Kvantummechanika

- dióhéjban -

Kasza Gábor

2016. július 5. - Berze TÖK

Mire fogunk választ kapni az előadásból?

- Miért KVANTUMmechanika?
- Miért részecske? Miért hullám?
- Mit mond a Schrödinger-egyenlet?
- Hogy működik a határozatlansági-elv?
- Hogyan épül fel egy hidrogén atom?
- Mire jó ez az egész?

Feketetest sugárzás

Definíció

A feketetest egy olyan ideális test, ami bármilyen hullámhosszú elektromágneses sugárzást teljesen elnyel.

Abszorpciós együttható:

$$0 \leq A \leq 1$$

Abszolút fekete test abszorpciós együtthatója:

$$A_{bb}(\lambda, T) = 1$$

Spektrális emisszióképesség:

$$E(\lambda, T) = E_{bb}(\lambda, T) \cdot A(\lambda, T)$$

A feketetest emisszióképessége a legnagyobb! Ebből következően az összemisszió-képessége is a legnagyobb.

Feketetest sugárzás

Abszolút feketetest nem létezik! De ideálisan megvalósítja egy nagy vezetőképességű fémfallal körbevett tartály.

- a fématomok elnyelik a sugárzást
- energiát nyerve gyorsulnak, ezért sugároznak (apró oszcillátorok)
- a bejövő fényt visszasugározzák az üreg belsejébe
- a fal és az üreget kitöltő sugárzás között termikus egyensúly jön létre
- kis lyukat fúrunk a tartályra, amivel mérhetjük a kialakult sugárzás frekvencia szerinti összetételét

Szükségünk van egy elméletre, ami megmagyarázza a méréseket! Ötlet:

- az üregben lévő sugárzás felbontható elemi módusokra
- adjuk össze a módusok intenzitásjárulékát $\rightarrow$ fekete test spektruma

Rayleigh-Jeans törvény

Spektrális energiasűrűség:

$$\rho(\nu, T) \sim \nu^2 \bar{E} = \nu^2 k_B T$$

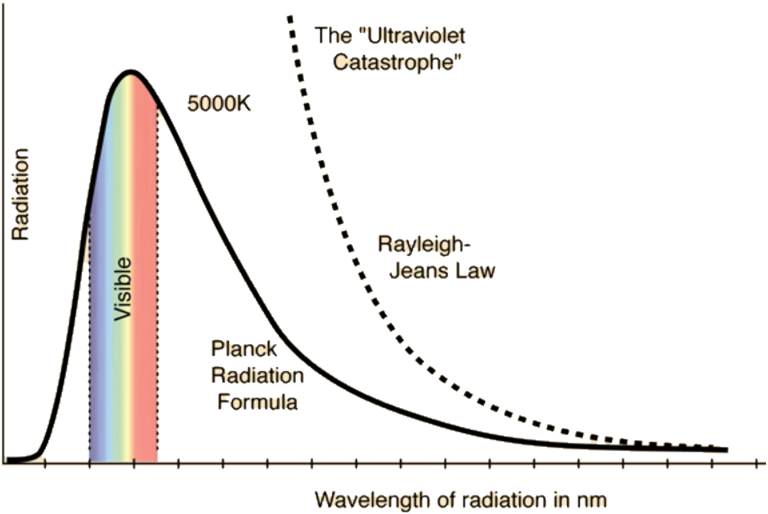
Ultraibolya katasztrófa! Megfagy az Univerzum! Probléma megoldása:

- Planck illeszti a mérési adatokat (h, $\hbar$)
- Einstein pedig megmagyarázza a kapott képletet: az oszcillátorok energiája kvantált!
- Pontosabban: az energiaváltozásuk csak $h\nu$ egész számú többszöröse lehet!
- $\bar{E} \neq k_B T$

$$E = nh\nu \longrightarrow \bar{E} = \frac{h\nu}{e^{\beta h\nu - 1}} \longrightarrow \rho(\nu, T) \sim \frac{\nu^3}{e^{\beta h\nu - 1}}$$

Az elektromágneses sugárzás kvantumja (legkisebb egysége): **foton**. Energiája $E_\gamma = h\nu = \hbar\omega$.

Planck-spektrum



de Broglie hipotézis

Eddig úgy gondoltuk, hogy a fény alapvetően hullámtermészetű, de láttuk, hogy részecskeként is értelmezhető. Kísérleti megerősítés...

- ...hullámtermészetre: interferencia, elhajlás
- ...részecskeként való viselkedésre: fotoeffektus, fénynyomás

de Broglie ötlete

Ha az elektromágneses hullámokat tekinthetjük részecskeként, miért ne lehetne az ismert részecskéknek hullámtulajdonsága?

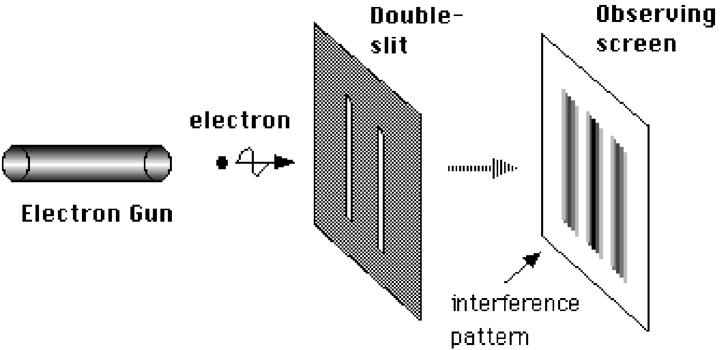
Részecskék impulzusa (hullámhossza) és energiája (frekvenciája) a foton-kép alapján:

$$\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k} = \frac{h}{\lambda} \qquad E = \hbar\omega = h\nu$$

Davisson elektronelhajlási kísérlete igazolta de Broglie feltevését!

Kétrés kísérlet

Mindkét természetet igazoló kísérlet:



Kétrés kísérlet eredményei

Ha megmérjük, hogy melyik résen megy át az elektron, elvész az interferenciakép! Helyette véletlenszerűen megjelent egy pont.

Konklúzió

Tehát a mérés kimenetele nem független a megfigyelőtől!

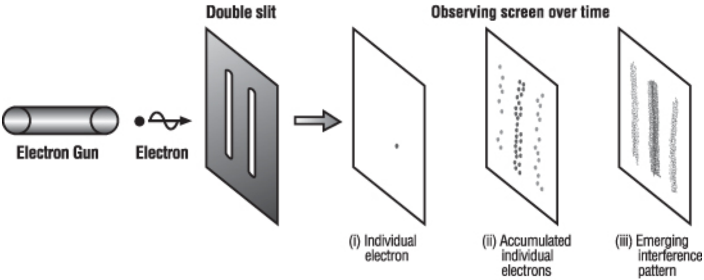
A kvantummechanika fizikájának kereteit ki kell bővíteni az alábbi fogalmakkal:

- megfigyelő
- mérés

A klasszikus fizikához képest ez hatalmas különbség!

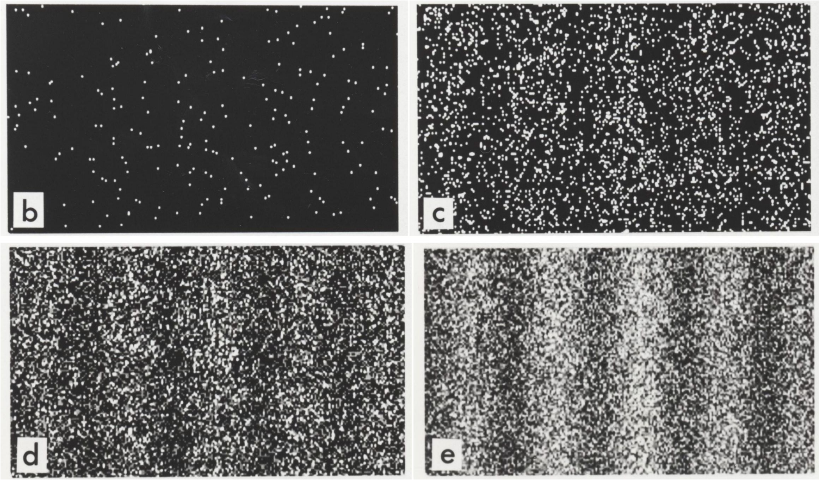
Tonomura kísérlet

Mi a kapcsolat a részecske- és interferenciakép között?



Double-slit apparatus showing the pattern of electron hits on the observing screen building up over time.

Tonomura kísérlet



Valószínűségi értelmezés

Interpretáció:

- Egy részecskéhez tehát tartozik egy hullámfüggvény: $\Psi(\mathbf{x})$
- ez önmagában nem fizikai mennyiség (nem mérhető)

A részecske **x** helyen tartózkodásának valószínűsége:

$$P(\mathbf{x}) = |\Psi(\mathbf{x})|^2$$

Összeadva az összes **x** ponthoz tartozó valószínűséget, akkor éppen egyet kapunk (normálás). Ez teljesen logikus, hiszen valahol egészen biztosan megtaláljuk az elektront.

Schrödinger-egyenlet

$\Psi(\mathbf{x})$-re felírható az alábbi egyenlet:

$$\hat{H}\Psi(\mathbf{x}) = E\Psi(\mathbf{x})$$

Ezt az egyenlőséget nevezik Schrödinger-egyenletnek. $\hat{H}$ jelentése:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{\mathbf{x}})$$

Ez éppen a klasszikus energia kifejezése! De mik azok a kalapok?

Operátor formalizmus

Kalapos kifejezések: operátorok, amik valamilyen "operációt" végeznek a hullámfüggvényen. Minden fizikai mennyiséghez tartozik egy operátor!

Ha a Schrödinger egyenletben $V \neq 0$:

- kötött állapotok alakulhatnak ki (pl. H atom)
- legegyszerűbb esetben minden állapothoz tartozik egy energiaszint
- tehát egy atommag körül keringő elektron csak diszkrét energiákon mozoghat: E_n
- minden állapot rendelkezik egy önálló hullámfüggvénnyel: ϕ_n

Operátor formalizmus

Az önálló hullámfüggvények szuperpozíciója adja a teljes hullámfüggvényt!

$$\Psi(\mathbf{x}) = \sum_{n=0}^{N-1} c_n \phi_n(\mathbf{x}),$$

ahol $|c_n|^2$ annak a valószínűsége, hogy az elektron a $\phi_n(\mathbf{x})$ állapotban van.

A Schrödinger-egyenlet tehát egy sajátérték probléma:

$$\hat{H}\phi_n(\mathbf{x}) = E_n \phi_n(\mathbf{x})$$

Ha megmérjük az elektron valamilyen fizikai tulajdonságát, akkor az elektron "beugrik" valamely n. állapotba. A mérési eredményünk a mérendő fizikai mennyiséghez tartozó operátor n. sajátértéke lesz.

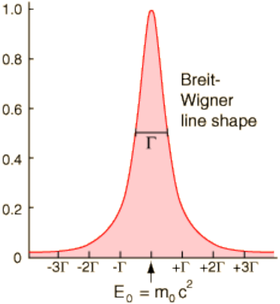
Heisenberg-féle határozatlansági elv

Az impulzus és a koordináta bizonytalanságára:

$$\Delta x \Delta p \geq \hbar/2$$

Egy részecske energiájára és élettartamára:

$$\Delta E \Delta \tau \geq \hbar/2$$



A H atom Schrödinger-egyenlete

Bontsuk fel $\hat{H}$-t kinetikus és potenciális tagokra:

$$\hat{H}(\mathbf{x}, \hat{\mathbf{p}})\Psi(\mathbf{x}) = \hat{K}\Psi(\mathbf{x}) + V\Psi(\mathbf{x})$$

V ez esetben nem más, mint a Coulomb potenciál, ami **x**-nek csak a nagyságától függ:

$$\hat{H}\Psi = \left(\frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m_e} + V(r)\right)\Psi = \left(\frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m_e} - \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{e^2}{r}\right)\Psi$$

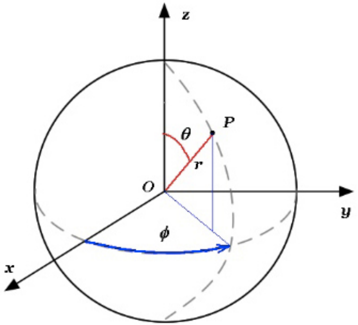
Kihasználjuk: $m_p \gg m_e$, gömbszimmetria $(\Psi(\mathbf{x}) \to \Psi(r, \phi, \theta))$

Az energiára kapható képlet:

$$E_n = -\frac{1}{16\pi^2\varepsilon_0^2}\frac{m_e e^4}{2\hbar^2}\frac{1}{n^2} = -\frac{E_0}{n^2}$$

A H atom Schrödinger-egyenlete

Egy gömböt három paraméterrel jellemezhetünk: r,ϕ,θ.



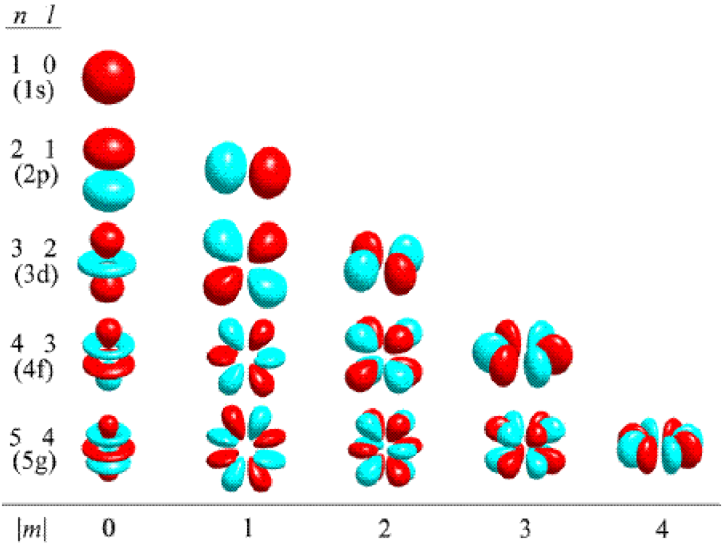
$$x = r sin(\theta) cos(\phi)$$

$$y = r sin(\theta) sin(\phi)$$

$$z = r cos(\theta)$$

Láttuk, hogy a Coulomb-potenciál csak r-től függ, tehát ha beülünk a proton helyére, akkor bármerre nézhetünk, ugyanazt az potenciált fogjuk látni $\Longrightarrow$ gömbszimmetria.

Hullámfüggvények



Bohr-modell

Láttuk: $E_n = -E_0/n^2$
Pont ezt jósolta a Bohr! A H atomra alkalmazható a Bohr-modell, bizonyos keretek közt pontos eredményt ad, ráadásul sokkal egyszerűbb!

A modell lényege:

- az elektronok perdülete csak $L = mvr = pr = n\hbar$ lehet
- az ilyen pályákon nincsen gyorsulásból fakadó sugárzás
- a pályákon állóhullámok jelennek meg

Az energiaszintek számolásánál a Coulomb erő és a pályán tartó centripetális erő egyenlőségéből indulunk ki:

$$k\frac{e^2}{r^2} = \frac{mv^2}{r} = \frac{p^2}{mr} \Longrightarrow p^2r^2 = ke^2mr = n^2\hbar^2 \Longrightarrow r_n = \frac{n^2\hbar^2}{ke^2m}$$

Bohr-modell

r_n segítségével kifejezhető v_n^2:

$$v_n^2 = k\frac{e^2}{mr_n} = \frac{k^2e^4}{n^2\hbar^2}$$

Ezzel pedig megvannak az energiaszintek:

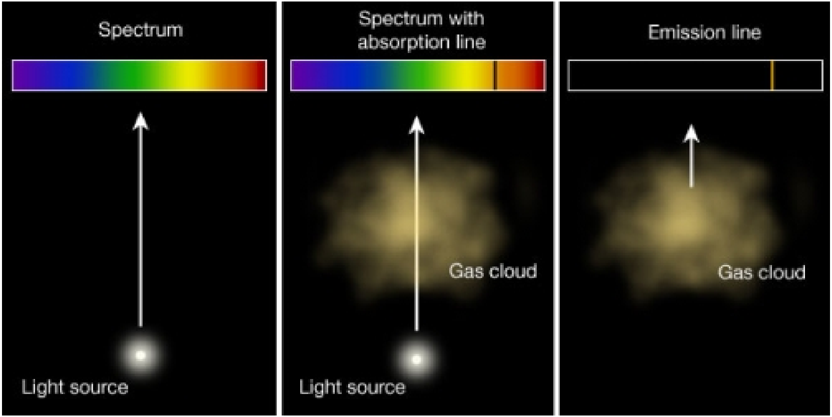
$$E_n = \frac{1}{2}mv_n^2 - k\frac{e^2}{r_n} = -\frac{E_0}{n^2}$$

A Bohr-posztulátumok szerint egy elektron kibocsát egy fotont, ha egy magasabb energiaszintről egy alacsonyabbra ugrik, fordított esetben pedig elnyel egyet.

Atomok spektruma

A két energiaszint különbsége megegyezik az elnyelt, vagy kibocsátott foton energiájával. Emiatt látunk vonalas spektrumokat.

A csillagok spektruma



Fő- és mellékkvantumszám

Kvantumszámok nem univerzálisak minden rendszerre! Most a H atom példájánál maradunk.

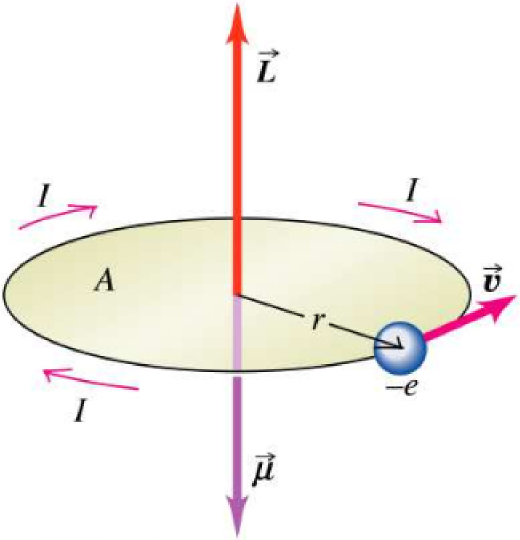
Főkvantumszám (n):

- már láttuk pl. a Bohr-modellben is
- az energianívók szintjeit jelöli
- alapállapot: $n = 1$

Mellékkvantumszám (l):

- egy keringésszerű tulajdonságból származó perdületként interpretálható
- adott n szinthez többféle l is tartozhat: l={0,1,...,$n-1$}
- spektrális jelölés: 0=s, 1=p, 2=d, 3=f, stb.
- alapállapot spektrális jelölése: 1s

Fő- és mellékkvantumszám



Spin és mágneses kvantumszám

Spin (s):

- az elektron sajátperdületének szokták nevezni
- hasonló matematikai tulajdonságokkal (algebrával) bír, mint l
- valóban forgással kapcsolatos, de nem a megszokott értelemben
- értéke lehet egész (bozonok) vagy félegész (fermionok)
- az elektron egy fermion ($s = 1/2$)

Mágneses kvantumszám (m):

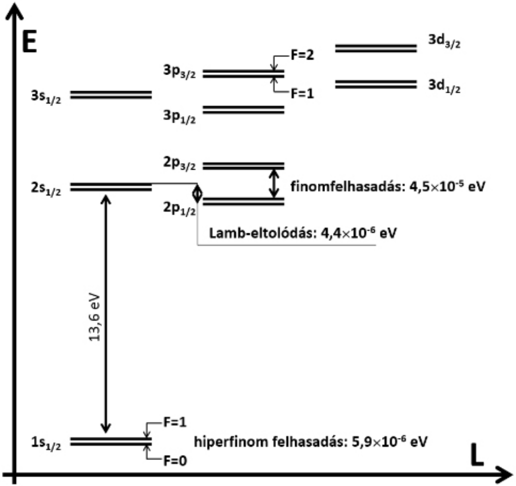
- minden perdületszerű mennyiséghez tartozik m
- a részecske mágneses térrel való kölcsönható képességét méri
- értéke lehet: $m_s = \{-s, -s+1, ..., s-1, s\}$ (spin példáján)
- alapállapot spektrális jelölése: $1^2\mathrm{s}_{1/2}$ $(n^{2s+1}l_j)$

Szükséges korrekciók

A hidrogén atom kvantummechanikai levezetésénél több korrekcióra is szükség van, amit a Bohr-modellel már nem tudunk megmagyarázni:

- relativisztikus korrekciók
- elektron saját- és pályaperdületének kölcsönhatása
- az elektron és a proton spinje is kölcsönhat
- Lamb-féle eltolódás

H atom spektruma



A kvantummechanika jelentősége

A kvantummechanikával az tudomány bármely szegletében találkozhatunk. Akár a hétköznapokban is!

Széles körben felhasználják:

- anyagszerkezet meghatározás (röntgen fluoreszcencia analízis)
- orvosi alkalmazás (MRI, gyógyszerek)
- bármilyen elektronikai készülék (pl. okostelefonok)
- csillagok spektruma
- részecskegyorsítók (hatékonyabb pelenkák, tejesdobozok lezárása, rák elleni küzdelem)
- mikroszkópok (SEM, TEM)