Kvantummechanika

Fizika II. és Műszaki fizika

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

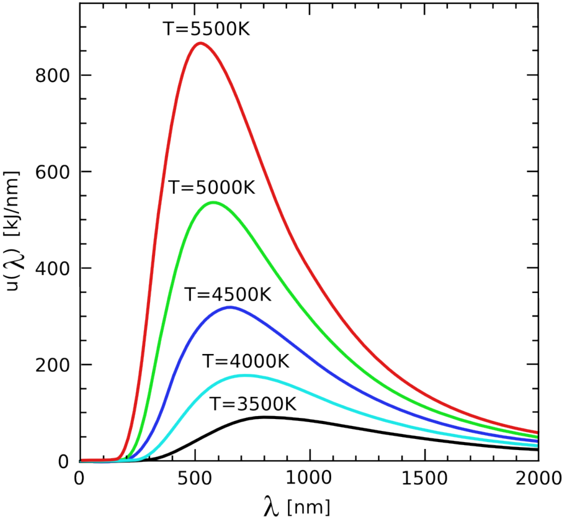
Óbudai Egyetem
Alba Regia Műszaki Kar
Székesfehérvár

2016. október 10.

Vázlat

Vázlat

A feketetest sugárzás – grafikon



Stefan–Boltzmann törvény

$$P = \sigma A T^4$$

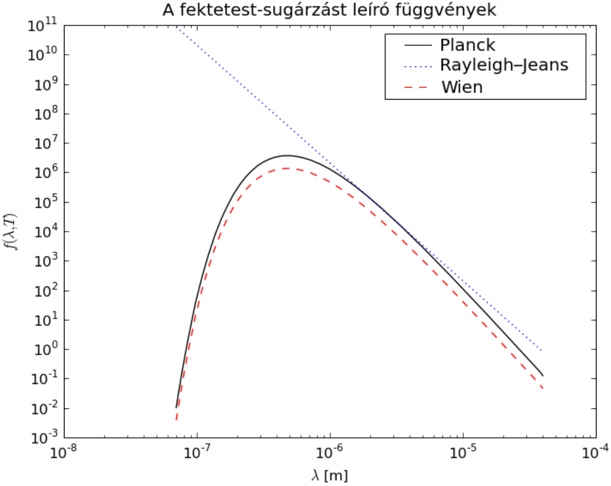
A feketetest sugárzás – Wien-féle eltolódás

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

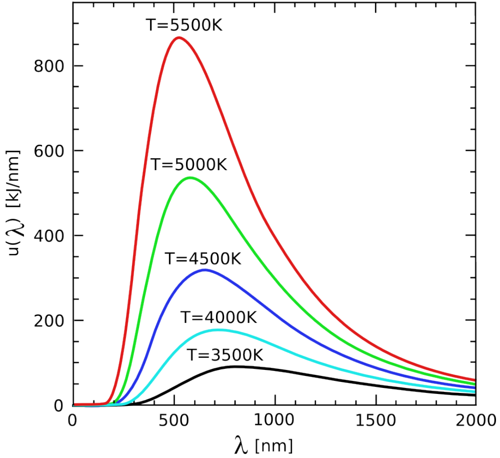
A feketetest sugárzás – Különböző képletek



Wien sugárzási törvénye

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

A feketetest sugárzás – Planck-törvény



Planck
sugárzási törvénye

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

Max Planck

A Planck-törvény következményei

Gondoljuk végig, hogyan lehet megkapni a következő törvényeket a Planck-törvényből. (Csak a kiindulólépés.)

- Wien-féle eltolódási törvény
- Stefan–Boltzmann-törvény
- Wien sugárzási törvénye

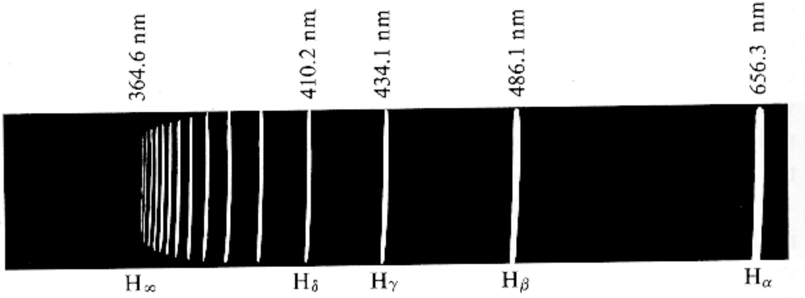
A Planck-törvény következményei

- Wien-féle eltolódási törvény: szélsőérték, tehát deriválni kell a Planck-törvény összefüggését.
- Stefan–Boltzmann-törvény: görbe alatti terület kell, tehát integrálni kell λ 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!)

Vázlat

Vázlat

Balmer-sorozat és -formula

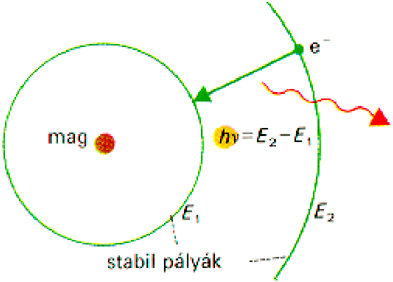


$$\frac{1}{\lambda} = R_H \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right)$$

Vázlat

Bohr-modell

$$mrv = n \cdot h/2\pi = n \cdot \hbar \quad \Rightarrow \quad E_n \sim \frac{1}{n^2}$$



$$E_n - E_m = h\nu$$

Kvantumszámok

Fő: $n = 1, 2, 3, 4, 5 \ldots$, energia
Mellék: $\ell = 0, \ldots, n-1$; pályák bonyolultsága; s, p, d, f...
Mágneses: $m = -\ell, \ldots, 0, \ldots, +\ell$, az ellipszisek iránya
Spin: $s = \pm 1/2$, az elektronok saját perdülete.

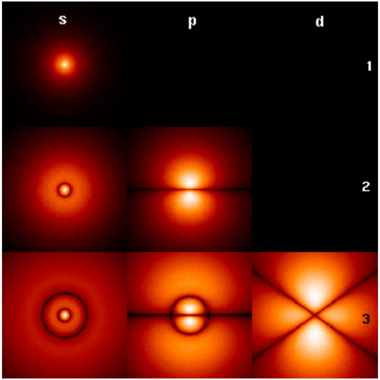
A periódikus rendszer

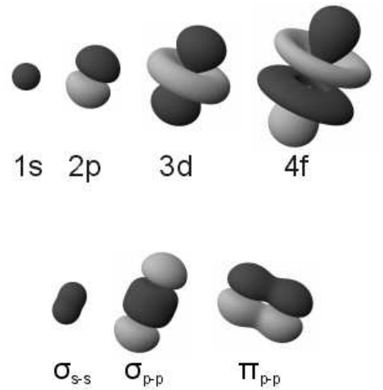
Z	Elem	Konfiguráció
1	H	$(1s)^1$
2	He	$(1s)^2 \equiv (\mathrm{He}),\quad$ zárt héj
3	Li	$(\mathrm{He})\ (2s)^1$
4	Be	$(\mathrm{He})\ (2s)^2$
5	B	$(\mathrm{He})\ (2s)^2(2p)^1$
6	C	$(\mathrm{He})\ (2s)^2(2p)^2$
7	N	$(\mathrm{He})\ (2s)^2(2p)^3$
8	O	$(\mathrm{He})\ (2s)^2(2p)^4$
9	F	$(\mathrm{He})\ (2s)^2(2p)^5$
10	Ne	$(\mathrm{He})\ (2s)^2(2p)^6 \equiv (\mathrm{Ne}),\quad$ zárt héj
11	N	$(\mathrm{Ne})\ (3s)^1$
12	Mg	$(\mathrm{Ne})\ (3s)^2$
	$\vdots$	

A periódikus rendszer

Z	Elem	Konfiguráció	
10	Ne	$(\mathrm{He})\ (2s)^2(2p)^6 \equiv (\mathrm{Ne}),$	zárt héj
11	N	$(\mathrm{Ne})\ (3s)^1$	
12	Mg	$(\mathrm{Ne})\ (3s)^2$	
13	Al	$(\mathrm{Ne})\ (3s)^2(3p)^1$	
14	Si	$(\mathrm{Ne})\ (3s)^2(3p)^2$	
15	P	$(\mathrm{Ne})\ (3s)^2(3p)^3$	
16	S	$(\mathrm{Ne})\ (3s)^2(3p)^4$	
17	Cl	$(\mathrm{Ne})\ (3s)^2(3p)^5$	
18	Ar	$(\mathrm{Ne})\ (3s)^2(3p)^6 \equiv (\mathrm{Ar}),$	zárt héj
19	K	$(\mathrm{Ar})\ (4s)^1$	
20	Ca	$(\mathrm{Ar})\ (4s)^2$	
21	Sc	$(\mathrm{Ar})\ (4s)^2(3d)^1,$	
	$\vdots$		

Az elektronfelhők





Vázlat

Nehézségek

A kvantummechanikában sokminden ellentmondásban van a hétköznap 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:

- Mártixmechanika (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*):

Vázlat

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:

$$\Psi \qquad \text{helyett} \qquad |\Psi\rangle$$

$$\varphi \qquad \text{helyett} \qquad |\varphi\rangle$$

(A fentiek kiejtése ket-pszi, ket-fí.)

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:

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

Itt a * a komplex konjugálást jelenti.
Az alábbi jelölés értelmezése:

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

Részecske hullámfüggvénye

Egy dimenziós eset időfüggés 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)

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

Vázlat

Mérés a részecskefizikában

A fizikai mennyiségeknek lineáris operátorok felelnek meg. Csak olyan esetben kapok minden méréskor azonos értéket, hogyha az állapotfüggvény az operátor sajátfüggvénye. Ilyenkor a sajátértéket kapjuk méréskor.
Ha az állapotfüggvény több sajátfüggvény lineáris kombinációja:

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

Akkor az összegzett sajátfüggvények sajátérétékeinek 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 $\hat{p} = \frac{\hbar}{i}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}$ operátor felel meg.
Az impulzus sajátfüggvényei $|\varphi(x)\rangle = re^{ikx}$ alakú függvények lesznek.

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

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

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

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 ∇-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:

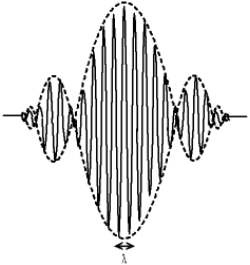
$$|\varphi(x,y,z)\rangle = e^{i(k_x \cdot x + k_y \cdot y + k_z \cdot z)} = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$$

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 Δx pontosságának és a lendületmérés Δp_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)

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:

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

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.

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 impulzusmérés tetszőleges pontossággal elvégezhető, mert a kettő operátora felcserélhető egymással, a kommutátoruk nulla.

Vázlat

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

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

A ∂_x^2 az x-szerinti második parciális deriváltat jelöli, a ∂_y^2 és ∂_z^2 hasonlót, 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:

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

Levezethető, hogy ilyen megoldások esetén:

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

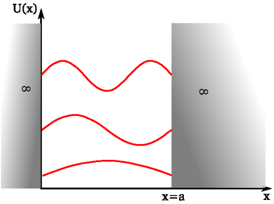
amit időfüggetlen Schrödinger-egyenletnek is szokás nevezni. Beírva a $\hat{H}$ értékét, csak egy dimenziót véve, és némileg átrendezve kapjuk a következő dia képletét.

A Schrödinger-egyenlet ($\cancel{t}$, 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.

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

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

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, α-bomlás magyarázata, alagútmikroszkóp