FIZIKA 3.

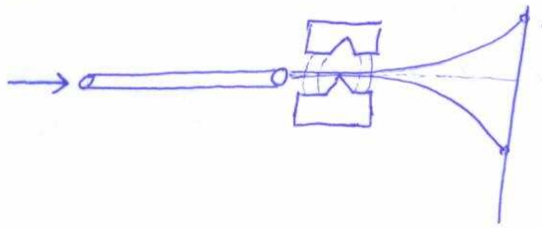
8 EA

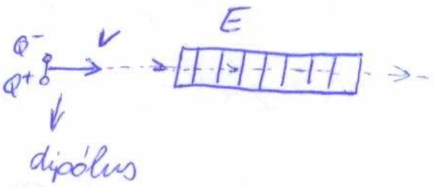
Stern-Gerlach kísérlet Ag

ezüst atomok - elpárologtatták - hosszú csőben engedték el

atomok egymással ll-osan - ezért kell a cső

atomokat inhomogén mágneses térbe engedték a cső után

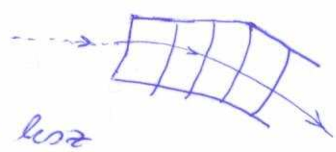




homogén mágneses mezőn keresztül küldve egyenesen halad

inhomogén esetén eltérül

azt várnánk, hogy ezüst atom nem térül el,
de eltérül



magyarázat: lenni kell mágneses dipólmomentumának

Ag^{47} - 1 db külső héjon lévő elektron

1 db - s pálya, $l=0$ gömbszimmetrikus a héj - ebből nem lesz mágn. dip. mom

héjnak van saját mágneses dipól momentuma - SPIN

nem a pályamozgásától ered, hanem saját

spin vetülete 2 lehet

$M = 0, \pm 1 \ \pm 2 \ \dots \ \pm l$ - egész számok

$2l+1$ - vetület

$2l+1=2$

$2s+1=2 \Rightarrow s = \pm\frac{1}{2}\hbar$ - elektron spinje feles spinű

e^- feles spinű részecske

másnéven fermion

Pauli-féle kizárási elv: négy kvantumszám közül legalább egyiknek különböznie kell a többitől

Periódusos rendszer

www. ptable. com/?lang=hu

He : $1s^2$ $n=1$ $m=0$ $l=0$

Li : $1s^2\,2s^1$ – $n=2$ $m=0$ $l=0$

Be : $1s^2\,2s^2$ – $n=2$ $m=0$ $l=0$

B : $1s^2\,2s^2\,2p^1$ – $n=2$ $m=-1$ $l=1$

Ne : $1s^2\,2s^2\,2p^6$ – telített állapot $n=2$ $m=1$ $l=1$

$l=2$ – d pálya

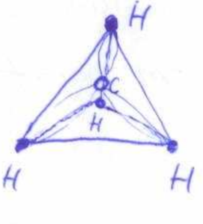
Schrödinger – egyenlet:

$a\Psi_s + b\Psi_p$ – megoldás (kevert, másképp nem tiszta)

pl. : Ψ_s tiszta állapot

Hibridizáció: (gyémánt, Si kristály, Ge kristály)

CH_4 – szabályos tetraéder



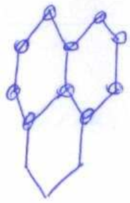
sp^3 orbitals:

1. $sp^3 = 1/2\,s - 1/2\,p_x - 1/2\,p_y + 1/2\,p_z$
2. $sp^3 = 1/2\,s - 1/2\,p_x + 1/2\,p_y - 1/2\,p_z$
3. $sp^3 = 1/2\,s + 1/2\,p_x - 1/2\,p_y - 1/2\,p_z$
4. $sp^3 = 1/2\,s + 1/2\,p_x + 1/2\,p_y + 1/2\,p_z$

skalár szorzat:

$\cancel{(n.sp^3)}$ $(n.sp^3;\ m.sp^3) = 0$

grafit

CH_3  síkban van

<u>Tétel:</u> hermitikus operátor különböző sajátértékeihez tartozó sajátfv-ek ortogonálisak

<u>Bizonyítás.</u> $\varphi_k \neq \varphi_l$

$$O\varphi_k = \lambda_k \varphi_k \quad / \cdot \varphi_l$$

$$\cdot \varphi_k / \quad O\varphi_l = \lambda_l \varphi_l$$

$$(O\varphi_k, \varphi_l) = (\lambda_k \varphi_k ; \varphi_l)$$

$$(\varphi_k, O\varphi_l) = (\varphi_k ; \lambda_l \varphi_l)$$

$$(O\varphi_k, \varphi_l) = (\varphi_k, O\varphi_l)$$

$$(\lambda_k \varphi_k ; \varphi_l) = (\varphi_k, \lambda_l \varphi_l)$$

$$\Rightarrow \quad \lambda_k^*(\varphi_k, \varphi_l) - \lambda_l(\varphi_k, \varphi_l) = 0$$

$$(\lambda_k - \lambda_l)(\varphi_k ; \varphi_l) = 0$$

$$\downarrow$$

$$(\varphi_k ; \varphi_l) = 0$$

$$\downarrow$$

ez volt az állítás

Bra Ket vektorok

$\langle \varphi_1 |$ $\qquad | \varphi_2 \rangle$

$$\langle \varphi_1 | \varphi_2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_1^* \varphi_2 \, dx$$

$$\hat{O} | \varphi_k \rangle = \lambda_k | \varphi_k \rangle$$

$$\langle \varphi_l | \hat{O} | \varphi_k \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_l^* O \varphi_k \, dx$$

de Broigle féle hullám

fény (foton) impulzusa : $p = \frac{E}{c}$ E – foton energiája, c – fénysebesség

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

fénynek van részecske és hullámtermészete is

MO Sch:

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

mo: $\psi = e^{ikx} = \cos(kx) + i \sin(kx)$

hullámszám $k = \left(\frac{2mE}{\hbar^2} \right)^{1/2}$ $\qquad k = \frac{2\pi}{\lambda}$ – hullámszám, λ hullámhossz

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \qquad E = \frac{p^2}{2m}$$

$$\boxed{p = \hbar k}$$

De Broigle: $p = \frac{h}{2\pi} \cdot \frac{2\pi}{\lambda} \Rightarrow \boxed{\lambda = \frac{h}{p}}$ – anyag hullámtermészetét írja le

Időfüggő Schrödinger-egyenlet

Heisenberg féle felcs. törvény $p_x; x$ - kanonikusan konjugáltak

$$(-H); t$$

$$[-H; t] \neq 0$$

idő operátor:

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

Hamilton op.

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

időfüggő Schr.-egyenlet

nem relativisztikus

Kontinuitási egyenlet

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

$$\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\overbrace{(\Psi^*\Psi)}^{\text{jelöljük } \rho\text{-val}}}{\partial t} - \frac{\hbar^2}{2m}\left(\Psi^*\Delta\Psi - \Psi\Delta\Psi^*\right) = 0$$

$$\Delta\Psi = \text{divgrad}\,\Psi \qquad (\text{divgrad}\,\Psi^*)\cdot\Psi - \Psi^*(\text{divgrad}\,\Psi) =$$

$$= \text{div}\left(\Psi\,\text{grad}\,\Psi^* - \Psi^*\,\text{grad}\,\Psi\right)$$

$$\boxed{\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div}\, j = 0}$$ - kontinuitási egyenlet

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

Ha egy potenciál nem függ az időtől, akkor a dolog visszavezethető statikus Schr. egyenletre

dinamikai (időfüggő) egyenlet mo, ha

$$V(x,y,z) \neq V(x,y,z,t)$$ — nem tartalmaz időfüggést a pot.

$$\frac{\hbar}{i}\frac{\partial \psi}{\partial t} - \frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi + V(x,y,z)\cdot\psi = 0$$

próbafv:
$$\psi(x,y,z,t) = \varphi(x,y,z)\cdot T(t)$$

$$\frac{\hbar}{i}\frac{dT}{dt}\varphi(x,y,z) - \frac{\hbar^2}{2m}\Delta\varphi(x,y,z)\cdot T(t) + V(x,y,z)\,\varphi(x,y,z)\,T(t) = 0$$

$$:\varphi(x,y,z)\cdot T(t)$$

$$\frac{\hbar}{i}\frac{1}{T(t)}\frac{dT}{dt} + \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\varphi(x,y,z) + V(x,y,z)\,\varphi(x,y,z)\right]\frac{1}{\varphi(x,y,z)} = 0$$

1. eset

$$\frac{\hbar}{i}\frac{1}{T}\frac{\partial T}{\partial t} = -\alpha$$

$$T(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}\alpha t}$$

2. eset: nagy zárójel $= \alpha$
helyfüggő rész

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

$$\alpha = E$$

megkaptuk a stacionárius Schrödinger-egyenletet

$$\psi(x,y,z,t) = \varphi(x,y,z)\,e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$$

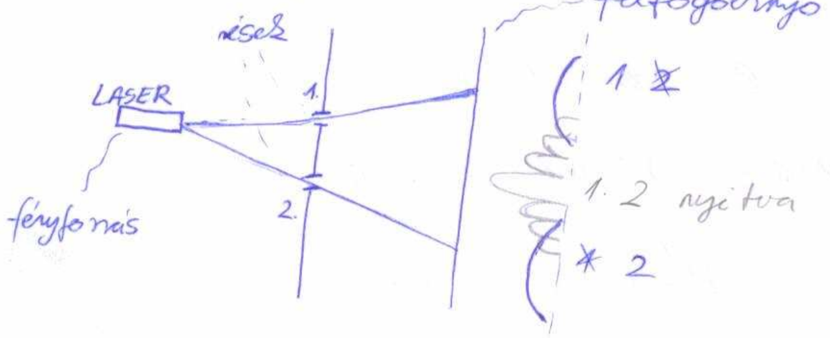
tartózkodási vség:
$$\psi^*\psi = \varphi^*(\ )\,e^{+\frac{i}{\hbar}Et}\cdot\varphi(\ )\,e^{-\frac{i}{\hbar}Et} = \varphi^*(\ )\,\varphi(\ )$$

potenciál időfüggetlen

FIZIKA 3

9 EA

Jönsson-féle kísérlet - 1961 - elektronok hullámtermészetét szeretnék megmutatni



Jönson megcsinálta ezt a kísérletet LASER helyett elektronággyúval

2 rés távolsága: 1 μm

rés vastagsága: 0,3 μm

felfogóernyő : 35 cm-re

az eredmény ugyanaz lett

	FOTONOK	RÉSZECSKE
nyugalmi tömeg	$m_0 = 0$	m_0 $\quad m(v) = \dfrac{m_0}{\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}}$ - v sebességgel mozog
sebesség	c	$v < c$
impulzus	$p = \dfrac{h}{\lambda} = \dfrac{h\nu}{c}$	$p = mv = \dfrac{m_0 v}{\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}}$
energia	$E = h\nu = \hbar\omega$	$E = mc^2 = \dfrac{m_0 c^2}{\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}}$

Azonos részecskék

megkülönböztethetetlenek a részecskék

hullámfv.

$$|\Psi(A,B)|^2$$

1-be teszek egy részecskét – A

2-be teszek egy részecskét – B

$$P\Psi(A,B) = k\,\Psi(B,A)$$

$$P^2\Psi(A,B) = k^2\,\Psi(A,B) = \Psi(A,B)$$

$$\Downarrow$$

$$k^2 = 1 \Rightarrow k = \pm 1$$

természetben csak olyan fv.-ek tudják leírni a mikrovilágot, hogy ha

$k = 1 \rightarrow$ szimmetrikus

$$\Psi(A,B) = \Psi(B,A) \quad \text{– bozonok}$$

ha $k = -1$ antiszimmetrikus hullámfv.

$$\Psi(A,B) = -\Psi(B,A) \quad \text{– fermionok}$$

kísérleti tapasztalat – az elektronok fermionok

Pauli-elv: e^--ok hullámfüggvénye antiszimmetrikus

FIZIKA 3

10 EA

Tétel: Ha két operátor felcserélhető egymással, akkor szimultán sajátfüggvényei vannak és fordítva

Bizonyítás: $O_2 \cdot | \; O_1 \varphi^i = \lambda_1 \varphi^i =$

$O_1 \cdot | \; O_2 \varphi^i = \lambda_2 \varphi^i$

$$O_2 O_1 \varphi^i = O_2 \lambda_1 \varphi^i = \lambda_1 \lambda_2 \varphi^i$$

$$O_1 O_2 \varphi^i = O_1 \lambda_2 \varphi^i = \lambda_1 \lambda_2 \varphi^i$$

$$(O_2 O_1 - O_1 O_2)\varphi^i = 0$$ – kész

másik irány:

$O_2 \; | \; O_1 \varphi = \lambda_1 \varphi$ $\quad [O_1 \, O_2] = 0$ – felcserélhető, azt jelenti

$$O_2 O_1 \varphi = O_2 \lambda_1 \varphi = \lambda_1 O_2 \varphi$$

$$O_1 O_2 \varphi = \lambda_1 \underbrace{O_2 \varphi}_{\psi}$$

$$O_1 \psi = \lambda_1 \psi$$

$$\psi = \underset{\substack{\downarrow \\ \text{valami} \\ \text{szorzó}}}{\mu} \varphi$$

Méréselmélet

$$sp^3 \quad \psi_1 = 2s + 2p_x + 2p_z + 2p_y$$

$$\psi = a\psi_1 + b\psi_2 + c\psi_3 + d\psi_4$$

ψ - sajátfv

$\psi(t)$ - valószínűség, hogy van egy $\psi(t)$ állapotban és annak sajátértéke λ_k

$$W_k = |(\psi_k ; \psi(t))|^2$$

skalárszorzás

teljes függvényrendszert alkotnak

$$\psi = \sum_{k=1} c_k \psi_k$$

$$(\psi_r ; \psi_s) = \delta_{rs}$$

$$(\psi_k ; \psi(t)) = \sum_r c_r (\psi_k ; \psi_r) = \sum c_r \delta_{kr} = c_k$$

$$\boxed{W_k = |c_k|^2} \qquad |\psi(t) ; \psi(t)| = (\sum c_k \psi_k ; \sum c_l \psi_l) =$$

$$= \sum\sum c_k^* c_l (\psi_k ; \psi_l) = \sum c_k^* c_k = \sum |c_k|^2 = 1$$

$$\boxed{\sum |c_k|^2 = 1}$$

$$\bar{O} = \sum W_k \lambda_k = \sum |c_k|^2 \lambda_k \qquad \psi^*(t) = \sum c_r^* \psi_r^*$$

$$O\,\psi(t) = \sum c_k O \psi_k = \sum c_k \lambda_k \psi_k$$

$$\iiint \psi^*(t) O \psi(t) = \iiint \sum_k \sum_r \lambda_k c_k c_r^* \psi_r^* \psi_k \, dx\,dy\,dz$$

$$\iiint \psi_r^* \psi_k \, dx\,dy\,dz = \delta_{rk}$$

$$\iiint \psi^*(t) O \psi(t) dx\,dy\,dz = \sum_k \lambda_k |c_k|^2$$

$$\boxed{\bar{O} = \psi(t)\,;\, O\, \psi(t)}$$ – középérték (operátor várható értéke)

Heisenberg-féle bizonytalansági elv

$$\bar{O} = (\psi\,;\, O\,\psi)$$

közepes eltérés, átlagtól való szórás: $\Delta O = \sqrt{\overline{(\hat{O}-\bar{O})^2}}$

$$(\Delta O)^2 = \overline{(\hat{O}-\bar{O})^2} = (\psi, (\hat{O}-\bar{O})^2\psi) = (\psi, \hat{O}^2\psi) - 2\bar{O}\underbrace{(\psi;\hat{O}\psi)}_{\bar{O}} + \bar{O}^2 =$$

$$= \overline{\hat{O}^2} - \bar{O}^2$$

$$[O_1\,;\,O_2] = \hat{O}_3 \qquad [\hat{O}_1'\,;\,\hat{O}_2'] = \hat{O}_3$$

$$\hat{O}_1' = \hat{O}_1 - \bar{O}_1$$

$$\hat{O}_2' = \hat{O}_2 - \bar{O}_2$$

$$(\Delta O_1)^2 = (\psi, \hat{O}_1'^2\psi) = (\hat{O}_1'\psi, \hat{O}_1'\psi)$$

$$(\Delta O_2)^2 = (\psi, \hat{O}_2'^2\psi) = (\hat{O}_2'\psi, \hat{O}_2'\psi)$$

Schwartz-egyenlőtlenség:

$a+b \geq c$

skalárszorzat

$$(f\,;\,f)(g\,;\,g) \geq |(f\,;\,g)|^2$$

legyen $f = \hat{O}_1'\psi \qquad g = \hat{O}_2'\psi$

$$(\hat{O}_1'\psi\,;\,\hat{O}_1'\psi)(\hat{O}_2'\psi, \hat{O}_2'\psi) \geq |(\hat{O}_1'\psi\,;\,\hat{O}_2'\psi)|^2 =$$

$$= |(\psi\,\hat{O}_1'\,;\,\hat{O}_2'\psi)|^2$$

$$|(\psi\,;\,O_1'\,O_2')|^2 = \left|\left(\psi\,;\,\frac{O_1'O_2 + O_2'O_1}{2}\right) + \left(\psi, \frac{O_1'O_2' - O_2'O_1'}{2}\psi\right)\right|^2 =$$

$$= \left|\left(\psi\,;\,\frac{O_1'O_2' + O_2'O_1'}{2}\psi\right)\right|^2 + \left|\left(\psi, \frac{O_1'O_2' - O_2'O_1'}{2}\psi\right)\right|^2 + \phi$$

~~[illegible]~~ keresztszorzat

$$(\Delta\hat{O}_1 ; \Delta\hat{O}_2)^2 \geq \left|\left(\psi, \cancel{\frac{O_1' O_2' + O_2' O_1'}{2}} \psi\right)\right|^2 + \left|\left(\psi, \frac{O_1' O_2' - O_2' O_1'}{2} \psi\right)\right|^2$$

ezt elvéve egyenlőtlenség mégjobban fentáll

$$(\Delta O_1 \, \Delta O_2)^2 \geq \left|\left(\psi, \frac{O_1' O_2' - O_2' O_1'}{2} \psi\right)\right|^2$$

$$\downarrow$$

$$(\Delta O_1 \cdot \Delta O_2) \geq \frac{1}{2}\left|\overline{O_3}\right|$$

O_1 = impulzus

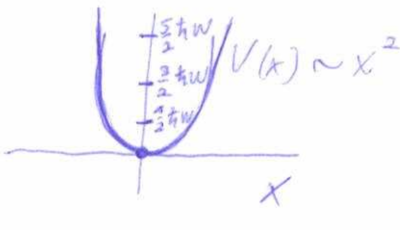
O_2 = hely

$$\boxed{\Delta p_x \cdot \Delta x \geq \frac{1}{2}\hbar}$$

nem egyidőben

világ nem determinisztikus

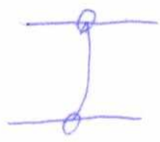
<u>lineáris oszc:</u>



ha • helyen lenne atom

$0 \cdot 0 \geq \frac{1}{2}\hbar$

<u>természetes vonalszélesség</u>



e⁻ felugrik gerjesztett nívó

$$[E, t] = \frac{\hbar}{i}$$

$$\Delta t \sim \tau$$

$$\Delta E = 0 \quad \Delta E \cdot \Delta t \ngeq \frac{1}{2}\hbar$$

$$\downarrow$$

elmosódott vonal

természetes vonalszélesség