

# Kvantummechanika

Fizika II. és Műszaki fizika

Horváth Árpád <horvath.arpad@amk.uni-obuda.hu>

2016. október 10.

## 1. A kvantummechanikához vezető tapasztalatok

A kvantummechanika kialakulásához a fény (az elektromágneses hullámok) viselkedésének a tanulmányozása vezetett, voltak olyan problémák (hőmérsékleti sugárzás, fotoeffektus, atomok színképe), amelyek nem voltak értelmezhetők a klasszikus hullámtan segítségével.

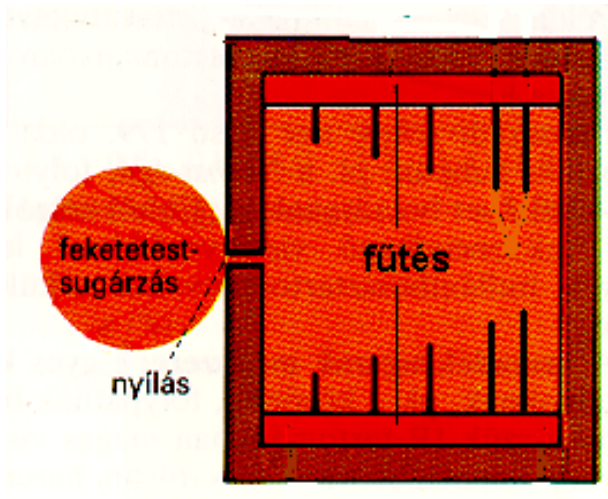
### 1.1. A feketetest-sugárzás

A testek hőmérsékletük függvényében elektromágneses sugárzást (infra, látható fény, ultraibolya) bocsátanak ki. A hőmérsékleti sugárzás egyik alapvető mennyisége a spektrális emisszióképesség. A spektrális emisszióképesség ( $E(\lambda, T)$ ) számértéke az egységnyi felületről egységnyi térszögbe, időegység alatt kisugárzott energia egységnyi hullámhosszintervallumra (használatos frekvenciavallumra is) eső részének nagyságával egyenlő. Függ a hullámhossztól és a hőmérséklettől. A spektrális emisszióképesség mértékegysége:  $W/m^3$ . A spektrális abszorpcióképesség:

$$A(\lambda, T) = \frac{\Delta\lambda \text{ sávban visszavert teljesítmény}}{\Delta\lambda \text{ sávban beeső teljesítmény}}$$

Kirchoff sugárzási törvényei szerint egy olyan test tulajdonságaiból, amely nem ver vissza semennyi fényt, következtetni lehet a többi test által visszavert és kisugárzott elektromágneses sugárzás viszonyára. Ezt a nem visszaverő testet, nevezik *abszolút fekete test*nek. Ennek az abszorpcióképessége tehát minden hullámhossz esetén azonosan 1 (azaz 100 %).

Az ilyen testet leginkább úgy lehet megközelíteni, hogy egy üreget csinálunk sötét belső fallal. Ebbe az üregbe, ha kívülről fény jut, nem sok esélye van kijutnia, hiszen a több belső visszaverődés során nagy valószínűséggel elnyelődik. Ezt a testet viszont ha melegítem nem lesz teljesen sötét. A hőmérséklete függvényében sugározni fog. Meglepő módon ez az abszolút fekete test elég fényes is lehet magas hőmérsékleten. A feketesége az elnyelésre vonatkozik, nem a kisugárzásra.



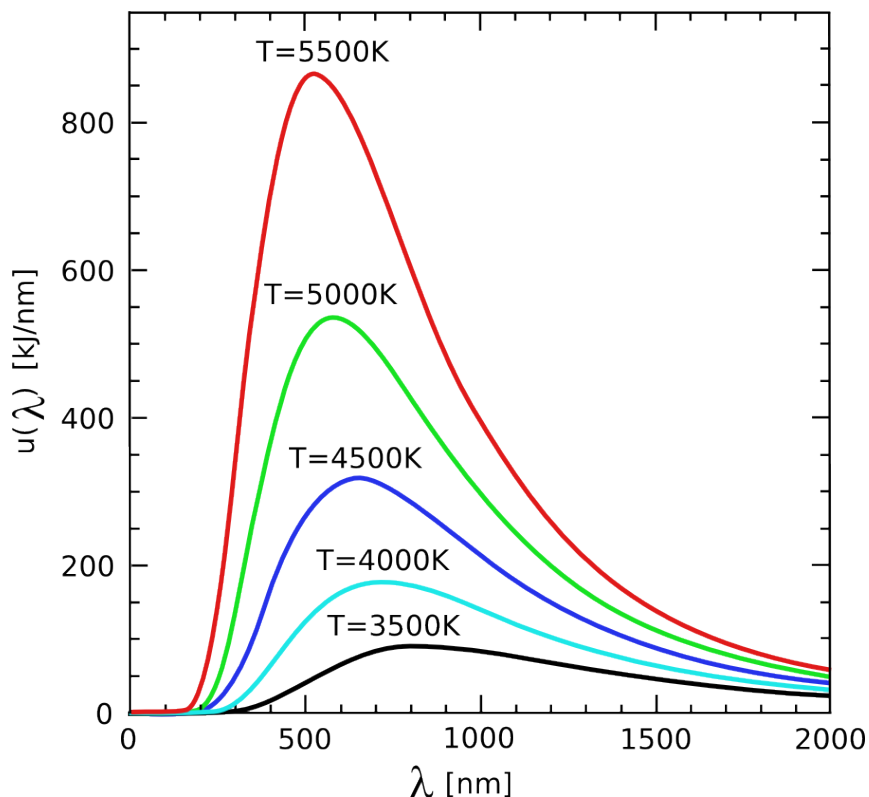
**Kirchhoff törvénye** különböző minőségű testekre, azonos hőmérséklet és hullámhossz esetén a spektrális emisszió és spektrális abszorpcióképesség viszonya állandó:

$$\frac{E(\lambda, T)}{A(\lambda, T)} = \text{állandó}$$

ezért elegendő csak az abszolút fekete test sugárzását vizsgálni (lsd. az ábrát), a többi testé ennek konstansszorososa minden frekvenciára.

A feketetest-sugárzásnak az eloszlását sokan vizsgálták kísérletileg és elméletileg is, de elméleti magyarázatot csak a sugárzás kvantumosságának elfogadása mellett lehetett megalkotni.

### A feketetest sugárzás – grafikon



1879-ben JOSEF STEFAN szlovén anyanyelvű osztrák fizikus vizsgálta a feketetest által az összes hullámhosszon kibocsájtott teljes teljesítményt, és azt tapasztalta, hogy ez a hőmérséklet negyedik hatványával arányos mértékű. Ezt később LUDWIG BOLTZMANN osztrák fizikus magyarázta elméleti úton. A *Stefan–Boltzmann törvény* szerint a kisugárzott teljesítmény a hőmérséklet negyedik hatványával arányos:

$$P = \sigma AT^4$$

Itt a  $\sigma = 5,672 \cdot 10^{-8} \text{ W/(m}^2\text{K}^4)$  (szigma) a Stefan–Boltzmann-állandó;  $A$  az a felszín, amelyen a sugárzás történik;  $T$  az abszolút hőmérséklet (Kelvin).

### A feketetest sugárzás – Wien-féle eltolódás

A Planck-görbe képletének ismerete előtt is ismert volt a *Wien-féle eltolódási törvény*, mely szerint nagyobb hőmérsékletű test sugárzásának maximuma a kisebb hullámhosszaknál keresendő:

$$\lambda_{max} = \frac{b}{T}$$

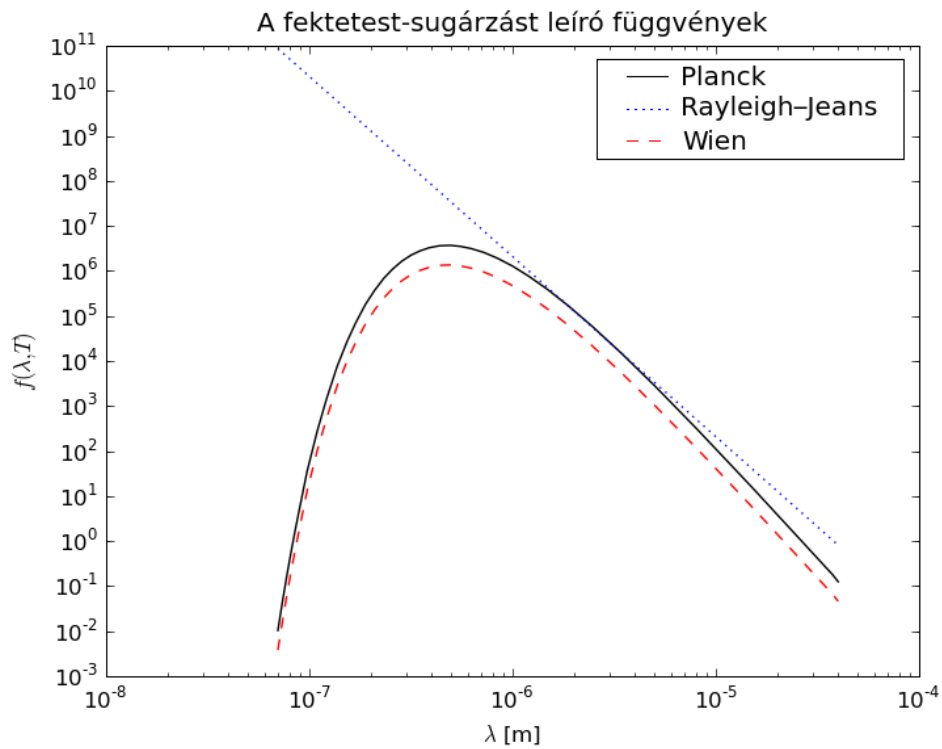
ahol  $b = 2,897768 \cdot 10^{-3} \text{ K} \cdot \text{m}$

Ebből a törvényből lehet következtetni például a csillagok és a vasolvastóban a vas hőmérsékletére. A hidegebb csillagok vörösek, majd az egyre melegebb csillagok sárgák, kékek, fehérek. (A híradástechnikában a színháromszögben be voltak jelölve ezek a termikus színek, melyek a később tárgyalandó Planck-eloszlásnak felelnek meg.)

### A feketetest sugárzás – Különböző képletek



1. ábra. Josef Stefan és Ludwig Boltzmann



Boltzmann termodinamikai oldalról közelítette meg a problémát, majd Wien továbbfejlesztve az elméletét a következő képletet kapta

### Wien sugárzási törvénye

$$f(\lambda, T) = \frac{c_1 \lambda^{-5}}{e^{(c_2/\lambda T)}}$$

ahol  $c_1$  és  $c_2$  a mérési pontokhoz legjobban illő állandó,  $T$  az abszolút hőmérséklet (Kelvinben).

Rayleigh és Jeans konkrétan a sugárzások klasszikus elméletét felhasználva pedig a következő eredményre jutottak (Rayleigh–Jeans sugárzási törvénye):

$$f(\lambda, T) = 8\pi kT\lambda^{-4}$$

ahol  $k$  a Boltzmann-állandó,  $T$  az abszolút hőmérséklet.

Ezeket a képleteket nem kell megjegyeznünk, csak tudatosítanunk kell, hogy a klasszikus képletekkel a megoldást nem sikerült elérni.

MAX PLANCK szintén a sugárzások elméletét vette alapul. Egy helyen azonban feltételezte, hogy a sugárzások csak diszkrét értékeket vehetnek fel, egy a frekvenciától függő érték többszörösét. Egy adott  $\nu$  frekvenciájú sugárzás csak a  $h\nu$  érték többszörösét veheti fel. Ahol a  $h = 6,63 \cdot 10^{-34}$  érték az azóta *Planck-állandónak* elnevezett érték. Ezzel sikerült egy olyan képletet levezetnie, amely pontosan illeszkedett a mérési pontokra.

Ez a képlet az

$$f(\lambda, T) = \frac{8\pi hc\lambda^{-5}}{e^{(hc/\lambda kT)} - 1}$$

ahol a korábban említett állandókon felül a  $c = 3 \cdot 10^8$  m/s a vákuumbeli fénysebesség.

## Max Planck



### A Planck-törvény következményei

- Wien-féle eltolódási törvény: szélsőérték, tehát deriválni kell a Planck-törvény összefüggését.

- Stefan–Boltzmann-törvény: görbe alatti terület kell, tehát integrálni kell  $\lambda$  szerint  $(0, \infty)$  intervallumon.
- Wien sugárzási törvénye: ha az exponenciális rész kitevője elég nagy, akkor a  $-1$  elhanyagolható a nevezőben. (Határozzuk meg  $c_1$  és  $c_2$  értéknek mi felel meg!)

## 1.2. A fényelektromos jelenség

A fémből a megvilágítás hatására elektronok lépnek ki, amit fényelektromos jelenségnek (fotoeffektus) nevezünk. A jelenség törvényszerűségei, amelyek az alábbiak, nem voltak értelmezhetők a klasszikus megfontolások alapján:

1. A kilépő elektronok maximális sebessége csak a fény frekvenciájától függ, nem függ a fény intenzitásától. Az adott fémre jellemző küszöbfrekvenciánál kisebb frekvenciájú fény nem vált ki fotoeffektust.
2. A kilépő elektronok száma függ a megvilágítás intenzitásától. Más szóval adott frekvencia esetén a fotoáram a fényerősséggel arányos.
3. Az elektronok kilépése pillanatszerűen megindul megfelelő frekvenciájú fény esetén, bármilyen gyenge a fény intenzitása. Ezt úgy is mondhatjuk, hogy a fotoeffektusnak nincs tehetetlensége.

Ezzel szemben azt várnánk, hogy nagyobb intenzitású fény esetén több energiát nyer a kilépő elektron, így nagyobb sebességgel lépne ki. Továbbá igen gyenge fény hatására csak meglehetősen hosszú idő után történne kilépés, amíg a szükséges fényenergia össze nem gyűlik.

A hullámelmélettel nem magyarázható tapasztalati tényeket ALBERT EINSTEIN értelmezte 1905-ben. Ez alapján a megvilágított fém valamelyik elektronjával egy energiaadag, az említett foton lép kölcsönhatásba. Ezt fejezik ki az Einstein-féle fényelektromos egyenlet az energiamegmaradás alapján:

$$h\nu = W_{ki} + \frac{1}{2}mv_{\max}^2,$$

ahol  $W_{ki}$  az ún. kilépési munka. Az összefüggés alapján a fényintenzitástól csak a kilépő elektronok száma függ (nincs minimális intenzitás, már egy foton is elég) energiájuk (sebességük) a frekvenciától, ha  $\nu < W_{ki}/h$  a jelenség nem megy végbe. A fotoeffektus úgy fogható fel, mint egy klasszikus ütközési folyamat, amelynél a fenti összefüggés az energia megmaradást fejezi ki. Ütközésnél érvényes az impulzus megmaradás is, tehát a fotonnak impulzus lehet tulajdonítani, valamint tömeget is, melyekre a következő összefüggések igazak:

$$p = mc, \quad E = mc^2$$

A fotonnak nagyon kicsi a relativisztikus tömege. Például egy  $\lambda = 600$  nm hullámhosszú fény esetén

$$m = \frac{E}{c^2} = \frac{h\nu}{c^2} = \frac{6,63 \cdot 10^{-34} \cdot 600 \cdot 10^{-9} m}{(3 \cdot 10^8)^2} = 4,42 \cdot 10^{-57} \text{kg}$$

Einstein erről szóló cikke az 1905-ös csodálatos évében (Annus Mirabilis) jelent meg, két szintén alapvető jelentőségű másik cikkével együtt. Az egyik a Brown-mozgást vizsgálatával kimutatta, hogy az bizonyítja az atomok létezését. A másik cikk a speciális relativitásról szólt. A Nobel-díjat a fotoeffektus magyarázatáért kapta 1921-ben.

## 2. Az atomelmélet fejlődése

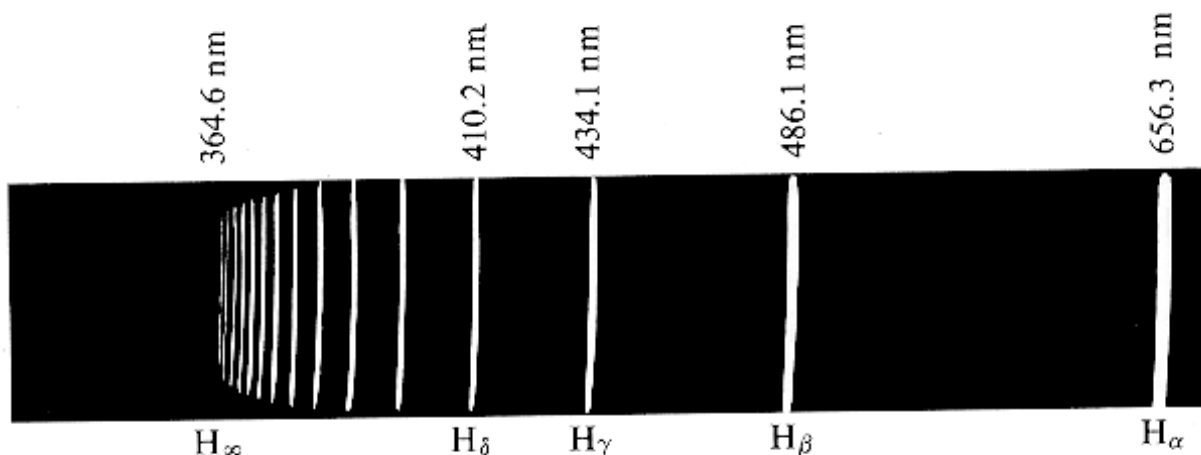
Rutherford által elképzelt modellben az atom tömege a központi, pozitív magban koncentrálódik, körülötte körpályán keringenek az elektronok egyenletes körmozgást végezve. A centripetális erőt a Coulomb-erő biztosítja.

A körpályán keringő elektron azonban, mint gyorsuló töltés, elektromágneses sugárzást bocsát ki, így energiavesztés következik be, és az elektronnak spirális pályán a magba kellene zuhanni. Ez ellentmond az atomok stabilitásának. Továbbá az elektron a csökkenő sugarú pályán egyre nagyobb szögsebességgel keringne, folytonosan változó frekvenciájú elektromágneses hullámokat bocsátana ki, melyek spektruma folytonos lenne szemben a tapasztalt vonalassal.

JOHANN BALMER a hidrogénatom színekét vizsgálva, azt vonalas színeként találta, amelyre empirikus úton felállította az ún. *Balmer-formulát* (1885), mely szerint a kapott vonalakkhoz tartozó fény hullámhosszának a reciproka:

(empirikus formula = nem elméleti úton megállapított, hanem a kísérleti eredmények megfigyelésével kitalált)

### Balmer-sorozat és -formula



$$\frac{1}{\lambda} = R_H \left( \frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right)$$

ahol az  $R_H$  az ún. Rydberg-állandó, amelynek értéke hidrogénre

$$R_H = 1,097 \cdot 10^7 \text{ m}^{-1} \quad \text{és} \quad n_2 = n_1 + 1, \quad n_1 + 2, \dots \text{ (egészek)}$$

Amennyiben  $n_1 = 1$  az ultraibolya,  $n_1 = 2$  a látható fény (ábra),  $n_1 \geq 3$  az infravörös tartományban vagyunk.

## 3. A Bohr-modell – félúton a klasszikus és kvantumos közt

Az atomi elektronos diszkrét energiaszintjeit és a hidrogénatom vonalas színekét a Bohr-féle atommodell tudta értelmezni.

**Bohr féle atommodell** NIELS BOHR a Rutherford-féle atommodell ellentmondásainak kiküszöbölésére és a diszkrét energiafelvétel, ill. kibocsátás értelmezésére három posztulátumot állított fel:

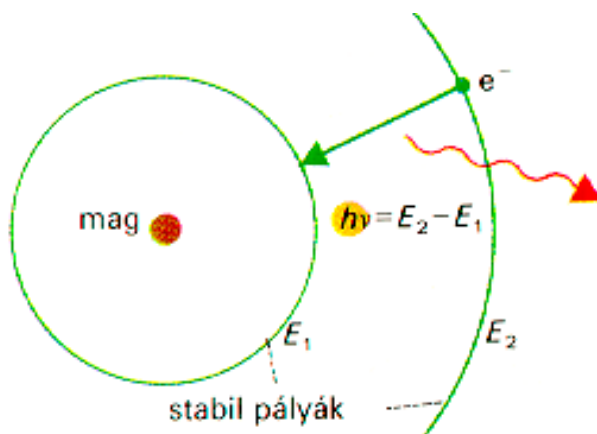
1. Az atomban az elektronok csak meghatározott pályákon keringhetnek, ezekhez diszkrét energiaértékek tartoznak. Eközben az elektron energiát nem sugároz.
2. A megengedett elektronpályákra érvényes:

$$mrv = n \cdot h/2\pi = n \cdot \hbar$$

ahol  $n = 1, 2, 3 \dots$ . Eszerint az elektron csak olyan pályákon keringhet (ábra), amelynél az elektron impulzusmomentuma,  $L$  a  $h/2\pi = \hbar$  egész számú többszöröseit veheti fel. (Az összefüggésben az  $n$  a később értelmezendő főkvantumszám lesz.)

3. Két elektronpálya közötti elektronátmenet foton kisugárzásával, ill. elnyelésével jár. A foton energiája:

$$E_n - E_m = h\nu$$



(A posztulátumok vagy axiómák olyan állítások, amelyek igazságértékét a továbbiakban nem vizsgáljuk, hanem elfogadjuk.)

A modell segítségével meghatározhatjuk a hidrogén színeképét, melyre az empirikus Balmer-formulával egyező eredményt kapunk.

**Bohr–Sommerfeld-modell** A „bolygómodell” alapján nem csupán körpályák, hanem az általánosabb ellipszispályák is elképzelhetők az atom elektronjainál. Pontosabb spektroszkópiai vizsgálatok az eredményezték, hogy a hidrogén színeképében a vonalak több összetevőből állnak, azaz finomszerkezetet mutatnak. Sommerfeld ezen tapasztalatok alapján egészítette ki ellipszispályákkal a Bohr-modell körpályáit. Ezek az ellipszispályák az adott  $n$ -hez tartozó Bohr féle pályán belül vannak, melyek impulzusmomentumai

$$L = \ell \frac{h}{2\pi} = \ell \hbar, \quad \text{ahol } \ell = 0, 1, 2, \dots, n - 1$$

$\ell$  a *mellékvantumszám*, míg az  $n$  a pályák összességét jelentő héjra (tulajdonképpen az ellipszisek nagytenelyére) jellemző *főkvantumszám*. Mivel  $\ell$  lehet nulla is és minden körmozgás nullánál nagyobb impulzusmomentumot eredményez, így  $\ell \hbar$  nem is a klasszikus értelemben vett impulzusmomentum.



**Zeeman-effektus** PIETER ZEEMAN kísérletileg kimutatott egy elméletileg már korábban megjósolt jelenséget: erős mágneses mezőben a színképvonalak több összetevőre bomlanak (felhasadnak). Ez az ún. (normális) Zeeman-effektus. Amennyiben az elektront úgy fogjuk fel, mint az atommag körüli köráramot, akkor ennek a köráramnak van mágneses momentuma, amelynek nagysága:

$$M = \mu_B \ell$$

arányos az impulzusmomentummal és az arányossági tényező az ún. Bohr-magneton, amely  $\mu_B = e\hbar/2m$ , ahol  $e$  az elektron töltése  $m$  a tömege. Az  $M$  mágneses momentum vektor, amelynek vetületei adott  $z$  irányban:

$$M_z = M \cos \alpha = \mu_B \ell \cos \alpha, \text{ ahol vezessük be az } m = \ell \cos \alpha \text{ jelölést,}$$

akkor az  $m$  az impulzusmomentum-vektor vetületeit jellemzi és szintén egész számot vehet fel, nevezetesen  $m = -\ell, \dots, 0, \dots, +\ell$ . Az  $m$ -et *mágneses kvantumszámnak* nevezzük.

**Spinkvantumszám** További spektroszkópiai vizsgálatok eredménye úgy magyarázható, hogy az elektronnak saját forgása miatt is van impulzusmomentuma, ez a saját impulzusmomentum, vagy spin ( $L_S = s\hbar$ ). Az ebből adódó  $s$  *spinkvantumszám* csak kétféle értéket vehet fel:  $s = \pm 1/2$ .

**Pauli-elv** WOLFGANG PAULI, osztrák fizikus (1900-1958) a róla elnevezett tilalmi elvet 1925-ben fogalmazta meg. Az atomban kötött elektronra vonatkozóan eszerint: az atomban nincs két olyan elektron, amelynek mind a négy kvantumszáma megegyezik. Általánosán: bármely fizikai rendszerben, a rendszer valamely adott kvantumszámokkal jellemzett állapotában nem lehet egynél több elektron. A Pauli-féle tilalmi elv alapján értelmezhetjük a DMITRIJ IVANOVICS MENGYELEJEV (1834-1907) által 1869-ben kidolgozott periódusos rendszert. Mengyelejev az elemeket kémiai viselkedésük alapján foglalta rendszerbe, melynek fizika alapját a Pauli-elv adta meg.

Nézzünk erre egy példát: Az alumíniumnak 13 elektronja van, mivel minden atom alulról épül fel, az  $n = 1$  héjhoz tartozik az  $\ell = 0$ , amihez az  $m = 0$ , így az  $1s$  pályán a két lehetséges spin-kvantumszámnak megfelelően 2 elektron van. Az  $n = 2$  héjhoz tartozik a  $2s$  pálya, amelyen az előzővel megegyezően szintén 2 elektron van, és a  $2p$ , amelynél  $m = -1, 0$  és  $+1$ , azon 6 elektron található. Összesítve az  $n=2$  héjon összesen 8 elektron van. A maradék 3 elektron pedig úgy oszlik el, hogy a  $3s$  pályára jut 2 és a  $3p$ -re pedig egy. Ezek alapján az alumínium elektronszerkezete a következőképpen alakul:

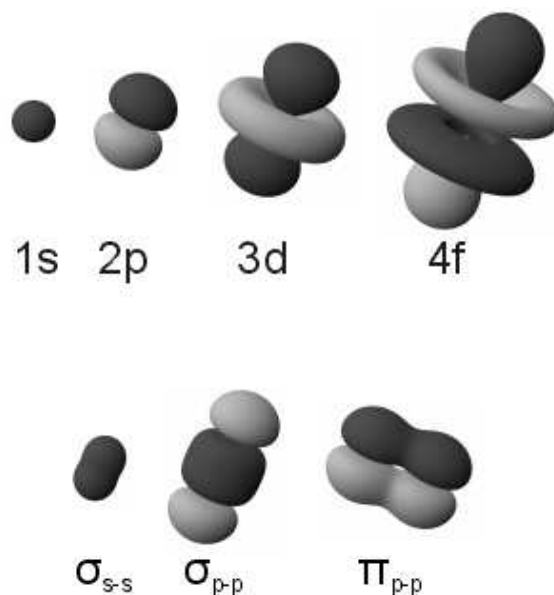
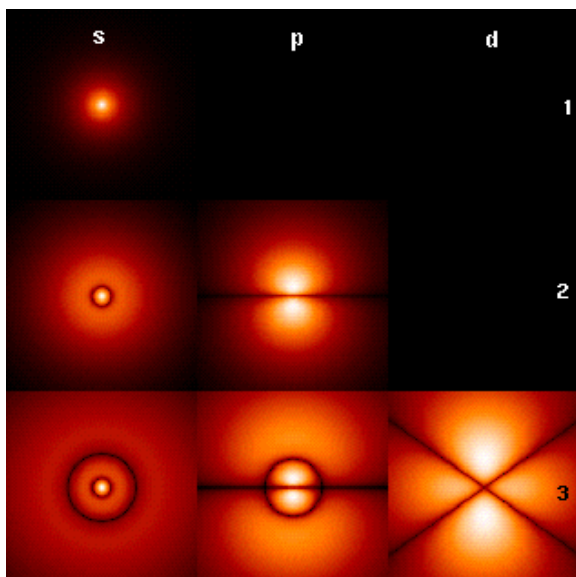
$$(1s)^2, (2s)^2, (2p)^6, (3s)^2, (3p)^1.$$

A lezárt héjakat gyakran a hozzá tartozó elem jelével szoktuk jelölni, például az  $(1s)^2$  zárt héjat (He)-vel, mivel a hélium esetén záródik ez a héj. A zárt héjjal rendelkező elemek nem szeretnek sem elektront kölcsönadni, sem kölcsönvenni, ezért nehezen lépnek kölcsönhatásba. Ezek a nemesgázok.

Az elemek periódikus rendszerének felépülését a következő táblázat szemlélteti:

Z	Elem	Konfiguráció
1	H	$(1s)^1$
2	He	$(1s)^2 \equiv (\text{He})$ , zárt héj
3	Li	$(\text{He}) (2s)^1$
4	Be	$(\text{He}) (2s)^2$
5	B	$(\text{He}) (2s)^2(2p)^1$
6	C	$(\text{He}) (2s)^2(2p)^2$
7	N	$(\text{He}) (2s)^2(2p)^3$
8	O	$(\text{He}) (2s)^2(2p)^4$
9	F	$(\text{He}) (2s)^2(2p)^5$
10	Ne	$(\text{He}) (2s)^2(2p)^6 \equiv (\text{Ne})$ , zárt héj
11	Na	$(\text{Ne}) (3s)^1$
12	Mg	$(\text{Ne}) (3s)^2$
13	Al	$(\text{Ne}) (3s)^2(3p)^1$
14	Si	$(\text{Ne}) (3s)^2(3p)^2$
15	P	$(\text{Ne}) (3s)^2(3p)^3$
16	S	$(\text{Ne}) (3s)^2(3p)^4$
17	Cl	$(\text{Ne}) (3s)^2(3p)^5$
18	Ar	$(\text{Ne}) (3s)^2(3p)^6 \equiv (\text{Ar})$ , zárt héj
19	K	$(\text{Ar}) (4s)^1$
20	Ca	$(\text{Ar}) (4s)^2$
21	Sc	$(\text{Ar}) (4s)^2(3d)^1$ ,
	:	

### Az elektronfelhők



A fenti első ábrán a világosabb részek nagyobb megtalálási valószínűséget (később majd értjük: nagyobb  $|\Psi^2|$  értéket) jelölnek. A második ábrán a pályák térbeli képét látjuk: azt a térrészt, ahol nagy

valószínűséggel található az elektron, az alsó sorban több atomos rendszereket.

## 4. Az igazi kvantummechanika

### Nehézségek

A kvantummechanikában sokminden ellentmondásban van a hétköznapi megszokott dolgokkal.

A kvantummechanika viszont működik. Nélküle nem lenne mikroelektronika, nem lennének elméletileg magyarázhatóak olyan tények, mint az atommag bomlása, szupravezetés, alagútdióda.

### Az igazi kvantummechanika

1925 körül:

- Mátrixmechanika (WERNER HEISENBERG)
- Hullámmechanika (ERWIN SCHRÖDINGER)
- Integrálegyenlettel (LÁNCZOS KORNÉL)

Később olyan matematikai megfogalmazást dolgozott ki NEUMANN JÁNOS, amely az előzőek általánosítása (1932 *Mathematische Grundlagen der Quantenmechanik*):

### 4.1. Matematikai háttér

#### Lineáris operátorok

Szükségünk lesz pár fogalomra:

Az  $\hat{f} : A \rightarrow A$  függvényt *lineáris leképezésnek* nevezzük, ha bármely  $\varphi_1, \varphi_2 \in A$  és  $a, b$  számok esetén  $\hat{f}(a\varphi_1 + b\varphi_2) = a\hat{f}(\varphi_1) + b\hat{f}(\varphi_2)$ .

Azt a lineáris leképezést, mely függvényből függvényt hoz létre *lineáris operátornak* nevezzük. (Ilyen például a deriválás és az integrálás.)

Ha  $\hat{A}$  egy lineáris operátor és „ $a$ ” egy szám, és  $\hat{A}\varphi(x) = a\varphi(x)$  (azaz az operátor erre a függvényre saját többszörösét adja), akkor  $\varphi(x)$ -et  $\hat{A}$  *sajátfüggvényének* nevezzük,  $a$ -t a  $\varphi(x)$ -hez tartozó *sajátértékének*.

#### Bra és ket jelölésmód, Hilbert-tér

A kvantummechanikában az állapotfüggvények úgynevezett Hilbert-teret alkotnak. PAUL DIRAC nyomán az állapotfüggvényeket gyakran a következőképpen jelöljük:

$$\begin{array}{lll} \Psi & \text{helyett} & |\Psi\rangle \\ \varphi & \text{helyett} & |\varphi\rangle \end{array}$$

(A fentiek kiejtése ket-psi, ket-fi.)

## A Hilbert-tér belső szorzata, 1D

Ez a jelölésmód sokszor tömörebb és intuitív jelölésre ad módot.

Két állapot belső szorzatát így jelöljük, és a következőt jelenti:

$$\langle \varphi_1 | \varphi_2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_1^*(x) \cdot \varphi_2(x) dx$$

Itt a \* a komplex konjugálást jelenti.

Az alábbi jelölés értelmezése:

$$\langle \Psi | \hat{f} | \Psi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x) \hat{f} \Psi(x) dx$$

## Részecske hullámfüggvénye

Egy dimenziós eset időfügges nélkül.

A részecske állapotát egy időpillanatban egy  $|\Psi(x)\rangle$  állapotfüggvény adja meg, amely eleget tesz a később említendő Schrödinger-egyenletnek. Ez tartalmaz minden adatot a részecskéről.

Egy szabadon mozgó részecske esetén (amely minden vonzó testtől távol van, a helyzeti energia mindenhol 0) a megoldás lehet például koszinuszos.

A koszinuszos függvény egyszerűbben kezelhető, ha az alábbi komplex számként írjuk, és csak a valós résznek tulajdonítunk fizikai tartalmat. (Villanytanban is gyakori)

$$|\Psi(x)\rangle = re^{ikx} = r(\cos(kx) + i \sin(kx)) \quad k = 2\pi/\lambda$$

## 4.2. Mérés, határozatlanság

### Mérés a részecskefizikában

A fizikai mennyiségeknek lineáris operátorok felelnek meg. Csak olyan esetben kapok minden mérés-kor azonos értéket, hogyha az állapotfüggvény az operátor sajátfüggvénye. Ilyenkor a sajátértéket kapjuk mérés-kor.

Ha az állapotfüggvény több sajátfüggvény lineáris kombinációja:

$$|\Psi(x)\rangle = \sum c_n |\varphi_n(x)\rangle,$$

Akkor az összegzett sajátfüggvények sajátértékeinek akármelyikét felveheti a mért érték  $c_n^2$  valószínűséggel ( $\sum c_n^2 = 1$ ).

### Egy fontos példa, az impulzus, egy dimenzióban

Az impulzusnak (lendületnek) a hullámmechanikában a  $\hat{p} = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}$  operátor felel meg.

Az impulzus sajátfüggvényei  $|\varphi(x)\rangle = re^{ikx}$  alakú függvények lesznek.

$$\hat{p} |\varphi(x)\rangle = \frac{\hbar}{i} \frac{d(re^{ikx})}{dx} = \frac{\hbar}{i} ikre^{ikx} = k\hbar |\varphi(x)\rangle.$$

A  $|\varphi\rangle$  sajátfüggvény a de Broglie-egyenletből ismerős sajátértékkel:

$$p = k\hbar = \frac{2\pi}{\lambda} \hbar \quad p = \frac{h}{\lambda}.$$

### Az impulzus három dimenzióban

Az impulzusnak (lendületnek) a hullámmechanikában az alábbi operátor felel meg:

$$\hat{p} = \frac{\hbar}{i} \begin{pmatrix} \partial_x \\ \partial_y \\ \partial_z \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{i} \nabla$$

operátor felel meg, ahol az egyszerűség kedvéért az  $x$  szerinti parciális deriválást egyszerűsítve jelöljük:

$$\partial_x = \frac{\partial}{\partial x}$$

és az összes többi koordináta szerinti deriválást is.

### Az impulzusoperátor alkalmazva egy függvényre

A fenti három deriváltból álló vektort  $\nabla$ -val (nablával) jelöljük.

Egy függvényre alkalmazva a nablát illetve az impulzusoperátort mindig egy vektor három komponensét kapjuk.

Az impulzusoperátor sajátfüggvényei térben az alábbi alakú függvények:

$$|\varphi(x, y, z)\rangle = e^{i(k_x \cdot x + k_y \cdot y + k_z \cdot z)} = e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}$$

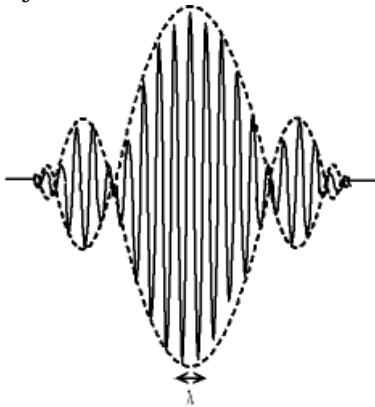
Erre alkalmazva az impulzusoperátort

$$\hat{p} |\varphi(x, y, z)\rangle = \frac{\hbar}{i} \begin{pmatrix} \partial_x |\varphi\rangle \\ \partial_y |\varphi\rangle \\ \partial_z |\varphi\rangle \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{i} \begin{pmatrix} i \cdot k_x \cdot |\varphi\rangle \\ i \cdot k_y \cdot |\varphi\rangle \\ i \cdot k_z \cdot |\varphi\rangle \end{pmatrix} = \hbar \vec{k} |\varphi(x, y, z)\rangle$$

### Határozatlansági reláció

A fenti példában lendület pontosan mérhető, a helyre viszont semmi nem mondható.

Ha hullámcsomagot veszek, akkor a hely valamilyen pontossággal meghatározható, de – mivel a hullámcsomag több szinusz összegeként áll elő (Fourier-sor illetve Fourier-integrál) – a lendületmérésre több érték jöhet ki.



### Határozatlansági reláció

Összességében megállapítható, hogy a helymérés  $\Delta x$  pontosságának és a lendületmérés  $\Delta p_x$  pontosságának szorzata nem lehet akármilyen kicsi, szorzatukra a Heisenberg-féle határozatlansági reláció igaz:

$$\Delta p_x \cdot \Delta x \approx \hbar$$

Hasonló kapcsolat igaz az energia és az időtartam között:

$$\Delta E \cdot \Delta t \approx \hbar$$

(Rövid idejű energiaszintek kiszélesedése  
rövid felezési idejű részecskék félértékszélessége)

Az utóbbinak a következménye, hogy a rövid felezési idejű részecskék esetén a mért tömegérték kiszélesedik. Olyan, mintha rövid időre többletenergiát/többlettömeget kaphatna a részecske. Egy másik jelenség is ezen alapul, amelyben nem a részecskék élettartama a rövid, hanem az elektron tartózkodási ideje egy energiaszinten. Ha az atomban az adott energiaszinten rövid ideig tartózkodik az elektron, akkor a mérések során úgy tapasztalom, mintha az az energiaszint kiszélesedne. Mintha néha kicsit nagyobb, néha kicsit kisebb lenne az az energiaszint. Emiatt amikor ide érkezik az elektron, vagy innen továbbjut, akkor a leadott illetve felvett energia nagysága nem lesz olyan pontos érték, mint két stabilabb energiaszint közötti átjutáskor. A kibocsájtott fény frekvenciája emiatt kismértékben eltérhet attól, amit a két energiaszint különbségéből kapunk az  $E = h\nu$  képlettel.

### Határozatlansági reláció

#### Kommutátor

Bizonyos mennyiségek egyszerre mérhetőek tetszőleges pontossággal. Azok, amelyeknek közösek a sajátfüggvényei. Ezeknek az a jellemzőjük, hogy mindegy, hogy egy állapotfüggvényre milyen sorrendben alkalmazzuk a két mennyiség operátorát. A felcserélhetőség jellemzésére használjuk a két operátor kommutátorát.  $\hat{a}$  és  $\hat{b}$  operátorok esetén a kommutátor:

$$[\hat{a}, \hat{b}] = \hat{a}\hat{b} - \hat{b}\hat{a}$$

### Határozatlansági reláció

A helymérés  $\hat{x}$  operátora (egyetlen  $x$  dimenzióban) az  $x$ -szel való szorzás művelete. Ezt így jelöljük:

$$\hat{x} = x \cdot$$

Az  $x$  koordinátát egyszerre lehetne mérni tetszőleges pontossággal a  $p_x$  impulzus-komponenssel, ha kommutátoruk nulla lenne. Nézzük meg, mi történik, ha egymás után alkalmazzuk a kettőt egy függvényre (egyszerűség kedvéért egy dimenzióban) kétféle sorrendben:

$$\hat{x}\hat{p}_x|\varphi\rangle = x\frac{\hbar}{i}(\partial_x|\varphi\rangle)$$

$$\hat{p}_x\hat{x}|\varphi\rangle = \frac{\hbar}{i}\partial_x(x|\varphi\rangle) = \frac{\hbar}{i}(\partial_x x)|\varphi\rangle + x\frac{\hbar}{i}(\partial_x|\varphi\rangle)$$

Az első tag csak az utóbbiban szerepel.

**4.1. feladat** Igazolja, hogy az  $\hat{x}$  operátor tényleg lineáris operátor!

### Határozatlansági reláció

A két összefüggést összevetve:

$$[\hat{p}_x, \hat{x}] |\varphi\rangle = (\hat{p}_x \hat{x} - \hat{x} \hat{p}_x) |\varphi\rangle = \frac{\hbar}{i} (\partial_x x) |\varphi\rangle = \frac{\hbar}{i} |\varphi\rangle$$

ebből:

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

Hasonlóan belátható, hogy az  $x$  irányú helymérés, és az  $y$  irányú impulzuszérés tetszőleges pontossággal elvégezhető, mert a kettő operátora felcserélhető egymással, a kommutátoruk nulla.

### 4.3. A Schrödinger-egyenlet és megoldásai

#### A Schrödinger-egyenlet

A hullámfüggvényre fennáll a következő ú.n. Schrödinger-egyenlet:

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

rövidebben

$$\partial_t |\Psi\rangle = -\frac{i}{\hbar} \hat{H} |\Psi\rangle,$$

ahol

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V,$$

azaz

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} (\partial_x^2 + \partial_y^2 + \partial_z^2) + V = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V.$$

A  $\partial_x^2$  az  $x$ -szerinti második parciális deriváltat jelöli, a  $\partial_y^2$  és  $\partial_z^2$  hasonló, csak a másik két koordinátára.

#### A Schrödinger-egyenlet stacionárius megoldásai

A Schrödinger-egyenletnek vannak olyan állapotai, amelyek nem sugároznak, ezeket hívjuk stacionárius állapotoknak. (Ilyenek a stabil Bohr-féle elektronpályák.) Ezekre:

$$|\Psi(\vec{r}, t)\rangle = e^{i\omega t} |\varphi(\vec{r})\rangle = e^{\frac{i}{\hbar} E t} |\varphi(\vec{r})\rangle$$

Levezethető, hogy ilyen megoldások esetén:

$$\hat{H} |\varphi(\vec{r})\rangle = E |\varphi(\vec{r})\rangle,$$

amit időfüggetlen Schrödinger-egyenletnek is szokás nevezni.

Beírva a  $\hat{H}$  értékét, csak egy dimenziót véve, és némileg átrendezve kapjuk a következő dia képletét.

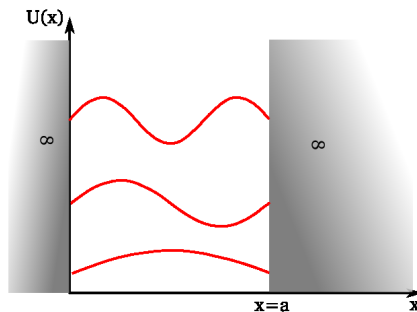
## A Schrödinger-egyenlet (1D)

Időfüggetlen 1 dimenziós változat:

$$\frac{\partial^2 |\varphi\rangle}{\partial x^2} - \frac{2m}{\hbar^2}(E - V)|\varphi\rangle = 0$$



## A potenciálgödör



$$V = \begin{cases} 0, & \text{ha } 0 < x < a \\ \infty, & \text{különben} \end{cases}$$

A megoldások olyan szinuszfüggvények, amelyek a falnál 0 értéket vesznek fel.

$$a = n \cdot \frac{\lambda_n}{2} \quad k_n = \frac{2\pi}{\lambda_n} = \frac{n\pi}{a} \quad |\varphi(x)\rangle = \sin(kx) = \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)$$

$$|\Psi(x,t)\rangle = e^{-i\omega_n t} \cdot \sin(kx) \quad E_n = \frac{p_n^2}{2m} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} n^2 \Rightarrow E_n \sim n^2$$

## Az alagúteffektus

Kvantummechanika: „a” szélességű  $U$  magasságú potenciálgáton az  $E$  energiájú részecske ( $E < U$ ) az alábbi valószínűséggel jut át:

$$P \sim e^{-a(U-E)}$$



Klasszikus mechanika: Ha a potenciálgátnál kisebb a részecske energiája, nem jut át. (Visszagurul a labda a hegyről.)

Alkalmazásai: alagútdióda,  $\alpha$ -bomlás magyarázata, alagútmikroszkóp