(1)

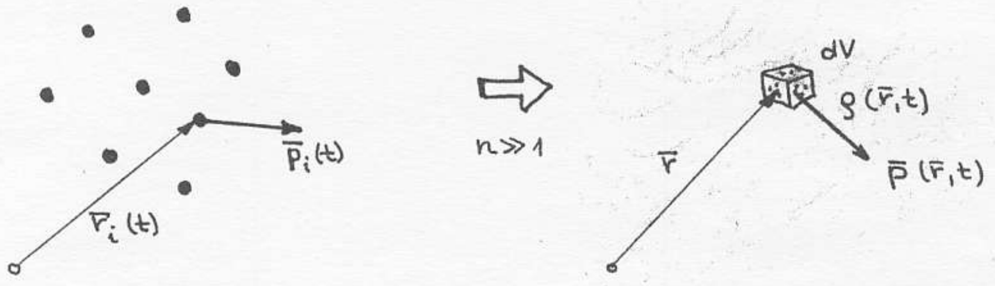
BEVEZETÉS

Klasszikus fizikai kiegészítés

- részecske modell
- hullám modell

} a klasszikus fizikában

pontrendszer (MECHANIKA) kontinuum (MECHANIKA)



$i = 1,2,3,\ldots, n$ ⇩ általánosítás

$$\left\{ \bar{r}_i(t), \bar{p}_i(t) \right\}_{i=1}^{n}$$

FIZIKAI MEZŐ
(tetszőleges fizikai mennyiség)

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

pl: $\bar{p}(\bar{r},t)$, $\bar{E}(\bar{r},t)$, $\bar{B}(\bar{r},t), \ldots$

elemi gerjesztések → hullámjelenség

Síkhullám:

$$\Psi(\bar{r},t) = A \sin 2\pi \left(\frac{x}{\lambda} - \frac{t}{T} \right) = A \sin \left(\frac{2\pi}{\lambda} x - \frac{2\pi}{T} t \right) \equiv A \sin (kx - \omega t)$$

$$\Psi(\bar{r},t) = A \sin (\bar{k}\bar{r} - \omega t)$$

$\downarrow$

$\Psi(\bar{r},t) =$ állandó

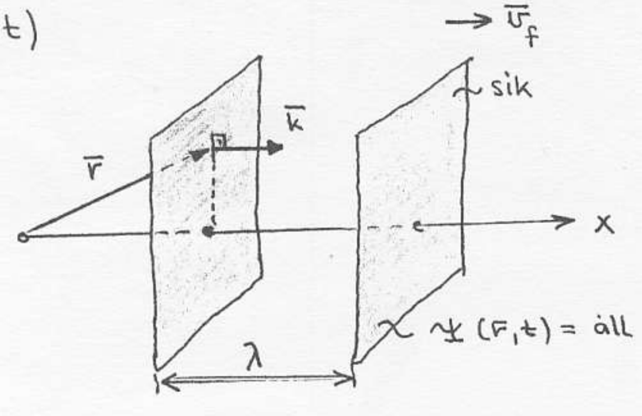
$\bar{k}\bar{r} - \omega t =$ állandó

$kx - \omega t =$ állandó

$k\dot{x} - \omega = 0$

$$v_f = \dot{x} = \frac{\omega}{k}$$

(fázissebesség)



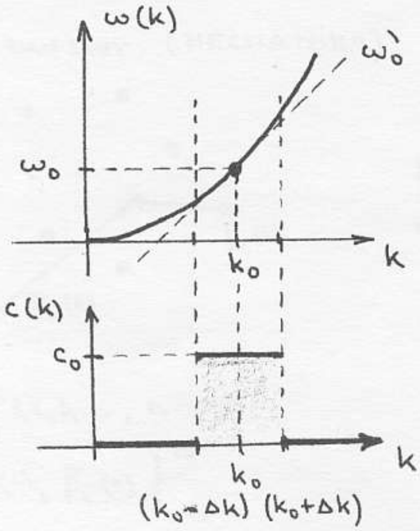
$$\Psi(\bar{r},t) = A \cdot \sin (\bar{k}\bar{r} - \omega t) \xrightarrow[\text{MATEMATIKA}]{} \boxed{\Psi(\bar{r},t) = A\, e^{j(\bar{k}\bar{r} - \omega t)}}$$

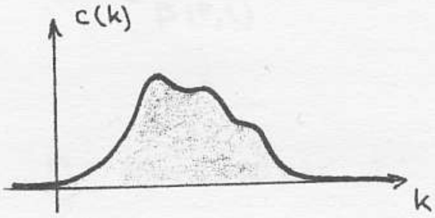
$$j \equiv \sqrt{-1}$$

2

Hullámcsomag

$$\Psi(x,t) = \int_{-\infty}^{+\infty} c(k)\, e^{j(kx-\omega t)}\, dk$$





$$\omega(k) = \omega(k_0) + \left[\frac{d\omega}{dk}\right]_{k_0} \cdot (k-k_0) + \cdots \equiv \omega_0 + \omega_0' \cdot (k-k_0) + \cdots$$

$$\Psi(x,t) \cong c_0 \int_{k_0-\Delta k}^{k_0+\Delta k} e^{j[kx-\omega_0 t - \omega_0' k\cdot t + \omega_0'\cdot k_0 \cdot t]}\, dk =$$

$$= c_0\, e^{j(\omega_0' k_0 - \omega_0)t} \cdot \underbrace{\int_{k_0-\Delta k}^{k_0+\Delta k} e^{j(x-\omega_0' t)k}\, dk}_{\frac{1}{j(x-\omega_0' t)}\left[e^{j(x-\omega_0' t)k}\right]_{k_0-\Delta k}^{k_0+\Delta k}} =$$

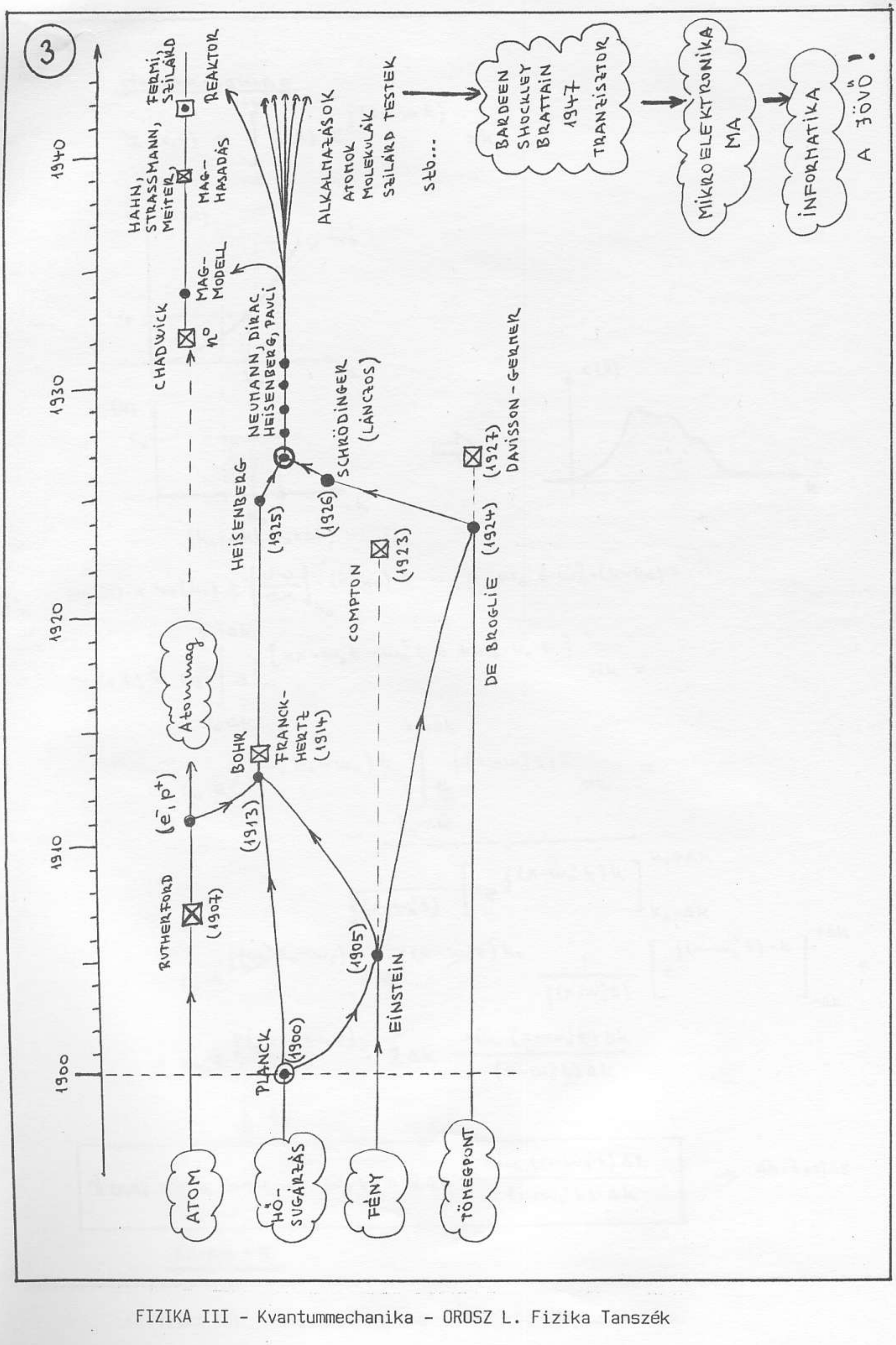
$$= c_0\, e^{j(\cancel{\omega_0' k_0} - \omega_0)t} \cdot e^{j(x-\cancel{\omega_0' t})k_0} \cdot \frac{1}{j(x-\omega_0' t)} \left[e^{j(x-\omega_0' t)\cdot k}\right]_{-\Delta k}^{+\Delta k} =$$

$$= c_0\, e^{j(k_0 x - \omega_0 t)} \cdot 2\Delta k \frac{\sin(x-\omega_0' t)\Delta k}{(x-\omega_0' t)\Delta k}$$

$$\Downarrow \mathrm{Re}$$

$$\boxed{\Psi(x,t) = c_0 \cos(k_0 x - \omega_0 t) \cdot 2\Delta k \cdot \frac{\sin(x-\omega_0' t)\Delta k}{(x-\omega_0' t)\cdot \Delta k}} \rightarrow \text{ábrázolás}$$

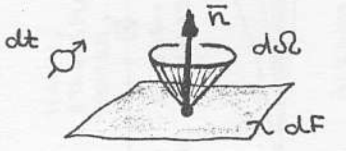
$\Delta x \cdot \Delta k = \pi$


3
1900
1910
1920
1930
1940
ATOM
HŐ-SUGÁRZÁS
FÉNY
TÖMEGPONT
PLANCK (1900)
EINSTEIN (1905)
RUTHERFORD (1907)
(e^-, p^+)
BOHR (1913)
FRANCK-HERTZ (1914)
Atommag
COMPTON (1923)
DE BROGLIE (1924)
HEISENBERG (1925)
SCHRÖDINGER (1926)
NEUMANN, DIRAC, HEISENBERG, PAULI
SCHRÖDINGER (LÁNCZOS)
(1927) DAVISSON-GERMER
CHADWICK
n^0
MAG-MODELL
HAHN, STRASSMANN, MEITER,
MAG-HASADÁS
FERMI, SZILÁRD
REAKTOR
ALKALMAZÁSOK
ATOMOK
MOLEKULÁK
SZILÁRD TESTEK
stb...
BARDEEN
SHOCKLEY
BRATTAIN
1947
TRANZISZTOR
MIKROELEKTRONIKA
MA
INFORMATIKA
A JÖVŐ!

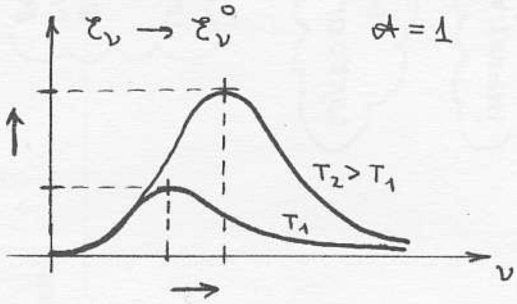
1. KVANTUMMECHANIKA

Bevezető (Történeti áttekintés)

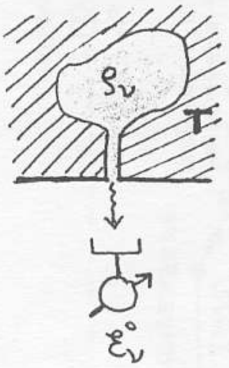
A fekete test sugárzása



$\mathcal{E}_\nu \, d\nu$

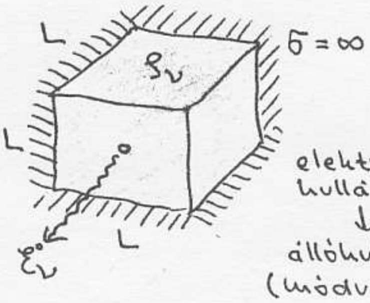


modell:



$$\boxed{\rho_\nu \sim \mathcal{E}_\nu^0}$$

SZÁMÍTHATÓ MÉRHETŐ



elektromágneses hullámok

↓

állóhullámok (módusok)

$$\rho_\nu = \frac{1}{L^3} \, n(\nu) \cdot \langle \varepsilon_\nu \rangle$$

$n(\nu) \sim \nu^2$, $\langle \varepsilon_\nu \rangle \to kT$

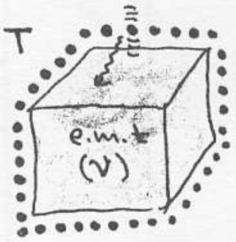
$$\mathcal{E}_\nu^{RJ} = A \cdot \nu^2 kT \quad \text{(Rayleigh–Jeans)}$$

PLANCK (1900)

$$\boxed{\mathcal{E}_\nu^{PL} = A \frac{h\nu^3}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1} \qquad h = 6{,}625 \cdot 10^{-34} \text{ J·s.}}$$

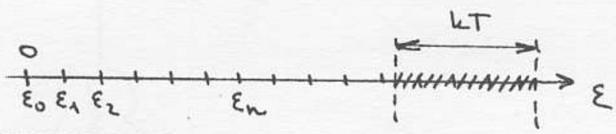
$$\mathcal{E}_\nu^{PL} \xrightarrow[h\nu \ll kT]{} \mathcal{E}_\nu^{RJ}$$

elméleti magyarázat



rezgő atomok sokasága (ν)

$$\langle \varepsilon_\nu \rangle^{PL} = \frac{h\nu}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1} \xrightarrow[h\nu \ll kT]{} kT$$

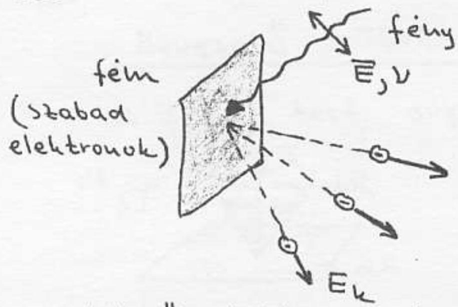


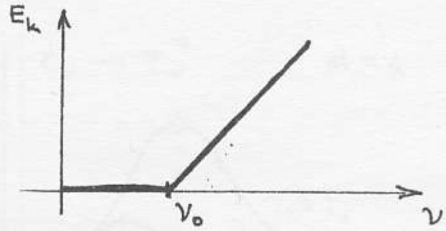
$$\boxed{\varepsilon_n = n \cdot h\nu}$$

termikus egyensúly

$$\langle \varepsilon_\nu \rangle_{\text{e.m.t}} = \langle \varepsilon_\nu \rangle_{\text{atomok}}$$

5 A fényelektromos jelenség



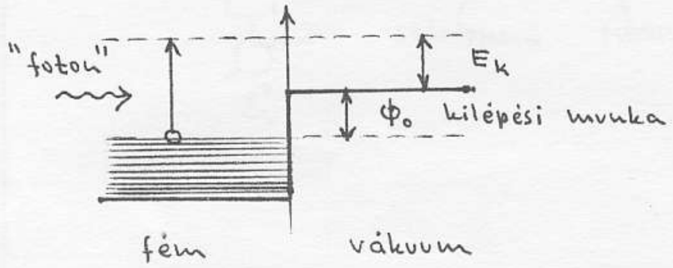


a kilépő elektronok kinetikus energiája mérhető

a klasszikus elképzelés:

$\overline{E}(t)$ $\qquad E_k \sim |\overline{E}|^2 \sim J$ (a fény intenzitása) NEM JÓ!

EINSTEIN (1905)



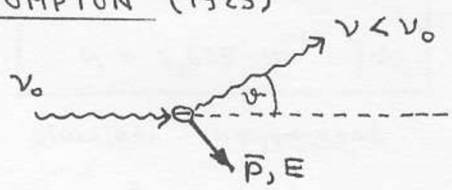
$$E_k = h\nu - \phi_0 = h\big(\nu - \underbrace{\tfrac{\phi}{h}}_{\equiv \nu_0}\big)$$

A foton ⟶ "részecske tulajdonság"

$$p = mc = \frac{mc^2}{c} = \frac{E}{c} = \frac{h\nu}{c} = \frac{h}{\lambda} \xrightarrow[\text{3 dim}]{} \boxed{\begin{matrix}\overline{p} = \hbar \overline{k} \\ E = \hbar\omega\end{matrix}}$$

$$\boxed{\hbar \equiv \frac{h}{2\pi}}$$

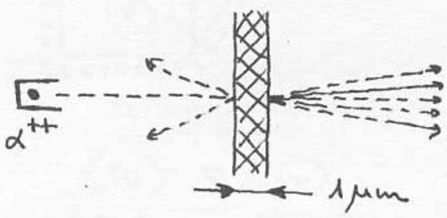
COMPTON (1923)

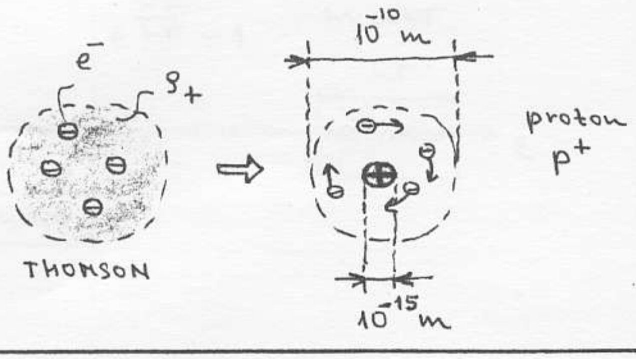


$$\Delta\lambda = \Lambda(1 - \cos\vartheta) \qquad \left(\Lambda = \frac{h}{mc}\right)$$

Az atom szerkezete

RUTHERFORD (1907, 1911)

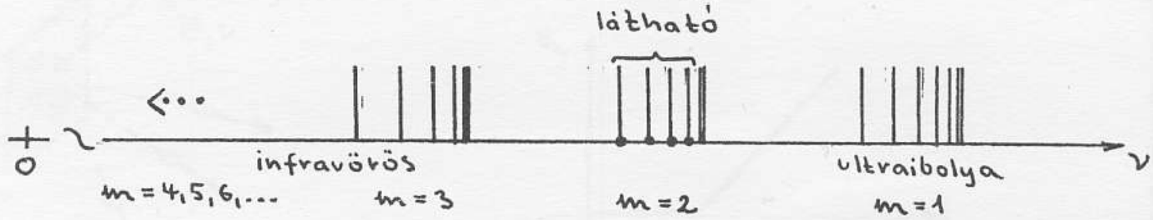




6 Atomok emissziós spektruma (vonalas színképek)

↓

Hidrogén atom (BALMER 1885)



Balmer: $\nu = R\left(\frac{1}{4} - \frac{1}{n^2}\right)$ $\xrightarrow{\text{általánosítás}}$ RYDBERG-RITZ

$n = 3, 4, 5, 6$

$$\boxed{\nu_{m,n} = R\left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2}\right) \quad m = 1, 2, 3, 4, \ldots \quad n > m}$$

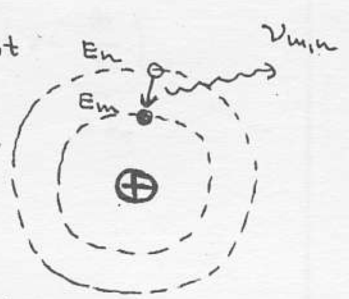
BOHR atommodellje (1913)

Posztulátumok:

P1: $E_1, E_2, E_3, \ldots$ körpályák, stacionárius állapot

P2: $\nu_{m,n} = \frac{E_n - E_m}{h}$ $\quad E_n \to E_m$

P3: $L_n = n \cdot \hbar \quad n = 1, 2, 3, \ldots$

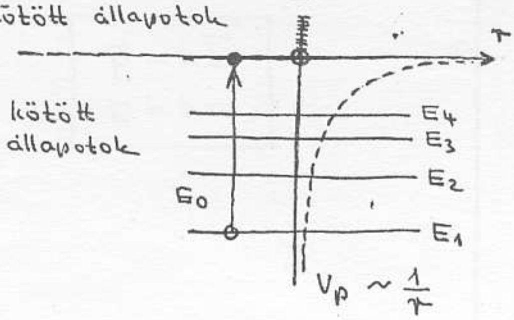


↓ eredmény

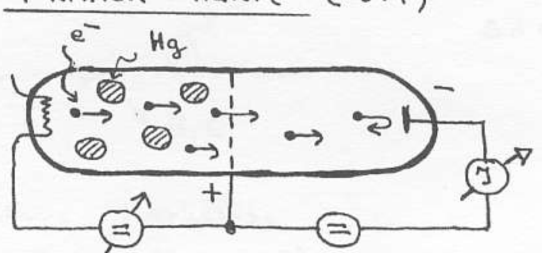
$$\boxed{E_n = -\frac{E_0}{n^2}}$$

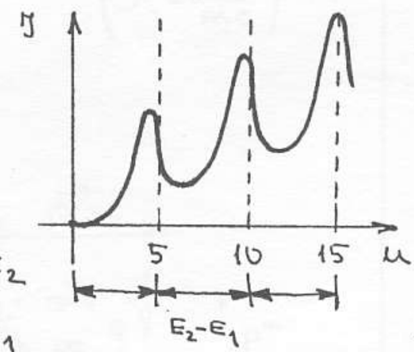
↓

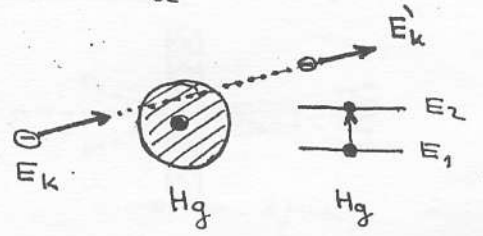
Rydberg-Ritz $\nu_{m,n} = \ldots$



FRANCK-HERTZ (1914)







$E_k + E_1 = E_k' + E_2$

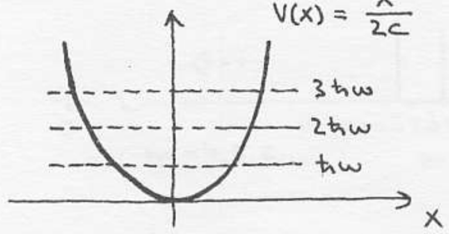
$E_k - E_k' = E_2 - E_1$

"rugalmatlan" ütközések

7 A BOHR-féle kvantálási feltétel általánosítása: BOHR–SOMMERFELD (1916)

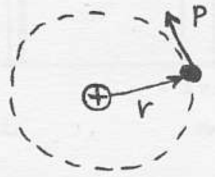
PLANCK:

$V(x) = \frac{x^2}{2c}$



$\longleftrightarrow$?

BOHR:



$E_n = n \cdot \hbar\omega$

$n = 1, 2, 3, \ldots$

$L_n = p \cdot r = n\hbar$

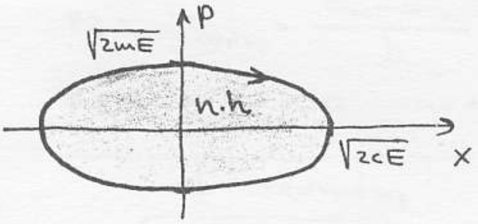
$n = 1, 2, 3, \ldots$

$\downarrow$

A teljes energiafüggvény (≡ Hamilton függvény)

$$H(p, x) = \frac{p^2}{2m} + \frac{x^2}{2c} = E \quad (\text{állandó})$$

$$\frac{p^2}{2mE} + \frac{x^2}{2cE} = 1$$



$$\oint p\,dx = \pi \cdot \sqrt{2mE} \cdot \sqrt{2cE} = 2\pi \cdot \underset{\text{kvantált}}{E} \cdot \underbrace{\sqrt{mc}}_{\frac{1}{\omega}}$$

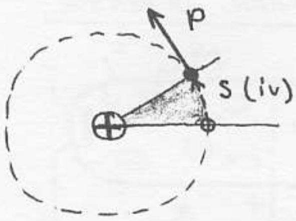
$$\oint p\,dx = 2\pi \cdot \hbar\cancel{\omega} n \cdot \frac{1}{\cancel{\omega}} = n \cdot h$$

$\downarrow$ ÁLTALÁNOSÍTÁS

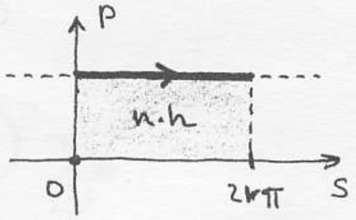
Általános koordináták:

$\{q_1, q_2, q_3, \ldots, q_f\} \rightarrow$ $\boxed{\oint p_k\,dq_k = n_k \cdot h}$ $(k = 1, 2, 3, \ldots f)$

Alkalmazása a BOHR féle atommodellben



$(q \equiv s)$



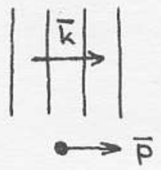
$$\oint p\,ds = p \cdot 2r\pi = L \cdot 2\pi = n \cdot h$$

$$L = n \cdot \hbar$$

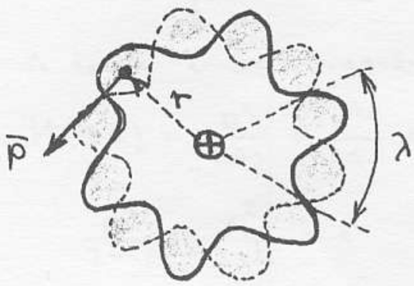
8 DE BROGLIE (1923)

Elektromágneses hullám ν, λ	$\longrightarrow$ fény	$\longrightarrow$ foton $E, \bar{p}$	
tömegpont modell $E, \bar{p}$	$\longrightarrow$ elektron	$\longrightarrow$ HULLÁM ? ν, λ	

$$E = \hbar\omega \qquad \bar{p} = \hbar \bar{k}$$



(Bohr P3)



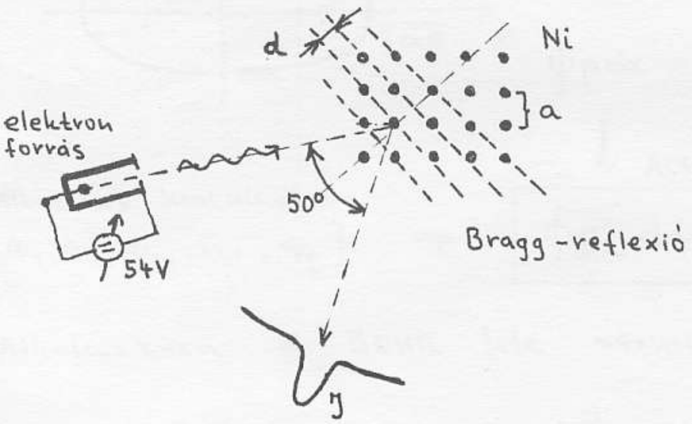
$$2\pi r = n\cdot\lambda \qquad \text{(állóhullám)}$$

$$\uparrow$$

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

$$\underbrace{pr}_{\equiv L_n} = n\cdot\hbar \qquad \text{(P3)}$$

DAVISSON – GERMER (1927)



$\longrightarrow$ Thomson – Stern (H atom)

HEISENBERG (1925)

$$\begin{bmatrix} \omega_{11} & \omega_{12} & \omega_{13} & \cdots \\ \omega_{21} & \omega_{22} & \omega_{23} & \cdots \\ \omega_{31} & \omega_{32} & \omega_{33} & \cdots \\ \vdots & & & \end{bmatrix} \equiv \underline{\underline{\omega}} \longrightarrow \underbrace{\underline{\underline{x}},\ \underline{\underline{p_x}},\ \underline{\underline{E}},}_{\text{TÚL ABSZTRAKT !}}$$

"mátrix diagonalizálás" (algebra)

$\Updownarrow$

SCHRÖDINGER (1926)

De Broglie hullám $\longrightarrow$ hullámegyenlet $\longrightarrow$ "SZEMLÉLETES" !

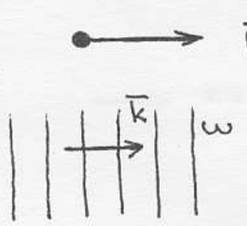
(9)

1.1. Hullámmechanika

1.1.1. A SCHRÖDINGER egyenlet és a hullámfüggvény

szabadon mozgó tömegpont — $\bar{p}, E$

Síkhullám — $\bar{k}$, ω



$$E = \hbar\omega \qquad \bar{p} = \hbar\bar{k} \qquad \text{(de Broglie)}$$

$$\Psi_0(\bar{r},t) = A\, e^{j(\bar{k}\bar{r} - \omega t)}$$

$$\left\{\begin{array}{ll} \dfrac{p^2}{2m} + V_0 = E & \text{(mechanika)} \quad V_0 = \text{állandó} \\[2ex] \dfrac{\hbar^2 k^2}{2m} + V_0 = \hbar\omega & \text{(diszperziós reláció)} \end{array}\right.$$

"Ha van hullám, akkor hullámegyenletnek is kell lennie!"

$$\left.\begin{array}{l} \bar{k} = (k_x, k_y, k_z) \\ \bar{r} = (x, y, z) \\ \bar{k}\bar{r} = k_x \cdot x + k_y \cdot y + k_z \cdot z \end{array}\right\} \Psi_0(\bar{r},t)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\Psi_0 = -j\omega\Psi_0 \quad \longrightarrow \quad \omega = -\frac{1}{j}\frac{\partial \Psi_0}{\partial t}\cdot\frac{1}{\Psi_0}$$

$$\left.\begin{array}{l} \dfrac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi_0 = -k_x^2\Psi_0 \\[2ex] \dfrac{\partial^2}{\partial y^2}\Psi_0 = -k_y^2\Psi_0 \\[2ex] \dfrac{\partial^2}{\partial z^2}\Psi_0 = -k_z^2\Psi_0 \end{array}\right] \longrightarrow \underbrace{(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)}_{k^2} = -\left(\frac{\partial^2\Psi_0}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\Psi_0}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\Psi_0}{\partial z^2}\right)\cdot\frac{1}{\Psi_0}$$

Tehát

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + V_0 = \hbar\omega$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2\Psi_0}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\Psi_0}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\Psi_0}{\partial z^2}\right)\cdot\frac{1}{\Psi_0} + V_0 = -\frac{\hbar}{j}\frac{\partial\Psi_0}{\partial t}\cdot\frac{1}{\Psi_0} \quad \Big|\cdot\Psi_0$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2\Psi_0}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\Psi_0}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\Psi_0}{\partial z^2}\right) + V_0\Psi_0 = -\frac{\hbar}{j}\frac{\partial\Psi_0}{\partial t}$$

10

Új matematikai szimbólumot vezetünk be:

$$\frac{\partial^2 \Psi_0}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi_0}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Psi_0}{\partial z^2} \equiv \underbrace{\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)}\cdot \Psi_0 \equiv \Delta \cdot \Psi_0$$

Neve: LAPLACE operátor
(műveleti utasítások)

Így tehát írható, hogy:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi_0 + V_0 \cdot \Psi_0 = -\frac{\hbar}{j} \dot{\Psi}_0$$

(!) ÁLTALÁNOSÍTÁS

$V_0 \rightarrow V(\bar{r},t)$

$\Psi_0 \rightarrow \Psi(\bar{r},t)$

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi + V(\bar{r},t)\cdot \Psi = -\frac{\hbar}{j} \dot{\Psi}}$$

Időfüggő SCHRÖDINGER egyenlet

Vezessünk be egy új matematikai szimbólumot

$$\underbrace{\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \cdot + V(\bar{r},t)\right]}_{\text{matematikai műveletek (operációk) sorozata}} \Psi \equiv \hat{H} \cdot \Psi$$

matematikai műveletek (operációk) sorozata $\equiv$ operátor $(\hat{H})$

HAMILTON OPERÁTOR

Így:

$$\boxed{\hat{H}\Psi = -\frac{\hbar}{j} \dot{\Psi}}$$

Időfüggő Schrödinger egyenlet operátor szimbólumot használva

Kvantummechanika V. posztulátuma

Parciális differenciál egyenlet $\longrightarrow$ közönséges differenciál egyenlet(ek)
(SZEPARÁLÁS)

$$\begin{cases} V(\bar{r},t) \longrightarrow V(\bar{r}) & \text{konzervatív rendszer } E = \text{állandó} \\ \Psi(\bar{r},t) \longrightarrow \psi(\bar{r})\cdot \Theta(t) & \text{(szeparálható alakba írható)} \end{cases}$$

$$\hat{H}\Psi = -\frac{\hbar}{j}\dot{\Psi} \longrightarrow \Theta \hat{H}\psi = -\frac{\hbar}{j}\psi \cdot \dot{\Theta} \quad \Big| \frac{1}{\psi \cdot \Theta}$$

$$\underbrace{\frac{\hat{H}\psi}{\psi}}_{(\bar{r})} = \underbrace{-\frac{\hbar}{j}\frac{\dot{\Theta}}{\Theta}}_{(t)} \quad \forall (\bar{r},t)$$

12

Próbálkozások:

Pl: szabadon mozgó részecske $\longrightarrow$ síkhullám (de Broglie)

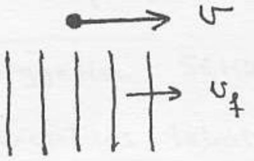
$$\Psi(\vec{r},t) = A \cdot e^{j(\vec{k}\vec{r}-\omega t)}$$

$V_0 \equiv 0$ választással

$$\omega = \frac{\hbar k^2}{2m}$$

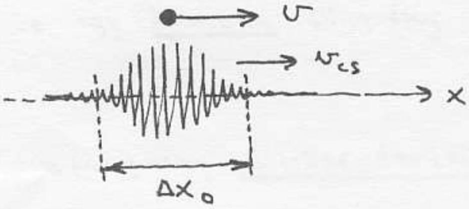
(diszperziós reláció)

$$v_f = \frac{\omega}{k} = \frac{\hbar k}{2m} = \frac{p}{2m} = \frac{v}{2} \quad (?)$$



$\left.\begin{matrix} \bullet \longrightarrow v \\ v_f = \frac{v}{2} \end{matrix}\right\}$ FURCSA!

szabadon mozgó részecske $\longrightarrow$ hullámcsomag (lokalizált)



$$v_{cs} = \frac{d\omega}{dk} = \frac{\hbar k}{m} = \frac{p}{m} = v \quad (!)$$

(EZ TALÁN ÉRTELMEZHETŐ)

$\downarrow$

DE diszperzió is van

$\left.\begin{matrix} t \text{ időpillanatban} & \Delta x_0 \\ t+T_2 \text{ időpillanatban} & 2\cdot\Delta x_0 \end{matrix}\right\}$ a hullámcsomag SZÉTFOLYIK

$$T_2 \approx \frac{m}{\hbar}(\Delta x_0)^2$$

Pl: $\left.\begin{matrix} m = 1\ \text{gr} \\ \Delta x_0 = 1\ \text{mm} \end{matrix}\right\}$ $T_2 = 10^{19}$ év EZ JÓ (makroszkópikus részecske)

$\left.\begin{matrix} m = 9\cdot 10^{-31}\ \text{kg} \\ \Delta x_0 = 10^{-10}\ \text{m} \end{matrix}\right\}$ $T_2 = 10^{-17}$ sec EZ ROSSZ! (az elektron nem stabil)

$\downarrow$

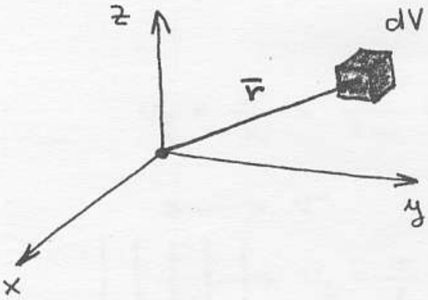
El kell vetnünk azt az (egyébként tetszetősnek tűnő) elképzelést, hogy a Ψ hullámfüggvény: valamilyen "anyagi közeg"-ben gerjesztett hullámjelenséget ír le, amit a méréseink során egy elektronként detektálunk.

(ANYAGHULLÁM NINCSEN!)

(13) MAX BORN (1926) + (Jordan, Bohr)

tapasztalati tény : csak egész elektront mérünk
(elemi töltés kvantálás)

$$P(\bar{r},t) \equiv |\Psi(\bar{r},t)|^2$$



$|\Psi(\bar{r},t)|^2\, dV$ megtalálási valószínűség !

konzervatív rendszer esetén

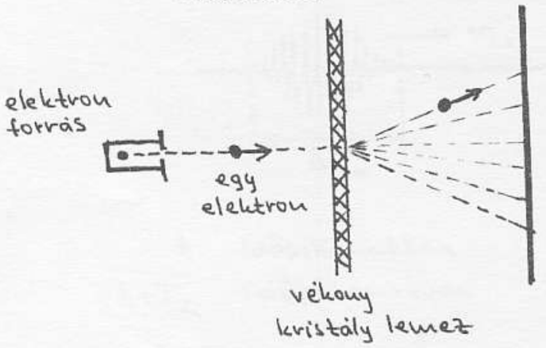
$V(\bar{r})$

$\downarrow$

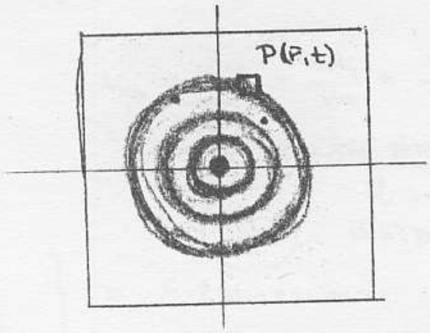
$$|\Psi(\bar{r},t)|^2 = |\psi(\bar{r})|^2 \equiv \psi(\bar{r})^* \psi(\bar{r})$$

$\uparrow$ komplex konjugált

kísérleti ellenőrzés :



(egyszerre csak egyetlen elektron van a rendszerben!)



becsapódási pontok

$\downarrow$

"INTERFERENCIA" gyűrűk

1.1.2. A hullámfüggvény matematikai tulajdonságai

$$\hat{H}\psi = E\psi \quad \Big| \cdot c$$

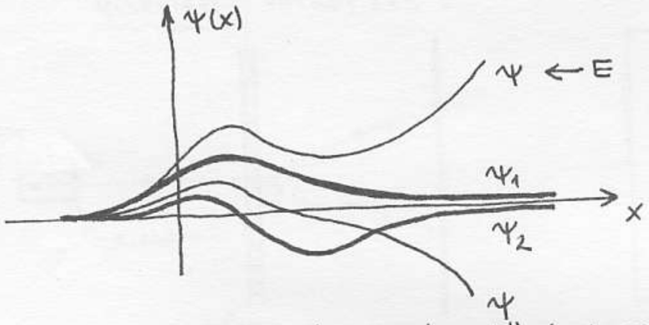
$$\hat{H}\underbrace{(c\psi)}_{\equiv\varphi} = E\underbrace{(c\cdot\psi)}_{\equiv\varphi} \quad \rightarrow \quad \int|\psi|^2 dV = \int|\varphi|^2 dV = 1 \quad \rightarrow \quad \boxed{|c|=1}$$

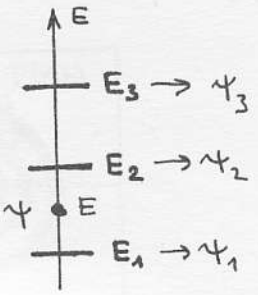
Gondolatmenet : 1 dim (szemléletes) $\longrightarrow$ általánosítás 3 dim. (reális jelenségek)

(Modern mikroelektronikai eszközök pl: kvantum völgyek)

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

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi'' + V(x)\psi = E\psi \quad + \text{ REGULARITÁS}$$





ψ: matematikai megoldás de nem reguláris így FIZIKAILAG nem értelmezhető!

$\hat{H}\psi_i = E_i\psi_i \quad \rightarrow$ sajátérték egyenlet : E_i sajátérték, ψ_i sajátfüggvény.

"Kötött állapot"

$$\psi'' = \frac{2m}{\hbar^2}\big(V(x)-E\big)\psi$$

$V(x)>E$ $\quad \psi'' = \begin{cases} >0 & \rightarrow \psi>0 \\ <0 & \leftarrow \psi<0 \end{cases}$

$V(x)<E$ $\quad \psi'' = \begin{cases} >0 & \leftarrow \psi<0 \\ <0 & \leftarrow \psi>0 \end{cases}$

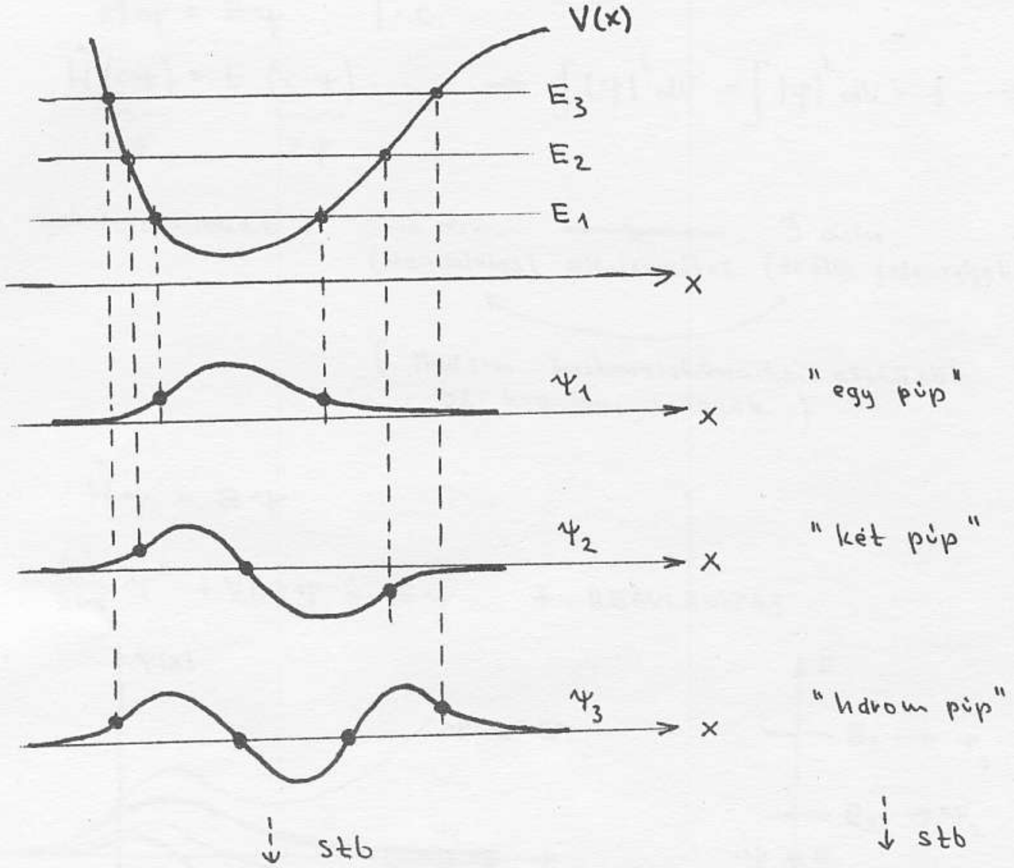
$\left.\begin{matrix} V(x)=E & \psi''=0 \\ \psi=0 & \psi''=0 \end{matrix}\right\}$ inflexió

a csomópontok száma változik

E nagyobb $\rightarrow$ több csomópont $\rightarrow \left\{E_{kin} \sim \frac{1}{\lambda(x)^2}\right\}$

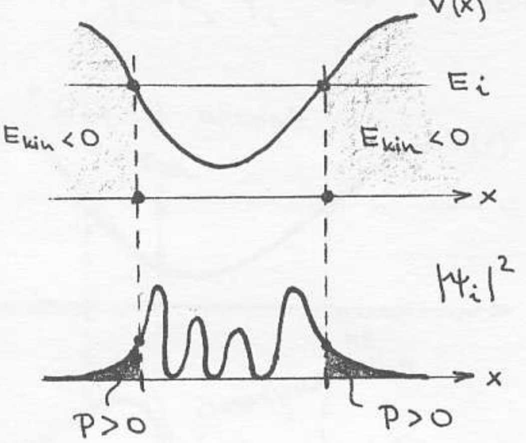
15

Kötött állapotok esetén általában kapjuk, hogy:



(ψ_i pontos meghatározása a Schrödinger egyenlet megoldásával történik $\rightarrow$ analitikus vagy numerikus módszerekkel)

Érdekesség :



A "részecske" $P > 0$ valószínűséggel megtalálható abban a térrészben is, ahol a "kinetikus energiája" negatív

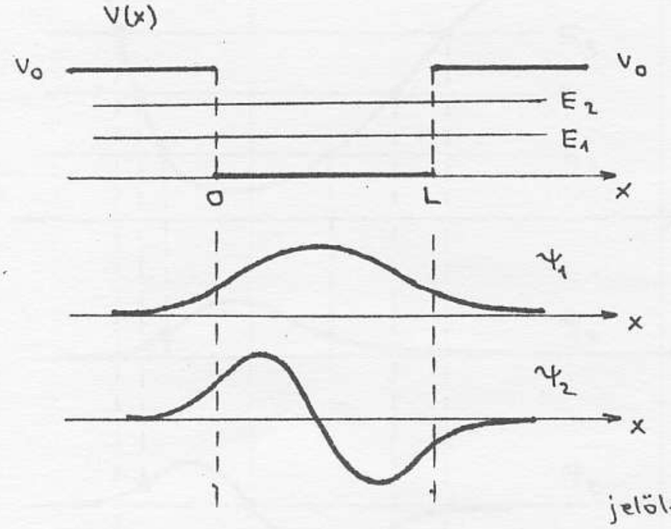
$\downarrow$

A "tömegpont szemlélet" nem jó!

(16)

1.1.3. Egyszerű példák kötött állapotokra

1.1.3.1. Potenciál völgy (Vázlatos tárgyalás)



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

$$\left.\begin{array}{l} -\frac{\hbar^2}{2m}\psi'' + V(x)\,\psi = E\psi \\ + \text{REGULARITÁS} \end{array}\right\}$$

$\downarrow$ (Matematika)

$$\psi'' = +\underbrace{\frac{2m}{\hbar^2}\left[V(x) - E\right]}\psi$$

jelölések: $\left\{\begin{array}{ll} +\frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E) & \equiv +\alpha^2 \\ -\frac{2m}{\hbar^2}E & \equiv -k^2 \end{array}\right.$

$x<0$ tartományban:

$$\left.\begin{array}{lll} \psi'' = +\alpha^2\psi & \longrightarrow & \psi(x) = A_0 e^{\alpha x} + B_0 e^{-\alpha x} \\ \text{REGULARITÁS} & \longrightarrow & \lim\limits_{x\to-\infty}\psi(x) = 0 \end{array}\right\} \quad \underline{\psi(x) = A_0 e^{\alpha x}}$$

$x>L$ tartományban:

$$\left.\begin{array}{lll} \psi'' = +\alpha^2\psi & \longrightarrow & \psi(x) = A_0 e^{\alpha x} + B_0 e^{-\alpha x} \\ \text{REGULARITÁS} & \longrightarrow & \lim\limits_{x\to\infty}\psi(x) = 0 \end{array}\right\} \quad \underline{\psi(x) = B_0 e^{-\alpha x}}$$

$0 \le x \le L$ tartományban:

$$\psi'' = -k^2\psi \longrightarrow \underline{\psi(x) = A\sin kx + B\cos kx} \quad \text{(REGULÁRIS)}$$

MEGOLDÁS a teljes $(-\infty < x < +\infty)$ tartományban

REGULARITÁS: $\psi(x)$ folytonosan differenciálható [Feladat]

$\downarrow$

$$\left.\begin{array}{ll} x=0 \text{ pontban} & \left\{\begin{array}{l} A_0 = B \\ \alpha A_0 = k\cdot A \end{array}\right. \\ x=L \text{ pontban} & \left\{\begin{array}{l} B_0 e^{-\alpha L} = A\sin kL + B\cos kL \\ -\alpha B_0 e^{-\alpha L} = kA\cos kL - kB\sin kL \end{array}\right. \end{array}\right] \rightarrow \alpha \rightarrow E$$

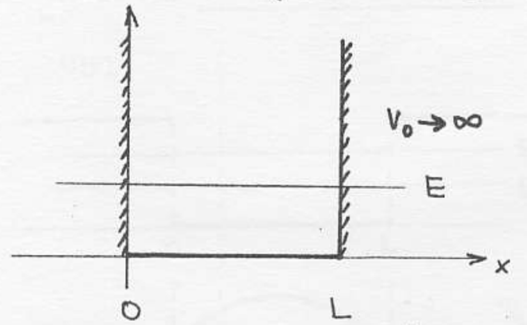
számítható [Feladat]

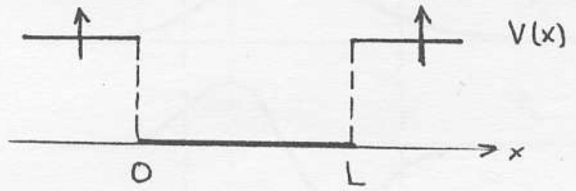
Megjegyzés: 1 dimenzióban mindig van legalább egy kötött állapot

GYAKORLATI ALKALMAZÁS: "kvantum völgyek" (Szilárdtestfizika)

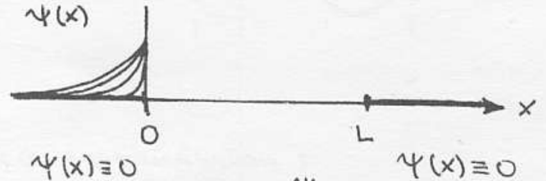
(17) 1.1.3.2. Potenciál doboz

(Matematikailag egyszerűen megoldható)

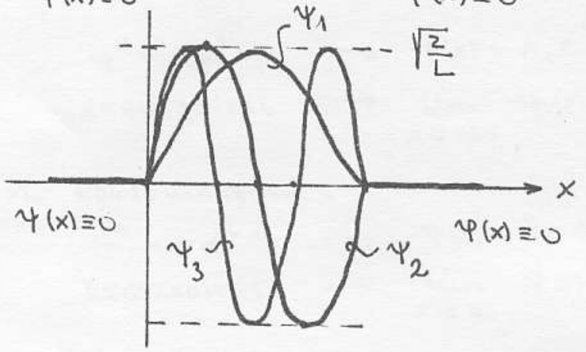




$\alpha^2 \equiv \frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E)$



$\lim\limits_{V_0 \to \infty} e^{\alpha x} = 0 \quad (\forall \; x<0)$



$\left\{ \begin{array}{l} 0 \le x \le L \quad \text{tartományban} \\ V(x) \equiv 0 \end{array} \right.$

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

$\psi(x) \equiv 0 \quad \{x<0, \; x>L\}$

$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi'' = E\psi \quad (0 \le x \le L)$

$\psi'' = -\underbrace{\frac{2mE}{\hbar^2}}_{\equiv k^2}\psi$

Regularitási feltétel: $\psi(x)$ folytonos $\leftarrow$ $\left\{ \begin{array}{l} \psi(x) = A \sin kx + B \cos kx \\ \text{(matematikai megoldás)} \end{array} \right.$

azaz $\psi(0) = \psi(L) = 0$

$\psi(0) = \phi + B = 0$ azaz $B \equiv 0$

$\psi(L) = A \sin \underbrace{kL}_{n\pi} = 0$

$n = 0 \pm 1 \pm 2 \pm \ldots$ (matematika) $\Big\downarrow$ FIZIKA

$\downarrow$

$k = \frac{\pi}{L} n \;\to\; E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} n^2$

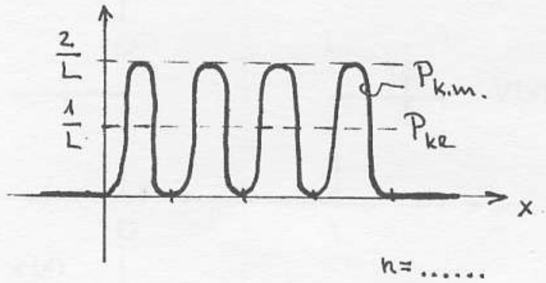
$\psi(x) = A \sin \frac{n\pi}{L} x$

$(n = 1, 2, 3, \ldots)$

$\int_0^L |\psi|^2 dx = 1 \;\to\; A = \sqrt{\frac{2}{L}}$

(18) A kapott megoldás értelmezése:

$$\boxed{\begin{aligned} E_n &= \frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}\,n^2 \\ \psi_n &= \sqrt{\frac{2}{L}}\,\sin\frac{n\pi}{L}x \\ n &= 1,2,3,\dots \end{aligned}}$$



A megtalálási valószínűség-sűrűség a klasszikus mechanika szerint

$$P_{ke}\,dx = A\cdot dt$$

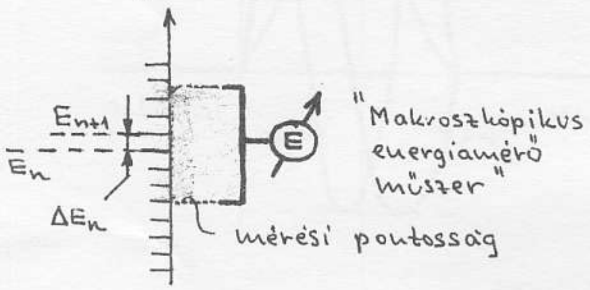
$$P_{ke} = A\cdot\frac{dt}{dx} = \frac{A}{\dot{x}} \equiv P_0 = \frac{1}{L}$$

Érdemes megvizsgálni: Kvantummechanika → klasszikus mechanika

(Korrespondencia elv)

Az energia:

$$E_n = E_0\cdot n^2$$



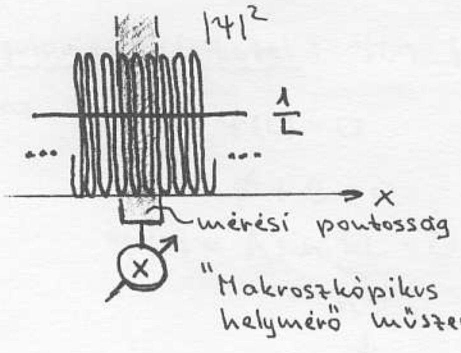
$$\frac{\Delta E_n}{E_n} = \frac{(n+1)^2-n^2}{n^2} = \frac{2n+1}{n^2}$$

$$(n \gg 1)$$

$$\lim_{n\to\infty}\frac{\Delta E_n}{E_n} = 0$$

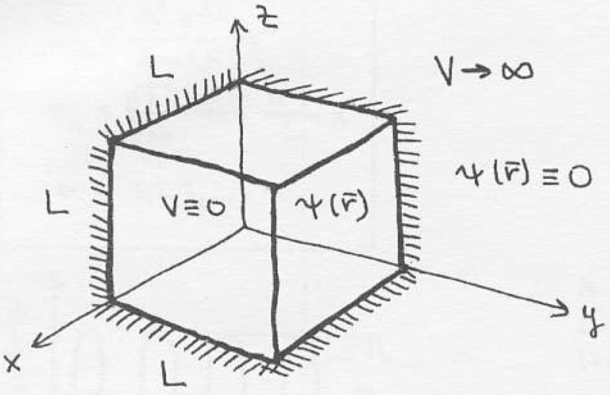
A kvantáltság "eltűnik"

A megtalálási valószínűség



"Makroszkópikus helymérő műszer" → a helymérés átlaga: $\frac{1}{L}$

(19) Háromdimenziós potenciál doboz



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

$$\psi(\bar{r}) \equiv 0 \quad \text{ha } \bar{r} \notin L^3$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi = E\psi \quad \text{ha } \bar{r} \in L^3$$

$$\Delta\psi = -\underbrace{\frac{2mE}{\hbar^2}}_{\equiv k^2}\psi$$

Szeparálás : $\psi(\bar{r}) \equiv X(x)\cdot Y(y)\cdot Z(z)$

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\psi = -k^2\psi$$

$$X''YZ + XY''Z + XYZ'' = -k^2\cdot XYZ \quad \Big|\cdot\frac{1}{XYZ}$$

$$\underbrace{\frac{X''}{X}}_{(x)} + \underbrace{\frac{Y''}{Y}}_{(y)} + \underbrace{\frac{Z''}{Z}}_{(z)} = -k^2$$

$$\downarrow \qquad \downarrow \qquad \downarrow$$

$$-k_x^2 - k_y^2 - k_z^2 = -k^2 \longrightarrow E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m}\left(k_x^2+k_y^2+k_z^2\right)$$

$$\left.\begin{array}{l} X'' = -k_x^2 X \\ Y'' = -k_y^2 Y \\ Z'' = -k_z^2 Z \end{array}\right] + \text{PEREMFELTÉTELEK } \left(\psi(\bar{r})=0 \text{ a falnál}\right) \rightarrow \left\{\begin{array}{ll} k_x = \frac{\pi}{L} n_x & (n_x = 1,2,3\ldots) \\ k_y = \frac{\pi}{L} n_y & (n_y = 1,2,3\ldots) \\ k_z = \frac{\pi}{L} n_z & (n_z = 1,2,3,\ldots) \end{array}\right.$$

Adódott tehát:

$$\boxed{\begin{array}{l} E = \frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}\left(n_x^2+n_y^2+n_z^2\right) \\ \psi(x,y,z) = \sqrt{\frac{8}{L^3}}\,\sin\left(\frac{n_x\pi}{L}x\right)\cdot\sin\left(\frac{n_y\pi}{L}y\right)\cdot\sin\left(\frac{n_z\pi}{L}z\right) \\ n_x, n_y, n_z = 1,2,3,\ldots \end{array}}$$

↑

u.n.: kvantum számok

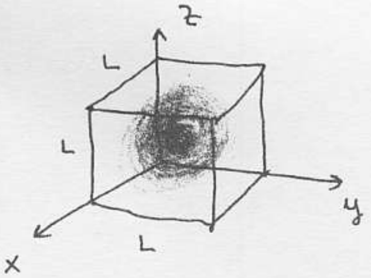
(20) Degenerált (elfajult) állapotok

$$\{n_x, n_y, n_z\} \begin{cases} \to \psi(\vec{r}) \\ \to E = E_0\,(n_x^2 + n_y^2 + n_z^2) \end{cases}$$

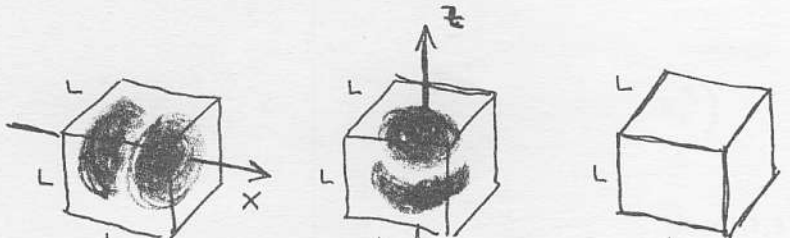
ψ	n_x	n_y	n_z	E
ψ_{111}	1	1	1	$3E_0$
ψ_{211}	2	1	1	$6E_0$
ψ_{121}	1	2	1	
ψ_{112}	1	1	2	

$\rightarrow$ Egy sajátértékhez több sajátfüggvény tartozik.

Degenerált állapotok és a "szimmetria"

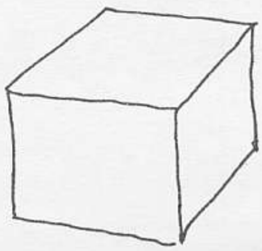


$|\psi_{111}|^2$ $E = 3E_0$



$$\underbrace{|\psi_{211}|^2 \quad |\psi_{112}|^2 \quad |\psi_{121}|^2}_{E = 6E_0}$$

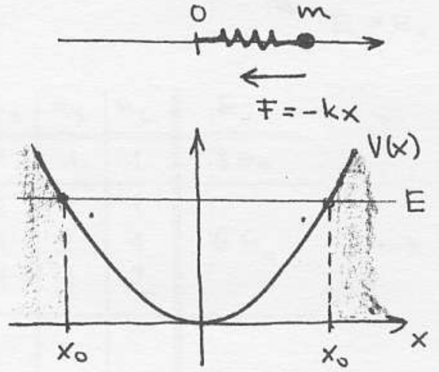
Feladat:



$|\psi_{221}|^2$

(21) **1.1.3.3. Harmonikus lineáris oszcillátor**

Klasszikus pontmechanikában

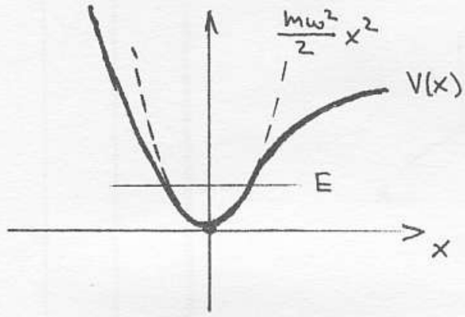


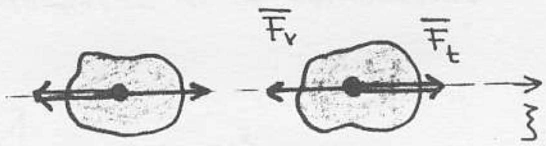
$$x(t) = x_0 \sin(\omega t + \delta)$$

$$\omega \equiv \sqrt{\frac{k}{m}}$$

$$V(x) = \frac{k}{2} x^2 = \frac{m\omega^2}{2} x^2$$

↓ általánosítás

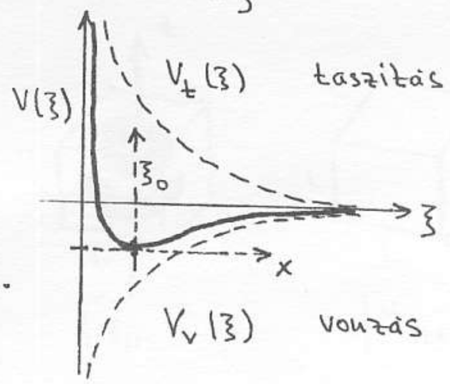




"Vonzás és taszítás"

$$F_t = -\frac{d}{d\xi} V_t$$

$$F_v = -\frac{d}{d\xi} V_v$$



koordináta rendszer választás

$$\begin{cases} \xi \to x \\ V(\xi) \to V(x) \end{cases}$$

$$V(x) = \underbrace{V(0)}_{=\emptyset} + \underbrace{\left[\frac{dV}{dx}\right]_0}_{=\emptyset} x + \frac{1}{2}\underbrace{\left[\frac{d^2V}{dx^2}\right]_0}_{\equiv \frac{1}{2}m\omega^2} x^2 + \dots$$

Kvantummechanikai tárgyalás

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

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi'' + \frac{m\omega^2 x^2}{2}\psi = E\psi \quad \to \quad \left.\begin{matrix} \psi(x) = ? \\ E = ? \end{matrix}\right\} \text{ sajátérték feladat}$$

Matematika:

$$\psi'' + \frac{2m}{\hbar^2}\left(E - \frac{m\omega^2}{2}x^2\right)\psi = 0$$

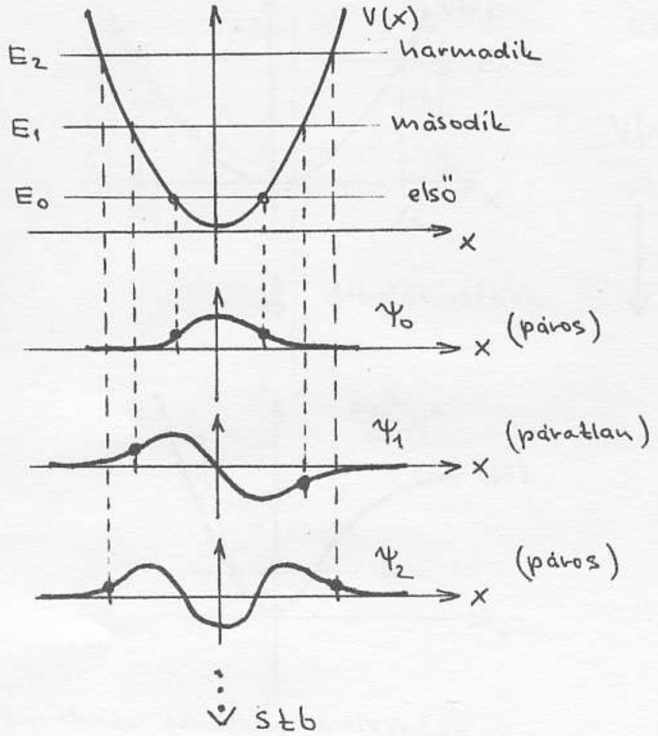
$$\psi'' + \left(\underbrace{\frac{2mE}{\hbar^2}}_{\equiv \eta} - \underbrace{\frac{m^2\omega^2}{\hbar^2}}_{\equiv \alpha^2} x^2\right)\psi$$

(jelölés bevezetésével)

22

$$\psi'' + (\eta - \alpha^2 x^2)\psi = 0$$
$$\downarrow \qquad\qquad \downarrow$$
$$? \qquad\qquad ?$$

A már ismertetett általános meggondolások alapján a kvalitatív eredmény felrajzolható :



$$V(x) = \frac{1}{2} m\omega^2 x^2$$

$$V(x) = V(-x)$$

$\psi(x) = \psi(-x)$ páros

$\psi(x) = -\psi(-x)$ páratlan

$$|\psi(x)|^2 = |\psi(-x)|^2$$

Legyen (próbálgatás!) $\quad \psi_0 = A_0 e^{-\gamma x^2}$

$$E_0 \rightarrow \eta_0$$

$$\psi_0'' + (\eta_0 - \alpha^2 x^2)\psi_0 = 0$$

$$\psi_0' = -2\gamma x \cdot \psi_0$$

$$\psi_0'' = -2\gamma\psi_0 - 2\gamma x\psi_0' = \dots$$

Tehát: $\quad = (-2\gamma + 4\gamma^2 x^2)\psi_0$

$$\underbrace{(-2\gamma + 4\gamma^2 x^2 + \eta_0 - \alpha^2 x^2)}_{\equiv 0}\underbrace{\psi_0}_{\neq 0} = 0 \qquad (\forall x)$$

$$\underbrace{(\eta_0 - 2\gamma)}_{\equiv 0} + \underbrace{(4\gamma^2 - \alpha^2)}_{\equiv 0}x^2 = 0 \qquad (\forall x)$$

(KELL!)

$\eta_0 = 2\gamma$

$2\gamma = \pm\alpha \longrightarrow \underline{\psi_0 = A_0 e^{\pm\frac{\alpha}{2}x^2}}$ (matematikai megoldás) $\rightarrow$

23

Regularitási feltétel:

$$\lim_{x \to \pm\infty} \psi_0(x) = 0 \quad \longrightarrow \quad \psi_0(x) = A_0 e^{-\frac{\alpha}{2}x^2}$$

A_0 meghatározása: $\displaystyle\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi_0(x)|^2 \, dx = 1$ $\qquad A_0 = \ldots\ldots\ldots$

Az E_0 energiaszint (alapállapoti energia) meghatározása:

$$E_0 = \frac{\hbar^2}{2m}\eta_0 = \frac{\hbar^2}{2m}\alpha = \frac{\hbar^{\cancel{2}}}{2\cancel{m}} \frac{\cancel{m}\omega}{\cancel{\hbar}} = \frac{1}{2}\hbar\omega$$

Tehát:

$$\boxed{\begin{aligned} E_0 &= \frac{1}{2}\hbar\omega \\ \psi_0 &= A_0 e^{-\frac{\alpha}{2}x^2} \end{aligned}} \longleftarrow \alpha = \frac{m\omega}{\hbar}$$

További próbálkozások

$\psi_1(x) = (c_1 \cdot x)\psi_0$ (páratlan)

$\psi_2(x) = (c_0 + c_2 x^2)\psi_0$ (páros)

$\psi_3(x) = (c_1 x + c_3 x^3)\psi_0$ (páratlan)

$\vdots$

$$\psi_n(x) = \underbrace{\mathcal{H}_n(x)}_{n\text{-ed fokú polinom (páros vagy páratlan)}} \cdot \psi_0$$

$$\boxed{\mathcal{H}_n(x) \equiv \sum_{k=1}^{n}{}' c_k x^k} \qquad \underbrace{\{c_k\}}_{\substack{\uparrow \\ \text{ezeket kell meghatározni}}} \longrightarrow \mathcal{H}_n(x)$$

A Schrödinger egyenlet:

$$\psi_n'' + (\eta_n - \alpha^2 x^2)\psi_n = 0 \quad \longrightarrow \quad \psi_0'' + (\eta_0 - \alpha^2 x^2)\psi_0 = 0$$

$$\psi_n = \mathcal{H}_n \cdot \psi_0$$

$$\psi_n'' = \mathcal{H}_n'' \cdot \psi_0 + 2\mathcal{H}_n' \underset{\substack{\uparrow \\ -\alpha x \psi_0}}{\psi_0'} + \mathcal{H}_n \cdot \psi_0''$$

---

matematika:

24

$$\mathcal{H}_n''\psi_0 - 2\alpha x\,\mathcal{H}_n'\psi_0 + \underbrace{\mathcal{H}_n\cdot\psi_0'' + (\eta_n - \alpha^2x^2)\,\mathcal{H}_n\psi_0}_{\mathcal{H}_n\cdot\underbrace{\left[\psi_0'' + (\eta_n-\alpha^2x^2)\psi_0\right]}_{\underbrace{\psi_0'' + (\eta_0-\alpha^2x^2)\psi_0}_{\equiv\,\emptyset} + (\eta_n-\eta_0)\psi_0}} = 0$$

azaz

$$\mathcal{H}_n'' - 2\alpha x\,\mathcal{H}_n' + (\eta_n-\eta_0)\,\mathcal{H}_n = 0$$

(HERMITE diff. egyenlet)

$$\mathcal{H}_n = \sum_k c_k x^k$$

$$\mathcal{H}_n' = \sum_k c_k\cdot k\cdot x^{k-1}$$

$$\mathcal{H}_n'' = \sum_k c_k\cdot k\cdot(k-1)\cdot x^{k-2}$$

$$\underbrace{\sum_{k=0} k(k-1)c_k\cdot x^{k-2}}_{} - \sum_{k=0} 2\alpha\cdot k\cdot c_k x^k + \sum_{k=0}(\eta_n-\eta_0)c_k x^k = \emptyset$$

$c_0\cdot\emptyset + c_1\cdot\emptyset + 2c_2x^0 + \dots$

átindexelés $k \to k+2$

$$\sum_{k=0}(k+2)(k+1)\,c_{k+2}\,x^k$$

Tehát

$$\sum_k \underbrace{\left[(k+2)(k+1)c_{k+2} - 2\alpha k\,c_k + c_k(\eta_n-\eta_0)\right]}_{\equiv\,\emptyset} x^k = 0$$

$$c_{k+2} = c_k\,\frac{2\alpha k - (\eta_n-\eta_0)}{(k+2)(k+1)}$$

u.n. rekurziós formula

↓

(HERMITE polinomok)

$c_0 \to c_2, c_4, c_6, c_8, \dots \to \mathcal{H}_n(x)$ páros

$c_1 \to c_1, c_3, c_5, c_7, \dots \to \mathcal{H}_n(x)$ páratlan

↑

(peremfeltételekből)

↓

POLINOM kell hogy legyen!

25

$\mathcal{H}_n(x)$ akkor lesz polinom, ha:

$$\underbrace{c_n \neq 0 \qquad c_{n+2} = 0}, \qquad c_{n+4} = 0 \;, \;\dots \text{stb}$$

$$\underbrace{c_{n+2}}_{=0} = \underbrace{c_n}_{\neq 0} \underbrace{\frac{2\alpha n - (\eta_n - \eta_0)}{(n+2)(n+1)}}_{=\phi}$$

kell, hogy legyen (η_n még ismeretlen!)

$$2\alpha n - (\eta_n - \eta_0) = 0$$

$$\eta_n = \eta_0 + 2\alpha n$$

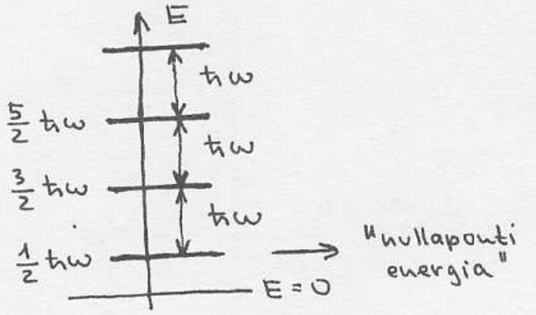
$$\downarrow$$

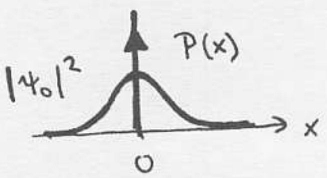
E_n = meghatározható

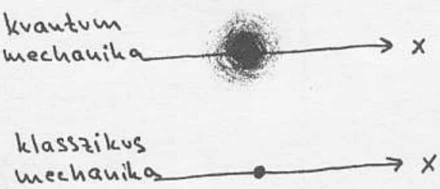
$$E_n = \frac{\hbar^2}{2m}\eta_n = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\eta_0 + 2\alpha n\right) = E_0 + \frac{\hbar^2 \alpha}{m} n = \underset{\uparrow \atop \frac{1}{2}\hbar\omega}{E_0} + \hbar\omega \cdot n$$

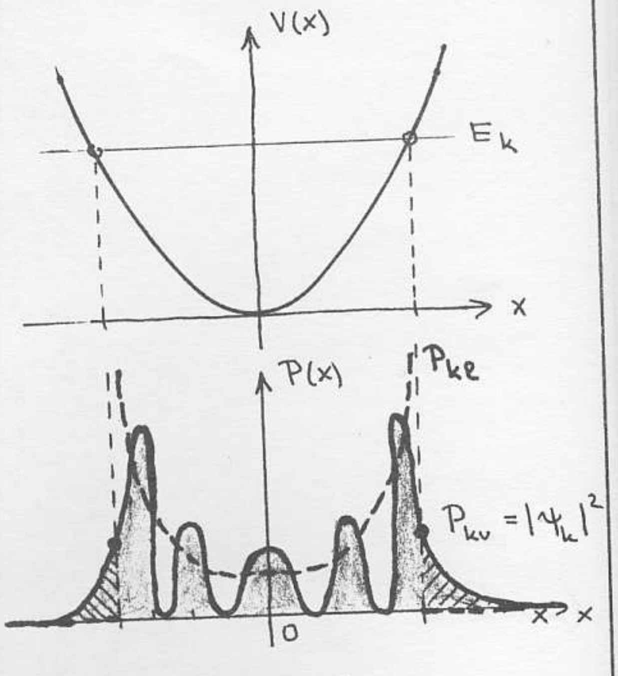
$$\boxed{E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right) \quad (n = 0, 1, 2, 3, \dots)}$$

$$\boxed{\psi_n = \mathcal{H}_n(x)\, e^{-\frac{\alpha}{2}x^2}}$$







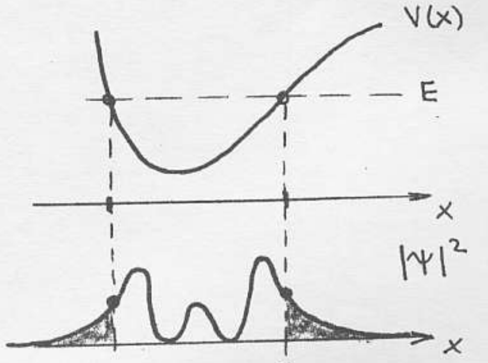


$$P_{kl} = \frac{\text{áll}}{\dot{x}} = \frac{A}{\sqrt{E - V(x)}}$$

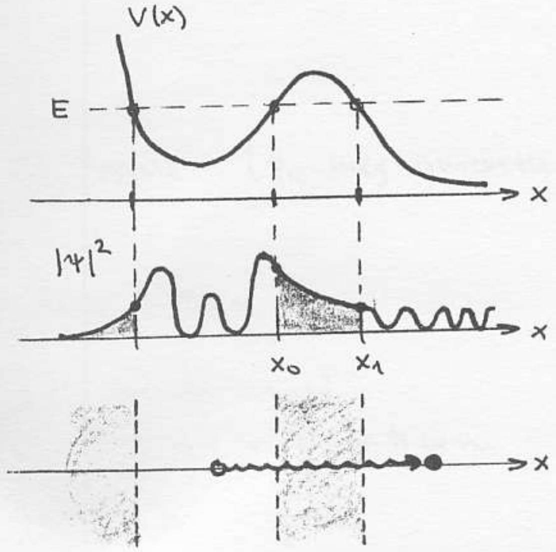
Kölcsönhatás $\hbar\omega$ energiaadagokban!

(26) 1.1.4. Nem kötött állapotok tárgyalása

1.1.4.1. A valószínűségi áramsűrűség



$$P(x>x_0) = \int_{x_0}^{\infty} |\Psi|^2 dx > 0$$



A részecske véges valószínűséggel áthalad egy klasszikus mechanika szerint "tiltott tartományon" ($\equiv E_{kin} < 0$!).

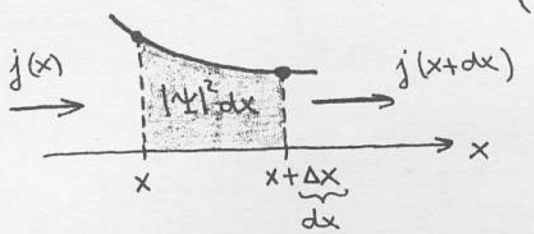
Az állapotfüggvény fizikai tartalma:

$$\Psi(\bar{r}) \to \Psi(x) = \begin{cases} \text{kötött állapot esetén}: \int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi|^2 dx = 1 \\ \text{nem kötött állapot esetén}: \int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi|^2 dx = \infty \quad (!) \end{cases}$$

↓

új fogalom : valószínűségi áramsűrűség $(\bar{j} \to j(x))$

1 dimenziós esetben: $(\Delta x \to dx)$!



$$j(x+dx) - j(x) = -\frac{\partial}{\partial t}\left\{ |\Psi|^2 dx \right\}$$

"kontinuitási egyenlet"
↓
"mérlegegyenlet"

$$\underbrace{\frac{j(x+dx) - j(x)}{dx}}_{\equiv \frac{d}{dx} j} = -\frac{\partial}{\partial t} |\Psi|^2$$

(27) Mivel a $\Psi(x,t)$-t meghatározó egyenlet az időtől függő Schrödinger egyenlet, ezért ebből kell kiindulnunk.

$$\boxed{\hat{H}\Psi = -\frac{\hbar}{j}\dot{\Psi}} \longrightarrow \boxed{\frac{d}{dx} j = -\frac{\partial}{\partial t}|\Psi|^2}$$

$j \equiv \sqrt{-1}$ (!)

$j \equiv$ valószínűségi áram sűrűség.

Ezt kell definiálni!

$$-\frac{\partial}{\partial t}|\Psi|^2 = -\frac{\partial}{\partial t}\Psi^* \cdot \Psi = -\dot{\Psi}^*\Psi - \Psi^* \cdot \dot{\Psi}$$

$$\left.\begin{aligned} \hat{H}\Psi &= -\frac{\hbar}{j}\dot{\Psi} \\ (\hat{H}\Psi)^* &= +\frac{\hbar}{j}\dot{\Psi}^* \end{aligned}\right\}$$

$$-\frac{\partial}{\partial t}|\Psi|^2 = -\frac{j}{\hbar}\left\{\Psi(\hat{H}\Psi)^* - \Psi^*\hat{H}\Psi\right\} = -\frac{j}{\hbar}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Psi\Psi^{*''} + \frac{\hbar^2}{2m}\Psi^*\Psi''\right]$$

$$\hat{H} \equiv \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V\right)$$

$$= -\frac{j}{\hbar}\cdot\frac{\hbar^2}{2m}\underbrace{\left\{\Psi^*\Psi'' - \Psi\Psi^{*''}\right\}}_{\frac{d}{dx}\left(\Psi^*\Psi' - \Psi\Psi^{*'}\right)} = +\frac{\hbar}{2mj}\frac{d}{dx}\left(\Psi^*\Psi' - \Psi\Psi^{*'}\right) =$$

$$= \frac{d}{dx}\left\{\frac{\hbar}{2mj}\left(\Psi^*\Psi' - \Psi\Psi^{*'}\right)\right\} \equiv \frac{d}{dx} j(x)$$

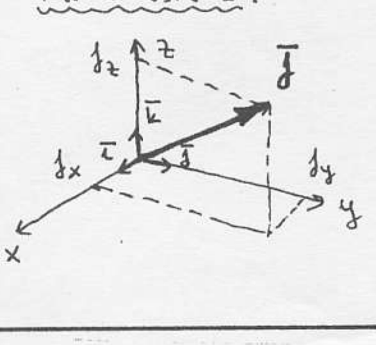
azaz

$$\boxed{j(x) \equiv \frac{\hbar}{2mj}\left(\Psi^*\Psi' - \Psi\Psi^{*'}\right)}$$

konzervatív rendszerek esetén

$$\Psi(x,t) = \psi(x)\, e^{-j\frac{E}{\hbar}t} \quad \longrightarrow \quad j(x) = \frac{\hbar}{2mj}\left(\psi^*\psi' - \psi\psi^{*'}\right)$$

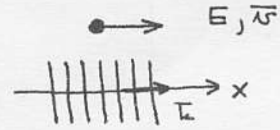
Általánosítás:



$$\left.\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} &\longrightarrow j_x \\ \frac{\partial}{\partial y} &\longrightarrow j_y \\ \frac{\partial}{\partial z} &\longrightarrow j_z \end{aligned}\right\} \quad \boxed{\bar{j} = \frac{\hbar}{2mj}\left(\Psi^*\nabla\Psi - \Psi\nabla\Psi^*\right)}$$

$$\nabla \equiv \text{grad} \equiv \frac{\partial}{\partial x}\bar{i} + \frac{\partial}{\partial y}\bar{j} + \frac{\partial}{\partial z}\bar{k}$$

Példa: Szabadon mozgó részecske:



$$\Psi(x,t) = \underbrace{A\cdot e^{jkx}}_{\psi(x)} \cdot e^{-j\frac{E}{\hbar}t}$$

$$\left.\begin{aligned} \psi(x) &= A e^{jkx} \\ \psi^*(x) &= A^* e^{-jkx} \\ \psi'(x) &= jk\cdot\psi \\ \psi^{*\prime}(x) &= -jk\cdot\psi^* \end{aligned}\right\} \quad j = \frac{\hbar}{2mj}\left\{jk|A|^2 + jk|A|^2\right\} = \frac{\hbar k}{m}|A|^2 = \frac{p}{m}|A|^2 = v\cdot|A|^2 = v\cdot|\psi|^2$$

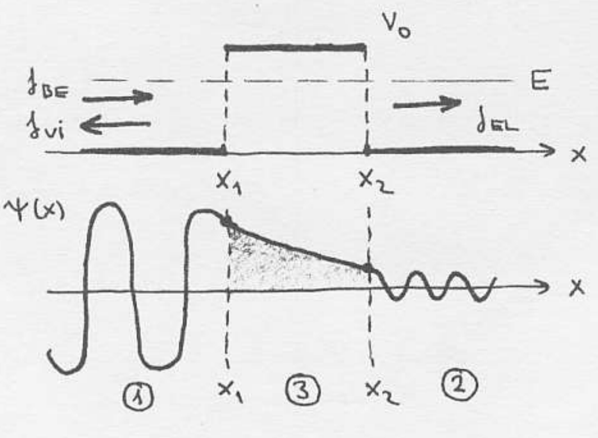
↓

általában: $\boxed{\bar{j} = \frac{\bar{p}}{m}|\psi|^2}$

analógia: áramsűrűség a klasszikus fizikában.

1.1.4.2. Áthaladás potenciálgáton (közelítő számítás)

(GAMOW formula)



A részecske átjutásának a valószínűsége (≡transzmisszió)

$$\boxed{T \equiv \frac{j_{EL}}{j_{BE}}}$$

$$\left.\begin{aligned} j_{BE} &= v_1\cdot|\psi_1|^2 \\ j_{EL} &= v_2\cdot|\psi_2|^2 \end{aligned}\right\} v_1 = v_2$$

$$\left.\begin{aligned} T &= \frac{|\psi_2(x_2)|^2}{|\psi_1(x_1)|^2} \\ \psi_1(x_1) &= \psi_3(x_1) \\ \psi_2(x_2) &= \psi_3(x_2) \end{aligned}\right\} \quad T \approx \left|\frac{\psi_3(x_2)}{\psi_3(x_1)}\right|^2$$

$$\psi_3'' = \underbrace{-\frac{2m}{\hbar^2}(E-V_0)}_{\equiv \alpha^2}\cdot\psi_3 \;\rightarrow\; \psi_3 = A e^{\pm\alpha x}$$

29

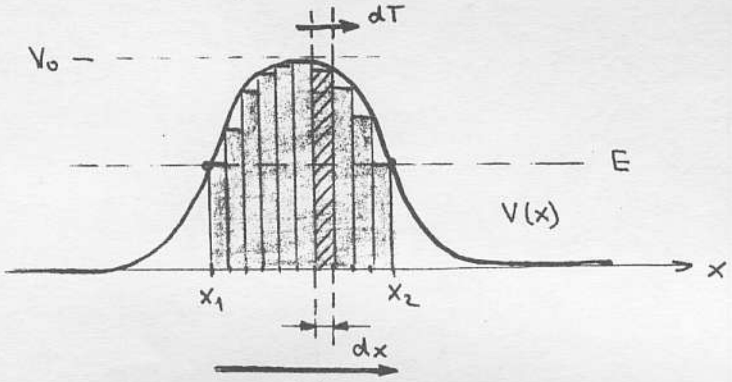
Azaz

$$T \approx \left|\frac{\psi_3(x_1)}{\psi_3(x_2)}\right|^2 = \left|e^{\pm\alpha(x_2-x_1)}\right|^2 = e^{\pm 2\alpha(x_2-x_1)} \leq 1$$

(T definíciója miatt!)

$$T \approx e^{-2\alpha(x_2-x_1)} = e^{-2\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V_0-E)}\cdot(x_2-x_1)}$$

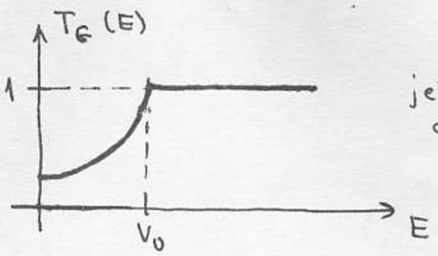
Tetszőleges alakú potenciálgát :



GAMOW közelítés :

$$T \approx T_G \equiv \prod dT$$

$$T_G = \prod e^{-2\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}[V(x)-E]}\cdot dx} = e^{-2\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}}\int_{x_1}^{x_2}\sqrt{V(x)-E}\,dx}$$

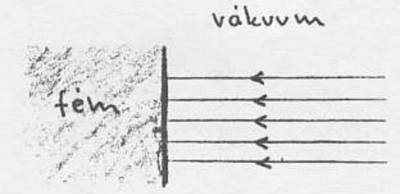


jellegzetes alak

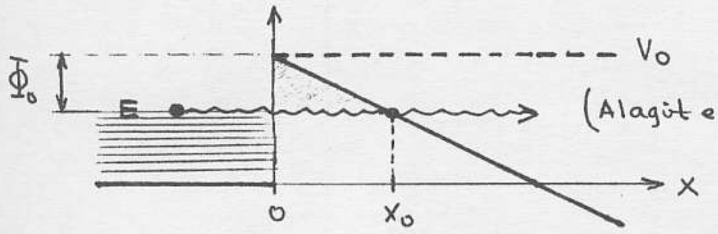
30

Példa: Hideg-emisszió (tér-emisszió)

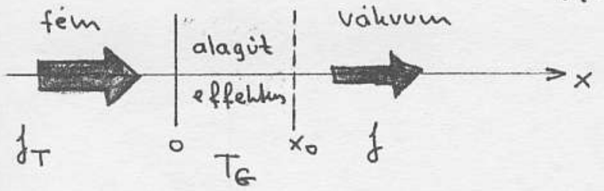
(Elektronok kilépése fémekből elektrosztatikus tér hatására)



$\overline{\mathcal{E}}$ (homogén elektromos tér)



$V(x) = V_0 - \mathcal{E}\cdot x$



$$\boxed{j = j_T \cdot T_G}$$

$j = j_T$ ($\equiv$ telítési áram, ha $T_G = 1$)

$$T_G = e^{-2\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}}\int_0^{x_0}\sqrt{V(x)-E}\,dx}$$

ahol $V(x) - E = (V_0 - \mathcal{E}\cdot x) - E = (V_0 - \mathcal{E}x) - (V_0 - \Phi_0) = \Phi_0 - \mathcal{E}\cdot x$

mivel $V(x_0) - E = 0 \longrightarrow \Phi_0 - \mathcal{E}\cdot x_0 = 0 \longrightarrow \Phi_0 = \mathcal{E}x_0$

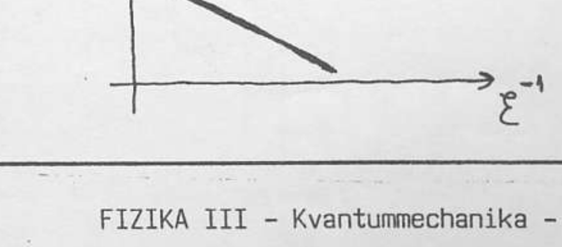
$$\int_0^{x_0}\sqrt{V(x)-E}\,dx = \sqrt{\mathcal{E}}\cdot\int_0^{x_0}\sqrt{x_0 - x}\,dx = \sqrt{\mathcal{E}}\left[-\frac{2}{3}(x_0-x)^{\frac{3}{2}}\right]_0^{x_0} = \underbrace{\frac{2}{3}\sqrt{\mathcal{E}}\,x_0^{\frac{3}{2}}}_{\frac{2}{3}\frac{1}{\mathcal{E}}\Phi_0^{3/2}} =$$

$$\boxed{j = j_T \cdot e^{-\text{áll}\cdot\frac{\Phi_0^{\frac{3}{2}}}{\mathcal{E}}}}$$

(közelítő összefüggés)

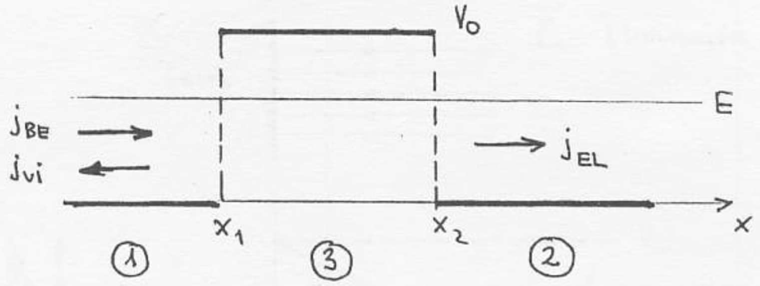
↓

FOWLER – NORDHEIM formula



(31) 1.1.4.3. Áthaladás potenciálgáton, potenciálvölgyön ...

Négyszögletes potenciálgát : A számolás elvégezhető



(stacionárius állapot)

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

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi'' + V(x)\psi = E\psi$$

$$\psi'' = \frac{2m}{\hbar^2}(E-V)\psi$$

$$\psi_1(x) = A_1 e^{jkx} + B_1 e^{-jkx}$$

$$\psi_3(x) = A_3 e^{\alpha x} + B_3 e^{-\alpha x}$$

$$\psi_2(x) = A_2 e^{jkx}$$

$\leftarrow$

$$k \equiv \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \qquad (V \equiv 0)$$

$$\alpha \equiv \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E)}$$

$$L \equiv x_2 - x_1$$

Regularitás : $\psi(x)$ folytonosan deriválható (x_1 és x_2 -ben is !)

T_G

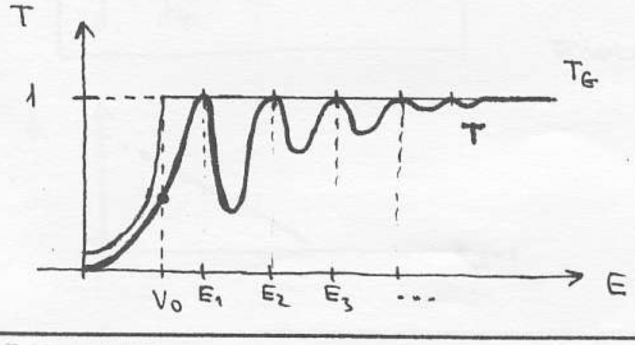
$$\left.\begin{aligned}
(*)\quad & \psi_1(x_1) = \psi_3(x_1) \\
& \psi_1'(x_1) = \psi_3'(x_1) \\
(*)\quad & \psi_2(x_2) = \psi_3(x_2) \\
& \psi_2'(x_2) = \psi_3'(x_2)
\end{aligned}\right\} \longrightarrow T = \frac{j_{EL}}{j_{BE}} = \frac{|A_2|^2}{|A_1|^2} = \dots$$

$$T = \frac{1}{1 + \underbrace{\frac{V_0^2}{4E(V_0-E)}\,\mathrm{sh}^2\sqrt{\frac{2mL^2}{\hbar^2}(V_0-E)}}_{\downarrow}} \longrightarrow \text{GAMOW } (E < V_0)$$

(Feladat)

$$\frac{1}{E-V_0}\,\sin^2\sqrt{\frac{2mL^2}{\hbar^2}(E-V_0)}$$

Ha $(E > V_0)$

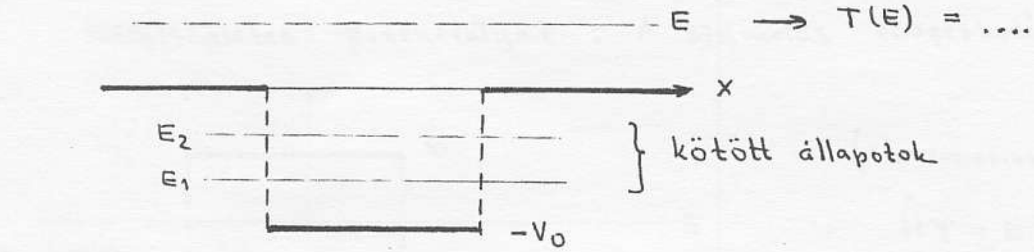


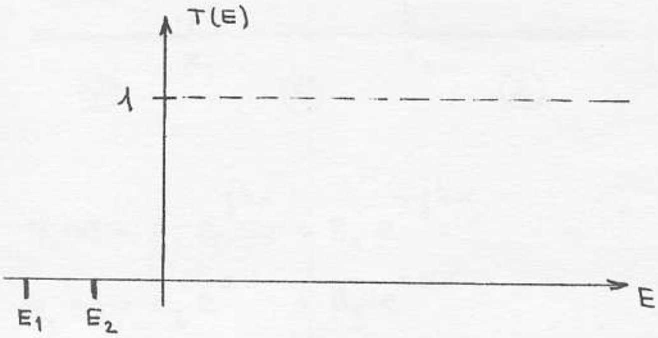
$T(E_i) = 1$

$\uparrow$

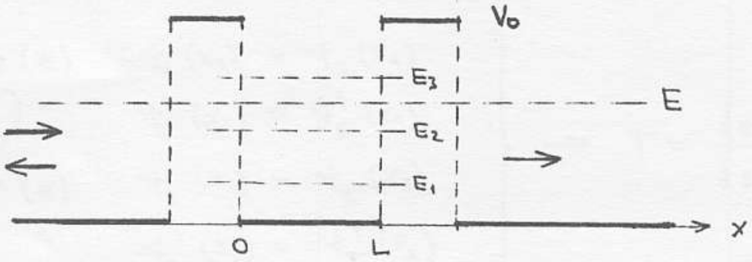
(Feladat)

(32) Négyszögletes potenciálvölgy :





Rezonáns alagút effektus :



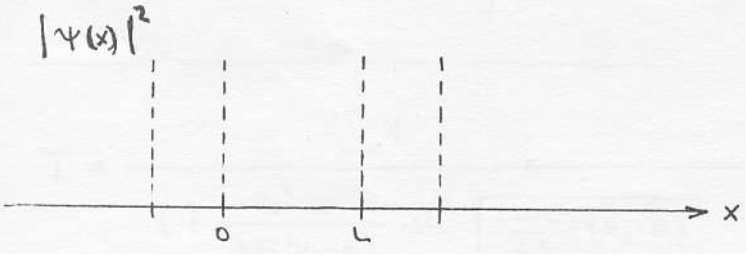
$E_1, E_2, E_3, \ldots$
(ú.n. virtuális energiaszintek)

$\downarrow$

$$\underbrace{\frac{1}{L}\int_0^L |\psi|^2 dx}_{} \gg \text{(kívül)}$$

$\downarrow$

(0,L) tartományban a részecske "hosszú" ideig tartózkodik



$E \approx E_i$