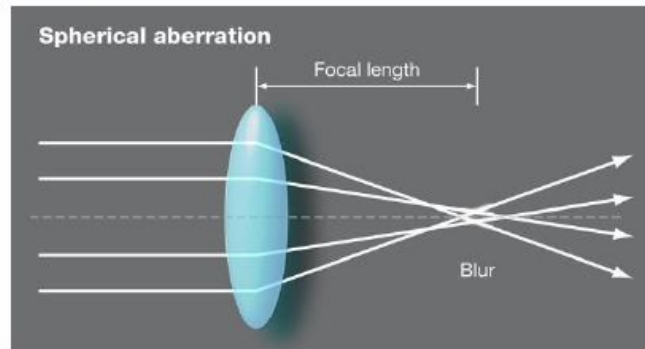
elektronnyalábbal történő pásztázás során a visszaszórt elektronokat, másodlagos elektronokat, a keltett röntgen sugárzást vagy fényt detektáljuk, így itt a felbontás 1-5 nm körüli.

2. A felbontóképesség korlátai

Elektronmikroszkópia felbontóképessége

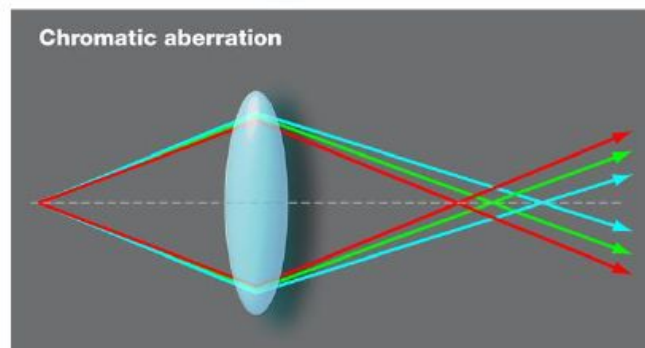
Szférikus aberráció:

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



Kromatikus aberráció:

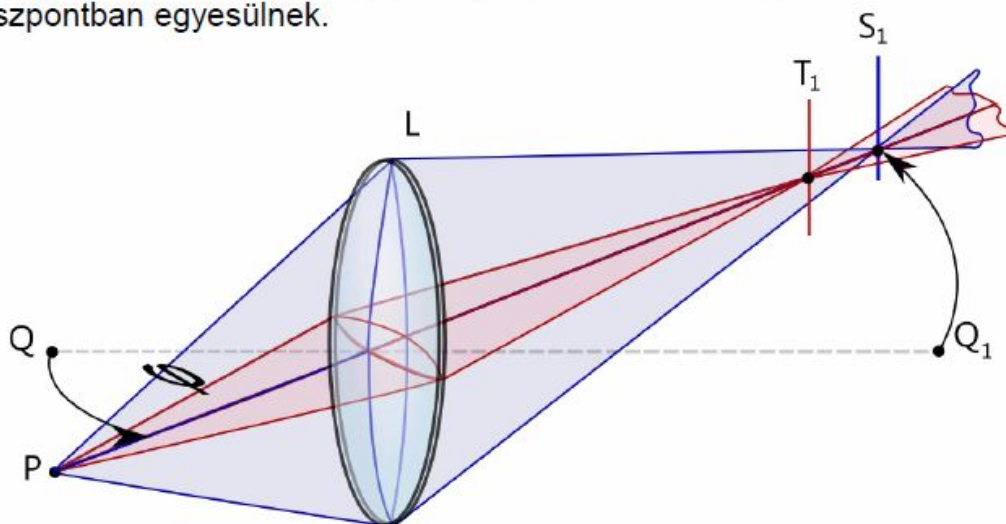
A lencsére azonos pontba érkező, de különböző hullámhosszú nyalábokat a lencse különböző fókusz távolsággal képezi le. Oka az lencse törésmutatójának függése a hullámhossztól.



2. A felbontóképesség korlátai

Elektronmikroszkópia felbontóképessége

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



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

Nem biztos, hogy csak ez + mi a levezetés?

Itt le van írva a levezetés: <http://www.eserc.stonybrook.edu/ProjectJava/Bragg/>

Elektron-diffrakció – interferencia kristályrácscon

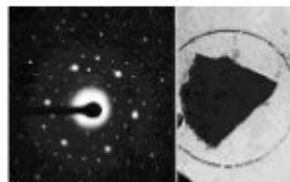
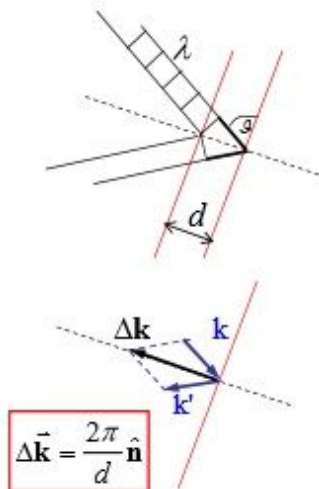
Az egykristályon végzett szórás kísérlet közvetlen információt ad a kristály szimmetriájáról és orientációjáról.

impulzus-hullámhossz
kapcsolat

$$E = \frac{p^2}{2m_e}, \quad |\mathbf{p}| = \hbar |\mathbf{k}| = \frac{h}{\lambda} \longrightarrow \lambda(\text{\AA}) = \frac{12}{\sqrt{E(\text{eV})}}$$

Bragg-feltétel $2d \sin \vartheta = m\lambda$

Az elektronmikroszkópban alkalmazott gyorsító tér segítségével a hullámhossz széles tartományban változtatható.



Egy 2,3 mikronos kristálylapka elektrondiffrakciós felvétele.



A kristálysíkok távolságának és normálisának ismeretében a szerkezet könnyen rekonstruálható (lásd: 10. előadás).

Ha az elektronok energiája elegendően nagy, akkor az impulzushoz rendelt hullámhossz kisebb, mint a megvilágított minta atomjainak távolsága, és teljesülhet a rugalmas szórás kísérletek Braggfeltétele. Az elektronmikroszkóp lencserendszerével a mintára párhuzamos sugarakból álló nyalábot vetítve a kristálysíkokon tükröződő nyalábok interferenciája éppen olyan diffrakciós képet alkot, mint amivel az elektromágneses hullámoknál találkoztunk (szerkezet-meghatározás Röntgen-szórással). A napjainkban rutinszerűen alkalmazott elektron-diffrakció az elektron hullámtermészetének legkézzelfoghatóbb bizonyítéka.

Milyen következtetés vonható le a hullámszám-vektor irányának megváltozásából?

NEM BIZTOS, JAVÍTSA VALAKI, AKI TUDJA, DE SZERINTEM EZ:

A diffrakciós kép egy pontjában megfigyelt erősítés a bejövő és a kimenő hullámszám-vektor különbségére merőleges kristálysíkoktól származik -> a diffrakciós kép megváltozik a hullámszám-vektor irányának megváltozása esetén.

Sztem:

-következtetni lehet síkok távolságára és normálisára (tipp) é

a távolságra szerintem azért nem, mert az az irányba nem szól bele, csak az interferenciába. a normálisra lehet következtetni.

Lehet következtetni a síkok távolságára abban az esetben, ha konstruktív interferencia van, mert ilyenkor $\sin(\theta) = \lambda/2$ (Bragg feltétel)

a hullámszámvektor hossza hullámszám ($2\pi/\lambda$), az iránya a terjedés/mozgás iránya. szal ha a hullámszámvektor iránya megváltozik, akkor a terjedés (vagy elektron/foton sebesség) iránya változik meg. diffrakciónál ha a beeső irány fix, akkor a kristálysík normálisa változott.

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

Dark-field image: képképzés diffraktált nyalábbal (egy Bragg-csúcs kiválasztása apertúrával), csak az adott orientálású kristálysíkok szórak

A diffrakciós kép egy pontjában megfigyelt erősítés a bejövő és kimenő hullámszám-vektor különbségére merőleges kristálysíkoktól származik. Ha egy apertúra megfelelő pozícionálásával csak ezt a nyalábot engedjük tovább, majd további lencsék illesztésével ezt alkalmazzuk az optikai képképzésre, akkor egy polikristályos mintáról készült felvételen csak azok a részek láthatók, amelyek az azonos orientációjú kristallithoz tartoznak. A diffrakció és a képképzés együttes alkalmazásával ilyen módon előállított kép a „dark field image”.
(3_elektronok_hullámtermészete pdf. 4. oldal)

leegyszerűsítve: csak a diffraktált fényt/elektront/fotont rögzítjük, a közvetlenül beérkezőt, máshonnan visszavert/más síkon diffraktálódottat nem (kitakarja valami, nem arra nézünk, stb.). Így a számunkra fontos infó lesz „világos”, minden más (háttér, nem diffraktáló részek) sötét.

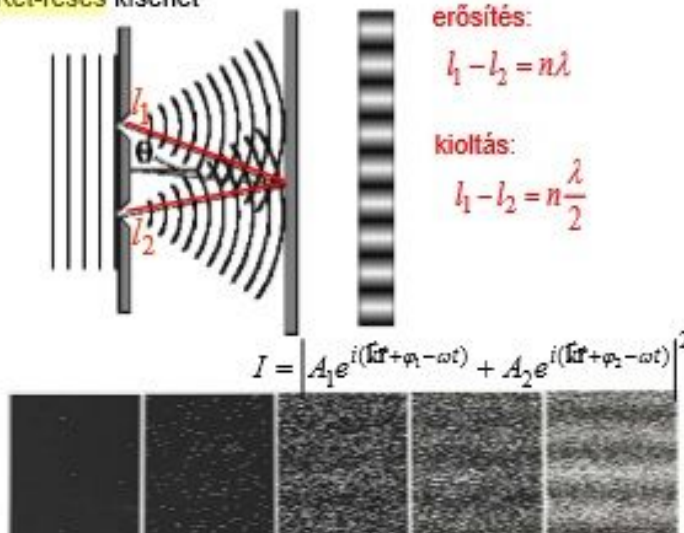
Az elektronok interferenciáját mutató két-réses kísérlet példáján keresztül ismertesse a szuperpozíció elvét, és a Born-féle valószínűségi értelmezést!

Részecskék interferenciája

A hullámok amplitúdója összeadódik, az eredő intenzitást detektáljuk.

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

Két-réses kísérlet



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

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

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



Az interferenciacsíkok kirajzolódása a részecskék detektorba történő "becsapódásából".

Valószínűségi értelmezés:

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

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

Schrödinger-egyenlet

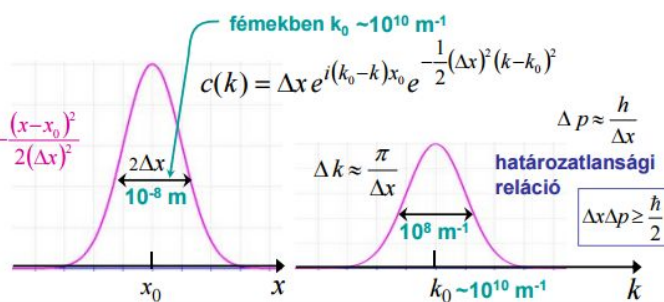
Mi a kapcsolat az impulzus-, illetve a hely-sajátállapotot leíró függvény és a hullámcsomagként előállított szuperpozíció szélessége között?

“Lokalizált” elektron

Szuperpozícióval előállított lokalizált állapot:

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

Egyszerre nem lehet a helyet, és az impulzust is pontosan meghatározni



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

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

Schrödinger-egyenlet → hullámfüggvények tulajdonságai

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi + V(\mathbf{r}) \psi$$

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

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

Max Born

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

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

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

Kontinuitási egyenlet

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

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

↑ Laplace

$$\frac{\partial}{\partial t} |\psi|^2 = -\nabla \cdot \mathbf{j}$$

↑ gradiens

a megtalálási valószínűség időbeli változása

divergencia

anyagmegmaradás egyenlete

valószínűségi áramsűrűség

A Schrödinger-egyenlet matematikai alakja megkötések jelent hullámfüggvény tulajdonságaira. Számos példával fogunk találkozni, amikor egy adott potenciálba helyezett elektron gerjesztési spektrumát (diszperziós relációját) a határfeltételek szabják meg. A hullámfüggvények alakjára vonatkozó elvárások ismerete önmagában elegendő például a kvantummechanika alagútáram kiszámításához. A Schrödinger-egyenlet alkalmazásával tanulságos formulát lehet levezetni az elektron időbeli terjedésére vonatkozóan. Egy elektron megtalálási valószínűségét ("sűrűségét") a hullámfüggvény abszolútérték-négyzete adja meg. Ha az elektron mozog, akkor a sűrűsége időben változik, az elektron "áramlik". Kérdés, hogy az áramlási tér, azaz hogy a tér egyes pontjaiban milyen erősséggel és irányban áramlik az elektron, jellemezhető-e a hullámfüggvény segítségével? A fent levezetett anyagmegmaradás egyenletének fizikai jelentése szemléletesebbé tehető a vektorszámítás Gauss-tételének alkalmazásával:

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

A differenciális formula integrálása egy zárt térfogatelemre:

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

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

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

A fentebb leírtak nem értem miért adnak választ a kérdésre. Itt a kérdés nem arra akar rákérdezni, hogy a hullámfüggvény normálható (négyzetes integrálja a teljes térben 1), hogy a hullámfüggvény folytonos, egyértékű(bármit is jelentsen az), véges értékű, és a deriváltja is folytonos?

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

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

Born-Kármán periodikus határfeltétel

$$\psi_n = A e^{i(k_n x - \omega t)} = A e^{\frac{i}{\hbar}(p_n x - \varepsilon_n t)}$$

$$k = n \frac{2\pi}{L}, \text{ ahol } n = 0, 1, 2, \dots \text{ egész számok}$$

véges méret $\rightarrow$ „ciklikus” határfeltétel

$$e^{i k x} = A e^{i k (x+L)}$$



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

Egy **3D piezo mozgató** segítségével egy **hegyes tű** előre meghatározott pályán mozog a **fém felület** felett.

A minta és a tű közötti alagútáram exponenciálisan változik a távolság függvényében (állandó feszültségű meghajtás). Az **XY** irányú "pásztázás" közben **Z** irányú távolságot az alagútáramra történő visszacsatolás határozza meg: a **konstans alagútáram** állandó távolságot jelent (a 0.1 - 5 nm tartományban).

A **Z-irányú** visszacsatoló piezofeszültség **XY** függése a minta **felületi topográfiáját** adja meg atomi felbontással!

A kvantummechanikai alagútjelenség adja az elvi alapját napjaink leg-pontosabb mikroszkópiai eljárásának. Az ún. pásztázó alagútmikroszkóp egy nagyon egyszerű berendezés, amellyel atomi szinten lehet felületeket feltérképezni és manipulálni. Az eszköz kulcseleme egy precíz, háromdimenziós mozgatóalkalmas piezoelektromos henger, s a végére rögzített hegyes tű. A tűből alagútáram folyik át a minta felületére, s mivel ez az áram nagyon érzékenyen változik a távolsággal, igen pontosan meg lehet határozni a tű távolságát a minta felületétől. A tű mozgásával atomi pontossággal letapogathatjuk a felület szerkezetét.

képletek a következő feladatban.

a részecske hullámként terjed (Schrödinger egyenlet), a potenciálgáthoz érkezően azon belül exponenciálisan lecseng (gondolom gát "magasságától" függően, magasabb potenciálgátban gyorsabban). Ha a potenciálgát rövid, akkor a túloldalt is még nem nulla amplitúdója lesz a hullámfüggvénynek, ami ugye négyzetre emelve megtalálási valószínűség, tehát nem nulla valószínűséggel megjelenik a túloldalon. Az exponenciális lecsengés miatt exponenciálisan függ a távolságtól, tehát nagyon érzékeny rá.

A felületről az információt az alagútáram adja, melyet számítógép értékel ki. A két elektróda között folyó alagútáram függ a minta és a tű távolságától, **0,1 nanométeres távolság változás tízszeres áramváltozást okoz** (mihez képest tízszeres???) [wikipédiáról másoltam...:/] Szerintem ha +0,1nm-el távolabb van, akkor tízszeresére nő az alagútáram ami addig volt.). Ennek alapján igen jó képet lehet alkotni a vizsgálandó felületről.

én ha jól értettem, akkor az alagútáram negatívan vissza van csatolva (ezaz!), és próbálják egy adott értékre szabályozni. a csodaszuper piezocuccal mozgatják a tűt, így marad mindig kb ugyanolyan közel a tárgyhoz (így az alagútáram is állandó), és a piezocucc beavatkozó jele adja a felületről az infót. a lényeg, hogy az alagútáram a távolságtól exponenciálisan függ, ezért nagyon kicsi (pl a 0.1 nm) távolságkülönbség is jelentős áramváltozást okoz. szabtech nyelven az exponenciális változás miatt van egy baszottnagy erősítés a szabályozási körben, ami miatt a statikus hiba nagyon kicsi, vagyis pontosan követi a tű a felületet.

Egy d szélességű, V_0 magasságú potenciálgát felett egy E energiájú részecske halad át. Írja fel a Schrödinger-egyenlet megoldásait a különböző tartományokban, továbbá azt a négy határfeltételi egyenletet, aminek a megoldása megadja a transzmisszió mértékét!

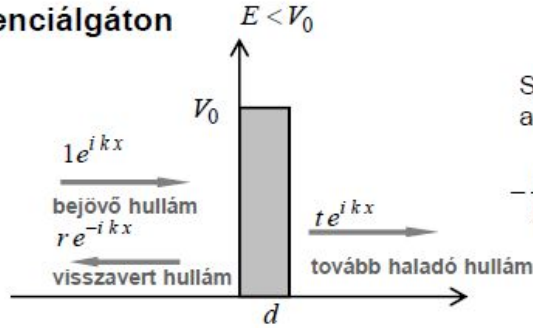
Példa: alagúteffektus potenciálján

Schrödinger egyenlet a szabad részben:

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

A potenciált belsejében a Schrödinger egyenlet:

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



Schrödinger egyenlet a szabad részben:

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

belül: evanescens hullámok

Megoldás: lecsengő hullám (mindkét irányban)

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

Határfeltételek

folytonosság

$$1 + r = A + B$$

folytonos deriválhatóság

$$Ae^{-\kappa d} + Be^{\kappa d} = te^{ikd}$$

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

komplex amplitúdók

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

A transzmittált hullám amplitúdójából számolt átjutási valószínűség:

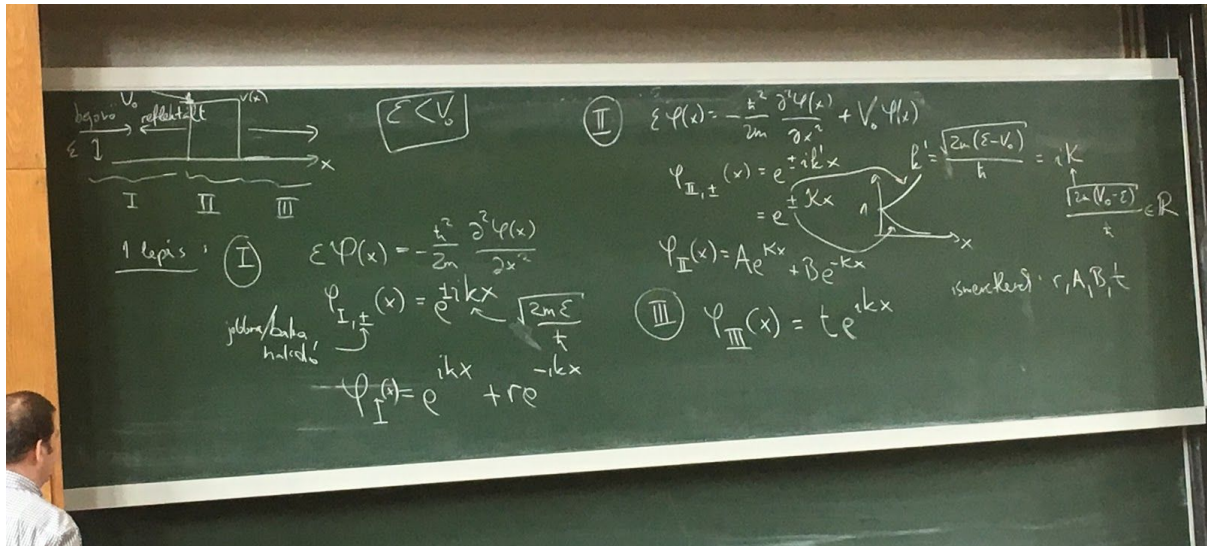
$$|t|^2 = \left(1 + \frac{V_0^2}{4E(V_0 - E)} \sin^2(\kappa d) \right)^{-1}$$

$\kappa d \gg 1$ határeset:

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

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

exponenciális lecsengés



Operátorok alkalmazása

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

Harmonikus oszcillátor

Hamilton-operátor:

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

keltő- és eltüntető operátorok

$$\hat{H} = \hbar\omega\left(\hat{a}^+\hat{a} + \frac{1}{2}\right) = \hbar\omega\left(\hat{N} + \frac{1}{2}\right), \text{ ahol}$$

$$\hat{a}^+ = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(\hat{x} - \frac{i}{m\omega}\hat{p}\right)$$

$$\hat{a} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(\hat{x} + \frac{i}{m\omega}\hat{p}\right)$$

és $\hat{N} = \hat{a}^+\hat{a}$ kvantumszám operátor

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

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

A harmonikus oszcillátor gerjesztési spektruma:

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

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

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

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

Milyen kapcsolatokat állapít meg az Ehrenfest-tétel a kvantummechanikai és a klasszikus fizikai mozgásegyenletek között?

időinvariancia $\rightarrow$ energia megmaradás $\frac{dE}{dt} = 0$
forgási szimmetria $\rightarrow$ impulzusmomentum megmaradás
eltolási szimmetria $\rightarrow$ impulzus megmaradás

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

impulzus kvantummechanikai átlagának időderiváltja = erő kvantummechanikai átlagával

Hasonló levezetés a hely várható-értékének változására:

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

impulzus kvantummechanikai átlaga = tömeg • a hely várható értékének deriváltja

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

Impulzusmomentum-operátor z-komponense

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

koordináta-rendszer-transzformáció
 $x = r \cos \varphi$
 $y = r \sin \varphi$

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

Sajátérték egyenlete:

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

egyértékű függvény:
 2π szerint periódikus kitevő

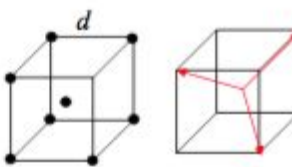
$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi} \psi(\varphi) = \lambda_z \psi(\varphi) \xrightarrow{\text{megoldás}} \psi(\varphi) = A e^{\frac{i}{\hbar} \lambda_z \varphi} \rightarrow \frac{\lambda_z}{\hbar} = n \rightarrow \lambda_z = n\hbar$$

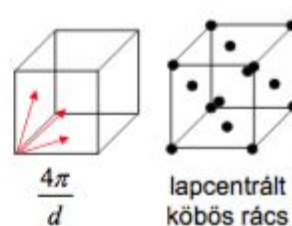
Bohr-feltétel!

Kristályok szerkezete, dinamikája

Mutassa meg, hogy lapcentrált köbös rácshoz tartozó reciprokrács tércentrált köbös szerkezetű!

Példa: a tércentrált köbös rácshoz tartozó reciprokrács

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


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


$\frac{4\pi}{d}$ lapcentrált köbös rács

A szilárdtestfizikában reciprokrácsnak nevezzük azt a rácsot, melyet egy direkt térbeli rács (például egy Bravais-rács) Fourier-transzformálásával kapunk. Emberi nyelven asszem ez úgy működik, hogy az egyik lapjainak(háromszög vagy négyzetlap, vagy mikor-mi?) a közepére raksz pöttyöt, és akkor pont a másik jön ki. ami az egyikben egy lap normálisa, az a másikban két pötty közötti vektor. meg fordítva, mert duálisok (csak irányokban jönnek ki, hossza nem).

Vezesse le, hogyan képzí le a rugalmas szórás kísérlet a rácsot reciprokrácsra (delta k=G)!

talán

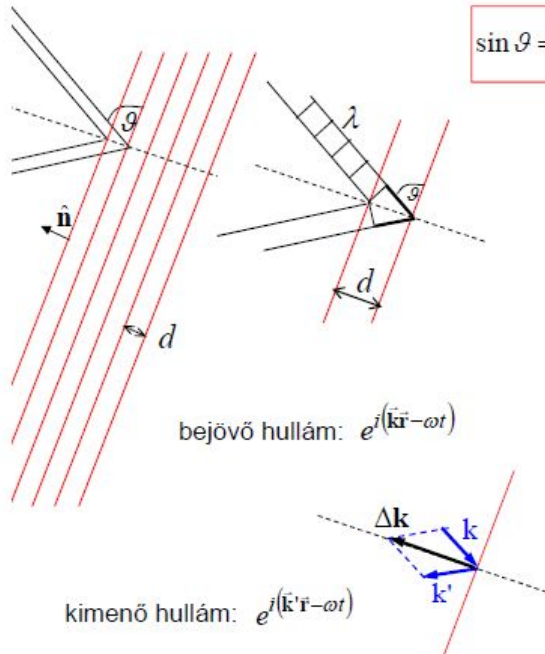
itt az a magic, hogy a beeső meg a visszavert hullámszámvektorok különbsége párhuzamos a sík normálisával (tehát merőleges a síkra). a hullámszámvektorok hosszára meg megkötést ad a Bragg feltétel. előző feladat alapján meg a síkok normálisai pont a reciprokrácsban a pöttyök közötti vektorok (bázis).

Röntgen-, neutron- és elektron- diffrakció

A rugalmas szórás a rácsot a reciprok rácsra képezi le!

Bragg-reflexió: diffrakció kristálysíkokon

a konstruktív interferencia feltétele: $2d \sin \vartheta = m\lambda$



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



$$\begin{aligned} \Delta \vec{k} &= \vec{k}' - \vec{k} \\ \Delta \vec{k} &\parallel \hat{n} \\ \text{merőleges a} &\text{ kristálysíkra} \end{aligned} \quad \left| \Delta \vec{k} \right| = 2 \left| \vec{k} \right| \sin \vartheta \quad \lambda = \frac{2\pi}{\left| \vec{k} \right|}$$

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

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

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

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

Szórás kísérletek

Elmélet: a szórt nyaláb intenzitása

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

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

Ewald-szerkesztés

A konstruktív interferencia feltétele:

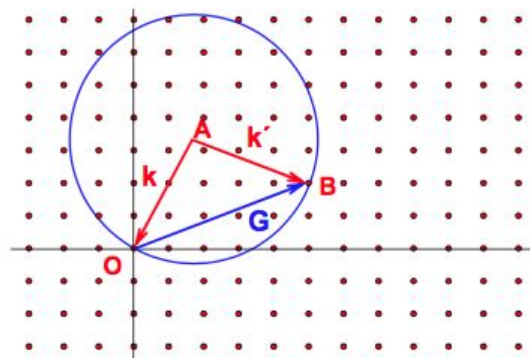
$$\Delta \vec{k}' = \vec{k}' - \vec{k} = \vec{G}$$

Vegyük fel a beeső nyaláb $\vec{k}$ hullámszámvektorát úgy, hogy a reciprok rács egy tetszőleges rácspontjába mutasson (O).

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

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

Reciprok rács



A reciprok tér „nagyon üres”, gondoskodni kell arról, hogy legyen metszéspont.

Ismertesse a Neumann-elvet! Milyen megszorítást jelent egy C mátrix-szal leírt szimmetriaművelet a fizikai mennyiségeket leíró tenzorokra!

Neumann-elv

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

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

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

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

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

1. Lézer

Milyen tulajdonságok jellemzik a lézerfényt? Adjon meg három alapvető tulajdonságot.

- A létrejött fény időben és térben koherens, a lézer által kibocsátott hullámok fázisa a sugár minden keresztmetszeténél azonos.
- A lézernyaláb keskeny és nagyon kis széttartású nyaláb (kollimált). A lézerfény nagyrészt párhuzamos fénysugarakból áll, nagyon kis szóródási szöggel. Ezzel nagy energiasűrűség érhető el szűk sugárban, nagy távolságokban is.
- A lézerek fénye egyszínű (monochromatikus). A lézersugár egy olyan elektromágneses hullám, amely közel egyetlen hullámhosszú összetevőből áll.
- A lézerek energiája kis térrészben koncentrálódik, a lézerfény teljesítménysűrűsége a megszokott fényforrásokénak sokszorosa lehet.

Mi a lézersugárzás kialakulásának három alapvető feltétele?

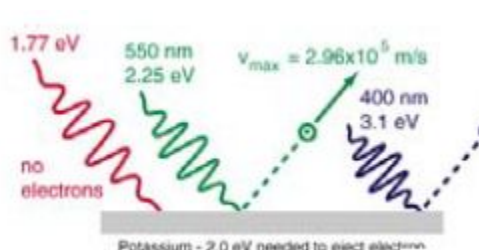
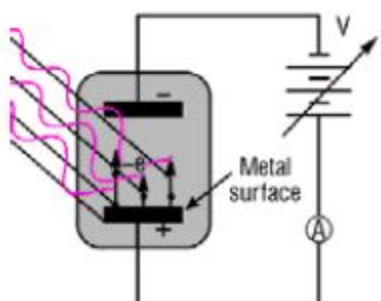
- populáció inverzió: Alkalmasan megválasztott erősítő közeggel és pumpálással
- visszacsatolás: rezonátor tükrök segítségével
- indukált emisszió: optikai erősítés, optikai rezonátorokkal

2. Fényelektromos jelenség

Vizsgáljuk a fényelektromos jelenséget kálium felületén. A kálium elektronjait jellemző kilépési munka 2 eV.

Ábrázolja vázlatosan a kísérleti elrendezést és a jelenséget!

Mekkora a kilökött elektronok maximális energiája és maximális sebessége, ha a besugárzáshoz 550 nm hullámhosszú zöld fényt használunk?



Kilökött elektronok maximális energiája:

$$E_{ke} = h \cdot \nu - W_{kilépési}$$

Tudjuk, hogy:

$$h = 2\pi \hbar ; \nu = \frac{c}{\lambda} ; 1\text{eV} = \frac{1}{1.6} \text{ J} = \frac{1}{1.6 \cdot 10^{-19}} \text{ J}$$

$$E_{ke} = 2 \cdot \pi \cdot 1,05 \cdot 10^{-34} \text{ Js} \cdot \frac{3 \cdot 10^8 \text{ m/s}}{550 \cdot 10^{-9} \text{ m}} - 2\text{eV} \cdot 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ C} = 4 \cdot 10^{-20} \text{ J}$$

Kilökött elektronok maximális sebessége:

$$v_{max} = \sqrt{\frac{2 \cdot E_{ke}}{m_e}} = \sqrt{\frac{2 \cdot 4 \cdot 10^{-20} \text{ J}}{9,1 \cdot 10^{-31} \text{ kg}}} = 2,96 \cdot 10^5 \frac{\text{m}}{\text{s}}$$

Ugyanaz, kicsit máshogy számolva:

Alapképlet: $hf = hf_0 + \frac{1}{2}mv^2$ ahol a $hf_0 = W_{kilépési} = 2\text{eV} = 2 \cdot 1,602 \cdot 10^{-19} \text{ Joule}$

A hullámhossz frekvencia átszámítása: $f = \frac{c}{\lambda} = \frac{300 \cdot 10^6}{550 \cdot 10^{-9}} = 545,45 \cdot 10^{12} = 545 \text{ THz}$

Planck állandó: $h = 6.62607004 \times 10^{-34} \text{ m}^2 \text{ kg / s}$

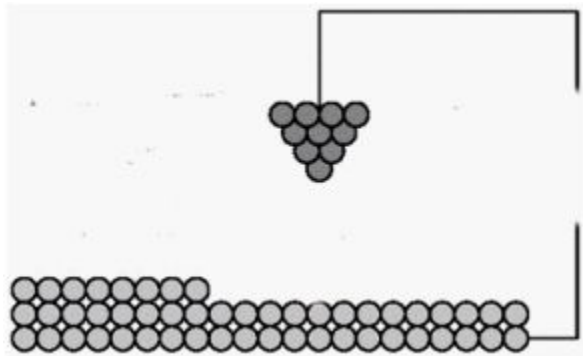
Kilökött elektronok maximális energiája:

$$\frac{1}{2}mv^2 = hf - hf_0 = h \frac{c}{\lambda} - W_{ki} = 6,626 \cdot 10^{-34} \cdot 545,45 \cdot 10^{12} - 2 \cdot 1,602 \cdot 10^{-19} = 0,254 \text{ eV} (\text{wolfram link})$$

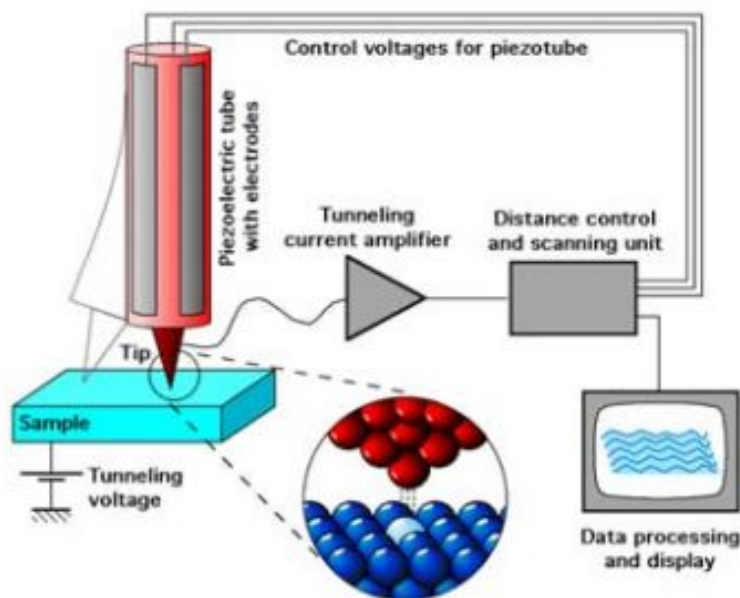
Kilökött elektron maximális sebessége: $v_{max} = \sqrt{\frac{2W}{m}} = \dots = 299\,217 \text{ m/s} (\text{link})$

3. Alagútmikroszkóp

Az alábbi rajz segítségével magyarázza el, hogy mire jó és hogyan működik a pásztázó alagútmikroszkóp.



Pásztázó alagútmikroszkóp (STM)



Egy **3D piezo mozgató** segítségével egy **hegyes tű** előre meghatározott pályán mozog a **fém felület** felett.

A minta és a tű közötti alagútáram exponenciálisan változik a távolság függvényében (állandó feszültségű meghajtás). Az **XY** irányú "pásztázás" közben **Z** irányú távolságot az alagútáramra történő visszacsatolás határozza meg: a **konstans alagútáram** állandó távolságot jelent (a 0.1 - 5 nm tartományban).

A **Z**-irányú visszacsatoló piezofeszültség **XY** függése a minta **felületi topográfiáját** adja meg atomi felbontással!

[http://fizipedia.bme.hu/index.php/P%C3%A1szt%C3%A1z%C3%B3_alag%C3%BAtmikroszk%C3%B3p_\(STM\)_alkalmaz%C3%A1sa](http://fizipedia.bme.hu/index.php/P%C3%A1szt%C3%A1z%C3%B3_alag%C3%BAtmikroszk%C3%B3p_(STM)_alkalmaz%C3%A1sa)

4. Dobozba zárt elektron

Egy egydimenzióban mozgó elektront bezárunk egy $x = 0$ és $x = L$ közti dobozba. Egy adott időpillanatban az elektront leíró hullámfüggvény $\psi(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{\pi}{L}x\right)$.

a) Mi ennek a $\psi(x)$ hullámfüggvénynek az SI mértékegysége?

wiki: "The unit of measurement for ψ depends on the system, and can be found by dimensional analysis of the normalization condition for the system. For one particle in three dimensions, its units are $[\text{length}]^{-3/2}$, because an integral of $|\psi|^2$ over a region of three-dimensional space is a dimensionless probability."

vagyis a hullámfüggvény négyzetének integrálja az értelmezési tartományon skalár kell legyen. ez alapján itt $\frac{1}{\sqrt{\text{méter}}}$ ($1/\sqrt{\text{m}}$), mer akkor a négyzetének az 1D (hossz szerinti) integrálja skalár lesz. a négyzet miatt $1/\text{méter}$, a hossz menti integrál meg méterrel szorzás, és akkor kész. ugyanígy:

2D-ben $1/\sqrt{\text{m}^2} = 1/\text{m}$,

3D-ben $1/\sqrt{\text{m}^3}$

(b) Ábrázolja a hullámfüggvényt.

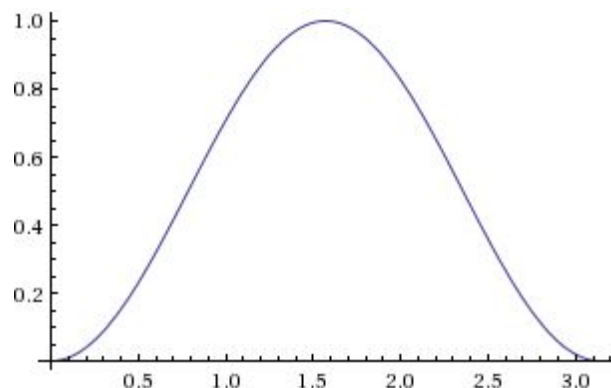
ez félperiódusnyi szinusz pukli (0-tól π -ig (**$x=L$ -nél lesz félperiódusa**)), a maximuma $x=L/2$ -nél $\sqrt{2/L}$ (a szinuszos rész 1)

(c) Ábrázolja az elektron valószínűségi sűrűségfüggvényét.

az előző négyzete, szal szinusznégyszet pukli, maximuma $x=L/2$ -nél $2/L$.

ha valaki esetleg nem rajzolt még szinusznégyszetet (mer amúgy mindenki ezt gyakorolja otthon nem? faszom. **Ez csak egy koszinusz, te gyökér xD...**

[http://www.wolframalpha.com/input/?i=sin%5E2\(x\)](http://www.wolframalpha.com/input/?i=sin%5E2(x))):



(d) Mekkora valószínűséggel tartózkodik az elektron a doboz bal felében, azaz az $x \in [0, L/2]$ tartományon?

tudományosan gondolom ki kéne integrálni a hullámfüggvény négyzetét ezen a tartományon.

amúgy ránézel és 50%. de erre biztos nem ad pontot. az túl szép lenne.

-De ad, legalábbis konzin ez volt.

(e) Írja fel a azokat a formulákat, amelyek megadják a hely várható értékét ($\langle x \rangle$) és szórását (Δx) a ψ állapotban. A formulákban szereplő integrálokat nem kell elvégezni.

legalább tudjuk, hogy van integrál a formulákban. :)))

wiki-s e-learning jegyzetből: részecske dobozban, állapotai:

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} n^2, \quad \varphi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{\pi}{L} nx\right), \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

megtalálási valószínűség eloszlása:

$$P(x) = |\varphi_1(x)|^2 = \frac{2}{L} \sin^2\left(\frac{\pi}{L} x\right)$$

várható érték:

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} x P(x) dx$$

szórás: (variancia gyöke)

$$\Delta x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2} = L \sqrt{\frac{1}{12} + \frac{1}{2\pi^2}} \quad \langle x^2 \rangle = \int_0^L x^2 |\varphi_1|^2 dx =$$

5. Valószínűségi áramsűrűség

emlékeztető: a $\psi(\mathbf{r})$ hullámfüggvénnyel leírt állapotban levő elektron valószínűségi áramsűrűsége:

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}) = \frac{\hbar}{2m_e i} [\psi^*(\mathbf{r}) \nabla \psi(\mathbf{r}) - \psi(\mathbf{r}) \nabla \psi^*(\mathbf{r})]$$

A tér egy $r_0 = (x_0, y_0, z_0)$ pontja közelében egy elektront leíró hullámfüggvény $\psi(x, y, z) = \frac{x e^{i k x}}{L^{5/2}}$ alakú, ahol L egy konstans (mértékegysége méter).

Adja meg az áramsűrűség-vektort az r_0 pontban.

Semmi extra, mivel a hullámfüggvénynek csak x komponense van. Ez leegyszerűsíti a dolgokat, mert a gradiensből is csak egy egyszerű d/dx lesz. Innentől kezdve csak be kell írni a megadott hullámfüggvényt és a konjugáltját a megfelelő helyekre, deriválni és összevonni.

Pite!

6. Pozitron-emissziós tomográf

Mire jó és hogyan működik a pozitron-emissziós tomográf (PET)?

A pozitronemissziós tomográfia (PET) az egyik legmodernebb funkcionális képalkotó eljárás. Non-invazív eljárás, melynek segítségével háromdimenziós **képet** nyerhetünk a **test** egy adott területéről.

A pozitronemissziós tomográfia működése azon alapul, hogy **pozitron** sugárzó **izotópokkal** jelölt **molekulák** segítségével képes a szervezet biokémiai folyamatait ábrázolni.

Az eljárás lényege, hogy a vizsgált szervbe **pozitron** kibocsátással bomló radioaktív **izotópot** tartalmazó molekulát juttatnak (a leggyakrabban használt anyagok az ^{18}F , az ^{15}O , az ^{13}N és a ^{11}C). Az egyik eljárás során a páciens radioaktív markert tartalmazó levegőkeveréket lélegez be, míg a másik eljárás során az izotópot injekcióval juttatják a véráramba. A különböző radiofarmakonokkal különböző funkciók működése mérhető fel, attól függően, hogy az illető molekula a szervezeten belül milyen folyamatokban vesz részt. Elméletileg az élő szervezet anyagcseréjében részt vevő bármilyen szerves molekula jelölhető PET-izotóppal, és a módszer segítségével szinte mindegyik biokémiai, élettani folyamat leképezhető, illetve aktivitása mérhető.

A szervezetbe juttatott marker anyag szöveti eloszlását a PET kamera (egy gyűrű alakú detektor) segítségével lehet detektálni a pozitron-kibocsátást kísérő **gamma-sugárzás** észlelésén keresztül. A vizsgálat során nyert adatokból számítógép segítségével történik a képek rekonstruálása. A vizsgálattal elsődlegesen a test hossz tengelyére merőleges szeletek nyerhetők (a CT-hez hasonlóan), akár az egész testről. Később a szeletekből tetszőleges irányú, akár háromdimenziós képek állíthatók elő.

[wiki](#)

7. Kétdimenziós kristály

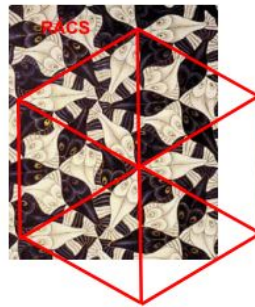
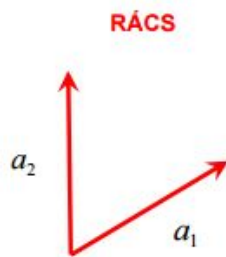
Tekintsünk egy kétdimenziós kristályt, melynek elemi rácsvektorai

$$\mathbf{a}_1 = a \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{a}_2 = a \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ \frac{\sqrt{3}}{2} \end{pmatrix}.$$

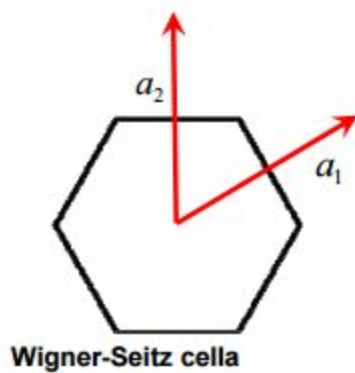
(a) Rajzolja fel a rácsot.

Példa: kétdimenziós hexagonális rács



Ennél a rácsnál nem cserélődött fel az a_1 , a_2 jelölés? Vagy jó így?

(b) Válasszon ki egy rácspontot és rajzold fel a hozzá tartozó Wigner-Seitz-cellát.



(c) A fenti $\mathbf{a}_1$ és $\mathbf{a}_2$ elemi rácsvektorok ismeretében hogyan fejezhetők ki a reciprokrács $\mathbf{b}_1$ és $\mathbf{b}_2$ elemi rácsvektorai?

A reciprokrácsvektorok iránya könnyen meghatározható a vektoriális definícióból, míg nagyságukat az elemi cellákra vonatkozó összefüggésből származtathatjuk.

$$\det \underline{\mathbf{B}} = \frac{(2\pi)^2}{\det \underline{\mathbf{A}}} = \frac{(2\pi)^2}{\Delta} = \Delta_{\text{reciprok}}$$

$$\Delta = \frac{\sqrt{3}}{2} a^2 \quad \Delta_r = \frac{\sqrt{3}}{2} b^2 \quad \Delta_r = \frac{(2\pi)^2}{\Delta} = \frac{(2\pi)^2}{\frac{\sqrt{3}}{2} a^2} = \frac{\sqrt{3}}{2} b^2$$

$$|b_1| = |b_2| = 2\pi \frac{2}{\sqrt{3}} \frac{1}{a} = \frac{4\pi}{a\sqrt{3}}$$

tehát b_1 merőleges a_1 re, b_2 merőleges a_2 re. Nagyságuk pedig $2\pi/\det A$

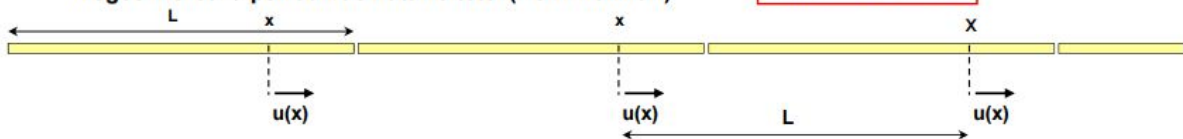
összefoglaló pdf (9es) alapján szerintem: b_1 merőleges a_2 -re, nagyságuk pedig $\frac{2\pi a}{\det A}$

8. Periodikus határfeltétel

Mit értünk *periodikus határfeltétel* vagy *Born-Kármán-határfeltétel* alatt?

A q hullámszám értelmezési tartománya

véges méret $\rightarrow$ periodikus határfeltétel (Born-Kármán)



$$u_0 e^{i\{qx - \omega t\}} = u_0 e^{i\{q(x+L) - \omega t\}} \Rightarrow e^{iqL} = 1 \Rightarrow q = n \frac{2\pi}{L}, \text{ ahol } n = 0, 1, 2, \dots \text{ egész számok}$$

itt a q a hullámszám

A periodikus határfeltétel alkalmazása milyen következményt von maga után a hullámszámok lehetséges értékeire vonatkozóan?

9. Szerkezetvizsgálat, Laue-módszer

Kétdimenziós, $5 \text{ \AA}$ rácsállandójú, egyszerű négyzetrács-szerkezetű kristályon végzünk röntgendiffrakciós kísérletet a Laue-módszerrel. Az ehhez használt polikromatikus röntgennyaláb a $\lambda \in [4\text{\AA}, 12\text{\AA}]$ hullámhossztartományban tartalmaz komponenseket.

Hány diffrakciós csúcsot látunk az ernyőn, amikor a beérkező röntgennyaláb éppen párhuzamos valamely elemi rácsvektorral?

Laue módszer: több hullámhosszú fénnel/röntgennel/elektronnal világítunk meg egy kristályt, a visszavert (diffraktált), vagy áthatolt hullámokból azt a hullámhosszt fogjuk látni az ernyőn, ami kielégíti a Bragg-feltételt (a többi interferálódik, és emiatt nem látszik/halvány lesz/miegymás). emiatt random szögből világíthatunk (úgysem ismerjük a kristály szerkezetét (jó, most de), és orientációt), ha nem nagyon elbaszott a helyzet, akkor valamit mindig látni fogunk, és tudunk következtetni a szerkezetre és az orientációra is. Én ezt az egész diffrakciós témát nem tudom értelmezni 2D kristályon, mert pont az kell hozzá, hogy legalább két kristályszerkezet legyen.

hacsak

a röntgen is abban a síkban van, mint a kristály.

akkor ha az egyikkel párhuzamos, a másikra merőleges. visszaverődik az egyikről, ez oké. a következőről úgy verődik vissza, hogy $2 \cdot 5$ angströmöt hullámléghosszban, vagyis az 5 és 10 angström hullámléghossz lesz csak fázisban. tehát két pötty (diffrakciós csúcs) lesz az ernyőn. az más kérdés, hogy ezek szerintem egybeesnek az ernyőn, és csak egyet látunk. de lehet a szín alapján meg lehet őket különböztetni.

10. Rácsrezgések

Tekintsük az egydimenziós, egyforma m tömegű atomokból álló, D rugóállandójú rugókkal összekötött, a rács-állandójú lineáris láncot. Ebben a rácsban a rácsrezgések diszperziós

relációja $\omega(q) = \sqrt{\frac{4D}{m}} \left| \sin \frac{qa}{2} \right|$. (Megjegyzés: A PDF-ekben gyakran a $4D$ helyett $4c$ szerepel, ami ugyanúgy rugóállandó...)

(a) Ábrázolja a rácsrezgések $\omega(q)$ diszperziós relációját, és sorolja fel jellemző tulajdonságait.

A diszperziós reláció tulajdonságai

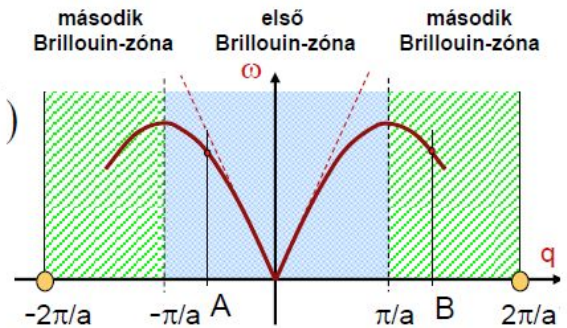
- periódikus $2\pi/a$ szerint; célszerű választás $q=0$, $\omega=0$

(- lineárisan indul, meredekség: $a\sqrt{\frac{c}{M}}$ folytonos közeg: $\sqrt{\frac{E}{\rho}}$)

- a $-\pi/a < q < \pi/a$ intervallum hordoz minden információt

- A és B ekvivalens: q ekvivalens $q+G$ -vel
(a második Brillouin-zónához tartozó hullámszám ugyanazt a rezgést írja le)

- A $g(\omega)$ állapot-sűrűség divergál a zónahatáron



Brillouin-zóna:
a reciprok rács
Wigner-Seitz cellája

$$g(\omega) = \frac{L}{2\pi} \frac{1}{\omega_{\max} \frac{a}{2} \cos \frac{qa}{2}} = \frac{N}{\pi} \frac{1}{\omega_{\max} \sqrt{1 - \sin^2 \frac{qa}{2}}} = \frac{N}{\pi} \frac{1}{\sqrt{\omega_{\max}^2 - \omega^2}}$$

(b) Becsülje meg a D rugóállandó értékét, ha a láncban a hangsebesség $v_{\text{hang}} = 5000$ m/s, az atomok tömege $m = 5 \times 10^{-26}$ kg, a rácsállandó pedig $a = 5$ Å.

$$\omega = c_{\text{hang}} q$$

így aztán ezt behelyettesítjük a feladatban lévő képletbe, akkor kiesik q . Mivel sin argumentumban angström nagyságrend van ezért gondolom $\sin x \approx x$ egyszerűsítés mehet. Így már kifejezhető D .

Hogy helyettesíték be és miért esne ki a q ?