

1. A kvantummechanika alapjai

1.1. A klasszikus fizika tudományos világképe

- 1) Vannak „anyagok” vagy testek, amelyek tömeggel és impulzussal rendelkeznek.

A mikrorészecskék közül ilyenek pl. az elektronok

Vannak hullámok, amelyekre jellemző az elhajlás és az interferencia.

Ilyen a fény, amely elektromágneses sugárzás.

Ezek mereven elkülönülő jelenségek.

- 2) Bármely mozgás energiája bármekkora értéket fölvehet.



Energiafelvétel és energialeadás is tetszőleges lehet.

- 3) Ismerve a részecske helyzetét és impulzusát egy kezdeti pillanatban, abból pontosan megjósolható, hogy egy tetszőleges t időpillanatban mi lesz a részecske helyzetvektora és impulzusa.

A XIX. sz. végén és a XX. sz. elején az elemi részecskék, atomok és molekulák energialeadásával és –fölvételével, valamint a fény természetével és az „anyaggal” való kölcsönhatásaival kapcsolatban számos olyan kísérleti tény merült föl, amely ellentétben áll ezzel a világképpel. Magyarázatukra született meg a kvantummechanika.

1.2. A klasszikus fizika korlátai az atomi szintű jelenségek leírásában. A kvantummechanika születése

1.2.1. A feketetest-sugárzás

Abszolút fekete test: bármilyen frekvenciájú sugárzást elnyel.

Adott hőmérsékleten bármely más testnél nagyobb a fénykibocsátó képessége.

Modellje: belülről bekormozott doboz, amelyen egy apró lyuk van (az itt kibocsátott sugárzás energiáját mérik, amelyet számszerűen a sugárzás energiasűrűségével, azaz az egységnyi térfogatra és hullámhosszra jutó energiával jellemeznek; egysége J/m^4).

A sugárzást a doboz falának hevítésével idézik elő.

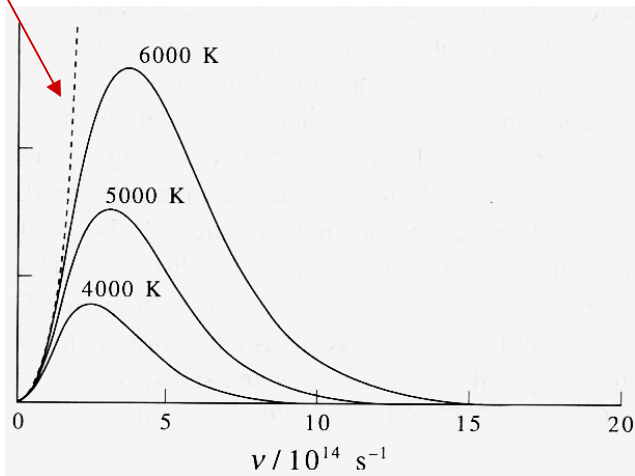
Klasszikus fizika alapján

A ν frekvenciájú fényt ν sajátfrekvenciájú oszcillátorok bocsátják ki. Ezeket a hőmozgás gerjeszti, amelynek energiája egyenletesen oszlik meg az oszcillátorok között. Tehát valamennyi oszcillátor gerjesztődik és sugároz, a kis- és nagyfrekvenciájúak egyaránt.

Kísérleti tapasztalat

Rayleigh – Jeans-törvény

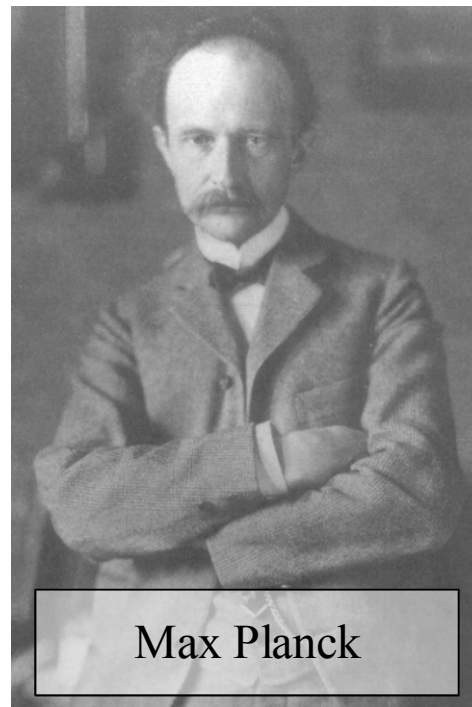
csak kis frekvenciáknál érvényes



Planck-féle kvantumhipotézis

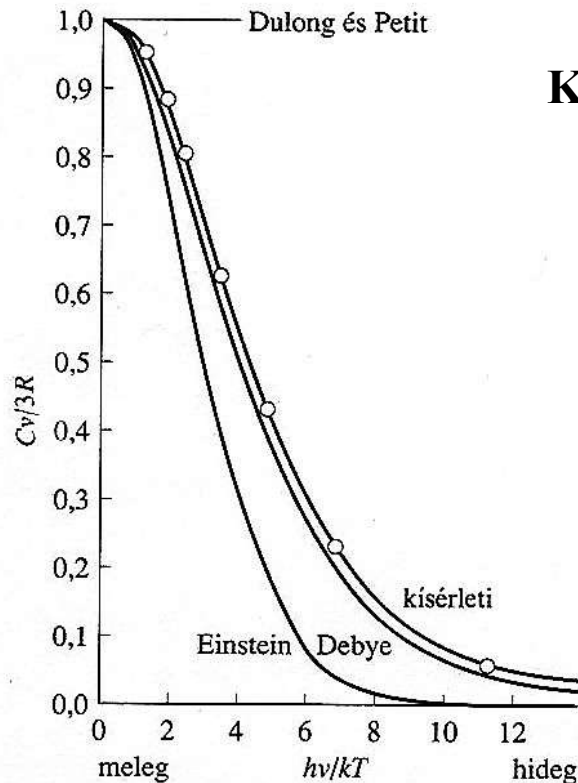
A ν frekvenciájú oszcillátorok energiája *nem lehet akármekkora*, csakis $n \cdot h\nu$, ahol n egész szám.

Miért nem sugároznak a nagy frekvenciájú oszcillátorok?



A nagy frekvenciájú oszcillátorok gerjesztéséhez ugyan a hőmérséklet növelésekor több termikus energia jut (lásd a görbék eltolódását a nagyobb frekvenciák felé a T növelésekor – vörös izzásból fehér izzásba mennek át a sugárzó testek). Egy frekvencia határon túl azonban megszűnik az oszcillátorok gerjeszthetősége és így sugárzása is.

1.2.2. Szilárd testek hőkapacitásának hőmérsékletfüggése



Klasszikus fizika: ekvipartíció tétele

Termikus egyensúlyban lévő részecskerendszer teljes energiakifejezésében minden négyzetes tag egy részecskére jutó átlagértéke $kT/2$, ahol k a Boltzmann-állandó, T a termodinamikai hőmérséklet

Egydimenziós oszcillátor teljes energiája

2 négyzetes tagot tartalmaz,
ezért energiája kT

$$H = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{1}{2} k \cdot x^2$$

3 dimenziós oszcillátor energiája $3kT$ (x , y , z irányú elmozdulás és az impulzusvektor x , y , z irányú komponensei miatt).

1 mól oszcillátor belső energiája $U_m = N_A \cdot 3 \cdot k \cdot T = 3 RT$

$$C_v = \left(\frac{\partial U_m}{\partial T} \right)_v = 3R \quad C_v\text{-nek állandónak kellene lennie!}$$

A csökkenés a Planck-hipotézis alapján magyarázható: alacsony hőmérsékleten nem elegendő a termikus energia az oszcillátorok gerjesztéséhez, így energiát sem fölvenni, sem leadni nem képesek.

1.2.3. Fényelektromos hatás

A jelenség: ultraibolya fény hatására a fémek felületéről elektronok lépnek ki.

Klasszikus fizika:

A sugárzás elektromos tere a fény haladási irányára merőlegesen oszcillál. A fény intenzitása az amplitúdó négyzetével arányos. Ha nő a fény intenzitása, nő az amplitúdó. Ezzel együtt a fém felületén az elektron is növekvő amplitúdóval oszcillál, mígnem leszakad a fém felületéről, annál nagyobb kinetikus energiára téve szert, minél nagyobb volt a fény intenzitása.

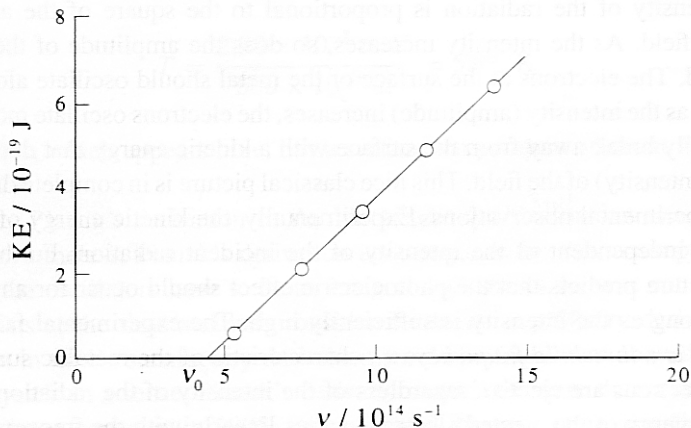
Tehát az **várható**, hogy bármekkora frekvenciájú fény kiváltja az elektronok kilépését, ha elég nagy az intenzitása, és az elektronok kinetikus energiája a fényintenzitással együtt nő.

Kísérleti tények:

Elektronok csak akkor lépnek ki, ha a sugárzás frekvenciája meghalad egy küszöbértéket.

Ha $\nu > \nu_0$, akármilyen kis intenzitású fény hatására azonnal elektronok lépnek ki.

Az elektronok kinetikus energiája nem függ a fény intenzitásától, hanem annak frekvenciájával arányos. A kilépő elektronok *száma* arányos a fényintenzitással.



Einstein:

Továbbfejlesztette Planck kvantumhipotézisét azzal, hogy nemcsak az atomi oszcillátorok adják le a sugárzási energiát $h\nu$ adagokban, hanem a kisugárzott **fény is $h\nu$ energiaadagokból (fotonokból) áll.** (A fény részecskejellege)

Az elektron kinetikus energiája a foton energiájának és a kilépési munkának a különbsége:

$$\frac{1}{2} m_e v_e^2 = h\nu - \varphi = h\nu - h\nu_0$$

1.2.4. Compton-effektus

A jelenség: a röntgensugarak elektronokon szóródnak, ami a sugárzás hullámhosszának csökkenésével jár. A csökkenés a szórási szögtől függ.

Magyarázat: a fotonok impulzussal rendelkező *részecskék*. Más részecskékkel (az elektronokkal) ütközve az impulzus- és energiamegmaradás törvénye érvényesül. A fotonok impulzusa (Einstein):

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

1.2.5. Dualizmus a mikrovilágban

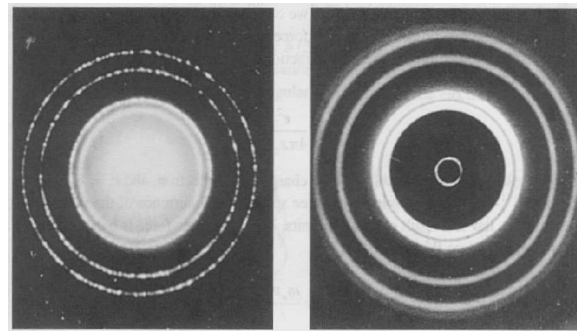


de Broglie anyaghullámai:

Feltételezte, hogy az anyagi világ egységes: amint a fény kettős természetű (bizonyos körülmények között hullámként, más körülmények között részecskék áramaként viselkedik), ugyanúgy az impulzussal rendelkező részecskékhez, pl. az elektronhoz vagy más testhez rendelhető egy hullám. Ennek hullámhossza és a test impulzusa között ugyanaz az összefüggés érvényes:

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

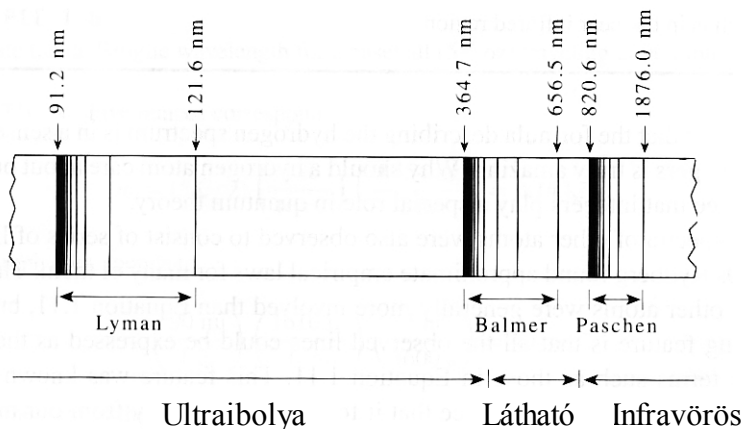
Kísérleti bizonyíték



Diffrakció alumínium fólián

Röntgensugárzás Elektronnyaláb

1.2.6. A H-atom vonalas színeke



A hidrogénatomokkal nagy energiát közöltek, majd a kisugárzott fényt hullámhossza szerint felbontották és fényérzékeny lemezen mutatták ki.

Következtetés:

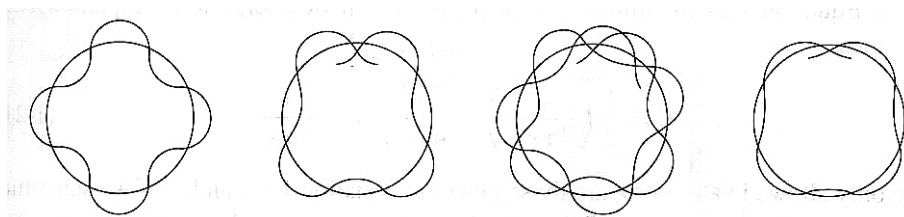
A színekp vonalas, vagyis a H-atom nem ad le akármekkora energiát, tehát meghatározott diszkrét energiaszintjei kell legyenek.



Niels Bohr

Bohr, fölhasználva de Broglie anyaghullám-föltételezését, ki tudta mutatni, hogy csak bizonyos energiák megengedettek a H-atom számára, és ezek stacionárius állapotok (az elektron nem zuhan be az atommagba, amint azt a klasszikus fizika alapján várhatnánk).

Alapföltételezés: az elektron olyan körpályán mozog, amelynek kerülete az elektrnhullám hullámhosszának egész számú többszöröse. Ellenkező esetben a hullám amplitúdója csökken, majd kioltódik.



1.3. A kvantummechanika néhány fontos alapelve

1.3.1. A hullámfüggvény

Egy kvantummechanikai rendszer állapotát tökéletesen jellemzi egy $\Psi(x)$ függvény, amelyben x a részecske koordinátája. A rendszerre vonatkozó minden lehetséges információ levezethető a $\Psi(x)$ hullámfüggvényből, amelynek **valószínűségi** tartalma van (Born-féle értelmezés).

$\Psi^* \Psi = |\Psi|^2$ az ún. valószínűségi sűrűségfüggvény.

$\Psi^* \Psi d\tau$ a tér egy pontjában megadja annak a valószínűségét, hogy a részecskét ezen pont egy kicsiny $\delta\tau = dxdydz$ környezetében találjuk

$\int_V \Psi^* \Psi d\tau$ a véges V térfogatban való tartózkodás valószínűsége
Ez $d\tau = dxdydz$ esetén pl. egy hármas integrál, amelynek értéke 0 és 1 közé esik.

$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \Psi d\tau = 1$ a teljes térre vett integrál pedig megadja annak a valószínűségét, hogy a részecske valahol a térben van (ez biztos esemény, amelynek valószínűsége 1).

Mindez akkor igaz, ha a hullámfüggvény normált.

Egy függvény normált, ha abszolút értékének a teljes térre vett négyzetintegrálja 1, azaz egyváltozós függvény esetén

$$\int_{-\infty}^{\infty} f^*(x)f(x)dx = 1$$

Ha ez nem áll fenn, de a négyzetintegrál értéke véges, akkor a függvényt normálhatjuk.

Normálás: a függvény normálttá tétele. Megkeressük azt az N konstansot, az ún. normálási tényezőt, amellyel a függvényt megszorozva, az új függvényre teljesül a normálási feltétel.

A(z egyváltozós hullám)függvény normálása:

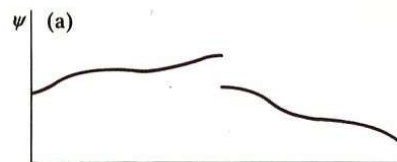
$$\int_{-\infty}^{\infty} (N\Psi(x))^* N\Psi(x)dx = N^2 \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x)\Psi(x)dx = 1$$

$$N = \sqrt{\frac{1}{\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x)\Psi(x)dx}}$$

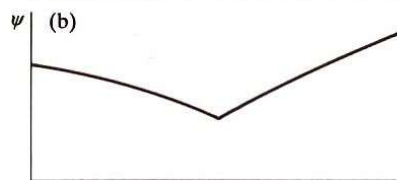
A valószínűségi értelmezés bizonyos követelményeket ró a hullámfüggvényre:

- folytonos legyen
- folytonos első deriváltja legyen
- egyértékű legyen
- majdnem mindenütt véges legyen (azaz ne legyen véges intervallumon végtelen)
- négyzetesen integrálható legyen (azaz a négyzetintegrálja ne legyen végtelen).

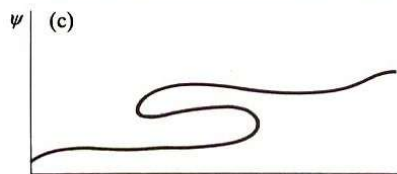
„Rossz” hullámfüggvények:



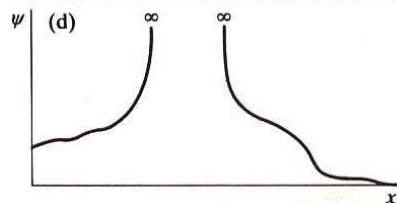
Nem folytonos.



Első deriváltja nem folytonos.



Többértékű.



Véges intervallumon végtelen.

1.3.2. Fizikai mennyiségek és operátorok. A Schrödinger-egyenlet.

A kvantummechanika másik alapelve, hogy

- 1) a fizikai mennyiségeket operátorokkal reprezentálja, vagyis a fizikai mennyiségekhez operátorokat rendel;
- 2) ezen operátorok sajátértékei az illető fizikai mennyiség mérhető értékeit adják meg.

Operátor

műveleti utasítás, amely egy függvényhez egy másik függvényt rendel, vagyis függvénytranszformáció:

$$\hat{\Omega}f = g$$

$$\hat{D}x^n = nx^{n-1}$$

pl. a differenciálás operátor, az x^n függvényhez az nx^{n-1} függvényt rendeli

Lineáris operátor (a kvantummechanikában ilyeneket alkalmaznak)

$$\hat{\Omega}(f + g) = \hat{\Omega}f + \hat{\Omega}g \quad \text{minden } f\text{-re és } g\text{-re teljesül}$$

$$\hat{\Omega}(cf) = c\hat{\Omega}f \quad \text{ahol } c \text{ valós vagy komplex szám, és } f \text{ tetszőleges}$$

Operátorok egyenlősége

$$\hat{\Omega}_1 = \hat{\Omega}_2 \quad \text{ha minden } f\text{-re teljesül, hogy} \quad \hat{\Omega}_1 f = \hat{\Omega}_2 f$$

Operátorok összege és különbsége

$$(\hat{\Omega}_1 \pm \hat{\Omega}_2)f = \hat{\Omega}_1 f \pm \hat{\Omega}_2 f$$

Operátorok szorzata és felcserélhetősége

$$(\hat{\Omega}_1 \hat{\Omega}_2)f = \hat{\Omega}_1(\hat{\Omega}_2 f) \quad \text{először hajtjuk végre a második operátor} \\ \text{által kijelölt transzformációt, majd az új} \\ \text{függvényt az első operátor szerint} \\ \text{transzformáljuk. Ha}$$

$$\hat{\Omega}_1 \hat{\Omega}_2 \neq \hat{\Omega}_2 \hat{\Omega}_1 \quad \text{az operátorok nem felcserélhetők}$$

$$\hat{\Omega}_1 \hat{\Omega}_2 = \hat{\Omega}_2 \hat{\Omega}_1 \quad \text{az operátorok felcserélhetők}$$

A kvantummechanikai operátorok értelmezési tartománya

mindazon függvények összessége, amelyek a

$-\infty, +\infty$ intervallumon vannak értelmezve
valós változójúak és komplex értékűek
abszolút értékük négyzetintegrálja véges, azaz

$$\int_{-\infty}^{\infty} f^*(x)f(x)dx < \infty$$

A kvantummechanikában alkalmazott legfontosabb operátorok

$$\hat{x} = x, \hat{y} = y, \hat{z} = z.$$

helykoordináták

$$\hat{p}_x = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}, \hat{p}_y = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y}, \hat{p}_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z}$$

impulzuskomponensek

$$\hat{\mathbf{p}} = \frac{\hbar}{i} \left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z} \right) = \frac{\hbar}{i} \nabla$$

impulzus

$$\hat{p}^2 = -\hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right)$$

impulzusnégyzet

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

kinetikus energia

$$\hat{V} = V.$$

potenciális energia

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V}$$

összes energia

Operátorok sajátfüggvényei és sajátértékei, sajátérték-egyenlet

$$\hat{\Omega} f = \omega f \quad \text{az operátor által kijelölt függvénytranszformáció az eredeti függvény konstansszorosát eredményezi}$$

Az olyan függvényeket, amelyekre ez teljesül, az operátor sajátfüggvényeinek, a megfelelő konstansokat az operátor sajátértékeinek nevezzük. Ez utóbbiak adják meg az operátor által reprezentált fizikai mennyiség mérhető értékeit.

Az operátort, sajátfüggvényét és sajátértékét tartalmazó, fentebbi típusú egyenlet az operátor sajátérték-egyenlete.

Schrödinger-egyenlet



Erwin Schrödinger

az összes energia operátorának, a ún. Hamilton-operátornak a sajátérték-egyenlete a Schrödinger-egyenlet:

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

Ennek megoldásával kaphatjuk meg a rendszer Ψ hullámfüggvényeit, valamint az ezeknek megfelelő E *energia-sajátértékeket* (a rendszer lehetséges, méréssel meghatározható energia-értékeit a legalacsonyabb energiájú, ún. alapállapotban, valamint a magasabb energiájú, ún. gerjesztett állapotokban).

A várható érték

A fizikai mennyiségek ún. várható értékének nevezik azt az átlagértéket, amely nagy számú mérés eredményeként adódik. A hullámfüggvény ismeretében ez is kiszámítható a következő, teljes térre vett integrál segítségével

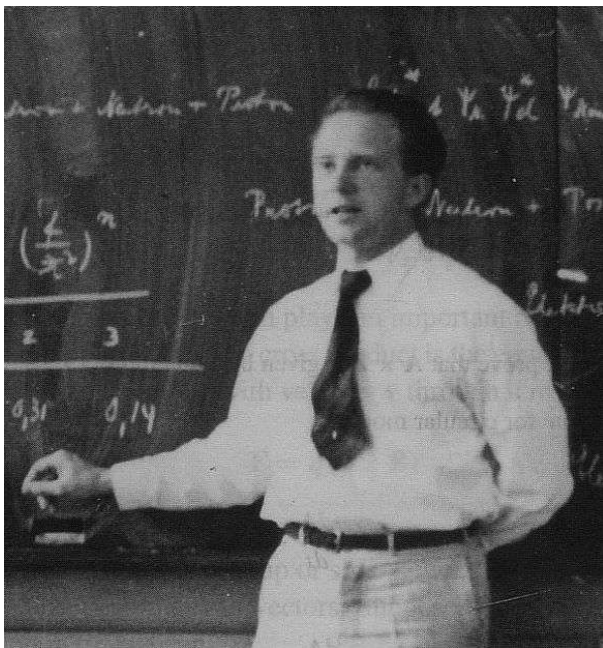
$$\langle \Omega \rangle = \int_{\text{teljes tér}} \Psi^* \hat{\Omega} \Psi d\tau$$

$\langle \Omega \rangle$ az Ω fizikai mennyiség várható értéke
 $\hat{\Omega}$ a fizikai mennyiséget reprezentáló operátor

1.3.3. A Heisenberg-féle határozatlansági elv

A kvantummechanika következő fontos alapelve:

vannak olyan fizikai mennyiség-párok, ún. *komplementer fizikai mennyiségek*, amelyek egyidejűleg nem határozhatók meg tetszőleges pontossággal.



Werner Heisenberg

A legfontosabb ilyen mennyiség-párok a hely és az impulzus, illetve az energia és az idő. Ha rendre Δp -vel, Δq -val, ΔE -vel, ill. Δt -vel jelöljük az impulzus, a hely, az energia, ill. az idő bizonytalanságát, a közöttük lévő relációkat a következőképpen adhatjuk meg

$$\Delta p \cdot \Delta q \geq \frac{\hbar}{2}$$

$$\Delta E \cdot \Delta t \geq \hbar$$

Felcserélhető-e a helyoperátor és az impulzusoperátor?

$$\hat{x}\hat{p}f = x \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} f = \frac{\hbar}{i} x \frac{df}{dx}$$

$$\hat{p}\hat{x}f = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} (x \cdot f) = \frac{\hbar}{i} f + \frac{\hbar}{i} x \frac{df}{dx}$$

NEM!

*A komplementer fizikai mennyiségek azok,
amelyeknek az operátorai nem felcserélhetők.*

hely és impulzus

energia és idő

impulzusmomentum z- és x-, ill. z- és
y-irányú komponense

1.3.4. Egyenes mentén való mozgás kvantummechanikai tárgyalása

Egy m tömegű részecske egy egyenes mentén, akadálytalanul mozog, potenciális energiája zérus. Ennek megfelelően a Hamilton-operátor megegyezik a kinetikus energia-operátorral. Így a mozgásra vonatkozó Schrödinger-egyenlet:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = E\Psi$$

Az ennek megoldásaként nyert hullámfüggvény: $\Psi = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$ (A és B konstans)

Az energia sajátértékek: $E = \frac{k^2 \hbar^2}{2m}$ k konstans, értéke tetszőleges

Ellenőrizzük, hogy a fentebbi függvény valóban sajátfüggvénye-e a Hamilton-operátornak!

$$\begin{aligned} \hat{H}\Psi (= \hat{T}\Psi) &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \{Ae^{ikx} + Be^{-ikx}\} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d}{dx} \{Aike^{ikx} + B(-ik)e^{-ikx}\} = \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \{Ai^2k^2e^{ikx} + Bi^2k^2e^{-ikx}\} = \frac{k^2\hbar^2}{2m} \{Ae^{ikx} + Be^{-ikx}\} = E\Psi \end{aligned}$$

Valóban visszakaptuk az eredeti függvény konstansszorosát, tehát a függvény a szabad haladó mozgást végző részecske Hamilton-operátorának sajátfüggvénye, a részecske hullámfüggvénye. A hullámfüggvény szorzója a részecske összes energiáját adja meg.

Vizsgáljuk meg, hogy a részecske hullámfüggvénye az impulzusoperátornak sajátfüggvénye-e!

Először azonban alakítsuk át a függvényt az $e^{i\phi} = \cos\phi + i\sin\phi$ Euler-egyenlet felhasználásával! (Itt $\phi = kx$) Legyen $A=B$!

$$\Psi = A(e^{ikx} + e^{-ikx}) = A[\cos kx + i \sin kx + \cos(-kx) + i \sin(-kx)] = 2A \cos kx,$$

$$\text{ugyanis } \cos(-kx) = \cos kx$$

$$\sin(-kx) = -\sin kx$$

$$\hat{p}\Psi = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} (2A \cos kx) = -\frac{\hbar}{i} 2A k \sin kx \neq \text{konst} \cdot 2A \cos kx$$

A haladó mozgást végző részecske hullámfüggvénye nem sajátfüggvénye az impulzusoperátornak: a fenti egyenletből nem tudjuk megállapítani a részecske lehetséges impulzusát.

Nézzük meg most, hogy a hullámfüggvény e^{ikx} és e^{-ikx} összetevői sajátfüggvényei-e az impulzusoperátornak!

$$\hat{p}e^{ikx} = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} e^{ikx} = ik \frac{\hbar}{i} e^{ikx} = k\hbar e^{ikx}$$

IGEN!

$$\hat{p}e^{-ikx} = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} e^{-ikx} = -ik \frac{\hbar}{i} e^{-ikx} = -k\hbar e^{-ikx}$$

Az impulzusoperátornak tehát az e^{ikx} és e^{-ikx} függvények sajátfüggvényei.

A sajátértékek: $k\hbar$ a részecske balról jobbra halad
 $-k\hbar$ a részecske jobbról balra halad

Jelen esetben a hullámfüggvény az impulzusoperátor sajátfüggvényeinek lineáris szuperpozíciója. (Lineáris szuperpozíció: olyan függvény, amelyet úgy kapunk, hogy bizonyos függvényeket egy-egy konstanssal megszorozunk, majd ezeket összeadjuk.) Ha mérjük az impulzust, a mérés eredménye a szuperpozíciót alkotó sajátfüggvények valamelyikéhez tartozó sajátérték.

Hogy az illető sajátértéket mekkora valószínűséggel mérjük, azt normált hullámfüggvény esetén a megfelelő sajátfüggvény együtthatója abszolút értékének négyzete adja meg, a jelen esetben A^*A , ill. B^*B . (Kézenfekvő feltételezés, hogy a szabad haladó mozgást végző részecske ugyanakkora valószínűséggel halad balról jobbra, illetve jobbról balra, vagyis $A=B$.)