

Kvantummechanikai alapok I.

Dr. Berta Miklós

bertam@sze.hu

2020. február 13.



Fizika és Kémia
Tanszék



Állapotfüggvény. Dinamikai egyenlet.

$$\Psi(\underline{r}, t)$$

Állapotfüggvény. Dinamikai egyenlet.

$$\Psi(\underline{r}, t)$$

$\Psi(\underline{r}, t)$ -csak a hely és idő komplex függvénye

Állapotfüggvény. Dinamikai egyenlet.

$$\Psi(\underline{r}, t)$$

$\Psi(\underline{r}, t)$ -csak a hely és idő komplex függvénye

$|\Psi|^2 dV$ annak a valószínűsége, hogy a vizsgált objektum a t időpillanatban az $\underline{r}$ helyvektorral jellemzett dV térfogatban található.

Állapotfüggvény. Dinamikai egyenlet.

$$\Psi(\underline{r}, t)$$

$\Psi(\underline{r}, t)$ -csak a hely és idő komplex függvénye
 $|\Psi|^2 dV$ annak a valószínűsége, hogy a vizsgált objektum a t időpillanatban az $\underline{r}$ helyvektorral jellemzett dV térfogatban található.
Az állapotfüggvény időbeli fejlődését a *Schrödinger-egyenlet* írja le.

$$\hat{H}\Psi(\underline{r}, t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(\underline{r}, t)}{\partial t}$$

$\hat{H}$ - a rendszer *Hamilton-operátora*

$i = \sqrt{-1}$ - az imaginárius egység

$\hbar = \frac{h}{2\pi}$ - a módosított Planck-állandó ($h = 6,63 \cdot 10^{-34}$ Js)

Állapotfüggvény. Dinamikai egyenlet.

$$\Psi(\underline{r}, t)$$

$\Psi(\underline{r}, t)$ -csak a hely és idő komplex függvénye
 $|\Psi|^2 dV$ annak a valószínűsége, hogy a vizsgált objektum a t időpillanatban az $\underline{r}$ helyvektorral jellemzett dV térfogatban található.
Az állapotfüggvény időbeli fejlődését a *Schrödinger-egyenlet* írja le.

$$\hat{H}\Psi(\underline{r}, t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(\underline{r}, t)}{\partial t}$$

$\hat{H}$ - a rendszer *Hamilton-operátora*

$i = \sqrt{-1}$ - az imaginárius egység

$\hbar = \frac{h}{2\pi}$ - a módosított Planck-állandó ($h = 6,63 \cdot 10^{-34}$ Js)

Az állapotfüggvény normálási feltétele:

$$\int_{(V)} |\Psi(\underline{r}, t)|^2 dV = 1$$

Állapotfüggvény. Dinamikai egyenlet.

$$\Psi(\underline{r}, t)$$

$\Psi(\underline{r}, t)$ -csak a hely és idő komplex függvénye
 $|\Psi|^2 dV$ annak a valószínűsége, hogy a vizsgált objektum a t időpillanatban az $\underline{r}$ helyvektorral jellemzett dV térfogatban található.
Az állapotfüggvény időbeli fejlődését a *Schrödinger-egyenlet* írja le.

$$\hat{H}\Psi(\underline{r}, t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(\underline{r}, t)}{\partial t}$$

$\hat{H}$ - a rendszer *Hamilton-operátora*

$i = \sqrt{-1}$ - az imaginárius egység

$\hbar = \frac{h}{2\pi}$ - a módosított Planck-állandó ($h = 6,63 \cdot 10^{-34}$ Js)

Az állapotfüggvény normálási feltétele:

$$\int_{(V)} |\Psi(\underline{r}, t)|^2 dV = 1$$

A fizikai mennyiségek, mint operátorok

A klasszikus fizikában minden fizikai mennyiség kifejezhető a klasszikus állapotot meghatározó két állapothatározóval, amelyek a koordináta és impulzus.

A fizikai mennyiségek, mint operátorok

A klasszikus fizikában minden fizikai mennyiség kifejezhető a klasszikus állapotot meghatározó két állapothatározóval, amelyek a koordináta és impulzus.

A kvantumfizikában a fizikai mennyiségekhez speciális lineáris operátorokat rendelünk!

A fizikai mennyiségek, mint operátorok

A klasszikus fizikában minden fizikai mennyiség kifejezhető a klasszikus állapotot meghatározó két állapothatározóval, amelyek a koordináta és impulzus.

A kvantumfizikában a fizikai mennyiségekhez speciális lineáris operátorokat rendelünk!

Az alapvető hozzárendelések:

$$p_k \rightarrow \hat{p}_k = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_k}$$

$$x_k \rightarrow \hat{x}_k = x_k.$$

A fizikai mennyiségek, mint operátorok

A klasszikus fizikában minden fizikai mennyiség kifejezhető a klasszikus állapotot meghatározó két állapotváltozóval, amelyek a koordináta és impulzus.

A kvantumfizikában a fizikai mennyiségekhez speciális lineáris operátorokat rendelünk!

Az alapvető hozzárendelések:

$$p_k \rightarrow \hat{p}_k = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_k}$$

$$x_k \rightarrow \hat{x}_k = x_k.$$

Lássuk, hogyan képezzük egy tömegpont Hamilton-operátorát!

Potenciáltérben mozgó tömegpont Hamilton-operátora

A tömegpont összenergiája, mint az impulzus és koordináta függvénye nem más, mint a Hamilton-függvény.

Potenciáltérben mozgó tömegpont Hamilton-operátora

A tömegpont összenergiája, mint az impulzus és koordináta függvénye nem más, mint a Hamilton-függvény.

$$H(\underline{p}, \underline{r}) = \frac{\underline{p} \cdot \underline{p}}{2m} + V(\underline{r}) = \frac{1}{2m}(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) + V(x, y, z)$$

Potenciáltérben mozgó tömegpont Hamilton-operátora

A tömegpont összenergiája, mint az impulzus és koordináta függvénye nem más, mint a Hamilton-függvény.

$$H(\underline{p}, \underline{r}) = \frac{\underline{p} \cdot \underline{p}}{2m} + V(\underline{r}) = \frac{1}{2m}(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) + V(x, y, z)$$

Térjünk át a Hamilton-operátorra:

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}(\hat{p}_x \hat{p}_x + \hat{p}_y \hat{p}_y + \hat{p}_z \hat{p}_z) + V(x, y, z).$$

$$\hat{H} = i^2 \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + V(x, y, z).$$

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(x, y, z).$$

Heisenberg-féle határozatlansági reláció

$$\hat{x}(\hat{p}_x \Psi(x)) = x \cdot \left(-i\hbar \frac{\partial \Psi(x)}{\partial x}\right) = -i\hbar x \frac{\partial \Psi(x)}{\partial x}$$

Heisenberg-féle határozatlansági reláció

$$\hat{x}(\hat{p}_x \Psi(x)) = x \cdot \left(-i\hbar \frac{\partial \Psi(x)}{\partial x}\right) = -i\hbar x \frac{\partial \Psi(x)}{\partial x}$$

$$\hat{p}_x(\hat{x} \Psi(x)) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}(x \cdot \Psi(x)) = -i\hbar(\Psi(x) + x \frac{\partial \Psi(x)}{\partial x})$$

Heisenberg-féle határozatlansági reláció

$$\hat{x}(\hat{p}_x \Psi(x)) = x \cdot \left(-i\hbar \frac{\partial \Psi(x)}{\partial x}\right) = -i\hbar x \frac{\partial \Psi(x)}{\partial x}$$

$$\hat{p}_x(\hat{x} \Psi(x)) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}(x \cdot \Psi(x)) = -i\hbar(\Psi(x) + x \frac{\partial \Psi(x)}{\partial x})$$

$$\hat{x}(\hat{p}_x \Psi(x)) \neq \hat{p}_x(\hat{x} \Psi(x))$$

Heisenberg-féle határozatlansági reláció

$$\hat{x}(\hat{p}_x \Psi(x)) = x \cdot (-i\hbar \frac{\partial \Psi(x)}{\partial x}) = -i\hbar x \frac{\partial \Psi(x)}{\partial x}$$

$$\hat{p}_x(\hat{x} \Psi(x)) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}(x \cdot \Psi(x)) = -i\hbar(\Psi(x) + x \frac{\partial \Psi(x)}{\partial x})$$

$$\hat{x}(\hat{p}_x \Psi(x)) \neq \hat{p}_x(\hat{x} \Psi(x))$$

$$\hat{x}\hat{p}_x - \hat{p}_x\hat{x} = [\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar \quad - W.Heisenberg$$

Heisenberg-féle határozatlansági reláció

$$\hat{x}(\hat{p}_x \Psi(x)) = x \cdot (-i\hbar \frac{\partial \Psi(x)}{\partial x}) = -i\hbar x \frac{\partial \Psi(x)}{\partial x}$$

$$\hat{p}_x(\hat{x} \Psi(x)) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}(x \cdot \Psi(x)) = -i\hbar(\Psi(x) + x \frac{\partial \Psi(x)}{\partial x})$$

$$\hat{x}(\hat{p}_x \Psi(x)) \neq \hat{p}_x(\hat{x} \Psi(x))$$

$$\hat{x}\hat{p}_x - \hat{p}_x\hat{x} = [\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar \quad - W.Heisenberg$$

$[\hat{x}, \hat{p}_x]$ – operátorok kommutátora

Heisenberg-féle határozatlansági reláció

$$\hat{x}(\hat{p}_x \Psi(x)) = x \cdot (-i\hbar \frac{\partial \Psi(x)}{\partial x}) = -i\hbar x \frac{\partial \Psi(x)}{\partial x}$$

$$\hat{p}_x(\hat{x} \Psi(x)) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}(x \cdot \Psi(x)) = -i\hbar(\Psi(x) + x \frac{\partial \Psi(x)}{\partial x})$$

$$\hat{x}(\hat{p}_x \Psi(x)) \neq \hat{p}_x(\hat{x} \Psi(x))$$

$$\hat{x}\hat{p}_x - \hat{p}_x\hat{x} = [\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar \quad - \text{W.Heisenberg}$$

$[\hat{x}, \hat{p}_x]$ – operátorok kommutátora

Azokat az operátorokat, amelyek kommutátora 0, kompatibilis operátoroknak nevezzük!

Stacionér megoldások

A potenciáltérben mozgó tömegpont Schrödinger - egyenlete időfüggetlen potenciál esetében:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi(x,y,z,t) + V(x,y,z).\Psi(x,y,z,t) = i\hbar\frac{\partial\Psi(x,y,z,t)}{\partial t}$$

Stacionér megoldások

A potenciáltérben mozgó tömegpont Schrödinger - egyenlete időfüggetlen potenciál esetében:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi(x,y,z,t) + V(x,y,z)\cdot\Psi(x,y,z,t) = i\hbar\frac{\partial\Psi(x,y,z,t)}{\partial t}$$

Keressük a megoldást $e^{-i\frac{E}{\hbar}t}\psi(x,y,z)$ alakban. Ezt behelyettesítve, majd egyszerűsítve:

$$\frac{\hbar^2}{2m}(\Delta - \frac{2m}{\hbar^2}V(x,y,z))e^{-i\frac{E}{\hbar}t}\psi(x,y,z) = -e^{-i\frac{E}{\hbar}t}E\psi(x,y,z)$$

$$\Delta\psi(x,y,z) = -k^2\psi(x,y,z)$$

$$k^2 = \frac{2m(E-V(x,y,z))}{\hbar^2}$$

Stacionér megoldások

A potenciáltérben mozgó tömegpont Schrödinger - egyenlete időfüggetlen potenciál esetében:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi(x,y,z,t) + V(x,y,z)\cdot\Psi(x,y,z,t) = i\hbar\frac{\partial\Psi(x,y,z,t)}{\partial t}$$

Keressük a megoldást $e^{-i\frac{E}{\hbar}t}\psi(x,y,z)$ alakban. Ezt behelyettesítve, majd egyszerűsítve:

$$\frac{\hbar^2}{2m}(\Delta - \frac{2m}{\hbar^2}V(x,y,z))e^{-i\frac{E}{\hbar}t}\psi(x,y,z) = -e^{-i\frac{E}{\hbar}t}E\psi(x,y,z)$$

$$\Delta\psi(x,y,z) = -k^2\psi(x,y,z)$$

$$k^2 = \frac{2m(E-V(x,y,z))}{\hbar^2}$$

Dobozba zárt elektron

Elektron egy dimenzióban, ha mozgását egy a hosszúságú szakaszra korlátozzuk.

Dobozba zárt elektron

Elektron egy dimenzióban, ha mozgását egy a hosszúságú szakaszra korlátozzuk.

Az elektron időben állandósult állapotát leíró állapotfüggvény tértől függő $\psi(x)$ része eleget kell tegyen az állóhullám-egyenletnek.

Dobozba zárt elektron

Elektron egy dimenzióban, ha mozgását egy a hosszúságú szakaszra korlátozzuk.

Az elektron időben állandósult állapotát leíró állapotfüggvény tértől függő $\psi(x)$ része eleget kell tegyen az állóhullám-egyenletnek.

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = -k^2\psi(x)$$

Dobozba zárt elektron

Elektron egy dimenzióban, ha mozgását egy a hosszúságú szakaszra korlátozzuk.

Az elektron időben állandósult állapotát leíró állapotfüggvény tértől függő $\psi(x)$ része eleget kell tegyen az állóhullám-egyenletnek.

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = -k^2\psi(x)$$

A megoldás a dobozon kívül azonosan nulla kell legyen, hiszen végtelen nagy taszító potenciált tettünk fel a doboz falainál – az elektron nem hagyhatja el a dobozt!

Dobozba zárt elektron

Elektron egy dimenzióban, ha mozgását egy a hosszúságú szakaszra korlátozzuk.

Az elektron időben állandósult állapotát leíró állapotfüggvény tértől függő $\psi(x)$ része eleget kell tegyen az állóhullám-egyenletnek.

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = -k^2\psi(x)$$

A megoldás a dobozon kívül azonosan nulla kell legyen, hiszen végtelen nagy taszító potenciált tettünk fel a doboz falainál – az elektron nem hagyhatja el a dobozt!

A dobozon belül az elektron viszont szabadon mozoghat, azaz itt $V(x, y, z) = 0$.

Dobozba zárt elektron

Elektron egy dimenzióban, ha mozgását egy a hosszúságú szakaszra korlátozzuk.

Az elektron időben állandósult állapotát leíró állapotfüggvény tértől függő $\psi(x)$ része eleget kell tegyen az állóhullám-egyenletnek.

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = -k^2\psi(x)$$

A megoldás a dobozon kívül azonosan nulla kell legyen, hiszen végtelen nagy taszító potenciált tettünk fel a doboz falainál – az elektron nem hagyhatja el a dobozt!

A dobozon belül az elektron viszont szabadon mozoghat, azaz itt $V(x, y, z) = 0$.

Az egyenletet két peremfeltétel mellett kell megoldani, amelyek a $\psi(0) = 0$ és $\psi(a) = 0$.

Az egyenletet két peremfeltétel mellett kell megoldani, amelyek a $\psi(0) = 0$ és $\psi(a) = 0$.

Az egyenlet megegyezik a harmonikus rezgéseket meghatározó egyenlettel, csak benne az időváltozó helyett helyváltozó szerepel. Megoldása harmonikus függvény.

Az egyenletet két peremfeltétel mellett kell megoldani, amelyek a $\psi(0) = 0$ és $\psi(a) = 0$.

Az egyenlet megegyezik a harmonikus rezgéseket meghatározó egyenlettel, csak benne az időváltozó helyett helyváltozó szerepel. Megoldása harmonikus függvény.

$$\psi(x) = A \sin(kx + \phi)$$

Az egyenletet két peremfeltétel mellett kell megoldani, amelyek a $\psi(0) = 0$ és $\psi(a) = 0$.

Az egyenlet megegyezik a harmonikus rezgéseket meghatározó egyenlettel, csak benne az időváltozó helyett helyváltozó szerepel. Megoldása harmonikus függvény.

$$\psi(x) = A \sin(kx + \phi)$$

Figyelembe véve a peremfeltételeket: $\phi = 0$ és $k = \frac{n\pi}{a}$, ahol $n = 1, 2, 3, \dots$

Az egyenletet két peremfeltétel mellett kell megoldani, amelyek a $\psi(0) = 0$ és $\psi(a) = 0$.

Az egyenlet megegyezik a harmonikus rezgéseket meghatározó egyenlettel, csak benne az időváltozó helyett helyváltozó szerepel. Megoldása harmonikus függvény.

$$\psi(x) = A \sin(kx + \phi)$$

Figyelembe véve a peremfeltételeket: $\phi = 0$ és $k = \frac{n\pi}{a}$, ahol $n = 1, 2, 3, \dots$

Mivel:

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} = \frac{n^2\pi^2}{a^2},$$

Az egyenletet két peremfeltétel mellett kell megoldani, amelyek a $\psi(0) = 0$ és $\psi(a) = 0$.

Az egyenlet megegyezik a harmonikus rezgéseket meghatározó egyenlettel, csak benne az időváltozó helyett helyváltozó szerepel. Megoldása harmonikus függvény.

$$\psi(x) = A \sin(kx + \phi)$$

Figyelembe véve a peremfeltételeket: $\phi = 0$ és $k = \frac{n\pi}{a}$, ahol $n = 1, 2, 3, \dots$

Mivel:

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} = \frac{n^2\pi^2}{a^2},$$

Így:

$$E_n = \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}n^2$$

Mivel:

$$\int_0^a |\psi(x)|^2 dx = 1.$$

Mivel:

$$\int_0^a |\psi(x)|^2 dx = 1.$$

Ennek alapján $A = \sqrt{\frac{2}{a}}$.

Mivel:

$$\int_0^a |\psi(x)|^2 dx = 1.$$

Ennek alapján $A = \sqrt{\frac{2}{a}}$.

$$\psi(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi}{a} x$$

Mivel:

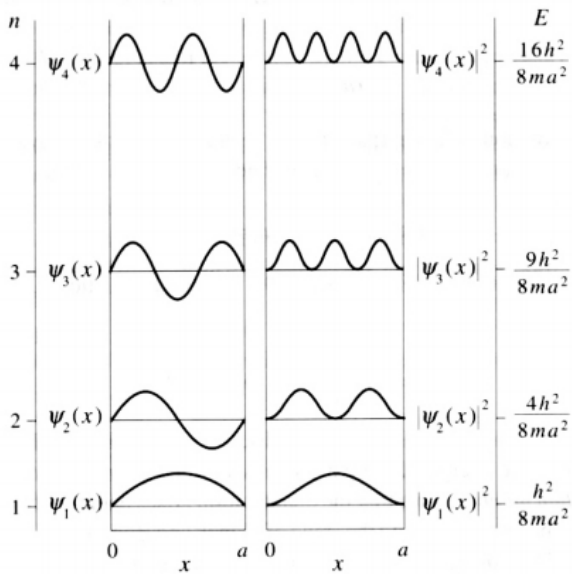
$$\int_0^a |\psi(x)|^2 dx = 1.$$

Ennek alapján $A = \sqrt{\frac{2}{a}}$.

$$\psi(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi}{a} x$$

Általánosan igaz, ha egy mikroobjektum mozgását térben korlátozzuk, akkor energiája csak diszkrét energiaértékeket vehet fel.

Vegyük észre, hogy a rendszer legkisebb energiája nem nulla, hanem valamilyen pozitív érték. **Zéruspon ti energia.**



Köszönöm a figyelmet!