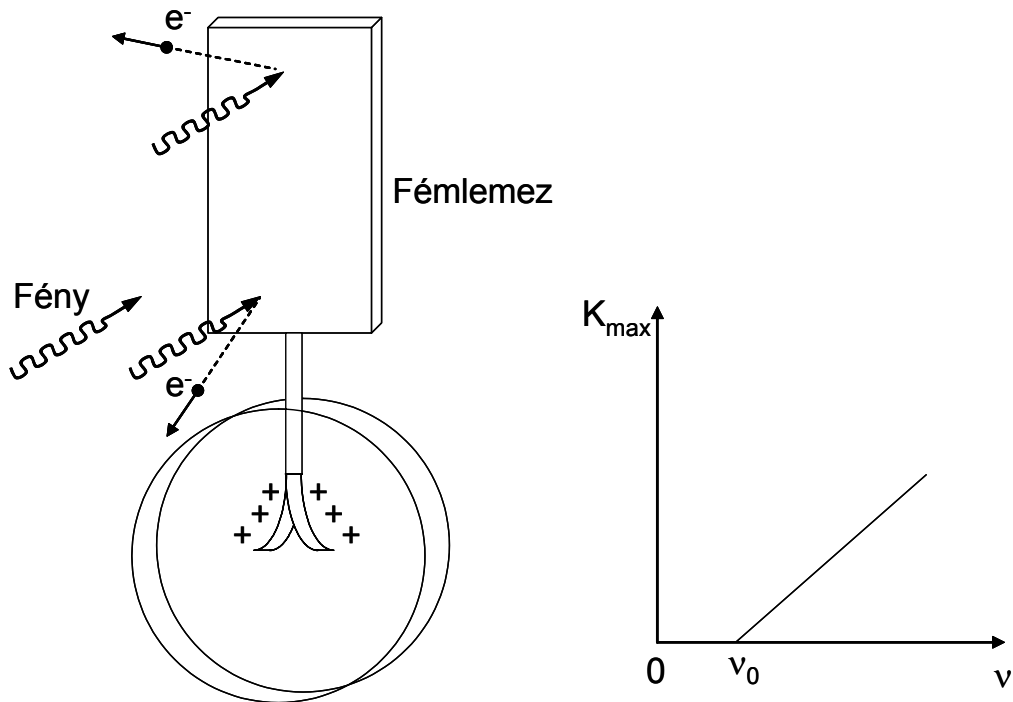


Anyaghullámok

A fény kettős természete

Fotoeffektus



1. ábra Egy fénnel megvilágított vezető töltötté válik. Ha a megvilágító fény frekvenciája egy küszöbfrekvenciánál kisebb, nincs elektronkilépés.

Megfigyelések (P. Lenard):

- a kilépő elektronok max. sebessége (max. kinetikus energiája) csak a megvilágító fény frekvenciájától függ, független a megvilágító forrás intenzitásától,
- a fémfelületből egységnyi idő alatt kilépő elektronok száma (a fotoáram) csak a fényforrás intenzitásának függvénye,
- a kilépő elektronok max. kinetikus energiája (K_{\max}) lineárisan függ a frekvenciától, a $K_{\max}(\nu)$ függvényt reprezentáló egyenesek azonban nem az origóban, hanem valamilyen ν_0 küszöbfrekvenciánál metszik a vízszintes tengelyt.

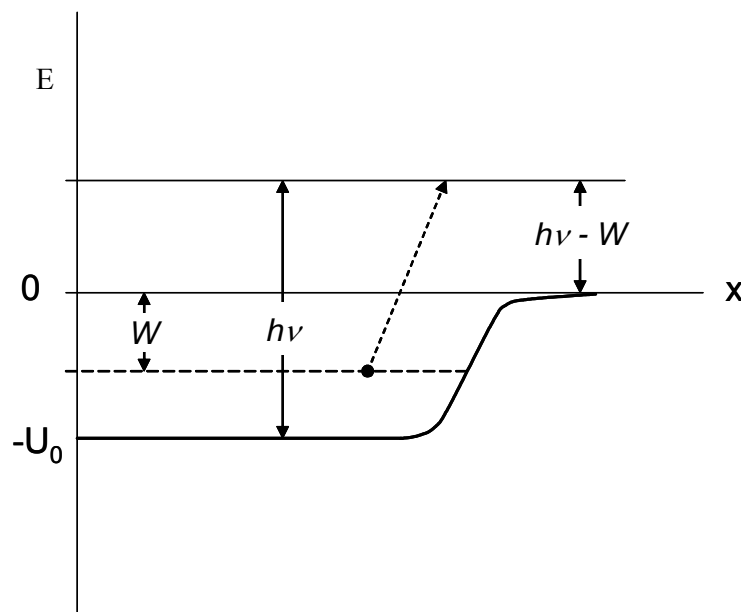
A fenti kísérleti tapasztalatok interpretációját Einstein adta meg éppen 1 évszázaddal ezelőtt. A fémbeli elektronok a fém darab teljes térfogatában szabadon mozognak, kilépni azonban nem tudnak, a fém darab végeinél meredek potenciális energiasíkkal állja útjukat, az elektronok összenergiája negatív.

Az energiatételből:

foton energiája = elektron kilépéséhez szükséges energia + az elektron kinetikus energiája

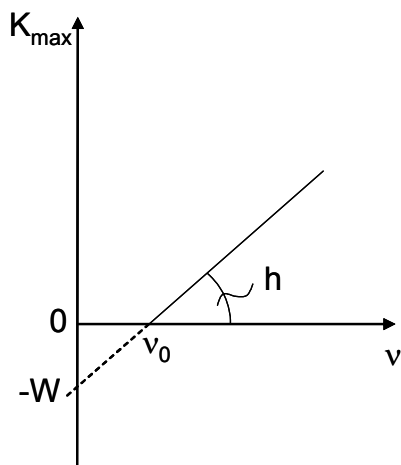
$$K_{\max} = h\nu - W = \hbar\omega - W$$

W : kilépési munka.



2. ábra A fémek potenciálkád modellje.

A kísérleti adatokból meghatározható h és W értéke.



h : Planck-állandó

$$h = 6,626 \times 10^{-34} \text{ Js}$$

3. ábra A kilépő elektronok max. kinetikus energiája a frekvencia függvényében. A függvény meredeksége éppen a Planck állandót adja.

Einstein úgy magyarázta, hogy a fény részecskéi (fotonok) rugalmatlanul ütköznek az elektronokkal.

A foton mint részecske: – mekkora a tömege?

$$m = \frac{m_0}{\sqrt{1 - \frac{u^2}{c^2}}} \xrightarrow{u=c} m = \frac{m_0}{0} = \infty ?$$

$$\Downarrow$$

$$E = mc^2 = \infty ?$$

De az előző kísérletekből tudjuk, hogy $E = h\nu$ véges.

Megoldás: $m_0 = 0$ kell legyen (a $0/0$ határérték véges is lehet).

A foton tehát zérus nyugalmi tömegű részecske!

(1): Energia: $E = mc^2 = h\nu$

(2): Impulzus: $p = \overset{u=c}{mu} = mc$ de m nem ismert (csak $m_0 = 0$)

$$(1'): (1)\text{-ből } m = \frac{h\nu}{c^2}$$

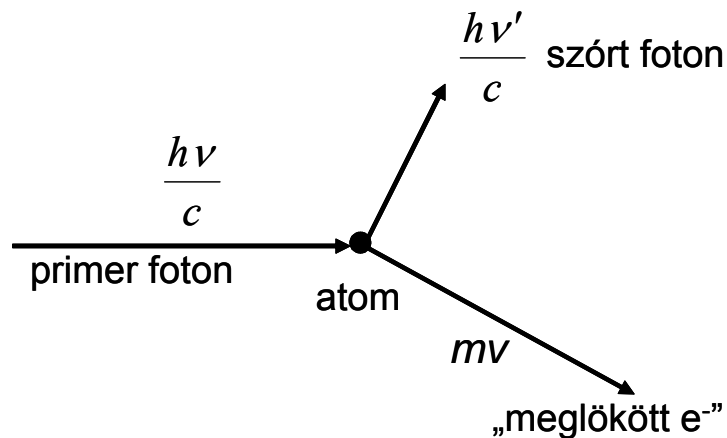
$$(1') \text{ beírva (2)-be: } p = \frac{h\nu}{c^2} c = \frac{h\nu}{c}$$

Tehát a foton energiája és impulzusa:

$E = h\nu$	$p = \frac{h\nu}{c} = \frac{h}{\lambda}$
------------	--

Részecske vagy hullám?

- Hullámtermészet: diffrakció, interferencia
- Részecske: fotoeffektus, Compton szórás (az elektronokkal ütköző fotonok hullámhossza/frekvenciája megváltozik).



4. ábra: Elektron ütközése fotonnal (Compton effektus)

- Hullám- és részecskemodell egyaránt jó: a fény nyomása, Doppler-effektus,

A fénnyel kapcsolatos jelenségek egy része tehát a hullámmal, másik része a részecskemoddal értelmezhető. Azt mondjuk, hogy a fény *kettős természetű*.

A kettős természet fogalmi elfogadása azért nehéz, mert a makroméretű testek világában valami vagy hullám, vagy részecske, a két elképzelés egymást kizárja.

De Broglie hipotézise

Nemcsak a fény viselkedik egyszer hullámként máskor részecskeként, hanem minden test ill. mikrorészecske (L. de Broglie 1923)!

Fotonokra mint láttuk: $p = \frac{h\nu}{c} = \frac{h}{\lambda}$, ($\lambda = c/\nu$)

Minden részecskéhez, testhez (nem zérus nyugalmi tömeggel rendelkezőkhöz is), hozzárendelhető egy hullám, amelynek hullámhossza (de Broglie-hullámhossz):

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

Makroszkopikus részecskékre nagyon kicsi: (az impulzusra ilyenkor használhatjuk a newtoni $p=mv$ impulzust): $\lambda < 10^{-30}$ m.

Kis tömegű részecskékre, pl. elektronokra már „mérhető”:
pl. 1 keV kinetikus energiájú elektronra

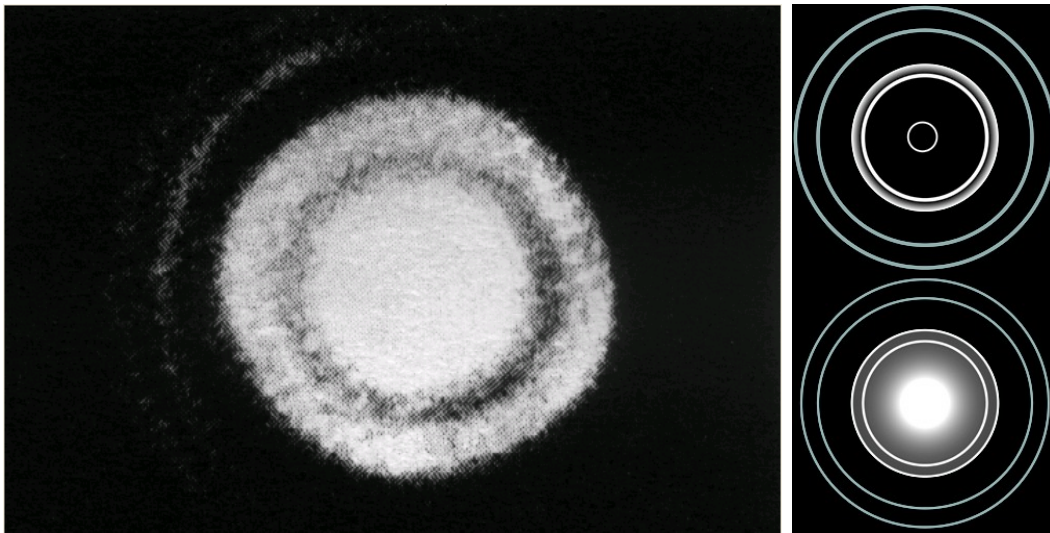
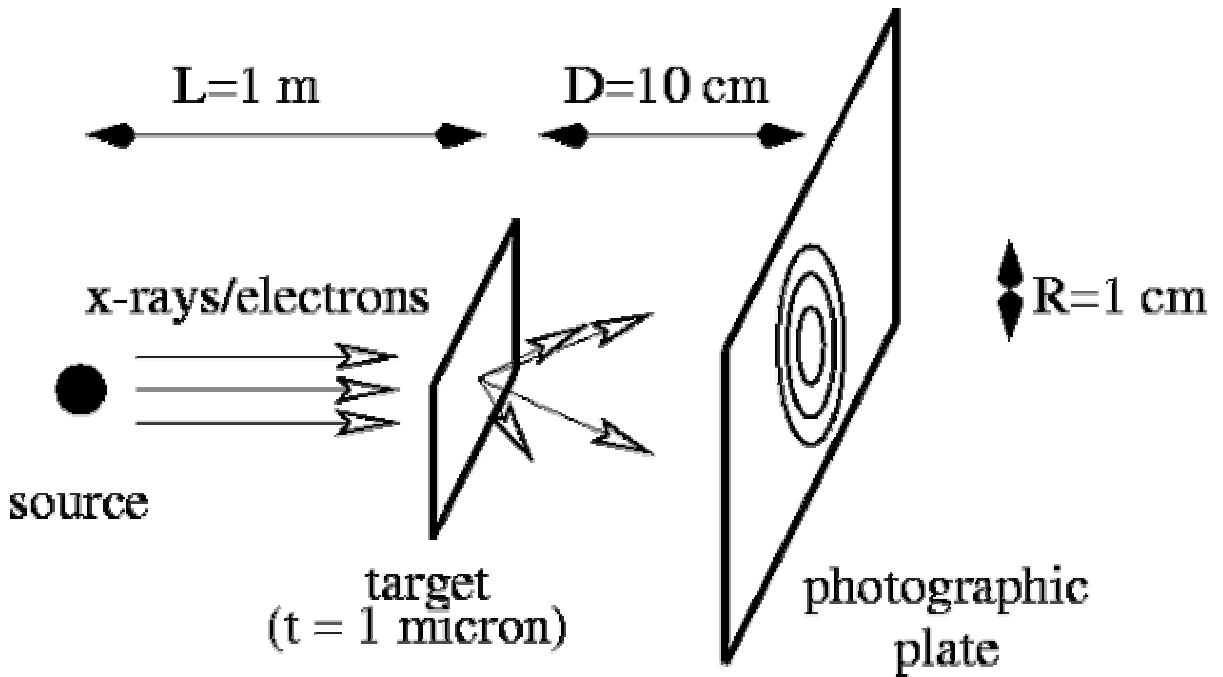
$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2mE}}$$

$$\lambda = \frac{6.6 \cdot 10^{-34} \text{ Js}}{\sqrt{2 \cdot 9 \cdot 10^{-31} \text{ kg} \cdot 10^3 \text{ eV} \cdot 1.6 \cdot 10^{-19} \text{ J/eV}}} = 3.9 \cdot 10^{-11} \text{ m}$$

A természetben előforduló kristályokban az atomsíkok távolsága néhány tized nm ($n \cdot 10^{-10}$ m) \Rightarrow az elektronoknak “optikai rácsokon” áthaladva interferenciajelenséget kell mutatniuk.

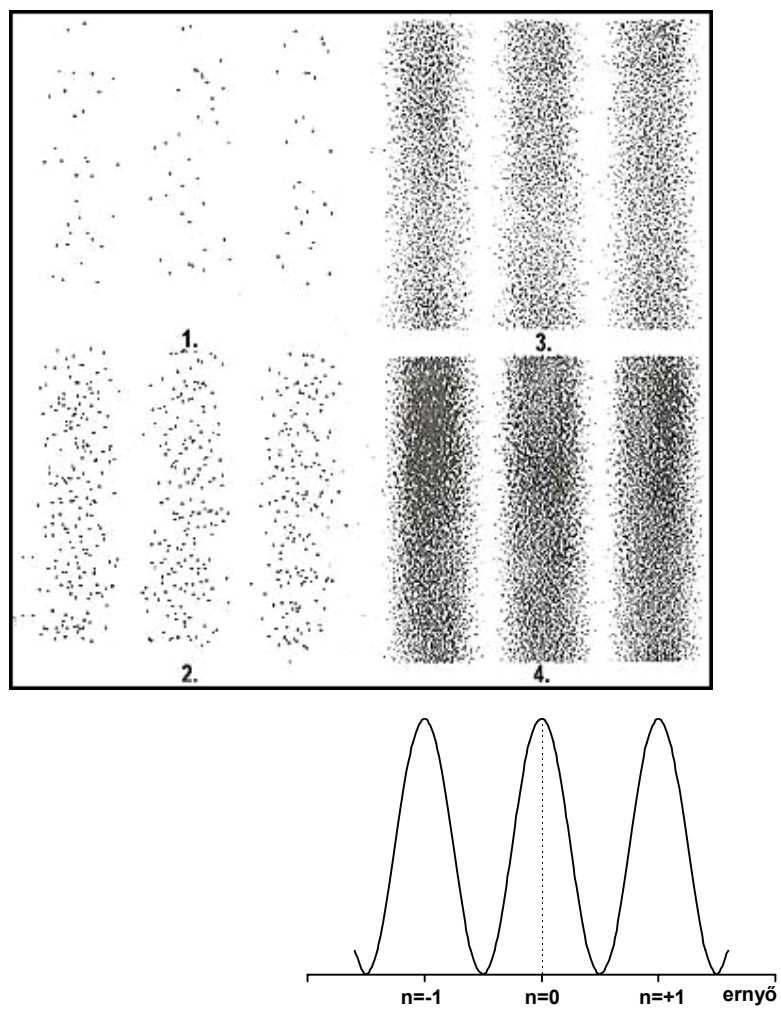
Davisson - Germer kísérlet (1927): elektron- interferencia

G. P. Thomson kísérlete (1927): az elektronokkal előállított interferenciakép hasonló a röntgensugarakkal előállított képhez.



5. ábra

Jönsson kétréses interferencia kísérlete(1961):



6. ábra

A hullámfüggvény (állapotfüggvény) bevezetése

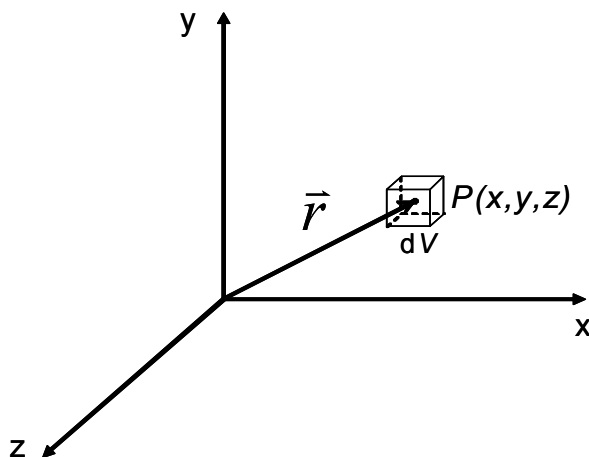
De Broglie szerint tehát minden p impulzusú részecskéhez $\lambda = h/p$ hullámhosszúságú hullámot rendelünk, a hullámfüggvény térbeli periodicitása, azaz a hullámhossz kódolja a részecskénk impulzusát (és kinetikus energiáját).

$$p = \frac{h}{\lambda} = \frac{h 2\pi}{2\pi \lambda} = \hbar k \quad \text{ahol} \quad k = \frac{2\pi}{\lambda} \quad \text{és} \quad \hbar \equiv \frac{h}{2\pi} \quad (\text{olv. } h \text{ vonás})$$

A részecskékkel előállított interferencia, valamint az a tény, hogy a részecskék a kísérletekben mindig oszthatatlannak bizonyultak, csak úgy volt magyarázható, ha feltételezték, hogy a hullámfüggvénynek valószínűségi jelentése van (M. Born). A részecske $r(x, y, z)$ pont környezetében történő megtalálásának valószínűsége a hullámfüggvény abszolút érték négyzetével arányos.

$$|\psi(\vec{r}, t)|^2 dV \quad \text{valószínűségi sűrűség}$$

A fenti kifejezés annak valószínűsége, hogy a részecskét a t időpillanatban az $r(x, y, z)$ pont körüli $dV = dx dy dz$ térfogatelemben találjuk.



7. ábra

Eddigi ismereteink alapján egy az x-tengely irányában állandó sebességgel haladó részecskéhez célszerű lenne a következő függvényt hozzárendelni:

$$\psi = A \cos(kx - \omega t)$$

A részecske tartózkodási valószínűsége:

$$|\psi|^2 = A^2 \cos^2(kx - \omega t)$$

Térben periodikus függvény, bizonyos térbeli pontokban zérus értékkel. Egy szabadon mozgó részecske tartózkodási valószínűsége miért nem azonos minden térbeli pontban? Olyan függvényt kell választanunk, amelyik helytől függetlenül állandó tartózkodási valószínűséget jelent.

Követelményeinknek az alábbi függvény tesz eleget (sík-hullám):

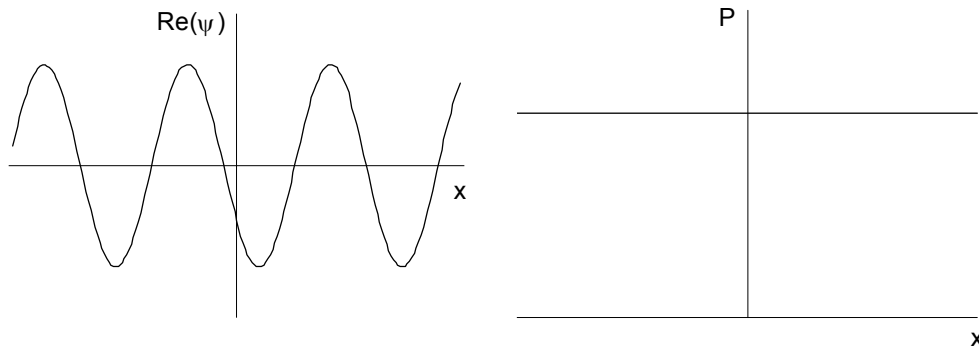
$$\psi = Ae^{i(kx - \omega t)}$$

e függvény abszolút értékének négyzete térben állandó értéket ad:

$$|\psi|^2 = \psi^* \psi = (Ae^{-i(kx - \omega t)})(Ae^{i(kx - \omega t)}) = A^2$$

A részecske „lokalizációja”, a hullámcsomag

A ψ függvény tartalmazza a részecske impulzusát (a hullámhossz kódolja az impulzust, $k \propto p$), van azonban egy nehézség: egy síkhullám nem lokalizálható a térben.

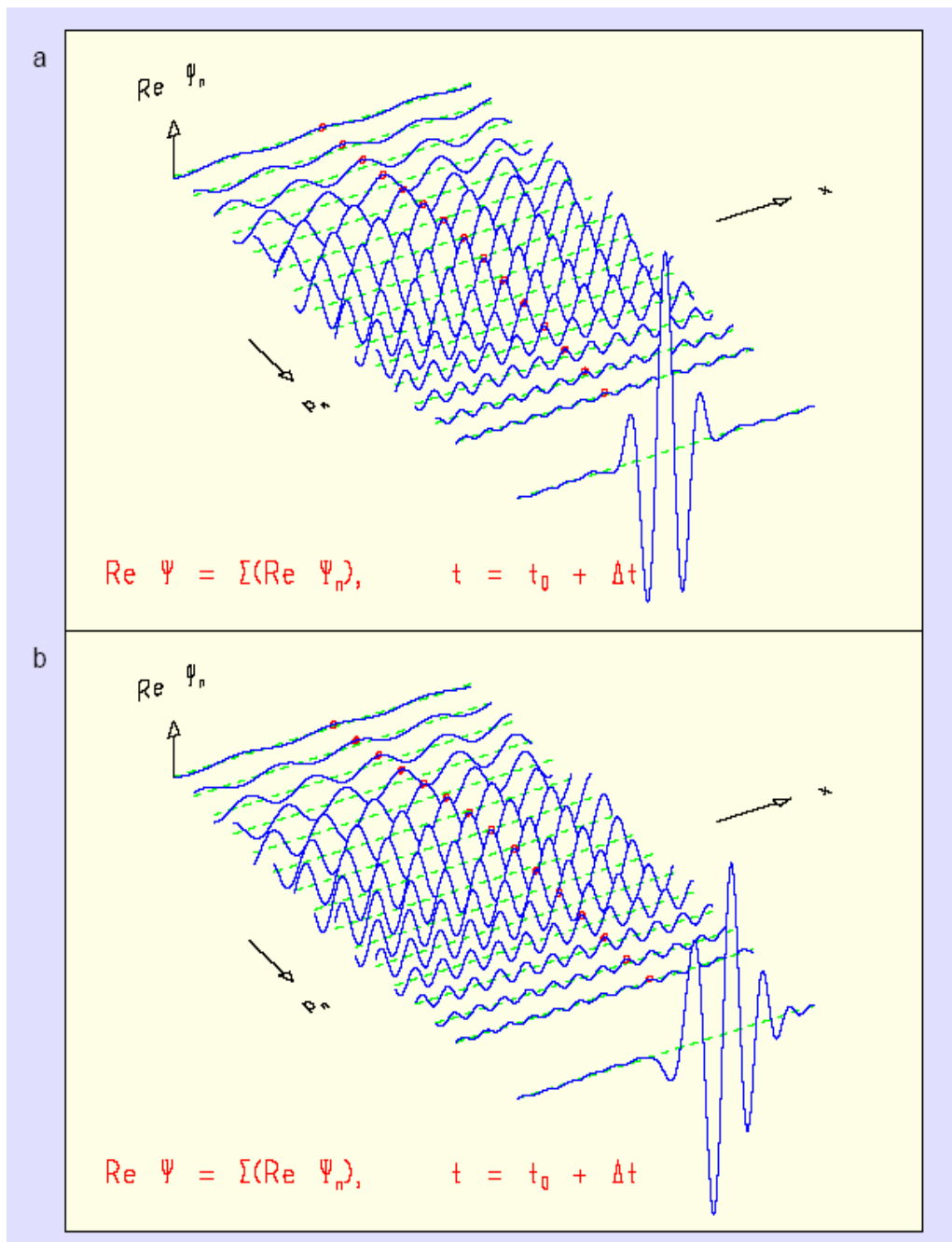


8. ábra A komplex síkhullám valós része és a hullámfüggvény abszolút-értékének négyzete

A gyakorlatban a lokalizáció legalábbis részben megtehető: többnyire meg tudjuk mondani, hozzávetőleg hol tartózkodik egy részecske: pl. elhagyta a katódot, de még nem csapódott be az ernyőbe. (A Wilson-kamrában a lokalizáció már annyira sikeres, hogy azt érezzük, a mikrorészecskék a makroszkópikus testekhez hasonlóan pályán, idegen szóval trajektórián mozognak.)

Megoldás: hullámcsomag készítése. Emlékezzünk vissza, ilyenkor különböző hullámhosszúságú (hullámszámú) hullámok szuperpozíciójával lehet térben valamennyire lokalizált csomagot előállítani ($\psi = \sum_i c_i \psi_i$):

$$\psi(x, t) = \int_{k_0 - \Delta k}^{k_0 + \Delta k} c(k) e^{i(\omega t - kx)} dk$$

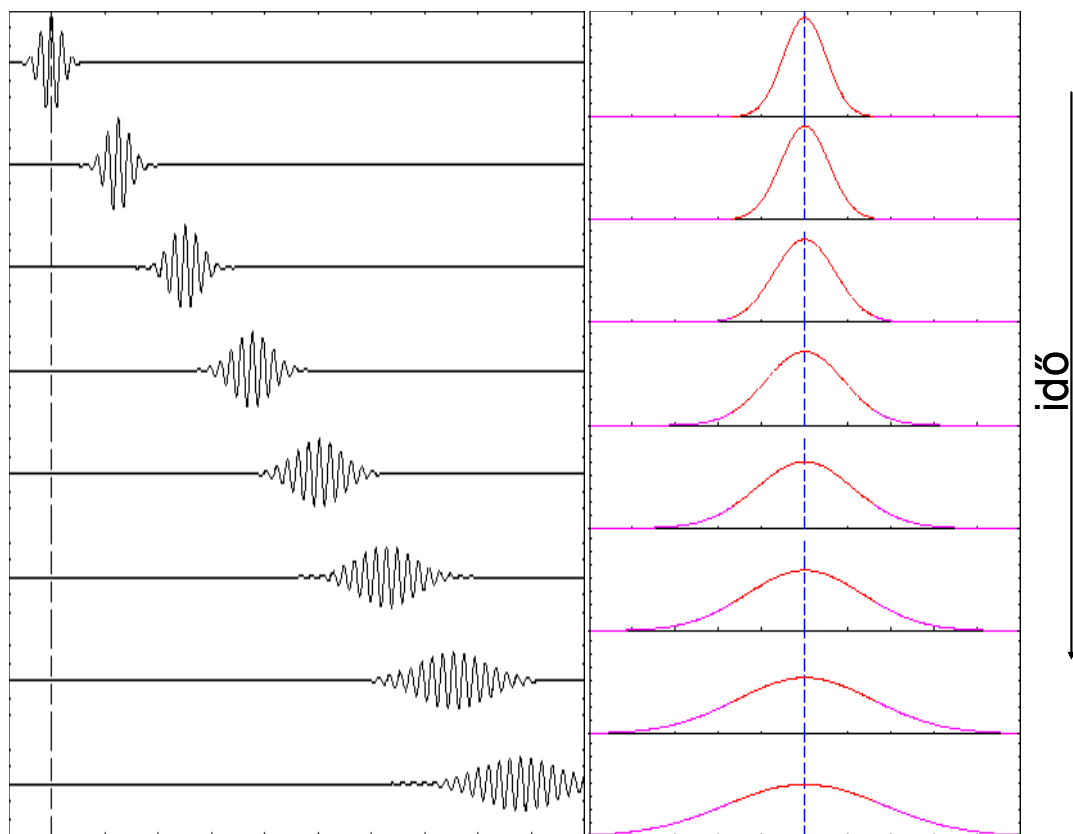


9. ábra Határozott impulzusú, (vagyis határozott hullámszámú, hullámhosszú) síkhullámok szuperpozíciójaként alkothatunk térben (most az x -tengely mentén) valamennyire lokalizált hullámcsomagot. Az „a” betétábra azt mutatja, milyen impulzus (hullámhossz) tartományból vett síkhullámokból építettük fel a csomagot. A határozott hullámhosszú síkhullámok komplex függvények, a b ábrán a valós rész hely és időfüggését ábrázoltuk.

Hullámcsomag szétfolyása (diszperzió):

A 9. ábra egy hullámcsomag két időpontbeli helyzetét mutatja, a két időkoordináta „távolsága” Δt . Látható, hogy a csomag építéséhez használt hullámok az eltelt időintervallumban különböző távolságot tesznek meg. Ennek érzékeltetésére az ábrán az egyes hullámokhoz köröket rendeltünk. Az egyes hullámok eltérő sebességének hatása az eredő hullám alakjának megváltozásán is látszik, a csomag kiterjedtebb lett.

A 10. ábra részletesen mutatja be a csomag szétfolyását.



hullámfüggvény: $\text{Re}[\psi(x,t)]$

megtalálási
valószínűség: P

10. ábra Egy hullámcsomag valós része és az abszolútértéknégyzete az idő függvényében.

A hullámcsomagok sebessége

(kapcsolat a klasszikus mechanikával)

A hullámokkal kapcsolatban láttuk, hogy a csomagok nem feltétlenül a fázissebességgel (ω/k), hanem az un. csoportsebességgel mozognak. A de Broglie féle anyaghullámok csomagjainak sebességét is a diszperziós reláció $\omega(k)$ határozza meg:

$$\hbar\omega = E, \quad p = \hbar k, \quad E = \frac{p^2}{2m}$$

relációkból kapjuk az anyaghullámok diszperziós relációját:

$$\hbar\omega = \frac{(\hbar k)^2}{2m} \Rightarrow \frac{d\omega}{dk} = \frac{\hbar k}{m} = \frac{p}{m} = v$$

Azt a megnyugtató eredményt kaptuk, hogy a részecskét reprezentáló hullámcsomag a részecskével együtt mozog, sebessége megegyezik a részecske sebességével.

Azonban a hullámcsomag időben szétfolyik. Szétfolyik a részecske? Igen! De a szétfolyás ideje $t \propto m(\Delta x)^2$

Példák:

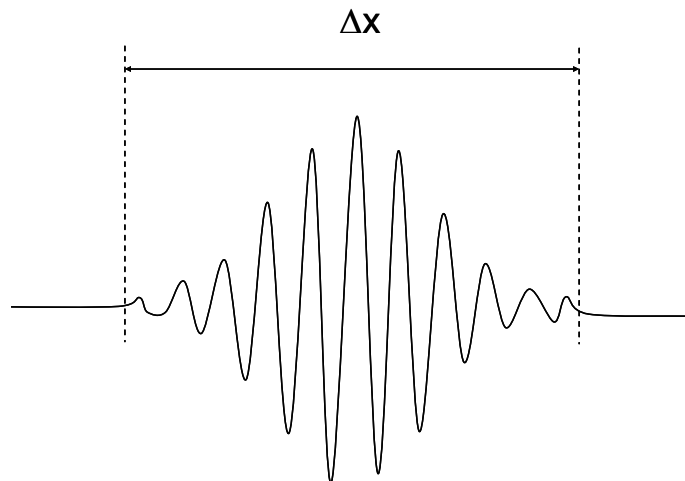
Egy elektron, mely kezdetben 0,1 nm-es térrészbe (atomi méret) volt lokalizálva, szabadrádó válása után kb. 10^{-15} s után $\sqrt{2}$ -szeresére „növekszik” (a hullámcsomag).

Ha kezdetben 1 μ m-es térrészre volt korlátozva, akkor 10^8 -szor több idő (kb. 100 ns) kell.

Ha 1 mm-re volt, akkor kb. 0.01 s szükséges.

Egy 0.1 mm-es, 1 grammos márványgolyó 6×10^{16} év alatt delokalizálódik spontán módon 0.1414 mm-méretűvé ($\sqrt{2}$ -szeresére).

Heisenberg-féle határozatlansági reláció



11. ábra egy hullámcsomag térbeli kiterjedése.

Δx -ben n vagy $n+1$ hullám van? Nehéz megmondani a végek „határozatlansága” miatt:

$$\frac{\Delta x}{n} = \lambda_1 \quad \text{vagy} \quad \frac{\Delta x}{n+1} = \lambda_2$$

$$\frac{\Delta x}{\lambda_2} - \frac{\Delta x}{\lambda_1} \cong 1, \text{ továbbá } p = \frac{h}{\lambda} \Rightarrow \frac{\Delta x(p_2 - p_1)}{h} \cong 1$$

Így $p_2 - p_1 = \Delta p$ jelöléssel:

$$\Delta x \Delta p \cong h$$

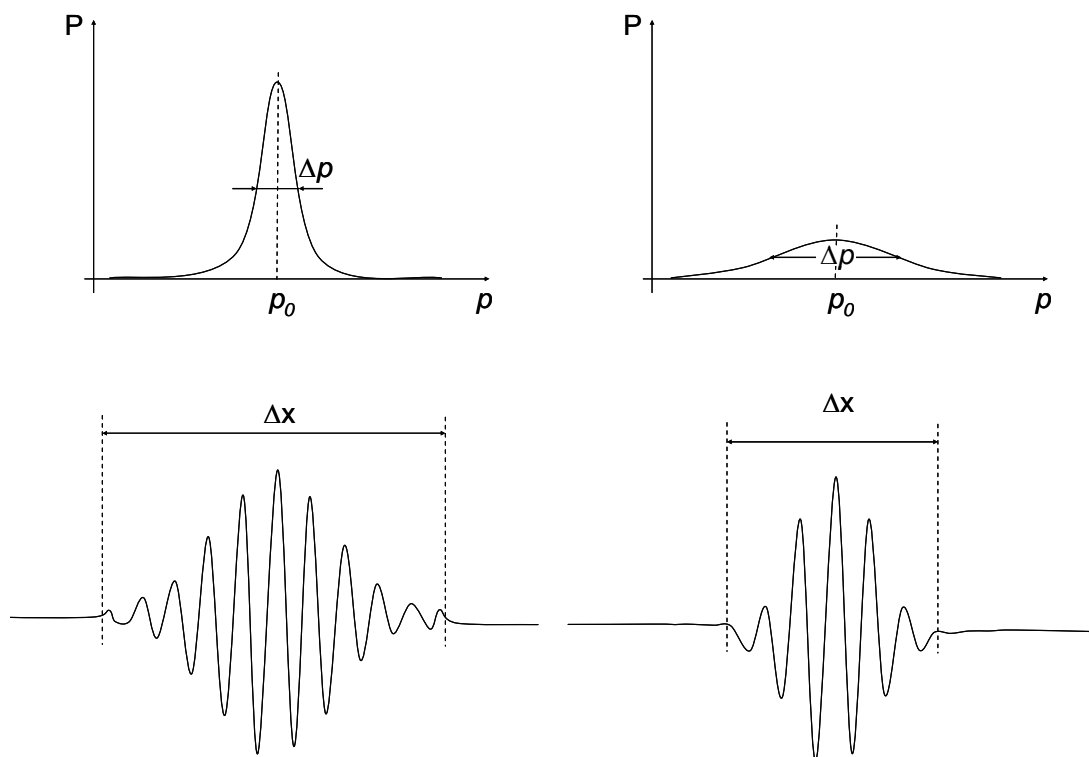
Pontosabban:

$$\Delta x \Delta p \geq h$$

ez a *Heisenberg-féle határozatlansági reláció*.

Egy részecske helyét és impulzusát nem ismerhetjük együtt tetszőleges pontossággal.

Megjegyzés: a rezgés és hullámcsomagokkal foglalkozó fejezetben láttuk, hogy klasszikus hullámcsomagokra $\Delta k \Delta x \approx 2\pi$ teljesül. Ebből az összefüggésből, felhasználva a de Broglie relációt, valamint a hullámszám és a hullámhossz kapcsolatát ($p = h/\lambda$, $k = 2\pi/\lambda$) a Heisenberg –féle relációt kaphatjuk.



12. ábra. Egy hullámcsomag kiterjedése a geometriai és az impulzustérben. Ha a csomag térbeli kiterjedését csökkentjük, az impulzustérbeli kiterjedés (életlenség, bizonytalanság, szórás) nő.

Részecske pályamenti mozgása

Nincs meghatározott pálya (trajektória), csupán valószínűsíthető.

Minél jobban tudjuk, hogy éppen hol jár a részecske, annál kevésbé tudjuk, hogy milyen gyorsan halad (azaz az impulzusát); és fordítva.

Megjegyzés:

Gondolatkísérlet:

egy elektron pályájáról pontosabb információt szerezhethetnénk, ha az elektront fénnel megvilágítjuk. A Compton szórás esetén láttuk mi történik: a két részecske impulzust cserél. A hely szerinti lokalizációt tovább növelhetnénk, ha a megvilágító fény hullámhosszát csökkentjük. A hullámhossz csökkentésével azonban nő a fotonok impulzusa, vagyis a hely pontosabb mérésével (Δx csökken) növeljük az elektronok impulzusának életlenségét (Δp nő). A határozatlansági relációt nem lehet „megkerülni”.

Megjegyzés:

A $\Delta x \Delta p \geq h$ relációhoz hasonló reláció érvényes egy állapot energiájának és élettartamának bizonytalanságára (életlenségére) $\Delta E \Delta t \geq h$.

Megjegyzés: a mérés mindig beavatkozik a mért rendszerbe, ahogyan megmérünk valamit már meg is változtatjuk azt.

A dobozba zárt részecske I

Képzeljünk el két, egymástól L távolságban lévő falat, amely a ráeső részecskéket tökéletesen reflektálja. Az egyik fal pozíciója $x=0$, a másiké $x=L$. A két fal által határolt területen a részecske szabadon, erőmentes térben mozog ($U=0$ ha $0 \leq x \leq L$, $U = \infty$, egyébként). A dobozban a reflexió miatt egyszerre van jelen a jobbra és a balra haladó részecskét reprezentáló síkhullám:

$$\psi(x, t) = Ce^{ikx - i\omega t} - Ce^{-ikx - i\omega t} = C(e^{ikx} - e^{-ikx})e^{-i\omega t}$$

A két síkhullám azért különböző előjelű, mert $x=0$ -ban a hullámfüggvény zérus (zárt vég).

Felhasználva, hogy $\sin kx = \frac{e^{ikx} - e^{-ikx}}{2i}$

$$\psi(x, t) = 2iCe^{i\omega t} \sin kx = A \sin kx, \quad A \equiv 2iCe^{i\omega t}$$

A részecske $x=L$ helyen sem hatolhat át a falon, így a hullámfüggvény $x=L$ helyen is zérus kell legyen:

$$\sin kL = 0 \Rightarrow kL = n\pi$$

vagyis a hullám hullámszáma csak az alábbi lehet:

$$k_n = n \frac{\pi}{L}$$

Mivel $k = 2\pi/\lambda$, csak olyan hullámok reprezentálhatják a dobozbeli részecskét, amely hullámok félhullámhossza egész számszor fér rá a doboz méretét jellemző L távolságra:

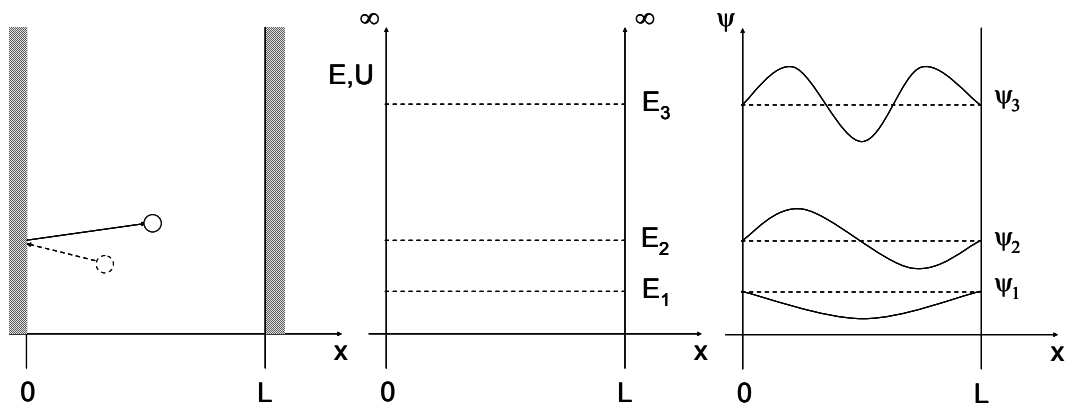
$$L = n \left(\frac{1}{2} \lambda \right)$$

Tudjuk hogy a hullám hullámszáma a de Broglie reláció szerint az impulzussal arányos:

$$p_n = \hbar k_n \Rightarrow p_n = n \frac{\pi \hbar}{L}$$

A doboz belsejében szabadon mozgó részecske energiája tehát:

$$E_n = \frac{p_n^2}{2m} = n^2 \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2}$$



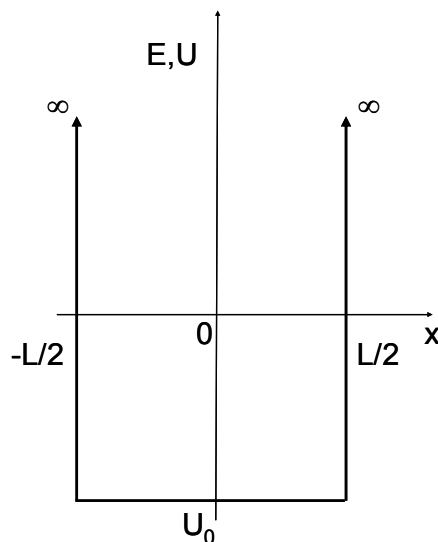
13. ábra A potenciálgödör (a gödör alján a potenciális energia zérus), az energia-sajátértékek, valamint az egyes állapotok sajátfüggvényei.

1. az n egész szám: kvantumszám, az $n=1$ állapotot
2. az egyes állapotokhoz tartozó hullámfüggvények hasonlóak a mechanikai hullámoknál megfigyelt állóhullámokhoz
3. a részecske energiája alapállapotban sem zérus!
4. az egyes állapotokat jellemezhetjük a belső csomópontok számával: Az első gerjesztett állapot ($n=2$) pl. egy belső csomópontos állapot. Természetesen, ha a részecskét két-ill.háromdimenziós dobozba zárjuk, a hullámfüggvények hasonlóak lennének a mechanikai hullámok esetén tapasztalt állóhullám megoldásokhoz, azzal a különbséggel, hogy az alapállapot 0 belső csomóvonalas (csomó síkos), az első gerjesztett állapot 1 belső csomóvonalas (csomósíkos) állapot lenne.

5. Az állapotok energiái nem ekvidisztánsak.
6. a részecske energiája erősen függ a doboz méretétől! A hullámfüggvény szétterülése energianyereséggel jár! Ez a jelenség az alapja a kémiai kötésnek.

A dobozba zárt részecske II

Mi a helyzet, ha gödör alján a potenciális energia nem zérus? Legyen a gödör alján a potenciális energia U_0 ! Határozzuk meg a hullámfüggvényt, a deriváltjait, valamint az energia sajátértékeket!



14. ábra. A gödör alján a potenciális energia nem zérus.

Az előző feladat alapján:

$$\psi = C \sin(kx + \alpha), \quad \text{ahol} \quad k = \frac{p}{\hbar}$$

az impulzus az összenergia fv. ($E=K+U$) segítségével:

$$K = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{1}{2m}m^2v^2 = \frac{p^2}{2m} \Rightarrow p = \sqrt{2mK}$$

$$p = \sqrt{2m(E - U_0)} \Rightarrow k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E - U_0)}$$

A hullámfüggvény második deriváltja:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -k^2 C \sin(kx + \alpha) = -k^2 \psi$$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{2m}{\hbar^2}(E - U_0)\psi$$

A kinetikus energiát az előző feladatban kapott összefüggés alapján számoljuk:

$$K_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} n^2$$

$$K_n = E_n - U_0 = n^2 \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} \Rightarrow E_n = n^2 \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} + U_0$$

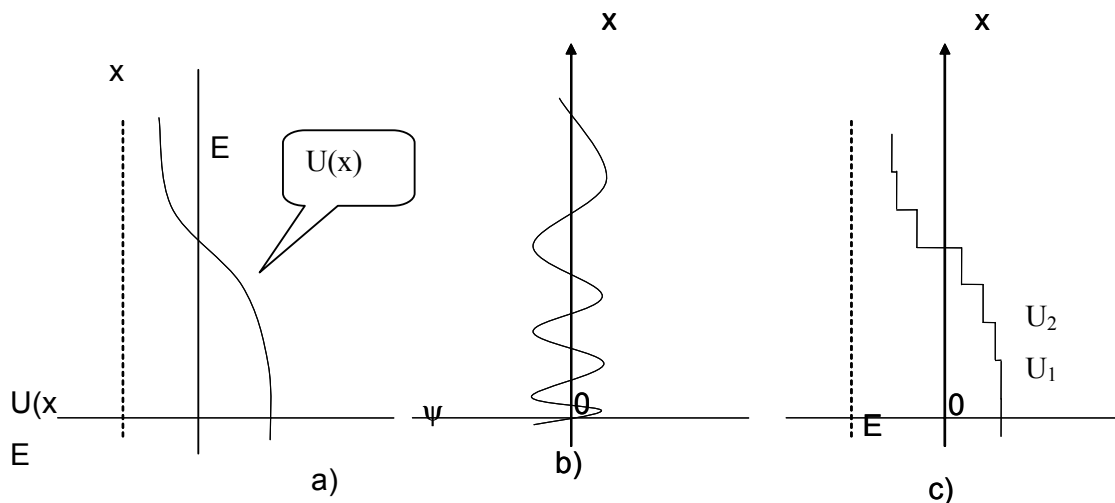
Megjegyzés:

Az előző feladatban $E = K$ volt ($U_0 = 0$)

Részecske mozgása erőterben

Az eddigiekben erőmentes térben vizsgáltuk a részecskét reprezentáló hullámfüggvényt. ($U=0$, $U=\text{áll.}$). Erő akkor hat egy testre, vagyis ha az $U(x)$ függvény térben változik (ha az U függvény x szerinti deriváltja nem zérus, vagyis $\text{grad}U \neq 0$).

A részecske összenergiája ($E = \frac{p^2}{2m} + U(x)$) konzervatív erők esetén állandó, ha tehát a potenciális energia x növekedésével növekszik $\Rightarrow p$ csökken ($E = \text{áll.}$) $\Rightarrow \lambda$ nő.



15. ábra A hullámfüggvény változása helyfüggő potenciálgödör esetén.

Az előző példa alapján, ha $U=U_1$, akkor a hullámfüggvény eleget tesz a

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{2m}{\hbar^2}(E - U_1)\psi$$

Tetszőleges potenciális energia függvény közelíthető lépcsősfüggvénnyel, úgy, hogy az egyes szakaszokon a fenti egyenletben U_1 , U_2 , U_3 , stb szerepel. Ezt egyetlen egyenlettel is kifejezhetjük:

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = -\frac{2m}{\hbar^2}[E - U(x)]\psi(x)$$

A fenti egyenlet neve: időfüggetlen, egydimenziós Schrödinger-egyenlet. Az egyenlet megoldásai stacionárius hullámok, ami azt jelenti, hogy a tartózkodási valószínűséget kifejező $|\psi(x,t)|^2$ időtől független.

Láttuk, hogy az egyenletnek csak bizonyos E_n energia értékeknél van megoldása, az egyenletet kielégítő $\psi_n(x,t)$ függvényeket **energia-sajátfüggvényeknek**, az E_n energia értékeket **energia sajátértékeknek** nevezzük.

Véges mélységű potenciálgödör

Ha a potenciálfal magassága véges, a hullámfüggvény nem tűnik el a doboz végeinél, vagyis nem biztos, hogy a részecske visszaverődik a falról.

Schrödinger egyenlet (SE) a fal mögött:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = \frac{2m}{\hbar^2}(U_0 - E)\psi$$

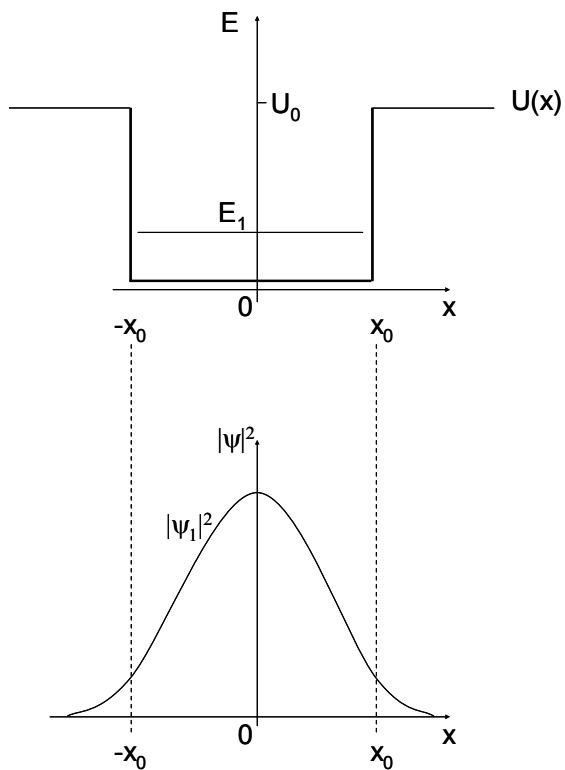
Megoldásai (trigonometrikus függvények nem csak exponenciális függvények jöhetnek szóba):

$$\psi_{FM} = Ae^{-\kappa x} + Be^{+\kappa x} \text{ ahol } \kappa = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(U_0 - E)}$$

A fal mögötti (FM) $B=0$ (onnan nem érkezik hullám).

SE a dobozon belül: mint láttuk az előzőekben trigonometrikus függvény

A fal mögötti exponenciális függvényt úgy kell összekapcsolni, hogy a doboz szélénél a függvények és azok első deriváltjai is illeszkedjenek egymáshoz.



Részecskénk kis valószínűséggel ugyan, de ott is tartózkodhat, ahol a kinetikus energia negatív! Ha részecske útját álló potenciálfal véges vastagságú, a részecske át is hatolhat a potenciálfalon. Ez a jelenség az **alagúteffektus**.

Alagútmikroszkópia

16. ábra

A Schrödinger egyenlet néhány egyszerű rendszerre

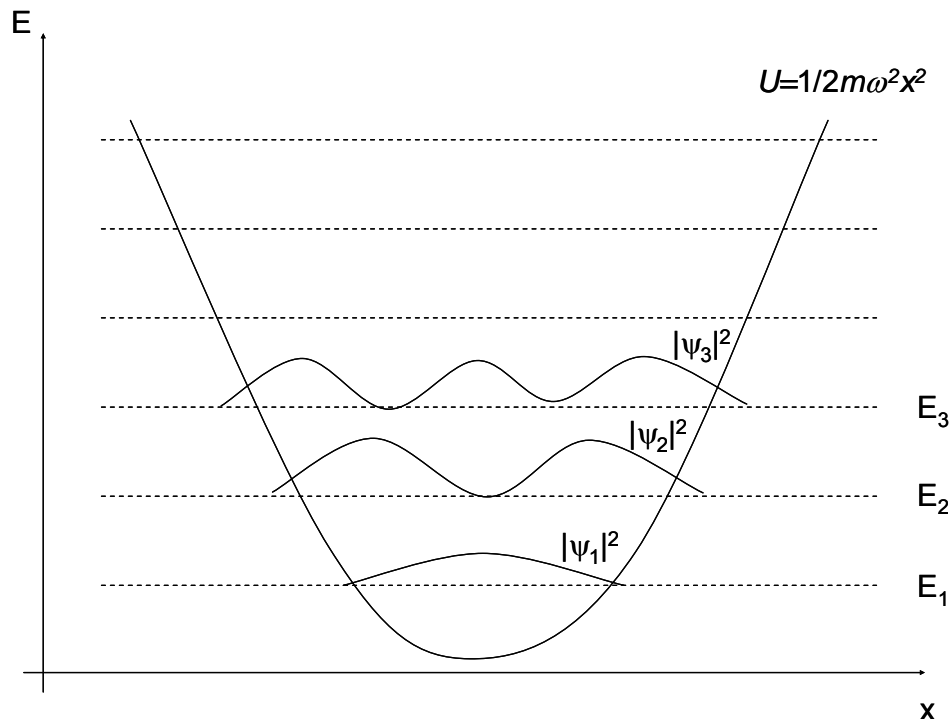
Lineáris harmonikus oszcillátor

A klasszikus a test *harmonikus rezgőmozgást* végzett. Hogyan mozog egy részecske $U = \frac{1}{2}kx^2 = \frac{1}{2}m\omega^2x^2$ potenciális energiával jellemezhető tartományban?

A SE:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{2m}{\hbar^2} \left(E - \frac{1}{2}m\omega^2x^2 \right) \psi$$

Energia sajátértékek: $E_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega$ ahol $n=0,1,2,3\dots$



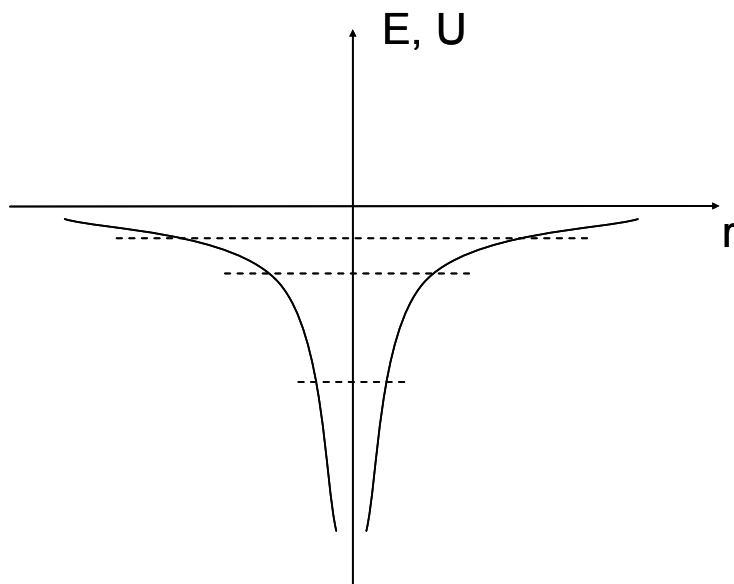
17. ábra. A lineáris harmonikus oszcillátor energia-sajátértékei és sajátfüggvényei.

- az alapállapot energiája nem zérus
- a hullámfüggvények nem válnak zérussá, az $E=U$ helyeken, a részecske kis valószínűséggel ugyan, de tartózkodhat azokon a helyeken, amelyek klasszikus esetben tiltottak,
- Az energiasajátértékek ekvidisztánsak, két energiaállapot közötti átmenet során a rendszer olyan fotont emittál, amely

frekvenciája megegyezik az oszcillátor klasszikus frekvenciájával.

A hidrogénatom

Az egydimenziós, függőleges falú potenciálfal durva leegyszerűsítése a Coulomb-potenciálnak, hiszen a proton potenciálja (hogy a legegyszerűbb Coulomb-térnél maradjunk) háromváltozós függvény ($U(r) = U(x, y, z)$), a fal nem függőleges stb. Primitív, egydimenziós modellünk azonban a valóság számos fontos jellegzetességét jól tükrözi. A proton terében lévő elektron energiája is diszkrét, nem ekvidisztáns stb. hasonlóan az egydimenziós modell alapján kapott energiákhoz.



18. ábra Az elektron energiaállapotai a proton Coulomb-terében.
SE:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} = -\frac{2m}{\hbar^2} (E - U(r)) \psi$$

célszerű polárkoordináták használata:

$$x = r \sin \vartheta \cos \varphi;$$

$$y = r \sin \vartheta \sin \varphi,$$

$$z = r \cos \vartheta$$

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{\partial \psi}{\partial \vartheta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2} = -\frac{2m}{\hbar^2} \left(E + k \frac{q^2}{r} \right) \psi$$

A kör alakú membránon sikerült olyan állóhullámokat gerjeszteni, amelyek körszimmetrikusak voltak. Az ilyen állóhullámok csomóvonalai körök, a membrán kitérései egy adott időpillanatban csak az $r = \sqrt{x^2 + y^2}$ változó függvénye volt. A polárszögtől (kétdimenzióban φ) a kitérés csak akkor függött, ha nem körszimmetrikus volt a kialakult állóhullám, vagyis megjelentek az egyenes csomóvonalak.

Csak r -től függő megoldással próbálkozunk. Próbafüggvény:

$$\psi = \exp\left(-\frac{r}{a}\right)$$

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial e^{-\frac{r}{a}}}{\partial r} \right) = -\frac{2m}{\hbar^2} \left(E + k \frac{q^2}{r} \right) e^{-\frac{r}{a}}$$

A deriválások után:

$$\frac{1}{a^2} - \frac{2}{a} \frac{1}{r} = -\frac{2mE}{\hbar^2} - \frac{2mkq^2}{\hbar^2} \frac{1}{r}$$

Az egyenlet két oldalán egy konstans és egy $1/r$ tagot tartalmazó tag áll. Az r -t tartalmazó tagok összehasonlításából:

$$\frac{2}{a} = \frac{2mkq^2}{\hbar^2}$$

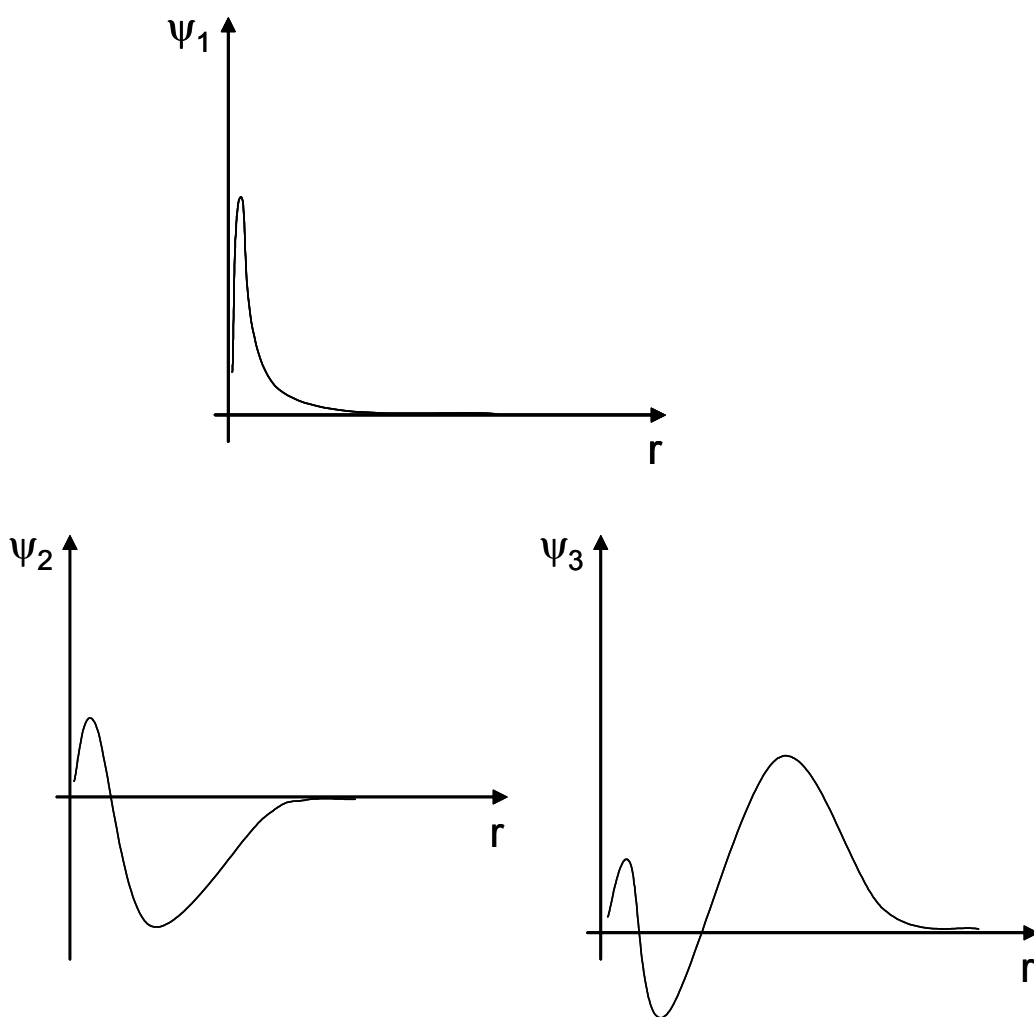
A konstansokat tartalmazó tagok összehasonlításából pedig a :

$$\frac{1}{a^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2} \Rightarrow E = -k^2 \frac{mq^4}{2\hbar^2} = -13.6 \text{ eV}$$

kifejezés adódik. Ez a H atom alapállapotú energiája.

Alapállapotban a hullámfüggvény $\psi_1 = e^{-\frac{r}{a}}$ alakú, vagyis gömbszimmetrikus, csomófelület nélküli függvény. Az elektront azonos valószínűséggel találjuk egy gömb felületén. A gömb közepe felé haladva a találati valószínűség nő.

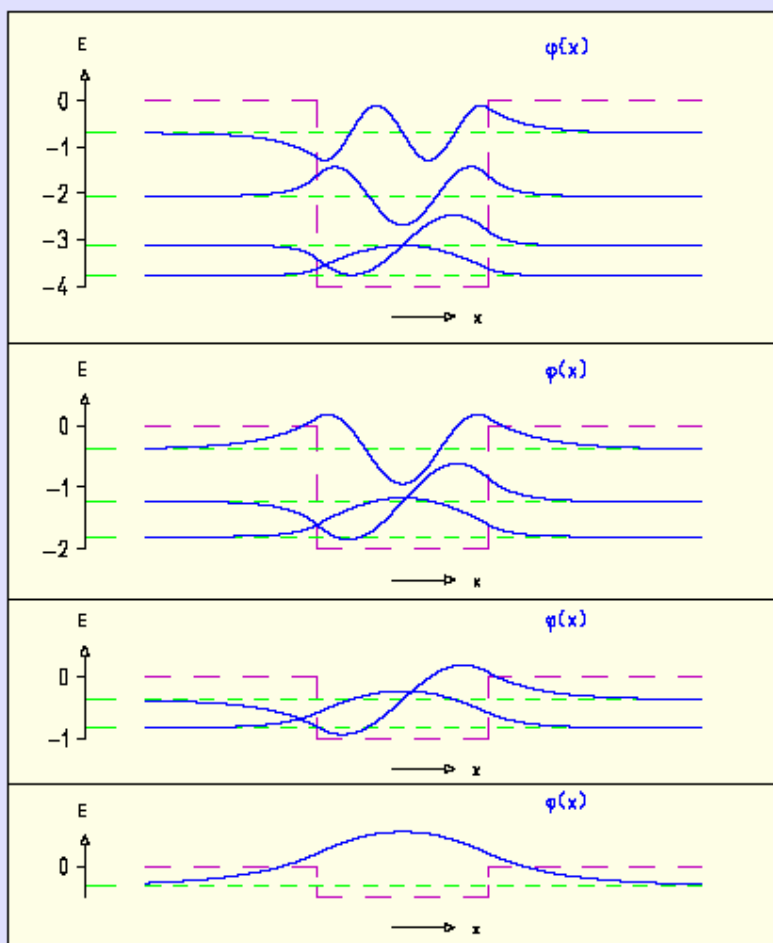
Hasonló gömbszimmetrikus, de már egy ill. két csomógömbös állapot hullámfüggvényeit mutatja az ábra.



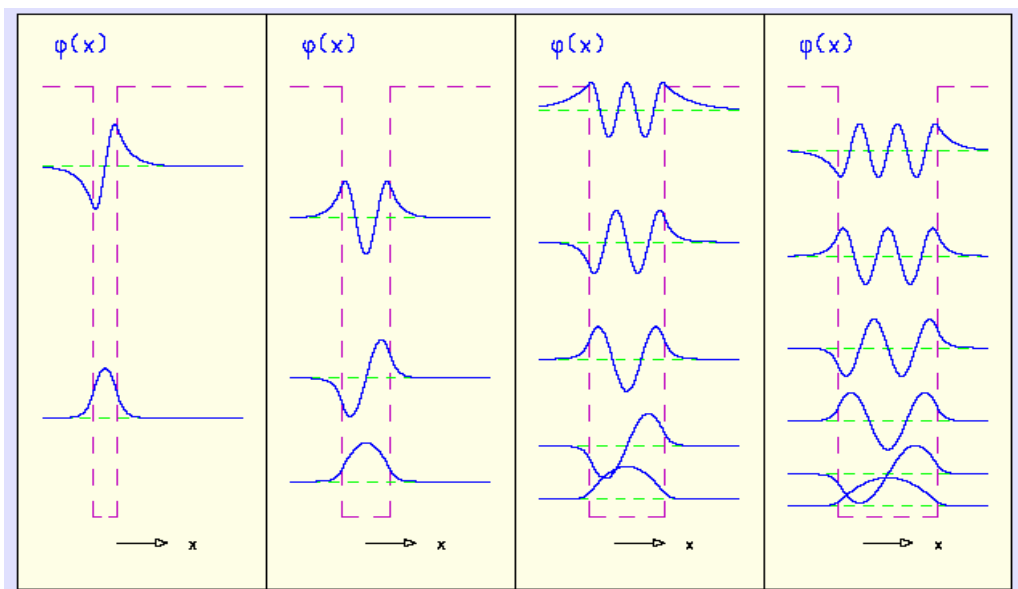
19. ábra.

Molekulák és szilárd testek modellezése

Célszerű megvizsgálnunk, hogy a potenciálgödör esetén kapott energia-sajátértékek és energia sajátfüggvények hogyan függnek a gödör paramétereitől.



20. ábra. A gödör mélységét változtatva a lehetséges állapotok száma változik. A mélység növelésével nő az állapotok száma. Figyeljük meg, hogy közben a gödör szélessége állandó maradt.

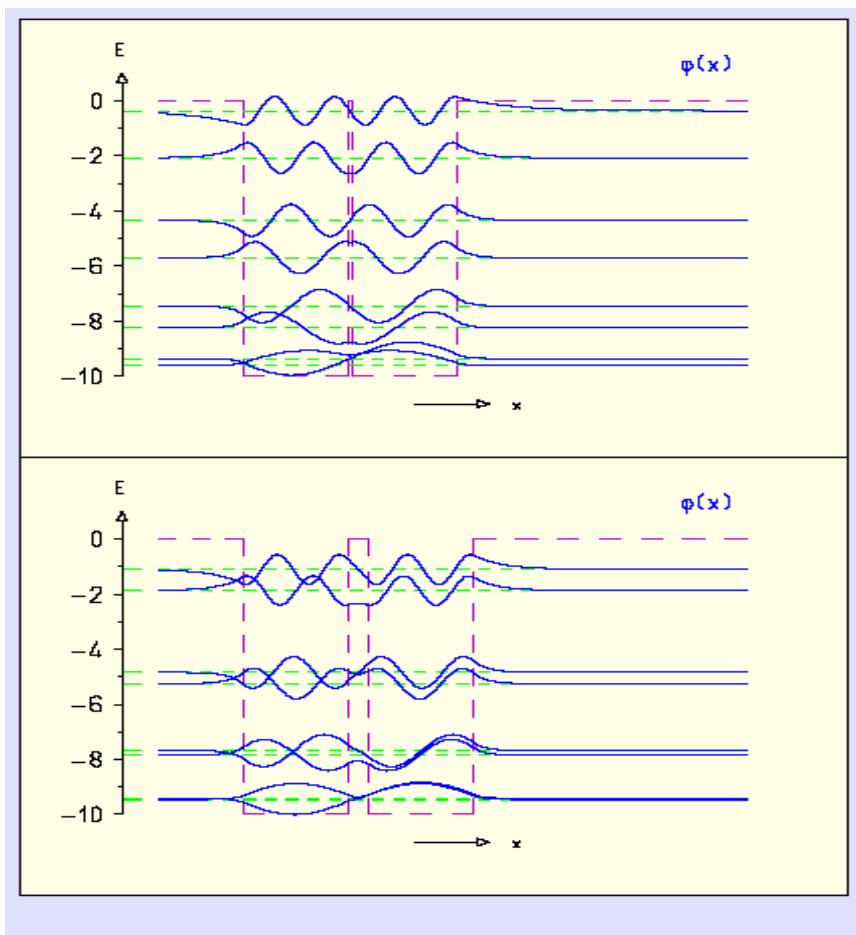


21. ábra Ha a gödörnek csak a szélességét változtatjuk, az energiaállapotok száma szintén változik.

Két gödör egymás mellett.

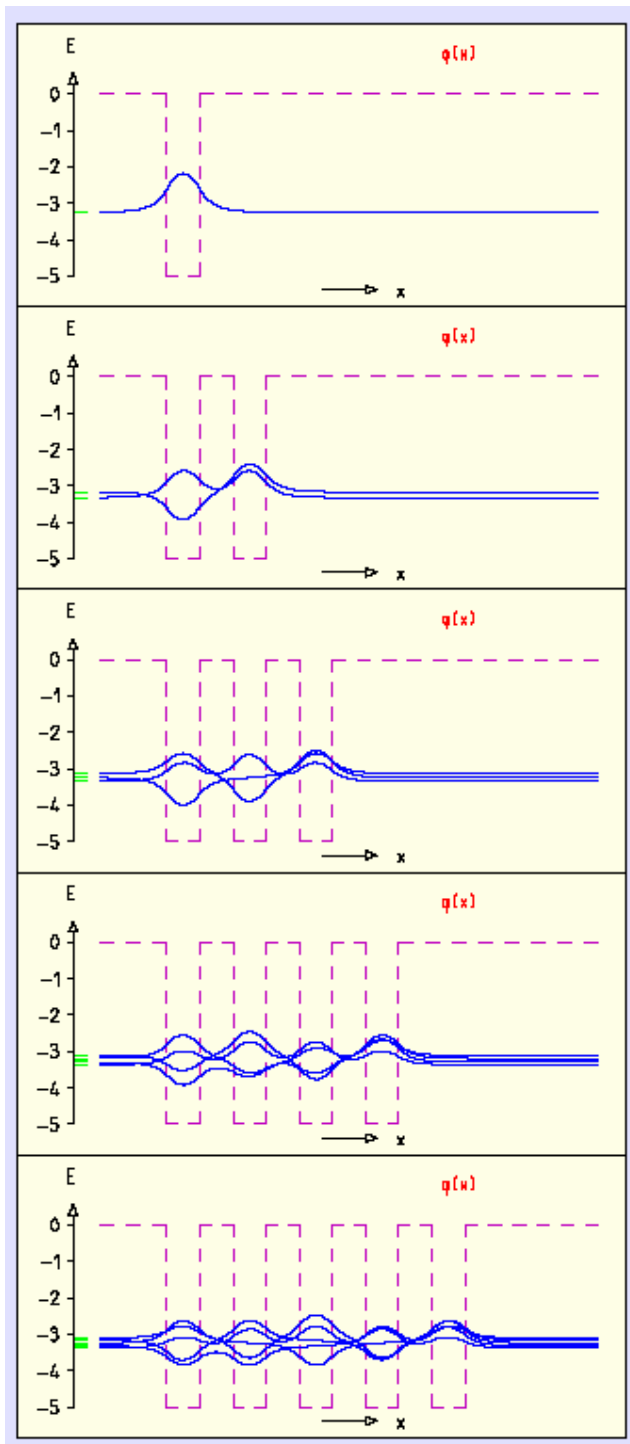
Nagyon fontos eset modellezéséhez érkeztünk: egy gödörrel eddigiekben egy proton Coulomb-terét modelleztük. Két gödör egymás mellett nyilvánvalóan alkalmas két, egymás melletti proton terében mozgó elektron energiaállapotainak modellezésére. Amit itt tapasztalunk, abból kvalitatíve megismerhetjük, hogyan megy végbe a molekulák képződése. Arra a kérdésre, hogy két atomból miért keletkezhet egyáltalán egy molekula, már a 21. ábra alapján is adható válasz. Láthatjuk, hogy az **elektron számára hozzáférhető tartomány méretének növelése (esetünkben a gödör szélesítése) alacsonyabb energia-állapotot eredményez.**

Két egymás mellett elhelyezkedő potenciálgödörben a kialakuló energia-sajátértékek és a hozzájuk tartozó hullámfüggvények jellegzetes viselkedést mutatnak. Az egy gödör esetén talált energia-állapotok és a sajátfüggvények megduplázódnak. Az alapállapot két egymáshoz közeli állapotra hasad, a hozzájuk tartozó hullámfüggvények, bár hasonló mintázatúak, (a gödrökben nincs belső csomópont), de megkülönböztethetők (szimmetrikus, ill. aszimmetrikus állapotok, 22. ábra).



22. ábra. Két egymás melletti gödörben lévő elektron energiasajátértékei és sajátfüggvényei. Figyeljük meg a gödröket elválasztó potenciálfal szélességének hatását.

Ha sok atomot helyezünk egymás mellé, és az elektronok mindegyik atomhoz hajlandók tartozni, akkor egy egydimenziós fémeket kapunk. Egy ilyen rendszert (egydimenziós szilárdtestet) is modellezhetünk potenciálgödrök sorozatával. A 23. ábrán megfigyelhetők a kialakuló állapotok jellegzetessége. Az egygödör esetén megismert állapot **annyi közeli állapotra hasad, ahány atom vesz részt a társulásban. Az egymáshoz közeli, diszkrét energiaállapotok sokaságát sávnak nevezzük.** Egy sávban a hullámfüggvények mintázata hasonló.



23. ábra. Egydimenziós fém modellezése. Az „egy-gödör” állapot annyi energiaállapotra hasad, ahány atom alkotja a fémot. Figyeljük meg az egy sávban lévő állapotok hullámfüggvényeinek mintázatát. Az ábra egyetlen sáv kialakulását mutatja.