

Kvantummechanikai alapok II.

Dr. Berta Miklós

bertam@sze.hu

2020. február 26.



Fizika és Kémia
Tanszék



Lineáris harmonikus oszcillátor

Egy harmonikus rezgést végző tömegpont összenergiája:

$$E = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}Dx^2$$

Mivel az összenergia (így a Hamilton-függvény is) független az időtől a stacionér Schrödinger-egyenletet kell megoldanunk.

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

Lineáris harmonikus oszcillátor

Egy harmonikus rezgést végző tömegpont összenergiája:

$$E = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}Dx^2$$

Mivel az összenergia (így a Hamilton-függvény is) független az időtől a stacionér Schrödinger-egyenletet kell megoldanunk.

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

Ez a következő alakra rendezhető:

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

$$\hat{H}\Psi(x, y, z) = E\Psi(x, y, z)$$

Tehát a stacionér Schrödinger-egyenlet valójában az időfüggetlen Hamilton-operátor sajátérték-egyenlete!

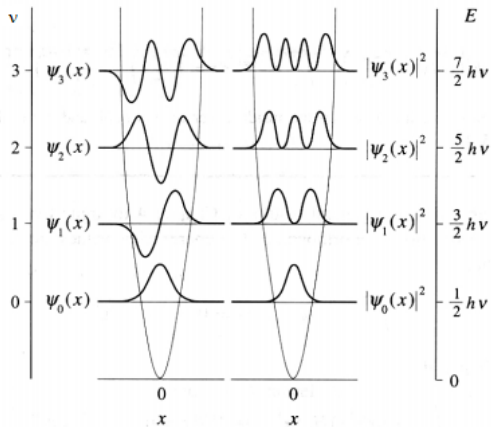
Az előbbi sajátérték-egyenlet megoldása a harmonikus rezgések Hamilton-operátorára:

$$E_\nu = \left(\nu + \frac{1}{2}\right) \hbar \sqrt{\frac{D}{m}} = \left(\nu + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega_0$$

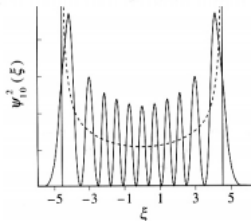
$$\psi_\nu(x) = e^{-\frac{\xi^2}{2}} H_\nu(\xi), \quad \xi = \sqrt{\frac{m\omega_0}{\hbar}} x$$

ν – vibrációs kvantumszám

Újra azt látjuk, hogy a rendszer zérusponti energiája nullától különböző pozitív érték!



$v=10$



Kontinuitási-egyenlet

Schrödinger-egyenlet:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi + V.\Psi = i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}$$

Kontinuitási-egyenlet

Schrödinger-egyenlet:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi + V.\Psi = i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}$$

Ennek komplex konjugáltja:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi^* + V.\Psi^* = -i\hbar\frac{\partial\Psi^*}{\partial t}$$

Kontinuitási-egyenlet

Schrödinger-egyenlet:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi + V.\Psi = i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}$$

Ennek komplex konjugáltja:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi^* + V.\Psi^* = -i\hbar\frac{\partial\Psi^*}{\partial t}$$

Az első egyenletet szorozzuk Ψ^* -gal, míg a másodikat $(-\Psi)$ -vel, majd a kapott egyenleteket adjuk össze:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left\{\Psi^*\Delta\Psi - \Psi\Delta\Psi^*\right\} = i\hbar\frac{\partial\Psi^*\Psi}{\partial t}$$

Átrendezve:

$$\frac{\partial \Psi^* \Psi}{\partial t} + \frac{i\hbar}{2m} \left\{ \Psi \Delta \Psi^* - \Psi^* \Delta \Psi \right\} = 0$$

Tudjuk, hogy $\Delta \mathbf{f} = \text{div grad } \mathbf{f}$, ezért:

$$\begin{aligned} \Psi \Delta \Psi^* - \Psi^* \Delta \Psi &= \Psi \text{div grad } \Psi^* - \Psi^* \text{div grad } \Psi = \\ &= \text{div} \left(\Psi \text{grad } \Psi^* - \Psi^* \text{grad } \Psi \right) \end{aligned}$$

Vezessük be a következő jelöléseket:

$$\rho = \Psi^* \Psi, \quad \underline{j} = \frac{i\hbar}{2m} \left(\Psi \text{grad } \Psi^* - \Psi^* \text{grad } \Psi \right).$$

A kontinuitási egyenlet:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div} \underline{j} = 0$$

ρ -valószínűségi sűrűség, $\underline{j}$ -valószínűségi sűrűség-áram

Alagút-effektus

Egy elektron valamilyen meghatározott E_k mozgási energiával közelítsen egy potenciállépcsőhöz. Csak azzal az esettel foglalkozunk, amikor az elektron mozgási energiája klasszikus értelemben nem elég a potenciál leküzdéséhez, azaz $E < V$.

Alagút-effektus

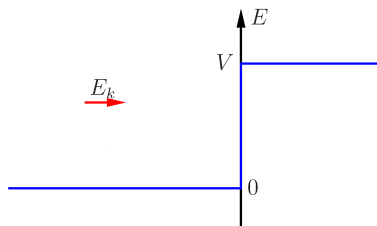
Egy elektron valamilyen meghatározott E_k mozgási energiával közelítsen egy potenciállépcsőhöz. Csak azzal az esettel foglalkozunk, amikor az elektron mozgási energiája klasszikus értelemben nem elég a potenciál leküzdéséhez, azaz $E < V$.

$$E_p(x) \begin{cases} 0, & \text{ha } x < 0 \\ V = \text{konstans}, & \text{ha } x \geq 0 \end{cases}$$

Alagút-effektus

Egy elektron valamilyen meghatározott E_k mozgási energiával közelítsen egy potenciállépcsőhöz. Csak azzal az esettel foglalkozunk, amikor az elektron mozgási energiája klasszikus értelemben nem elég a potenciál leküzdéséhez, azaz $E < V$.

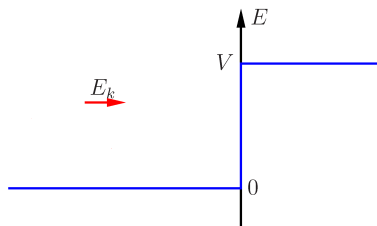
$$E_p(x) \begin{cases} 0, & \text{ha } x < 0 \\ V = \text{konstans}, & \text{ha } x \geq 0 \end{cases}$$



Alagút-effektus

Egy elektron valamilyen meghatározott E_k mozgási energiával közelítsen egy potenciállépcsőhöz. Csak azzal az esettel foglalkozunk, amikor az elektron mozgási energiája klasszikus értelemben nem elég a potenciál leküzdéséhez, azaz $E < V$.

$$E_p(x) \begin{cases} 0, & \text{ha } x < 0 \\ V = \text{konstans}, & \text{ha } x \geq 0 \end{cases}$$



Ilyenkor a klasszikus fizika szerint egy makroszkopikus test nem hatolhat be abba a térrészbe, ahol nagyobb lenne potenciális energiája, mint az a mozgási energia, amivel közeledik ehhez a térrészhez.

Ilyenkor a klasszikus fizika szerint egy makroszkopikus test nem hatolhat be abba a térrészbe, ahol nagyobb lenne potenciális energiája, mint az a mozgási energia, amivel közeledik ehhez a térrészhez.

A kvantummechanikai eredmény azonban mást mutat.

A részecske összenergiája:

$$E = E_k + E_p = \frac{p^2}{2m} + E_p$$

Ilyenkor a klasszikus fizika szerint egy makroszkopikus test nem hatolhat be abba a térrészbe, ahol nagyobb lenne potenciális energiája, mint az a mozgási energia, amivel közeledik ehhez a térrészhez.

A kvantummechanikai eredmény azonban mást mutat.

A részecske összenergiája:

$$E = E_k + E_p = \frac{p^2}{2m} + E_p$$

Fejezzük ki a k hullámszám négyzetét az energia segítségével:

$$k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (E - E_p)$$

Ilyenkor a klasszikus fizika szerint egy makroszkopikus test nem hatolhat be abba a térrészbe, ahol nagyobb lenne potenciális energiája, mint az a mozgási energia, amivel közeledik ehhez a térrészhez.

A kvantummechanikai eredmény azonban mást mutat.

A részecske összenergiája:

$$E = E_k + E_p = \frac{p^2}{2m} + E_p$$

Fejezzük ki a k hullámszám négyzetét az energia segítségével:

$$k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (E - E_p)$$

A probléma Schrödinger-egyenlete:

$$\frac{d^2\varphi(x)}{dx^2} + \frac{2m(E - E_p)}{\hbar^2}\varphi(x) = 0$$

Ilyenkor a klasszikus fizika szerint egy makroszkopikus test nem hatolhat be abba a térrészbe, ahol nagyobb lenne potenciális energiája, mint az a mozgási energia, amivel közeledik ehhez a térrészhez.

A kvantummechanikai eredmény azonban mást mutat.

A részecske összenergiája:

$$E = E_k + E_p = \frac{p^2}{2m} + E_p$$

Fejezzük ki a k hullámszám négyzetét az energia segítségével:

$$k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (E - E_p)$$

A probléma Schrödinger-egyenlete:

$$\frac{d^2\varphi(x)}{dx^2} + \frac{2m(E - E_p)}{\hbar^2}\varphi(x) = 0$$

A potenciál origóbeli ugrása miatt az x -tengely negatív és pozitív oldalán külön-külön meg kell oldani az egyenletet.

$x < 0$, $E_p = 0$. Tehát itt a megoldandó egyenlet:

$$\frac{d^2 \varphi_n(x)}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} \varphi_n(x) = 0.$$

$x < 0$, $E_p = 0$. Tehát itt a megoldandó egyenlet:

$$\frac{d^2 \varphi_n(x)}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} \varphi_n(x) = 0.$$

Legyen $k_0^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$. Ekkor

$$\frac{d^2 \varphi_n(x)}{dx^2} + k_0^2 \varphi_n(x) = 0.$$

$x < 0$, $E_p = 0$. Tehát itt a megoldandó egyenlet:

$$\frac{d^2 \varphi_n(x)}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} \varphi_n(x) = 0.$$

Legyen $k_0^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$. Ekkor

$$\frac{d^2 \varphi_n(x)}{dx^2} + k_0^2 \varphi_n(x) = 0.$$

Keressük ennek az egyenletnek a megoldását a következő alakban:

$$\varphi_n(x) = e^{ik_0 x} + A e^{-ik_0 x}.$$

Itt $i = \sqrt{-1}$ a képzetes egység.

$x < 0$, $E_p = 0$. Tehát itt a megoldandó egyenlet:

$$\frac{d^2 \varphi_n(x)}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} \varphi_n(x) = 0.$$

Legyen $k_0^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$. Ekkor

$$\frac{d^2 \varphi_n(x)}{dx^2} + k_0^2 \varphi_n(x) = 0.$$

Keressük ennek az egyenletnek a megoldását a következő alakban:

$$\varphi_n(x) = e^{ik_0 x} + A e^{-ik_0 x}.$$

Itt $i = \sqrt{-1}$ a képzetes egység.

Fizikai jelentés: egységnyi amplitúdójú síkhullám közelít a potenciállépcsőhöz + visszaverődés után egy A amplitúdójú visszavert síkhullám is hozzájárul a megoldáshoz.

$x \geq 0$, $E_p = V$. A megoldandó egyenlet:

$$\frac{d^2 \varphi_p(x)}{dx^2} + \frac{2m(E - V)}{\hbar^2} \varphi_p(x) = 0.$$

$x \geq 0$, $E_p = V$. A megoldandó egyenlet:

$$\frac{d^2 \varphi_p(x)}{dx^2} + \frac{2m(E - V)}{\hbar^2} \varphi_p(x) = 0.$$

Ez esetben az $\frac{2m(E-V)}{\hbar^2}$ kifejezés negatív, mivel $E < V$.

$x \geq 0$, $E_p = V$. A megoldandó egyenlet:

$$\frac{d^2\varphi_p(x)}{dx^2} + \frac{2m(E - V)}{\hbar^2}\varphi_p(x) = 0.$$

Ez esetben az $\frac{2m(E-V)}{\hbar^2}$ kifejezés negatív, mivel $E < V$.

Vezessük be a $-K^2 = \frac{2m(E-V)}{\hbar^2}$ jelölést. Az egyenlet a következő alakot ölti:

$$\frac{d^2\varphi_p(x)}{dx^2} - K^2\varphi_p(x) = 0,$$

vagy ami ugyanaz:

$$\frac{d^2\varphi_p(x)}{dx^2} = K^2\varphi_p(x).$$

Keressük a megoldást a következő alakban:

$$\varphi_p(x) = Ce^{-Kx} + De^{Kx}.$$

Keressük a megoldást a következő alakban:

$$\varphi_p(x) = Ce^{-Kx} + De^{Kx}.$$

Mivel a megoldás normálható kell legyen, így: $D = 0$.

Keressük a megoldást a következő alakban:

$$\varphi_p(x) = Ce^{-Kx} + De^{Kx}.$$

Mivel a megoldás normálható kell legyen, így: $D = 0$.

Így

$$\varphi_p(x) = Ce^{-Kx}.$$

Keressük a megoldást a következő alakban:

$$\varphi_p(x) = Ce^{-Kx} + De^{Kx}.$$

Mivel a megoldás normálható kell legyen, így: $D = 0$.

Így

$$\varphi_p(x) = Ce^{-Kx}.$$

A potenciállépcső magassága az $x = 0$ pontban véges, a kapott megoldásoknak és azok első deriváltjainak (kontinuitási-egyenlet miatt a valószínűségi sűrűség-áramnak térben folytonosnak kell lennie) az $x = 0$ pontban azonosaknak kell lenniük. Ezért:

$$1 + A = C$$

$$ik_0(1 - A) = -KC$$

Megoldva ezt az egyenletrendszert azt kapjuk, hogy:

$$A = \frac{ik_0 + K}{ik_0 - K},$$

és

$$C = \frac{2ik_0}{ik_0 - K}.$$

Megoldva ezt az egyenletrendszert azt kapjuk, hogy:

$$A = \frac{ik_0 + K}{ik_0 - K},$$

és

$$C = \frac{2ik_0}{ik_0 - K}.$$

A megoldásban az a meglepő, hogy az elektront leíró $\varphi_p(x)$ nem lesz nulla a potenciállépcsőben sem.

Megoldva ezt az egyenletrendszert azt kapjuk, hogy:

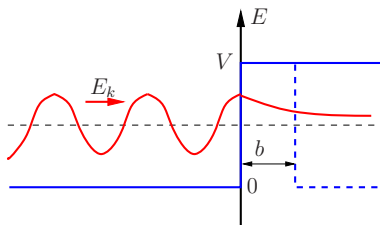
$$A = \frac{ik_0 + K}{ik_0 - K},$$

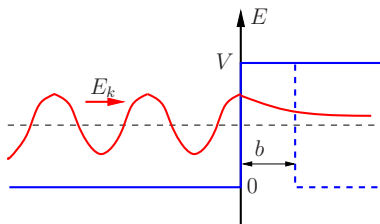
és

$$C = \frac{2ik_0}{ik_0 - K}.$$

A megoldásban az a meglepő, hogy az elektront leíró $\varphi_p(\mathbf{x})$ nem lesz nulla a potenciállépcsőben sem.

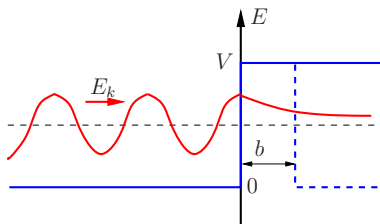
Azt mondhatjuk, hogy az elektron behatol a számára klasszikus értelemben elérhetetlen térrészbe is.





Ha a potenciállépcső véges szélességű, akkor az elektron átjut ezen a klasszikus értelemben számára leküzdhetetlen akadályon. Az átjutás valószínűsége (T) a következő mennyiséggel arányos:

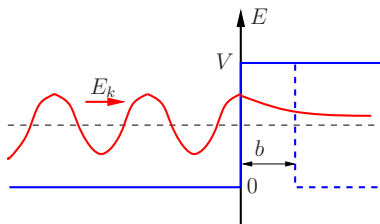
$$T \sim \frac{\varphi_p^2(b)}{\varphi_p^2(0)} \sim e^{-\frac{2b}{\hbar} \sqrt{2m(V-E)}}$$



Ha a potenciállépcső véges szélességű, akkor az elektron átjut ezen a klasszikus értelemben számára leküzdhetetlen akadályon. Az átjutás valószínűsége (T) a következő mennyiséggel arányos:

$$T \sim \frac{\varphi_p^2(b)}{\varphi_p^2(0)} \sim e^{-\frac{2b}{\hbar} \sqrt{2m(V-E)}}$$

T csökken ha b nő, vagy ha $V - E$ növekszik.

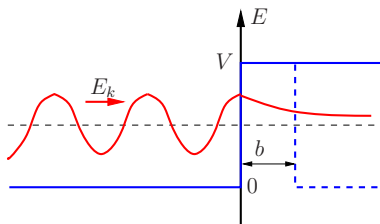


Ha a potenciállépcső véges szélességű, akkor az elektron átjut ezen a klasszikus értelemben számára leküzdhetetlen akadályon. Az átjutás valószínűsége (T) a következő mennyiséggel arányos:

$$T \sim \frac{\varphi_p^2(b)}{\varphi_p^2(0)} \sim e^{-\frac{2b}{\hbar} \sqrt{2m(V-E)}}$$

T csökken ha b nő, vagy ha $V - E$ növekszik.

A jelenség neve **alagút-effektus**.



Ha a potenciállépcső véges szélességű, akkor az elektron átjut ezen a klasszikus értelemben számára leküzdhetetlen akadályon. Az átjutás valószínűsége (T) a következő mennyiséggel arányos:

$$T \sim \frac{\varphi_p^2(b)}{\varphi_p^2(0)} \sim e^{-\frac{2b}{\hbar} \sqrt{2m(V-E)}}$$

T csökken ha b nő, vagy ha $V - E$ növekszik.

A jelenség neve **alagút-effektus**.

Ez teszi lehetővé a **radioaktív bomlást**, vagy az **elektronok átlépését fémek érintkezési felületein**.

Ez teszi lehetővé a **radioaktív bomlást**, vagy az **elektronok átlépését fémek érintkezési felületein**.

Az alagút-effektus legnagyobb sikerű alkalmazása a „**Pásztázó alagút mikroszkóp**”, amely lehetővé teszi felületek atomszerkezetének feltérképezését, sőt egyedi atomok manipulálását, áthelyezését.

Ez teszi lehetővé a **radioaktív bomlást**, vagy az **elektronok átlépését fémek érintkezési felületein**.

Az alagút-effektus legnagyobb sikerű alkalmazása a „**Pásztázó alagút mikroszkóp**”, amely lehetővé teszi felületek atomszerkezetének feltérképezését, sőt egyedi atomok manipulálását, áthelyezését.

Köszönöm a figyelmet!