

Néhány mozgás kvantummechanikai tárgyalása

Mozzanatok:

A Schrödinger-egyenlet felírása

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

Hamilton-operátor megállapítása

a kinetikus energiaoperátor felírása 1, 2 vagy 3 dimenziós mozgásra,

Descartes-féle koordinátarendszerben

szükség esetén áttérés (gömbi) polárkoordinátarendszerre

a potenciális energiaoperátor megállapítása az adott mozgásra

kiindulás: klasszikus fizikai összefüggések

A Schrödinger-egyenlet megoldása, ill. annak elemzése

Sajátfüggvények – határfeltételek – kvantumszámok

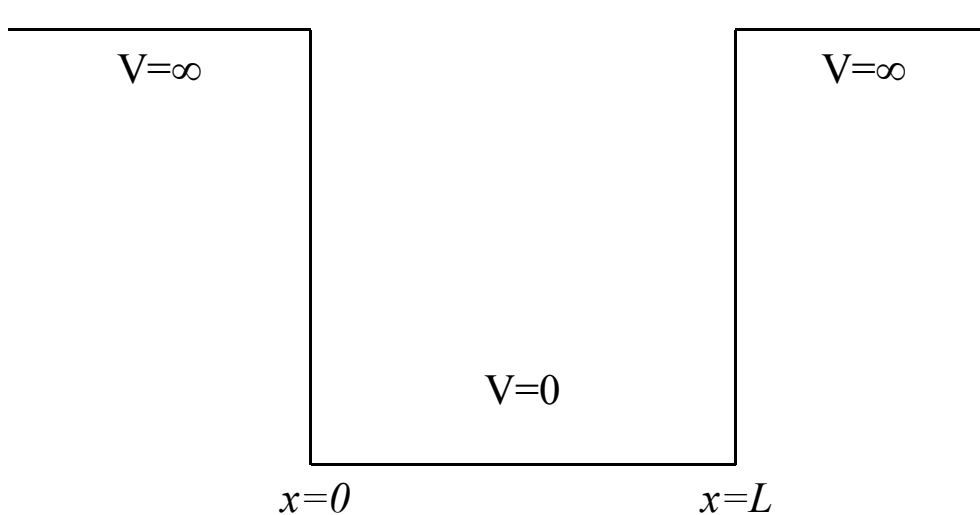
Valószínűségi sűrűségfüggvény elemzése

Sajátértékek (kvantáltak)

Más operátorok sajátértékei

A Heisenberg-elv érvényesülése

Haladó mozgás határok között (dobozba zárt részecske modell)



$$x < 0 \text{ és } x > L$$

$$\Psi(x) = 0$$

A hullámfüggvény folytonossága megköveteli, hogy

$$\Psi(0) = \Psi(L) = 0 \text{ legyen.}$$

$$x_n \rightarrow x_0 \quad (x_0 = 0, \text{ ill. } x_0 = L)$$

$$\Psi(x_n) \rightarrow \Psi(x_0)$$

$$\Psi = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \quad \text{általános megoldás, 1. szabad haladó mozgás}$$

Euler-egyenlet

$$e^{ikx} = \cos kx + i \sin kx \text{ és } e^{-ikx} = \cos kx - i \sin kx$$

$$\Psi = A \cos kx + Ai \sin kx + B \cos kx - Bi \sin kx$$

$$= (A + B) \cos kx + (A - B)i \sin kx = D \cos kx + C \sin kx$$

$$\Psi(0) = 0 \quad \text{határfeltételből}$$

$$D = 0 \quad \text{mert } \cos 0 = 1$$



$$\Psi = C \sin kx$$

$$\Psi(L) = 0 \quad \text{határfeltételből}$$

$$\Psi(L) = C \sin kL = 0$$

$C = 0$ fizikai szempontból értelmetlen,
mert akkor a hullámfüggvény mindenütt
zérus lenne, azaz a részecske nem lenne
sehol

$$\sin kL = 0$$

$$kL = n\pi \longrightarrow k = n\pi / L$$

**n értéke 0 (értelmetlen)
pozitív egész szám**

$$E = \frac{k^2 \hbar^2}{2m} = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{L^2 \cdot 2m \cdot 4\pi^2} = \frac{n^2 \hbar^2}{8mL^2} = E_n$$

Az energia kvantált!!

n : kvantumszám

Zéruspont-energia (energia a legalacsonyabb energiájú állapotban, akár az abszolút 0 fokon is rendelkezik ezzel a részecske)

$$E_1 = h^2/8mL^2$$

Heisenberg-elv érvényesülése: ha a kinetikus energia zérus lenne, akkor az impulzus biztosan zérus lenne, és a részecske helyzete teljesen bizonytalan lenne.

Ám a részecske helyzete nem teljesen bizonytalan, mert hiszen véges tartományban mozog – impulzusa sem biztosan zérus, mert $E \neq 0$.

A szomszédos energiaszintek távolsága

$$\Delta E = E_{n+1} - E_n = [(n+1)^2 - n^2] \cdot h^2/8mL^2 = (2n+1) \cdot h^2/8mL^2$$

$$L \rightarrow \infty \quad \Delta E \rightarrow 0$$

Ez megfelel annak a tapasztalatnak, hogy a makrovilágban a haladó mozgás kinetikus energiája folytonosan változik

Normáljuk a hullámfüggvényt!

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x) \Psi(x) dx = 1 \quad \text{teljesüljön.}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} C \cdot \Psi^*(x) \cdot C \cdot \Psi(x) dx = C^2 \cdot \int_0^L \sin^2 kx dx = C^2 \cdot \int_0^L \frac{1 - \cos 2kx}{2} dx = C^2 \cdot \int_0^L \frac{1}{2} dx - C^2 \frac{1}{2} \int_0^L \cos 2kx dx =$$

$$C^2 \cdot \frac{1}{2} [x]_0^L - C^2 \cdot \frac{1}{2} \left[\frac{1}{2k} \sin 2kx \right]_0^L = C^2 \cdot \frac{L}{2}$$

$$k = n\pi / L$$

$$C^2 \cdot \frac{L}{2} = 1, \text{ ebből } C = \sqrt{\frac{2}{L}}$$

A $\sin^2 kx$ függvény átalakítása:

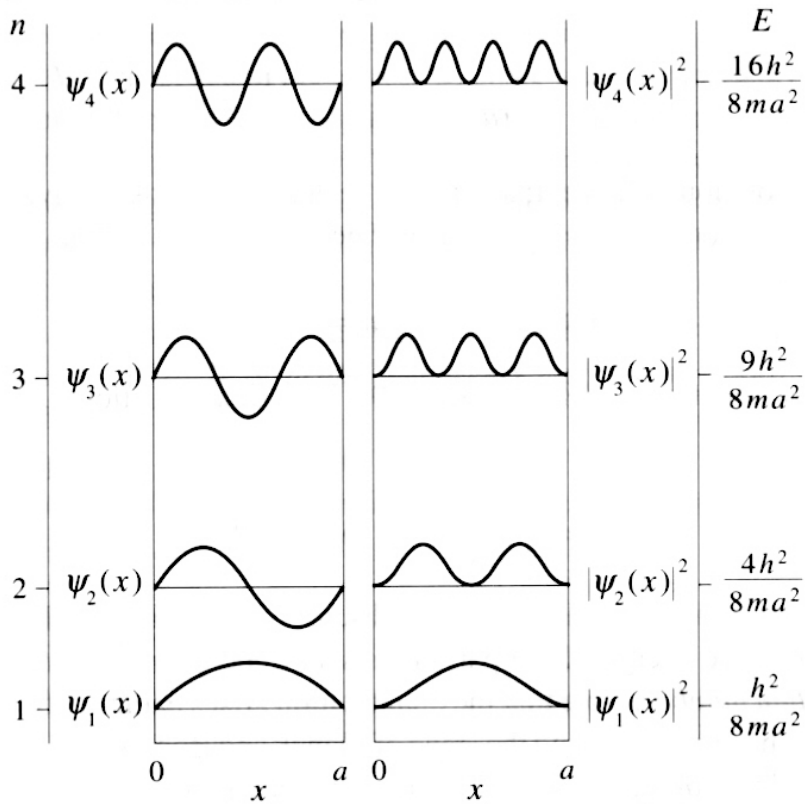
$$\cos^2 \alpha - \sin^2 \alpha = \cos 2\alpha \text{ és } \cos^2 \alpha + \sin^2 \alpha = 1, \text{ ahol } \alpha = kx$$

$$\cos^2 \alpha = 1 - \sin^2 \alpha$$

$$1 - 2\sin^2 \alpha = \cos 2\alpha$$

$$\sin^2 \alpha = (1 - \cos 2\alpha)/2$$

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



Csomópontok száma: $(n - 1)$

a hullámfüggvény értéke 0

a pont kis környezetében előjelet vált

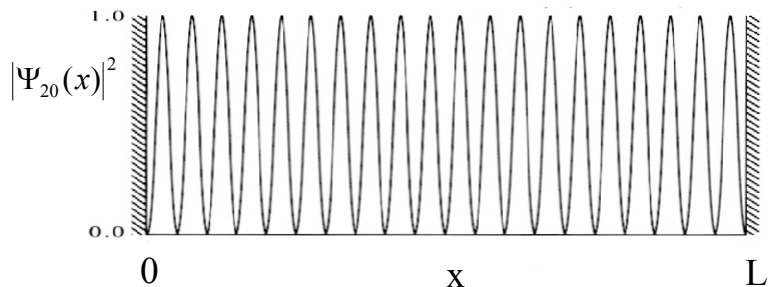
ha $n \rightarrow \infty$, a részecske

minden pont környezetében

ugyanannyi időt tölt el.

Korrespondencia-elv:

végtelen nagy kvantumszámoknál a kvantummechanikai leírás visszaadja a klasszikus mechanikai leírás eredményét.



A hullámfüggvény nem sajátfüggvénye az **impulzus**-operátornak (a sinusfüggvény deriváltja a cosinusfüggvény).

Felírható-e az impulzusoperátor sajátfüggvényeinek lineáris szuperpozíciójaként?

$$e^{ikx} = \cos kx + i \sin kx \text{ és } e^{-ikx} = \cos kx - i \sin kx$$

$$e^{ikx} - e^{-ikx} = 2i \sin kx$$

$$\sqrt{\frac{2}{L}} \cdot \sin kx = \sqrt{\frac{2}{L}} \cdot \frac{1}{2i} \cdot (e^{ikx} - e^{-ikx})$$

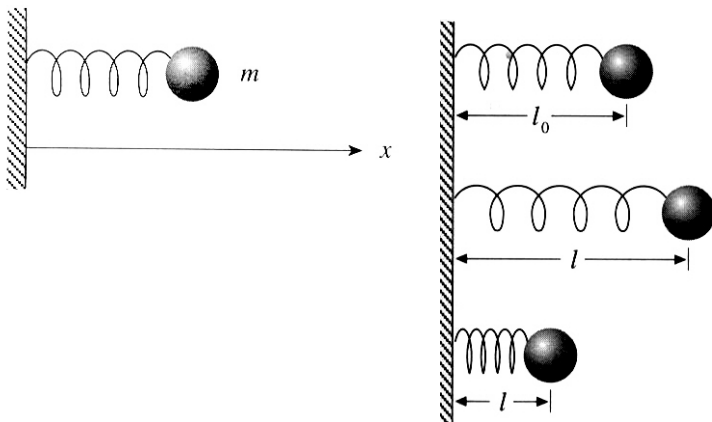
Igen.

Az együtthatók csak előjelükben térnek el, négyzetük tehát megegyezik.

Az impulzus

balról jobbra haladva	$k \cdot \hbar = \frac{n\pi}{L} \cdot \frac{h}{2\pi} = \frac{nh}{2L}$	50 %	} valószínűséggel
jobbról balra haladva	$-k \cdot \hbar = -\frac{n\pi}{L} \cdot \frac{h}{2\pi} = -\frac{nh}{2L}$	50 %	

A harmonikus oszcillátor (egydimenziós)

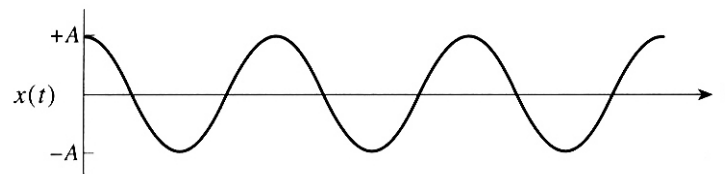


$$F = -k \cdot x \quad F = -\frac{dV}{dx}$$

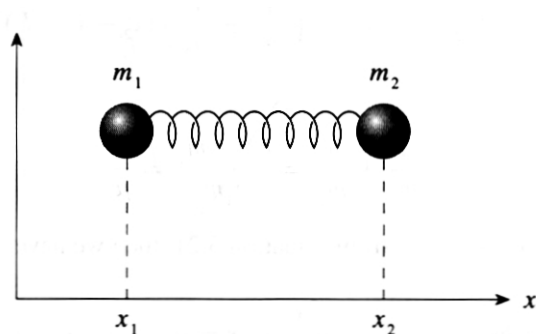
$$dV = kx dx$$

$$V = \int kx dx = \frac{1}{2} kx^2 + \text{konstans} = \frac{1}{2} kx^2$$

$$x(t) = A \cos \omega t$$



Kétatomos molekula rezgése



$$\omega = \sqrt{\frac{k}{\mu}}$$

$$\text{ahol } \frac{1}{\mu} = \frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2}$$

μ a redukált tömeg

$$\omega = \sqrt{\frac{k}{m}} \quad \text{a körfrekvencia}$$

Schrödinger-egyenlet:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{d^2\Psi}{dx^2} + \frac{1}{2}kx^2\Psi = E\Psi$$

$$E_v = \left(v + \frac{1}{2}\right) \cdot \hbar \cdot \omega = \left(v + \frac{1}{2}\right) \cdot h \cdot \nu$$

ahol $v = 0, 1, 2, 3, \dots$ a rezgési kvantumszám

$$\omega = \sqrt{\frac{k}{m}} \quad \text{a körfrekvencia, } \nu \text{ pedig a rezgés sajátfrekvenciája.}$$

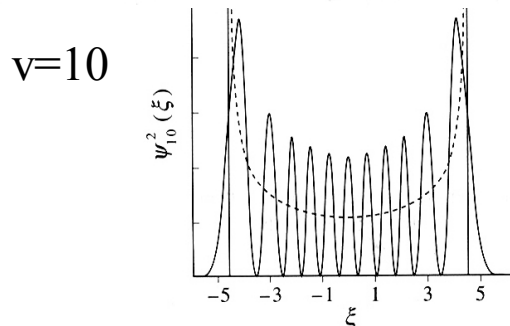
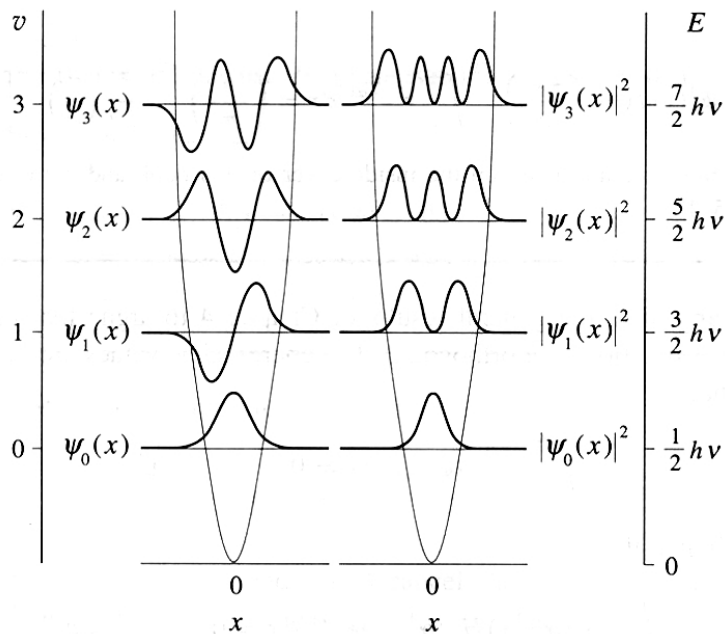
Zéruspont-energia:

$$E_0 = \frac{1}{2} h\nu$$

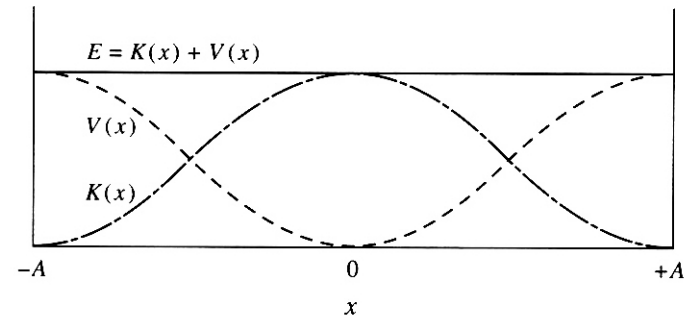
Magyarázat: a kötött állapot miatt a részecske helyzete nem teljesen határozatlan, ezért impulzusa nem lehet határozottan nulla, így energiája sem lehet zérus.

A hullámfüggvény

$v=0$ rezgési kvantumszámnál Ψ és $\Psi^*\Psi$ maximuma az egyensúlyi helyzetnél van, $v>0$ esetekben a „fordulópontoknál”. A rezgési kvantumszámmal megegyező számú csomópont.



Korrespondencia-elv



„Fordulópontok”: a teljes rezgési energia potenciális energia formájában van jelen, a kinetikus energia zérus.

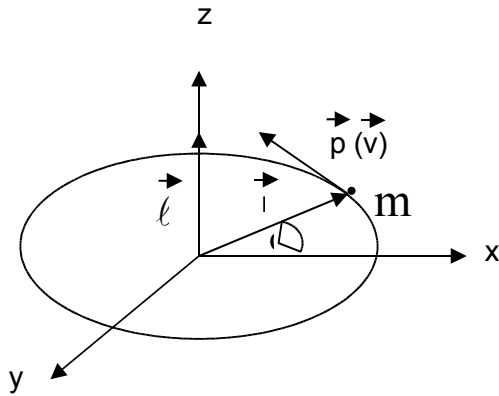
$$E_v = V = \frac{1}{2} k x_f^2 \longrightarrow x_f = \pm \sqrt{\frac{2E_v}{k}}$$

Tartózkodás a „tiltott” tartományban
(a fordulópontokon kívül)

$$\int_{-\infty}^{-x_f} \Psi_v^* \Psi_v dx \cong 0.08$$

$$\int_{x_f}^{\infty} \Psi_v^* \Psi_v dx \cong 0.08$$

Körmozgás (kétdimenziós forgómozgás)



„Merev” rotátor:

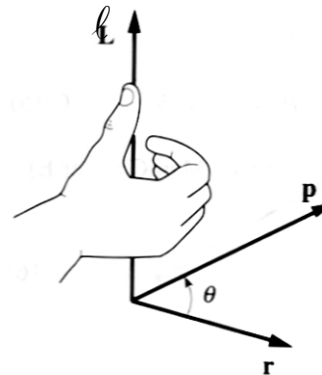
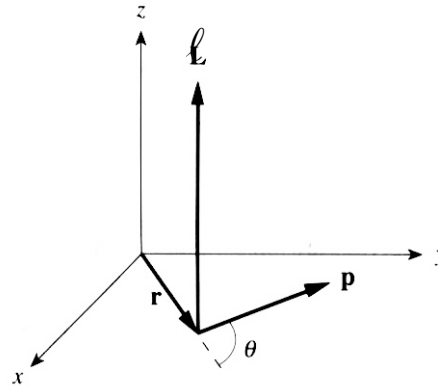
r = állandó.

$$V = 0$$

Impulzus (lendület) $\vec{p} = m \cdot \vec{v}$

m a tömegpont tömege

Impulzusmomentum (perdület) $\vec{\ell} = \vec{r} \times \vec{p}$



Schrödinger-egyenlet:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) \Psi = E \Psi$$

Egyszerűsíti a matematikai leírást, ha polárkoordinátarendszerre, pontosabban hengerkoordinátarendszerre térünk át.

Hengerkoordinátarendszer: r és ϕ polárkoordináták
 r állandó, így egyetlen koordinátával leírható: ϕ

□ ANALÓGIA AZ EGYENES MENTÉN TÖRTÉNŐ MOZGÁSSAL!

Megoldás

$$\Psi_{m_l}(\phi) = N \cdot e^{im_l \phi}$$

k helyett az m_l

$$E_{m_l} = \frac{m_l^2 \hbar^2}{2I}$$

p impulzus helyett az ℓ impulzusmomentum

m tömeg helyett az $I = mr^2$ tehetetlenségi nyomaték

Mekkora m_ℓ értéke?

A hullámfüggvény egyértékű függvény (valószínűségi értelmezés),
használjuk ki ezt a tulajdonságát!

$$\Psi(\varphi) = \Psi(\varphi + 2\pi)$$

$$\Psi(\varphi) = N \cdot e^{im_\ell \varphi}$$

$$\Psi(\varphi + 2\pi) = N \cdot e^{im_\ell (\varphi + 2\pi)} = N \cdot e^{im_\ell \varphi} \cdot e^{im_\ell 2\pi}$$

$$N \cdot e^{im_\ell \varphi} = N \cdot e^{im_\ell \varphi} \cdot e^{im_\ell 2\pi} \quad \text{csak akkor teljesülhet, ha} \quad e^{im_\ell 2\pi} = 1$$

$$e^{im_\ell 2\pi} = (e^{i\pi})^{2m_\ell} = (-1)^{2m_\ell}$$

$$e^{i\pi} = \cos\pi + i\sin\pi = -1 + 0 = -1$$

$$(-1)^{2m_\ell} = 1 \quad \text{ha a } 2m_\ell \text{ hatványkitevő páros szám vagy } 0$$

$$m_\ell = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad \textbf{Kvantumszám!}$$

Kvantált energiaszintek!

Elfajult (degenerált) állapotok

különböző hullámfüggvényekhez ugyanakkora
energia tartozik.

$$E_{m_\ell} = \frac{m_\ell^2 \hbar^2}{2I}$$

További analógiák az egyenes mentén történő mozgással

Az impulzusmomentum-operátor

$$\hat{\ell}_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi}$$

A tömegpont impulzusmomentuma

$$\hat{\ell}_z \cdot \Psi = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi} \cdot N \cdot e^{im_l \varphi} = \frac{\hbar}{i} \cdot i \cdot m_l \cdot N \cdot e^{im_l \varphi} = \hbar \cdot m_l \cdot N \cdot e^{im_l \varphi}$$

A sajátérték, $\ell_z = m_l \cdot \hbar$

A Heisenberg-elv a körmozgás esetében

Adott m_l esetén az adott hullámfüggvényhez egyféle
impulzusmomentum tartozik: az **teljesen meghatározott**.

A részecske **helyzete**:

$$\Psi_{m_l}(\varphi) = N \cdot e^{im_l \varphi} \quad \Psi_{m_l}^*(\varphi) = N \cdot e^{-im_l \varphi}$$

$$\Psi^* \cdot \Psi = N^2 \cdot e^{im_l \varphi - im_l \varphi} = N^2 \cdot e^0 = N^2 \quad \text{teljesen határozatlan.}$$

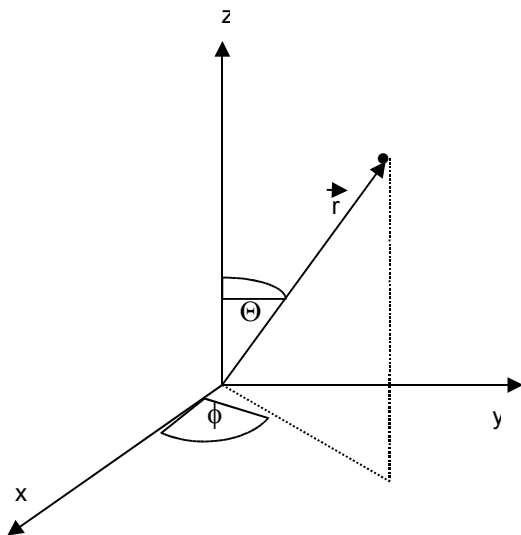
Gömbi mozgás (háromdimenziós forgómozgás)

Az m tömegpont egy r sugarú gömb felületén mozog. A rotátor merev (r =állandó), és $V=0$.

A Schrödinger-egyenlet

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

Gömbi polárkoordináta-rendszer



A $d\tau$ térfogatelem

$$d\tau = r^2 \cdot dr \cdot \sin\Theta \cdot d\Theta \cdot d\phi$$

A teljes térre vett integrálás határai

r szerint 0 és ∞

Θ szerint 0 és π

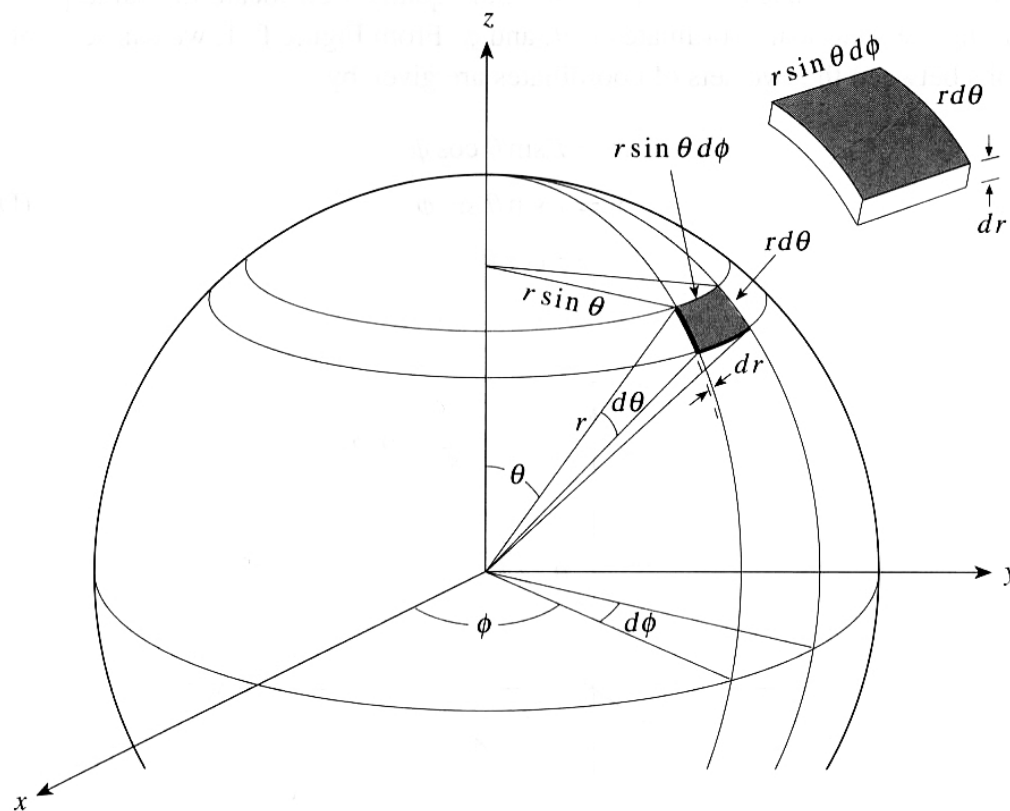
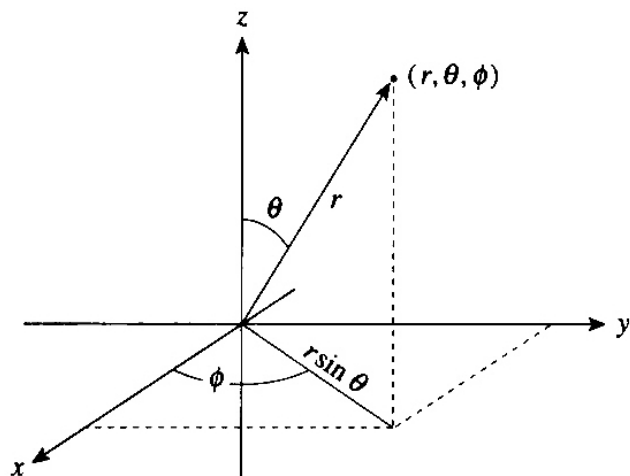
ϕ szerint 0 és 2π .

A térfogatelem gömbi polárkoordináta-rendszerben

$$x = r \sin \theta \cos \phi$$

$$y = r \sin \theta \sin \phi$$

$$z = r \cos \theta$$



Megoldások: az ún. **gömbfüggvények**

$$\Psi_{\ell, m_\ell} = Y_{\ell, m_\ell}(\Theta, \varphi)$$

$$Y_{\ell, m_\ell} = P_{\ell, m_\ell}(\Theta) \cdot e^{im_\ell \varphi}$$

$P_{\ell, m_\ell}(\Theta)$ $\sin\Theta$ és $\cos\Theta$ polinomja

$$\ell = 0, 1, 2, \dots$$

$m_\ell = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm \ell$ mágneses

kvantumszám; $(2\ell+1)$ -féle érték

A gömbfüggvények normáltak:

$$\int_0^{2\pi} \int_0^\pi Y_{\ell, m_\ell}^*(\Theta, \varphi) \cdot Y_{\ell, m_\ell}(\Theta, \varphi) \sin \Theta d\Theta d\varphi = 1$$

Energia sajátértékek

$$E_\ell = \frac{|\vec{l}|^2}{2I} = \frac{\ell(\ell+1) \cdot \hbar^2}{2I}$$

$(2\ell+1)$ -szeresen degenerált energiaszintek

Bebizonyítható, hogy

$$\hat{\ell}_z \cdot Y_{\ell, m_\ell}(\Theta, \varphi) = m_\ell \hbar \cdot Y_{\ell, m_\ell}(\Theta, \varphi)$$

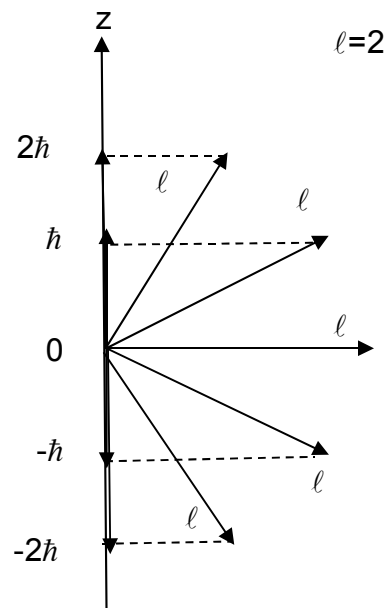
$$\hat{\ell}^2 \cdot Y_{\ell, m_\ell}(\Theta, \varphi) = \ell(\ell + 1)\hbar^2 \cdot Y_{\ell, m_\ell}(\Theta, \varphi)$$

Sajátértékek

$$\ell_z = m_\ell \hbar$$

$$|\vec{\ell}|^2 = \ell(\ell + 1)\hbar^2$$

Íránykvantálás

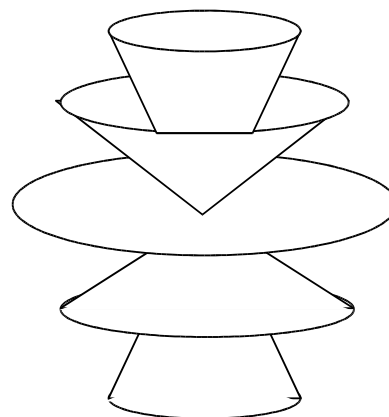


az ℓ vektor abszolútértéke (hossza)

$$|\vec{\ell}| = \sqrt{\ell(\ell + 1)}\hbar$$

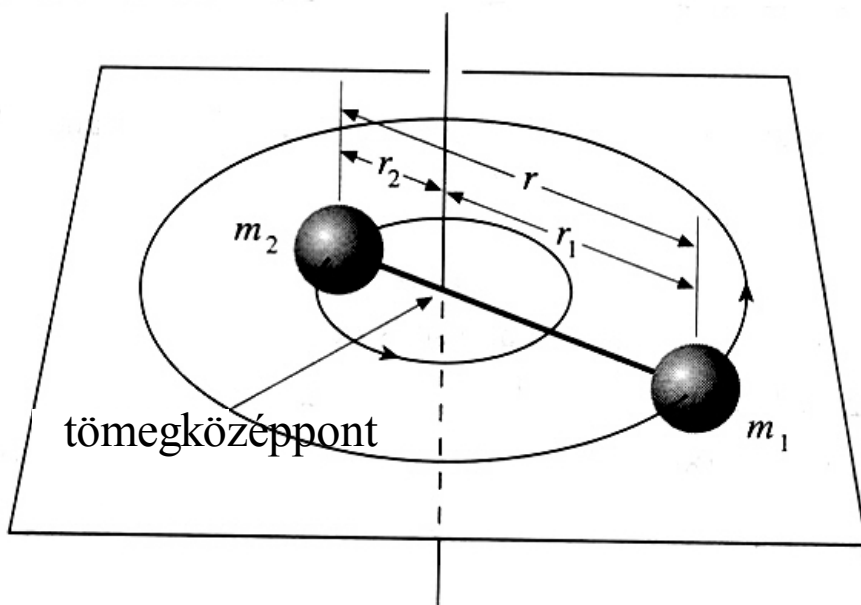
Az impulzusmomentum z- és x-, ill. z- és y-komponensének operátorai nem fölcserélhetőek, tehát a megfelelő komponensek komplementer fizikai mennyiségek: érvényes rájuk a Heisenberg-elv. Mivel a z-komponens teljesen meghatározott, az x- és y-komponens teljesen határozatlan.

Az impulzusmomentum z-tengelyre eső vetülete csak meghatározott értékeket vehet föl.



A gömbi mozgás modelljének fölhasználása

Kétatomos molekula forgása tömegközéppontján átmenő tengely körül



$$E_J = \frac{|J|^2}{2I} = \frac{J(J+1) \cdot \hbar^2}{2I}$$

$$I = \mu \cdot r^2$$

ahol μ a redukált tömeg

Az atomszerkezet kvantummechanikai leírása