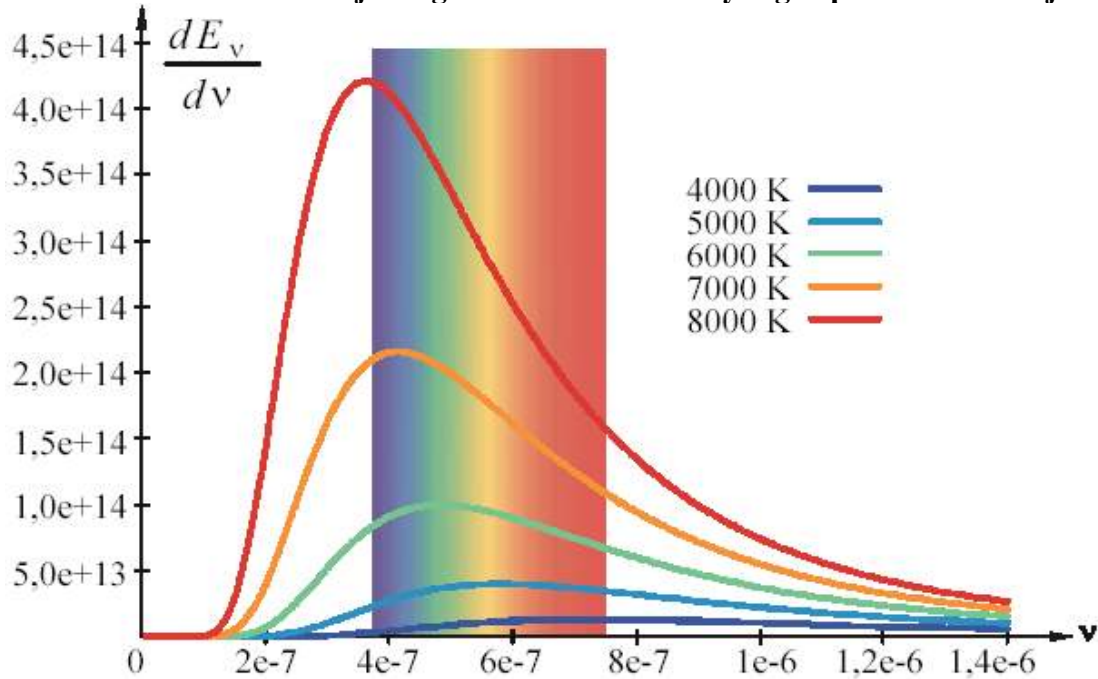


Kvantummechanika

1. Rajzolja fel a fekete test sugárzását jellemző kísérleti görbéket $T_1 < T_2$ hőmérsékletek esetén! Adja meg a mért fizikai mennyiségek pontos definícióját!



Az ún. abszolút fekete test által kibocsátott hőmérsékleti sugárzás spektrális eloszlása, az abszolút fekete test emisszióképessége

$$E(\nu) = \frac{8\pi h \nu^3}{c^3} \frac{1}{e^{h\nu/kT} - 1}$$

2. Ismertesse azt a „kvantálási hipotézist”, amely segítségével fizikailag értelmezni lehet a fekete test (mért) sugárzási törvényét (Planck elmélet)!

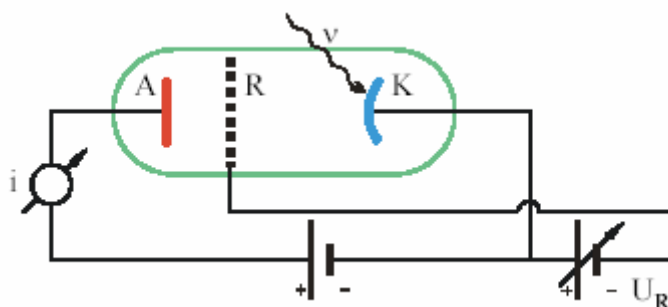
Planck eredeti gondolatmenetében az üreg falát alkotó atomok mint rezgő rendszerek ("rezonátorok") lehetséges energiáit határozta meg és megállapította, hogy hőmérsékleti egyensúlyban az ezen "rezonátorok"-ban, ill. a sugárzási térben lévő energia sűrűsége meg kell, hogy egyezzen.

$$E = h\nu \quad E_n = nh\nu$$

3. Ismertesse a fényelektromos jelenséget!

A múlt század vége felé több kutató megfigyelte, hogy az ultraibolya fénysugarak egy negatív töltésű fémtest töltését csökkentik, pl. egy elektroszkóppal összekötött negatív töltésű amalgámozott cink lemez töltése ultraibolya fénnel még vákuumban is kisülhető, míg a pozitív töltés nem. Tömegspektrometriás (vagyis töltés/tömeg hányados) mérésekkel azt is megállapították, hogy a fémből elektronok lépnek ki. Ez az elektronkilépés alkáli fémeknél már a látható színek tartományba eső fény esetén is észlelhető. A jelenséget *külső fotoeffektusnak* nevezték el

4. Ismertesse a fényelektromos jelenség Einstein által megadott fizikai magyarázatát!



A fény is energiakvantumok — *fotonok* — áramlása. A katód elektronjai ezekkel a fotonokkal ütköznek és ennek során az elektronok teljes energiájukat elvesztik. Ha az ütközésben szerzett energia elég nagy, az elektronok kiléphetnek a fémből.

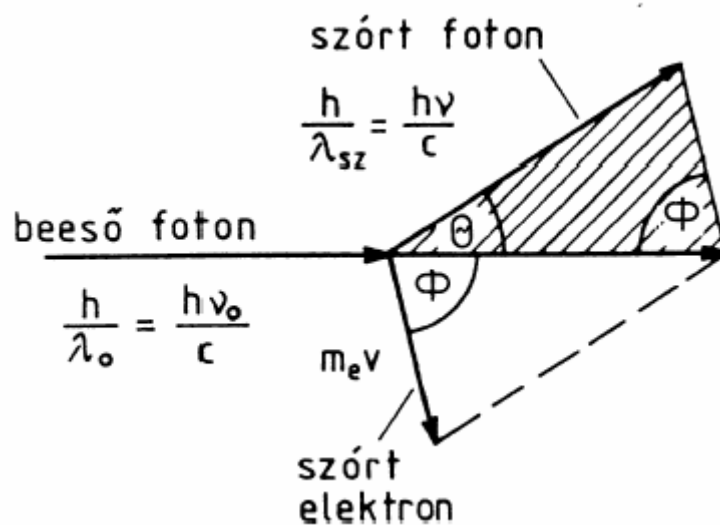
A fotonok energiája: $E_{foton} = \varepsilon_f = h\nu$

$$h\nu = \Phi_e + E_{kin}, \quad E_{kin} = \frac{1}{2}m_e v^2, \text{ ahol } \Phi_e = \text{kilépési munka.}$$

Ha $h\nu < \Phi_e$, akkor az elektronok nem képesek kilépni a fémből.

5. Ismertesse azt a kísérletet, amely azt bizonyította, hogy a fotonnak jól meghatározott impulzusa van (Compton effektus)!

Ha egy nagyenergiájú (tehát nagy frekvenciájú, illetve kis hullámhosszú) elektromágneses hullám könnyű elemekből álló anyagi közegen (illetve azok relatíve kis (tipikusan néhány eV) kötési energiájú, kvázi szabad elektronjain) szóródik, akkor a szórt sugárzásban az eredeti frekvenciájú sugárzás mellett kisebb frekvenciájú sugárzás is fellép. A frekvencia csökkenése (a szórt hullám λ -jának növekedése) annál nagyobb, minél nagyobb a beeső és a szórt hullám iránya közötti Θ szóródási szög (ld 8.9 ábra). Ezenkívül azt tapasztaljuk, hogy az anyagból elektronok repülnek ki. Ez a **Compton-effektus**. A kirepülő elektronok az ún. **Compton-elektronok**.



Minden fotonhoz $p = \frac{E_{foton}}{c} = \frac{h\nu}{c} = \frac{h}{\lambda}$ impulzus tartozik.

6. Adja meg a Bohr-féle (hidrogén) atommodell alapfelvetéseit!

Az atomok stabilitása, illetve vonalas színeképük a klasszikus fizika számára megmagyarázhatatlan. A problémát **Bohr** azzal "oldotta meg", hogy **feltételezte**: az elektronok az atomokban csak meghatározott sugarú pályákon keringhetnek, és ezeken a pályákon nem sugároznak. Az atom csak akkor bocsát ki fényt, ha benne az elektron egy, magasabb, E_n energiájú (tehát nagyobb sugarú) pályáról egy, alacsonyabb, E_m energiájú pályára ugrik át. Ez az átugrás pillanatszerű és egy foton kibocsátásával jár. A kisugárzott foton frekvenciáját a $h\nu_{nm} = E_n - E_m$ egyenlet határozza meg. Ez a **Bohr-féle frekvenciafeltétel** megszületése a fizika történetének nagy fordulópontja

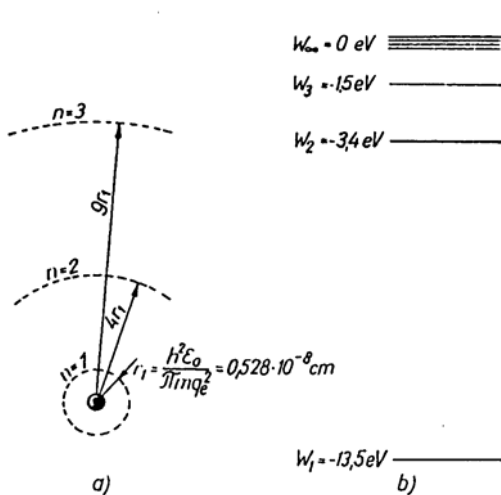
Bohr abban, hogy az atom energiája csak meghatározott értékeket vehet fel, annak megnyilvánulását látta, hogy az elektronok csak meghatározott pályákon keringhetnek. **Feltételezte**, hogy az elektron teljes impulzusmomentumának **kvantálnak**, a \hbar egész számú többszörösének kell lennie:

$$|L| = mvr = n\hbar, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

Ez a **Bohr-féle kvantum- (vagy pálya-) feltétel**. Az az atommodell, amelyikben az elektronok a mag körül csak a Bohr-quantumfeltétel által megadott pályákon keringhetnek, és az atom fénykibocsátása az elektron pályáról-pályára ugrásának következménye, az ún. **Bohr-féle atommodell**.

7. Adja meg a hidrogén atom lehetséges energiaszintjeit (eV-ban kifejezve)!

$$f_n = \frac{v_n}{2\pi r_n} = \frac{me^4}{4\epsilon_0^2 n^3 h^3}$$



a) A hidrogénatom elektronjának lehetséges pályái;
b) Az egyes pályákhoz tartozó energianívók

A hidrogén atom lehetséges energiaszintjei

8. Adja meg a hidrogén atom által kibocsátható elektromágneses hullámok lehetséges frekvenciáit [általános Balmer (Rydberg-Ritz) formula]!

$$\text{Balmer-formula: } \nu = \frac{E_2 - E_1}{h} = R c Z^2 \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right) = 3,3 \cdot 10^{15} Z^2 \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right)$$

9. Ismertesse az elektronokhoz rendelhető ún. de-Broglie hullámok jellemző tulajdonságait!

Az elektron mozgását jellemezze olyan hullám, amelyiknek a csoportsebessége egyenlő a részecske sebességével, és 0 nyugalmi tömegű elektron esetén is érvényes marad. Egy hullámcsomagot frekvenciájával, hullámhosszával (térbeli periódus) és csoportsebességével adunk meg. A hullámcsomag frekvenciáját a részecske összenergiája határozza meg: $W = h\nu = \hbar\omega = mc^2 = \sqrt{W_0^2 + p^2 + c^2}$ A hullám

csoportsebessége: $v_{csoport} = \frac{\partial\omega}{\partial k}$ A részecske sebessége egyenlő az anyaghullám

csoportsebességével: $v_{részecske} = v_{csoport}$. Összenergiája eleget tesz a Planck-feltételnek:

$W = h\nu = \hbar\omega$. Az anyaghullám fázissebessége:

$$v_{fázis} = \frac{\omega}{k} = \frac{\hbar\omega}{\hbar k} = \frac{W}{p} = \frac{mc^2}{mv_{részecske}} = \frac{c^2}{v_{részecske}}$$

10. Adja meg a hidrogén atomban kialakuló stacionárius elektronállapotok de-Broglie szerinti magyarázatát!

A de-Broglie modell egyszerű magyarázatot adott a pályakiválasztási szabályra:

$mv_n r_n = 2\pi r_n = n\lambda$, innen $2\pi r_n = n\lambda$. Tehát az atomban azon pályák lehetségesek, mint stacionárius pályák, amelyek kerülete az elektronhoz rendelt hullámhossz egészszámú többszöröse.

11. Írja fel az időtől független Schrödinger egyenletet (egy elektron esetén!)

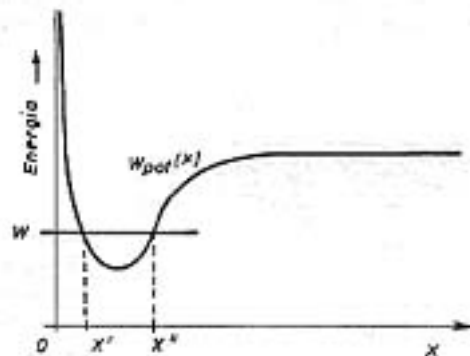
A ψ -t akarjuk belőle kiszámolni (hullámfüggvény).

$$E = \frac{p^2}{2m} + E_p, \quad p = \hbar k, \quad \frac{\partial\Psi}{\partial x} + k^2\Psi \Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + E_p(x)\Psi = E(\Psi)$$

12. Adja meg a hullámfüggvény fizikai értelmezését!

A szabadon mozgó, tömegpontnak képzelt elektron energiája és impulzusa közötti kapcsolatot a newtoni mechanika határozza meg (energia megmaradás tétele). Ez az összefüggés egyértelműen megadja az elektronhoz rendelt síkhullám frekvenciája és hullámhossza közötti kapcsolatot is (ennek neve diszperziós összefüggés). Egyszerűen hely és idő szerinti deriválásokkal megadható olyan differenciálegyenlet, mely megoldása olyan síkhullám, mely kielégíti a diszperziós összefüggést. Schrödinger feltételezte, hogy ez az egyenlet tetszőleges mozgás esetén is érvényes. Ekkor a potenciális energia a hely és az idő tetszőleges függvénye lehet. Az egyenlet megoldása pedig komplex alakban felírható, helytől és időtől függő függvény lesz, melynek neve *állapot-* vagy *hullámfüggvény*. Önmagában a $\Psi(x,y,z,t)$ függvénynek nincs fizikai jelentése (fizikai jelentése csak valós mennyiségeknek lehet), ezért a $\Psi(\mathbf{r}, t)$ komplex állapotfüggvényhez hozzá kell rendelnünk egy $\Psi^*\Psi dV$ valós függvényt, amely annak a valószínűségét adja meg, hogy a pontszerű elektron az \mathbf{r} helyvektor dV környezetében van.

13. Adott egy olyan egydimenziós $V(x)$ potenciális energia függvény, amely esekén kötött állapotok alakulnak ki. Rajzolja fel kvalitatíve helyesen az n -ik (kötött) energiaszinthez tartozó állapotfüggvényt! Egyértelműen jelölje be az inflexió pontokat!



A $W_{pot}(x)$ potenciálfüggvény menete és a részecske felvett W összenergiája

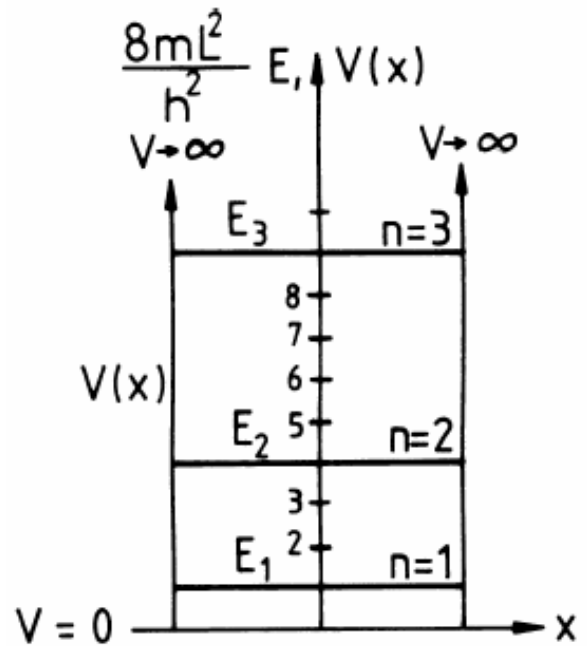
14. Adja meg diszkrét energiaszintek kvantumszámoktól függését 1 és 3 dimenziós potenciáldoboz esetén, valamint a kvantumszámok lehetséges értékeit is!

A potenciáldobozba zárt elektron energiái csak meghatározott értékeket vesznek fel, ezeket az energiaértékeket nevezzük energiaszinteknek. 1 dimenziós doboz esetén az energia: $W = \frac{h^2 \pi^2 n^2}{2ma^2}$. 3 dimenziós doboz esetén a részecske energiáinak lehetséges értékei:

$$W_{n_1 n_2 n_3} = W_1 + W_2 + W_3 = \frac{h^2}{8m} \left(\frac{n_1^2}{a^2} + \frac{n_2^2}{b^2} + \frac{n_3^2}{c^2} \right)$$

esetén a részecske energiáinak lehetséges értékei:

$$W_{n_1 n_2 n_3} = W_1 + W_2 + W_3 = \frac{h^2}{8m} \left(\frac{n_1^2}{a^2} + \frac{n_2^2}{b^2} + \frac{n_3^2}{c^2} \right)$$



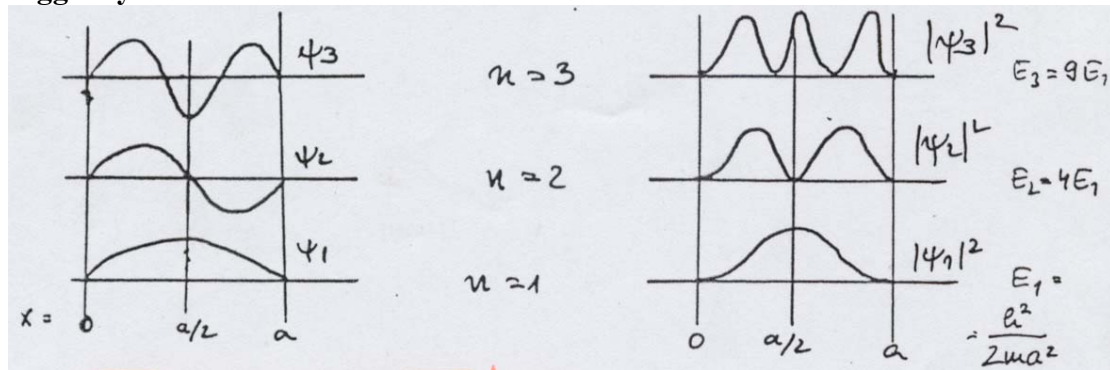
15. Adja meg a sajátfüggvények matematikai alakját 1 és 3 dimenziós potenciáldoboz esetén!

1 dimenzióban az ortonormált sajátfüggvény: $\Psi_n = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi x}{a}$ 3 dimenzióban:

$\Psi_{n_1, n_2, n_3}(x, y, z) = A \sin \frac{n_1 \pi x}{a} \sin \frac{n_2 \pi y}{b} \sin \frac{n_3 \pi z}{c}$ és a normalizálási feltételből

$$A = \sqrt{\frac{8}{abc}}$$

16. Adott egy egydimenziós potenciáldoboz. Rajzolja fel az n-ik energiaszinten lévő részecske állapotfüggvényét és tartózkodási valószínűség-sűrűségét megadó függvényt!



Az energia: $E = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ma^2}$, $E_n \sim n^2$, $n=1,2,3,\dots$

17. Mit nevezünk elfajuló (degenerált) állapotnak?

Ha különböző sajátfüggvényekhez azonos sajátértékek tartoznak, ezeket elfajult - degenerált sajátértékeknek nevezzük. A különböző sajátfüggvény a részecske más és más stacionárius állapotát jelenti, tehát egy energiaszinten a részecske több stacionárius állapotban lehet.

18. Adja meg (kvantumszámok segítségével) egy háromdimenziós potenciáldobozban lévő részecske néhány degenerált állapotát!

Kocka alakú doboz esetén az (n_1, n_2, n_3) számhármass meghatározza a sajátértékeket és a hozzá tartozó sajátfüggvények számát. A doboz W_1 nullponti energiájához az $(1, 1, 1)$ számhármass és egyetlen sajátfüggvény, a következő $W_2 = 2W_1$ energiaszinthez már három sajátfüggvény, a $(2, 1, 1)$, $(1, 2, 1)$ és $(1, 1, 2)$ tartozik, a $W_3 = 3W_1$ -hez, a $W_4 = (14/3)W_1$ -hez ugyancsak három, a $W_5 = 4W_1$ -hez már csak a $(2, 2, 2)$ állapot tartozik, de a $W_6 = (14/3)W_1$ szinten a részecske hat különböző stacionárius állapotban lehet. Ezek rendre az $(1, 2, 3)$, $(1, 3, 2)$, $(2, 1, 3)$, $(2, 3, 1)$, $(3, 1, 2)$ és $(3, 2, 1)$ állapotok.

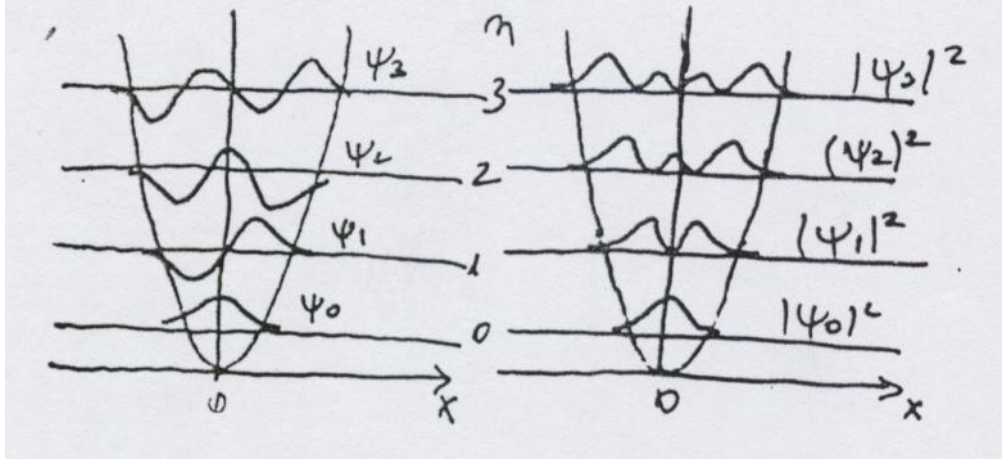
19. Adja meg egy lineáris harmonikus oszcillátor lehetséges energiaszintjeit! Adja meg az alapállapothoz tartozó állapotfüggvény matematikai alakját is!

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega, \quad n=1,2,3,\dots \quad \omega = \sqrt{\frac{k}{m}} \quad W_n = \hbar \omega_0 \left(n + \frac{1}{2}\right)$$

$n=0$ esetre a matematikai alak: $\Psi_0 = A_0 e^{-(\alpha x)^2/2}$, ahol

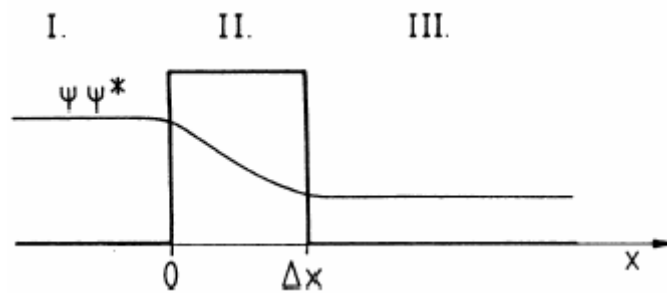
$$\alpha = \sqrt{\frac{1}{\hbar} * \sqrt{Cm}}; \quad A_0 = \sqrt{\frac{a}{\sqrt{\pi}}}; \quad \omega_0 = \sqrt{\frac{C}{m}}$$

20. Rajzolja fel egy harmonikus lineáris oszcillátor n-ik energiaszínjéhez tartozó állapotfüggvényét és a tartózkodási valószínűség-sűrűséget megadó függvényt!



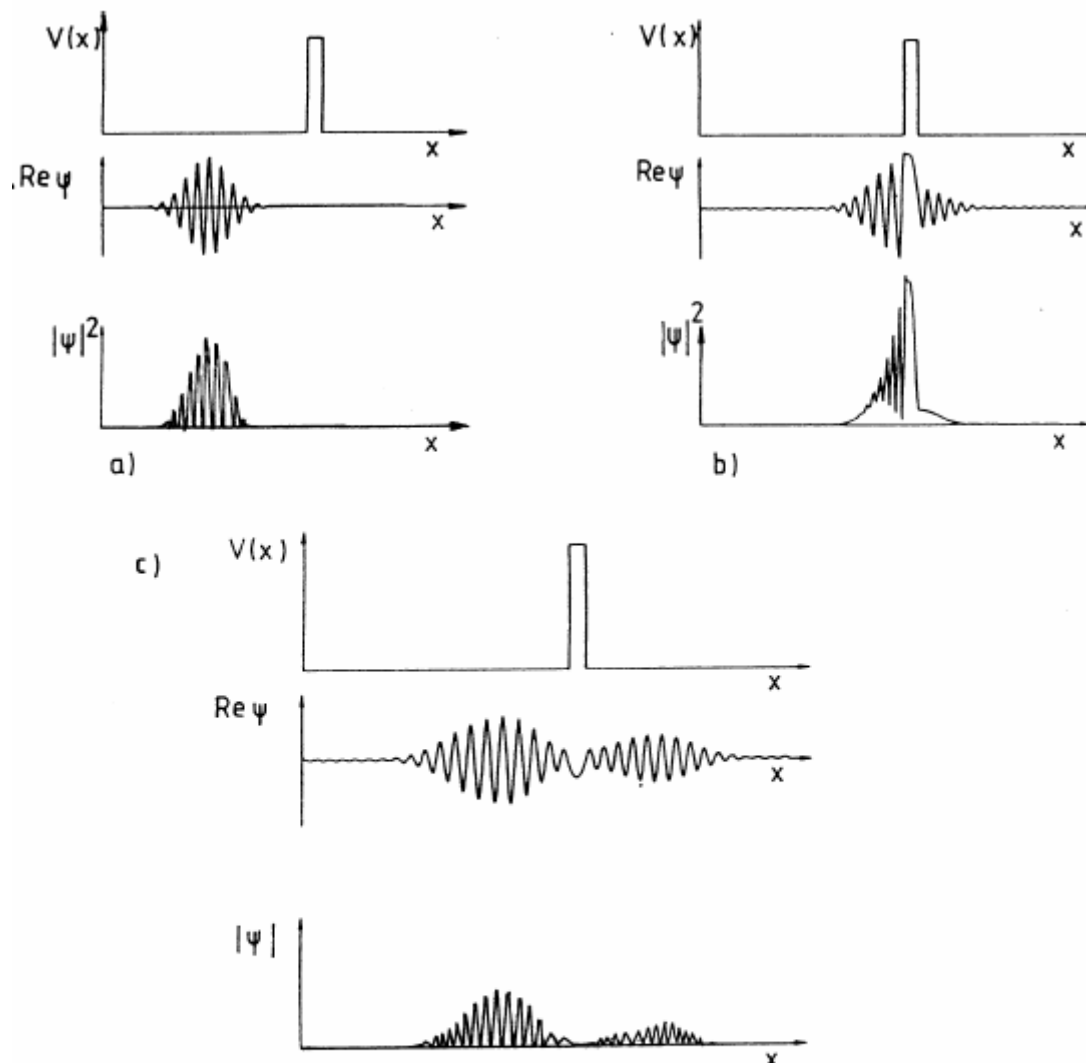
$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega, \quad n=1,2,3,\dots \quad \omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$$

21. Mi az „alagút effektus”?



Klasszikus esetben az elektron nem juthat át a potenciálfalon, azonban a kvantummechanikában megvan a valószínűsége annak, hogy átjut azon, a részecske mintegy átfúrja magát az alagúton. Az átjutás valószínűsége annál nagyobb, minél keskenyebb a potenciálfal, illetve minél kisebb a részecske energiája és a potenciálfal energiája közti különbség.

22. Egy (egyenes mentén szabadon mozgó) „E” energiájú részecske véges (V_0) magasságú négyzetes potenciálgátba ütközik. Rajzolja fel a továbbhaladás $T(E)$ valószínűségét (a transzmissziós tényezőt) az E energia függvényében!



8.30. ábra: Egy elektron áthaladása potenciálgáton.
Az ábrákon a potenciálmenetet, a állapotfüggvény valós részét és az abszolútértékének négyzetét ($\psi\psi^*$ -t) tüntettük fel. a) az elektron közeledik a potenciálgáthoz; b) az elektron behatolt a potenciálgátba; c) a állapotfüggvény egy része áthaladt, másik része visszaverődött

23. Ismertesse a kvantummechanika posztulátumait!

Posztulátum 1.: fizikai rendszer állapotának leírása: $\Psi(q_1, q_2, \dots, q_f, t)$ véges, folytonos és egyszeresen differenciálható egyértékű függvény (q_1, q_2, \dots, q_f) - konfigurációs térkoordináták, $t \rightarrow$ idő.

Posztulátum 2.: A konfigurációs tér dV térfogatelemében $\Psi\Psi^* dV$ valószínűséggel figyelhetjük meg a rendszert a teljes térre: $\int_V \Psi\Psi^* dV = 1$ (tehát Ψ négyzetesen integrálható).

Posztulátum 3.: minden L dinamikai mennyiséghez tartozik egy L lineáris operátor, és ha a rendszeren méréseket végzünk, akkor L mérhető értékei kizárólag az L operátor λ sajátértékei: $L\Psi = \lambda\Psi$.

Posztulátum 4.: ha egy fizikai rendszer állapota Ψ , és az L mennyiséget figyeljük meg, melynek operátora L , akkor az L mennyiség várható értéke: $\langle L \rangle = \int_V \Psi^* L \Psi dV$, mivel ez mindig valós $\rightarrow L = L^\dagger$.

Posztulátum 5.: a magára hagyott, zárt rendszer időbeli fejlődését a $j\hbar \left(\frac{\partial \Psi}{\partial t} \right) = H\Psi$

időfüggő Schrödinger-egyenlet határozza meg. (meghatározható Ψ_t állapotfüggvény jövőbeli alakulása)

24. Milyen (matematikai) tulajdonságokkal kell rendelkeznie egy $\psi(\mathbf{r})$ állapotfüggvénynek ahhoz, hogy egy lehetséges fizikai állapotot írasson le?

$\Psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$, határfeltételek: $\psi(x)=0$, $x=0$ és $x=a$ -nál

$\psi(0)=A+B=0 \Rightarrow A=-B \Rightarrow \Psi(x) = A(e^{ikx} - e^{-ikx}) = 2iA \sin kx = C \sin kx$, $C=2Ai$

$\Rightarrow \Psi(a) = C \sin ka = 0 \Rightarrow \sin ka = 0 \Rightarrow k = n \frac{\pi}{a}$, $n=0,1,2,3,\dots$

25. Hogyan értelmezzük egy kvantummechanikai mérés átlagát?

Heisenberg féle határozatlansági reláció: $\Delta L \Delta M \geq \frac{1}{2} \langle \Psi | C | \Psi \rangle$. Arról ad

felvilágosítást, hogy fel nem cserélhető operátorok által leírt fizikai mennyiségek egyidejű mérése esetén mi a mérés pontatlanságának a korlátja. Ha ezt az "x"

helykoordináta és az impulzus x komponensére alkalmazzuk, melyekre $C = \frac{\hbar}{j}$,

akkor a határozatlansági reláció legismertebb alakját kapjuk: $\Delta x \Delta p_x \geq \frac{1}{2} \left| \frac{\hbar}{j} \right| = \frac{\hbar}{4\pi}$

26. Mit nevezünk operátornak?

Operátoroknak nevezzük jól definiált matematikai műveletek együttesét. Az operátor tehát egy függvényt egy másik függvénybe transzformál. Akkor használjuk, ha a függvény É.T.-a és É.K.-e nem véges dimenziós tér.

27. Hogyan definiáljuk két operátor (pl. A és B) „kommutátorát”?

Két operátor szorzata általában nem felcserélhető: $LM \neq ML$. A felcserélhetőség a kvantumfizikában fontos szerepet játszik, ezért a rá jellemző $[L,M] = LM - ML$ kifejezésnek külön nevet adunk, az L és M operátorok kommutátorának nevezzük.

28. Adja meg a lineáris operátorok definícióját!

lineáris operátor: $A(c_1x_1 + c_2x_2) = c_1Ax_1 + c_2Ax_2$

29. Adja meg az önadjungált operátorok definícióját!

L lineáris operátor önadjungált, ha $L = L^\dagger$, azaz $\langle f | L | g \rangle = \langle g | L^\dagger | f \rangle^* = \langle g | L | f \rangle^*$.
Önadjungált L -re: $\langle f | L | f \rangle = \langle f | L | f \rangle^*$ értéke valós szám. Mivel az önadjungált operátorok sajátértékei valósak, egy fizikai mérés eredménye egy operátor sajátértéke.

30. Mit nevezünk egy operátor sajátértékének és sajátfüggvényének?

Azokat a függvényeket, amelyeket egy operátor az állandósorosukba visz át, az adott operátor sajátfüggvényeinek, az állandót pedig az adott operátor sajátértékének nevezzük. Több különböző független sajátfüggvényhez is tartozhat ugyanaz a sajátérték. Ha L lineáris operátor, és létezik egy olyan $|n\rangle \neq 0$ vektor, amelyre $L|n\rangle = L_n|n\rangle$, ahol L_n egy komplex szám, akkor azt mondjuk, hogy $|n\rangle$ az L operátor sajátvektora, L_n pedig a sajátértéke. A sajátfüggvények ortonormálható teljes rendszert alkotnak, azaz $\langle n|m\rangle = \delta_{m,n}$, és tetszőleges $|\psi\rangle$ -re $|\psi\rangle = \sum |n\rangle\langle n|\Psi\rangle$.

31. Mutassa meg, hogy egy önadjungált operátor sajátértéke valós!

Önadjungált L -re: $\langle f|L|f\rangle = \langle f|L|f\rangle^*$ értéke valós szám. Mivel az önadjungált operátorok sajátértékei valósak, egy fizikai mérés eredménye egy operátor sajátértéke.

32. Milyen operátorokat rendelhetünk az alábbi fizikai mennyiségekhez?

Descartes-helykoordináták (x,y,z) : x, y, z .

Impulzus-komponensek (p_x, p_y, p_z) : $\underline{p}_x = (\hbar/j)(\partial/\partial x)$ stb.

Perdület z komponense (L_z): $\underline{L}_z = (\hbar/j)(x(\partial/\partial y) - y(\partial/\partial x))$.

Perdület nagysága (L^2): $L^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2$.

Összenergia (H): $\underline{H} = -(\hbar^2/2m)\Delta + W_{pot}(x,y,z)$

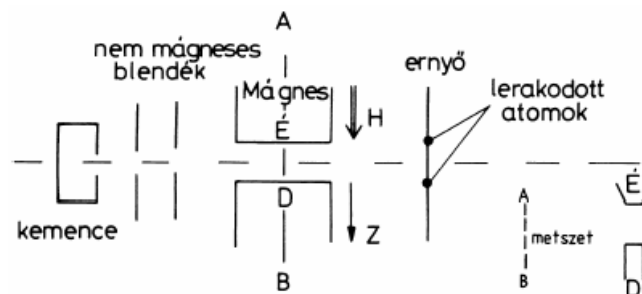
33. Adja meg az „x” koordináta és a „p_x” impulzusmomentum komponens között fennálló ún. határozatlansági relációt! Értelmezze ennek fizikai tartalmát!

$$\Delta x \Delta p_x \geq \frac{1}{2} \left| \frac{\hbar}{j} \right| = \frac{\hbar}{4\pi}$$

34. Miért van a zárt pályán mozgó elektronnak (a pályamozgásból adódóan) perdülete és mágneses momentuma?

Mivel az elektron „kvázi” körpályán mozog és van tömege, ezért van impulzusmomentuma. Az elektron köráramnak vagy ellipszis mentén folyó áramnak felel meg, és így mágneses momentummal is rendelkezik, amely alapján az impulzusmomentummal így függ össze: $\mu_l = -\frac{e}{2mc}l$

35. Ismertesse azt a kísérletet, amely segítségével ki lehetett mutatni, hogy az elektronnak önmagának is van (saját) mágneses momentuma! (Stern-Gerlach kísérlet)



Stern és Gerlach kísérlet: Inhomogén mágneses térben alapállapotú H atomok s elektronokkal ($l=0, M_l=0$) eltérülnek \Rightarrow eleve van mágneses momentumuk! \underline{M}_s

A mérések kétfajta dipol momentumot mutattak ki. Az elektronok saját mágneses momentuma (\underline{M}_s) is kvantált.

36. Adja meg az elektron-spín nagyságát és z irányú komponensének lehetséges értékeit!

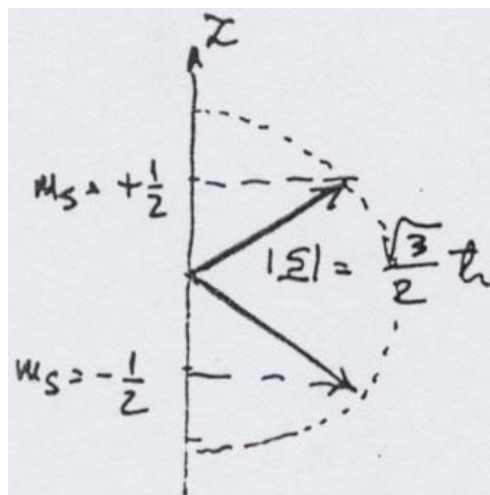
Spinnél kétféle irány $\Rightarrow l = \frac{1}{2}$

Kvantumszámok: $s, m_s \Rightarrow s = \frac{1}{2}, m_s = \pm \frac{1}{2}$

Spin – fizikai mennyiség – operátor \hat{S}

$$S^2 = s(s+1)\hbar^2 = \frac{3}{4}\hbar^2 \quad s = \frac{1}{2}$$

$$S_z = m_s \hbar \quad m_s = \pm \frac{1}{2}$$



37. Adja meg az elektron saját mágneses momentumának a nagyságát és z irányú komponensének lehetséges értékeit (μ_B ún. Bohr magneton egységeiben kifejezve)!

A körpályán mozgó elektron egy kis áramhurkot jelent. Így a mágneses momentuma számítható \Rightarrow a mágneses momentum vektor a pályaperdület vektorral arányos. A mágneses momentum vektor Descartes komponenseihez rendelt operátorok a perdület operátor ismeretében képezhetők. Tekintsük a z komponenshez rendelt kalap(M_z) operátort. Ez az kalap(L_z) operátortól csak egy konstans szorzóban különbözik. Ezért a két operátornak közösek a sajátfüggvényei és az operátorok közötti kapcsolatot a sajátértékek öröklük, tehát az M_z mágneses momentum komponens kvantált. Azaz $M_z = m_l \mu_B$ ahol $m_l = 0 \pm 1 \pm 2 \pm 3 \dots$ és mágneses kvantumszámnak hívjuk.

38. Adja meg a kvantumszámok fizikai értelmezését a hidrogén atom elektronállapotai esetén!

Főkquantumszám (n): az elektronpálya sugarát határozza meg. (H: $n=1$ ("K-héj")).
 Mellékkvantumszám (l): az elektron pálya-impulzusmomentumának mértéke. (H: $l \leq n-1 \rightarrow l=0$).
 Mágneses kvantumszám (m): egy megadott irányhoz viszonyítva az elektron keringéséből származó mágneses momentum. (H: $m=0$).
 Spinkvantumszám (s): egy adott irányhoz képest az elektron saját-impulzusmomentumából származó mágneses momentum ($\pm 1/2$). (H: $s=1/2$).
 A hidrogén elektronkonfigurációja tehát: (1, 0, 0, 1/2)

39. Ismertesse az ún. „Pauli elvet”!

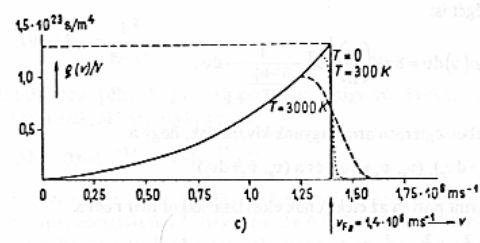
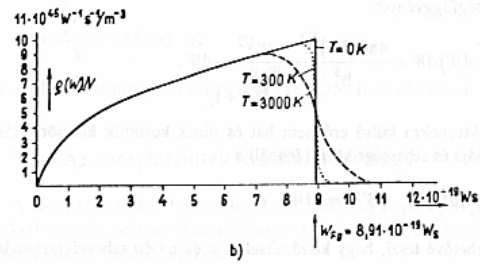
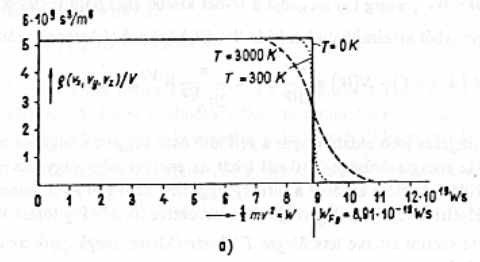
Egy atomban nem lehet két elektron aminek minden kvantum száma megegyezik, legalább a spinjük különböző.

40. Adja meg a termodinamikaivalószínűséget Fermi-Dirac és Bose-Einstein statisztika esetén!

$$f_{BE} = \frac{N_p}{g_p} = \frac{1}{e^{\frac{E_p}{k_B T}} - 1} \quad f_{FD} = \frac{N_p}{g_p} = \frac{1}{e^{\frac{E_p}{k_B T}} + 1}$$

41. Rajzolja fel a Fermi-Dirac eloszlásfüggvényeket! Értelmezze fizikai tartalmát!

Az elektrongáz eloszlásfüggvényei különböző hőmérsékleteknél volframfém esetében, ha atomonként egy szabad elektront tételezünk fel. A fázistérben (hatdimenziós tér, melynek koordinátái a három hely és a három impulzuskoordináta) minden h^3 nagyságú elemi cellába két, egy $+1/2$ és egy $-1/2$ spinű elektron helyezhető el. Mivel $dx dp_x$, $dy dp_y$, $dz dp_z$ nagyságrendje nem lehet h -nál kisebb, ezért a fázistér cellája sem lehet h^3 -nél kisebb.



Szilárdtestfizika

1. Definiálja az $N(E)$ állapotsűrűség fogalmát!

$N(E)$: az E és $E+dE$ tartományba eső diszkrét állapotok tényleges $N(E)dE$ számát becsljük meg.

2. Rajzolja fel a szabadelektron gáz $N(E)$ állapotsűrűségét megadó függvényt! A konstansától eltekintve adja meg az $N(E)$ függvény matematikai alakját!

a sebességkomponensek szerinti eloszlás sűrűségfüggvénye:

$$\int \rho(v_x, v_y, v_z) dv_x dv_y dv_z = 2V \left(\frac{m}{h} \right)^3 \frac{1}{e^{\frac{W-W_F}{kT}} + 1}$$

3. Definiálja a Fermi szintet alapállapotú ($T=0K$ hőmérsékletű) szabadelektron gáz esetén.

Szabadelektron gáz: A vezetési elektronok a fémén belül szabadon mozoghatnak. Az elektronok az ionrács közti ill. az elektronok egymás közti kölcsönhatása elhanyagolható, innen fémén belül a potenciális energia állandó. A fém az elektronok számára egy potenciálkád. Az elektron gáz spektruma kvantált. Az elektronok engedelmessékednek a Pauli elvnek.

Fermi szint abszolút 0 hőmérsékleten:

a: 1 valószínűséggel betöltött legnagyobb energia,

b: csak az elektronok térfogategységre eső számától függ. $W_{F0} = \frac{h^2}{8m} \left(\frac{3n}{\pi} \right)^{\frac{2}{3}}$ Állapotsűrűség

függvény: $g(w)$: a W és $W+dW$ tartományba eső diszkrét állapotok tényleges $g(w)dW$ számát becsljük meg.

4. Definiálja a Fermi szintet $T>0K$ hőmérsékletű) szabadelektron gáz esetén.

$$W_{F0} = \frac{h^2}{8m} \left(\frac{3n}{\pi} \right)^{\frac{2}{3}}, \quad [n] = \frac{e^-}{m^3}, \quad W_F = W_{F0} \left[1 - \frac{\pi^2}{12} \left(\frac{kT}{W_{F0}} \right)^2 + \dots \right]$$

5. Ismertesse a (pont)rács, bázis, reciprok rács, reciprok bázis fogalmát!

6. Ismertesse az elektron periódikus potenciálú térbeni állapotát megadó $\psi(\mathbf{r})$ (Bloch) hullámfüggvényét! Értelmezze fizikai tartalmát!

Az elektron periódikus potenciálú térbeni ψ hullámfüggvényét a Schrödinger egyenlet megoldásaként kapjuk, ami ebben az esetben Bloch hullám alakjában írható fel.

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi(\mathbf{r}) + W_r(\mathbf{r} + \mathbf{R}_n) = W \Psi(\mathbf{r}), \quad \text{ha } u(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \Psi(\mathbf{r}) \Rightarrow \Psi(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} u(\mathbf{r}), \quad u(\mathbf{r} + \mathbf{R}_n) = u(\mathbf{r})$$

(te hát a rácsperiódusnak megfelelően periodikus). Szemléletesen ez egy olyan síkhullám, melynek n rács periodusának megfelelően módosítva lett. A Schrödinger-egyenlet megoldása periódikus potenciálú térben Bloch hullám alakjában írható fel.

7. Adja meg az effektív tömeg definícióját!

$$m \frac{\partial \langle \bar{v} \rangle}{\partial t} = F_{\text{külső}} + F_{\text{belső}}, \text{ ionok teréből származó erő, nehéz vele számolni, innen: úgy írjuk le a}$$

jelenséget, mintha csak $F_{\text{külső}}$ hatna: $F_{\text{külső}} = m_{\text{eff}} \frac{\partial \langle \bar{v} \rangle}{\partial t}$

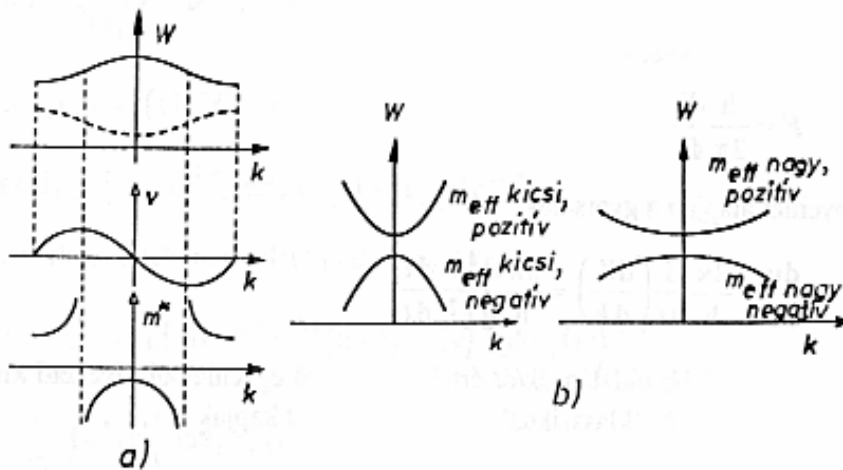
Effektív tömeg: egy olyan alkalmasan megválasztott mennyiség amivel az $F_{\text{külső}}$ és $F_{\text{belső}}$ erő együttes hatására létrejött $\frac{\partial \langle \bar{v} \rangle}{\partial t}$ tényleges gyorsulást meg kell szorozni, hogy éppen $F_{\text{külső}}$ -t kapjuk. Szabadelektronoknál: $F_{\text{belső}} = 0$ innen $m_{\text{eff}} = m$

1 dimenzióban: $m_{\text{eff}}^{-1} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 W}{\partial k^2}$.

3 dimenzióban egy tenzor jellegű mennyiség:

$$m_{\text{eff}}^{-1} = \left(\frac{1}{\hbar} \right)^2 \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 W}{\partial k_x^2} & \frac{\partial^2 W}{\partial k_x \partial k_y} & \frac{\partial^2 W}{\partial k_x \partial k_z} \\ \frac{\partial^2 W}{\partial k_y \partial k_x} & \frac{\partial^2 W}{\partial k_y^2} & \frac{\partial^2 W}{\partial k_y \partial k_z} \\ \frac{\partial^2 W}{\partial k_z \partial k_x} & \frac{\partial^2 W}{\partial k_z \partial k_y} & \frac{\partial^2 W}{\partial k_z^2} \end{pmatrix}$$

8. Rajzolja fel az 1 dimenziós kristály esetén az elektron energiájának, a csoportsebességnek és az effektív tömegnek a k-tól való függését megadó ábrát! (k a Bloch állapotokra jellemző hullámszám)



a) A sebesség ($-dW/dk$) és az effektív tömeg ($-\left[d^2W/dk^2 \right]^{-1}$) a kettős sáv esetében; b) A $W=W(k)$ függvény görbülete és az effektív tömeg közötti kapcsolat szemléltetése az energia-szélsőértékek környezetében

9. Parabolikus sáv esetén hogyan használható az effektív tömeg fogalma a vezetési sávban lévő elektronok dinamikájának egyszerű leírására (1 dimenziós modell esetén)?

A vezetési sáv elektronjai: -töltés, $+m_{\text{eff}}$. Valencia sávban: -töltés, +töltés, $-m_{\text{eff}}$, $+m_{\text{eff}}$

Effektív tömeg egyenlet:

a: m helyett m_{eff} ,

b: az eredeti periodikus tag helyett W_{c0} anyagállandó (a vezetési sáv energiaminimuma) a

Schrödinger egyenletbe: $W_C(k) = W_{C0}(r) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_{\text{eff}}}$

10. A szilárd testek jellegzetes (energia) sáv szerkezete esetén hogyan definiáljuk a vezető, a szigetelő és a félvezető fogalmát?

11. Szerkezeti félvezetőkben hogyan definiáljuk az ún. „lyuk” fogalmát?

A félvezetőkben lefolyó jelenségekben nagy számú elektron vesz részt, és az elektronok egymás közötti kölcsönhatása elhanyagolható, az áramlási jelenségek úgy írhatók le, hogy a majdnem szabad elektronok mellett pozitív töltéssel ellátott fiktív részecskék, a lyukak is részt vesznek mint töltéshordozók az áram létrejöttében. Lyukvezetés: A valenciasávban azért mozdulhatnak ki állapotukból elektronok, mert a vezetési sávba átugrottak, üres állapotokat (lyukakat) hagytak maguk után. hőmérséklet növekedésével egyre több elektron jut a vezetési sávba és minden elektron lyukat hagy maga mögött a valencia sávban.

12. Adja meg a mozgékonyág definícióját!

Az egységnyi térerő hatására fellépő jellemző sebesség a mozgékonyág:

$$\mu_n = \frac{v_e}{E} \text{ [cm}^2\text{/Vs]}$$

13. Adjon meg egy olyan effektív tömeg tenzort, amelyben egy, kettő illetve három skalár effektív tömeg szerepel!

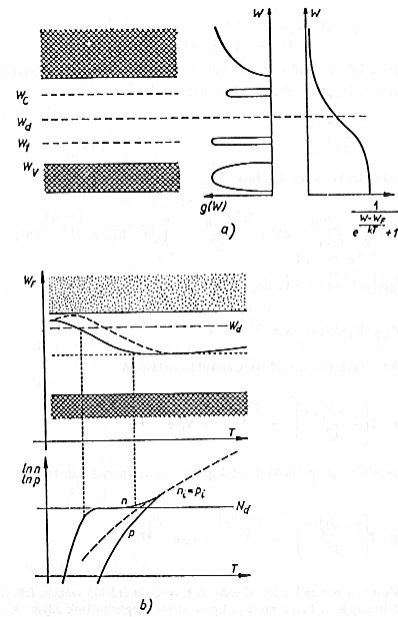
3 dimenzióban egy tenzor jellegű mennyiség:

$$m_{\text{eff}}^{-1} = \left(\frac{1}{\hbar}\right)^2 \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 W}{\partial k_x^2} & \frac{\partial^2 W}{\partial k_x \partial k_y} & \frac{\partial^2 W}{\partial k_x \partial k_z} \\ \frac{\partial^2 W}{\partial k_y \partial k_x} & \frac{\partial^2 W}{\partial k_y^2} & \frac{\partial^2 W}{\partial k_y \partial k_z} \\ \frac{\partial^2 W}{\partial k_z \partial k_x} & \frac{\partial^2 W}{\partial k_z \partial k_y} & \frac{\partial^2 W}{\partial k_z^2} \end{pmatrix}$$

14. Rajzolja fel félvezetők esetén E energiájú elektronállapotok sűrűségét megadó jellegzetes N(E) függvényt!

a: Nívósűrűség eloszlása vegyes adalékolású anyagban;

b: A Fermi-nívó helyzete egy közepesen adalékolt n-típusú félvezetőnél a hőmérséklet függvényében. Az $n_p = n_i p_i$ összefüggés csak egy szűk intervallumra korlátozódik, és pedig arra, ahol az elektronok száma a donoratomok számával azonosnak vehető, tehát ahol $n = N_d$. Magasabb hőmérsékleteken a szerkezeti félvezető tulajdonságok lépnek előtérbe. A felső ábra szaggatott vonala egy erősebb adalékolásra vonatkozik



15. Szemléltesse az N(E) állapotsűrűség függvény segítségével a „sávátfedés” jelenségét!

16. Ismertesse az elektronok és a lyukak eloszlását (termikus egyensúlyban lévő) szerkezeti félvezetők esetén!

A félvezetők nyugalmi állapota az egyensúlyi állapot. Minden folyamat kezdeti és határfeltételét az egyensúlyi állapotok jelentik. A szennyezetlen félvezető anyagokat sajátvezetésű vagy intrinsic félvezetőknek nevezik. Jellemzőjük, hogy abszolút nulla fokon a vezetési sávban nincs elektron, a valenciasáv telített, tehát szigetelők. A hőmérséklet növelésével egyre több elektron jut a vezetési sávba, és minden egyes elektron egy lyukat hagy maga után a valenciasávban. A vezetési sávban lévő elektronok száma térfogategységenként T hőmérsékleten:

$$n = \int_{W_{C0}}^{\infty} g(W)f(W)dW = \frac{4\pi [2m_{eff}^{(n)}]^{3/2}}{h^3} \int_{W_{C0}}^{\infty} \sqrt{W - W_{C0}} \frac{1}{e^{\frac{W-W_F}{kT}} + 1} dW .$$

Bevezetve az $x = \frac{W - W_{C0}}{kT}$, $\eta = \frac{W_{C0} - W_F}{kT}$ jelöléseket, amiből $dW=kTdx$, és

$$n = \frac{4\pi V [2m_{eff}^{(n)} kT]^{3/2}}{h^3} \int_0^{\infty} \frac{x\sqrt{x}}{e^{x-\eta} + 1} dx .$$

Az előző képletben szereplő improprius integrált $F_{1/2}(\eta)$ -val jelölik, az $F_{\alpha} = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} \frac{x^{\alpha}}{e^{x-\eta} + 1} dx$ (ezt nevezik Fermi-integrálnak), $\alpha=1/2$ esetén, az integrál

együtthatóját pedig N_C -vel: $N_C = 2 \frac{[2\pi m_{eff}^{(n)} kT]^{3/2}}{h^3} \int_0^{\infty} \frac{x\sqrt{x}}{e^{x-\eta} + 1} dx$ jelölik. Ezekkel a jelölésekkel:

$n=N_C F_{1/2}(\eta)$, ha a félvezető W_F fermi-szintje a tiltott sávba esik és $W_F - W_{C0} < -3kT$, akkor:

$n = N_C e^{\frac{W_F - W_{C0}}{kT}}$. Hogy meg tudjuk határozni a valenciasávbeli lyukak számát, a lyukkal betölthető szintek eloszlásfüggvényét már ismerjük, de meg kell határozni a betöltési

valószínűségüket is. Mivel egy sáv elektronnal való betöltésének valószínűsége $f(W)$, ezért nyilvánvaló, hogy a lyukkal való $1-f(W)$. Így $1 - \frac{1}{e^{\frac{W-W_F}{kT}} + 1} = \frac{1}{e^{\frac{W_F-W}{kT}} + 1}$. A valenciasávbeli

lyukak száma tehát $p = \int_{-\infty}^{W_V} \frac{4\pi [2m_{eff}^{(p)}]^{3/2}}{h^3} \sqrt{W_V - W} \frac{1}{e^{\frac{W_F-W}{kT}} + 1} dW$. Ezt az összefüggést át lehet

alakítani az n-re kapotthoz hasonló formára: $p = N_V F_{1/2}(\eta_p)$, ahol $N_V = 2 \frac{[2\pi m_{eff}^{(p)} kT]^{3/2}}{h^3}$, és

$\eta_p = \frac{W_V - W_F}{kT}$. Sajátvezetésű félvezetőben $n_i = p_i$, vagyis $p_i n_i = n_i^2$

17. Ismertesse az elektronok és lyukak eloszlását (temiks egyensúlyban lévő) „n” és „p” típusú adalékolt félvezetők esetén!

A félvezetők nyugalmi állapota az egyensúlyi állapot. Minden folyamat kezdeti és határfeltételét az egyensúlyi állapotok jelentik. *n-típusú félvezető*: Feltételezzük, hogy a donor atomok mind ionizálva vannak a T hőmérsékleten, a lyukak száma viszont nagyságrendekkel kisebb, mint az elektronok száma a vezetési sávban, akkor: $n_n \cong N_d$, vagyis

$2 \left[\frac{2\pi m_{eff}^{(n)} kT}{h^2} \right]^{3/2} e^{\frac{-(W_{C0}-W_F)}{kT}} \cong N_C e^{\frac{-(W_{C0}-W_F)}{kT}} = N_d$, amiből $W_F = W_{C0} + kT \ln \frac{N_d}{N_C}$. Ezzel az

értékkel kiszámíthatjuk a: $p = 2 \left[\frac{2\pi m_{eff}^{(p)} kT}{h^2} \right]^{3/2} e^{\frac{-(W_F-W_V)}{kT}} \cong N_V e^{\frac{-(W_F-W_V)}{kT}}$ összefüggésből a

lyukak számát is az n-típusú félvezető esetén: $p_n = N_V e^{\frac{-(W_{C0}-W_V)}{kT} - \ln \frac{N_d}{N_C}} = \frac{N_C N_V}{N_d} e^{\frac{-(W_{C0}-W_V)}{kT}} = \frac{n_i p_i}{n_n}$, amiből a következő nagyon érdekes

összefüggést kapjuk: $n_n p_n = n_i p_i \sim n_i^2 \sim p_i^2$. Minthogy az elektronok száma megnőtt a szerkezeti esethez képest, p_n lecsökkent. Ezt érzékeltethetjük úgy is, hogy a Fermi-nívó most feljebb tolódott, ezzel a valenciasáv elektronbetöltési valószínűsége megnőtt, így ott kevesebb lyuk található. Itt kell megjegyezni, hogy a többségben lévő töltéshordozókat *többségi*, a kis mennyiségben jelenlevőket *kisebbségi töltéshordozóknak* nevezzük. *p-típusú félvezető*: Ha feltételezzük, hogy minden akceptornívó be van töltve a T hőmérsékleten, akkor $p_p \cong N_a$. Ez

a közelítő egyenlőség a $W_F = W_V + kT \ln \frac{N_V}{N_a}$. Összefüggést adja a Fermi-nívó helyére

vonatkozóan. Most is eljuthatunk az $n_p p_p = n_i p_i \sim n_i^2 \sim p_i^2$ vagy $n_p = \frac{N_C N_V}{N_a} e^{\frac{W_{C0}-W_V}{kT}}$

összefüggéshez. A p-típusú félvezetőben tehát az elektronok száma csökken a szerkezeti esethez képest.

18. Miért és hogyan függ a félvezetők fajlagos vezetőképessége a hőmérséklettől?

A félvezető vezetőképességére a következő összefüggés adódott: $\sigma = e(n\mu_n + p\mu_p)$.

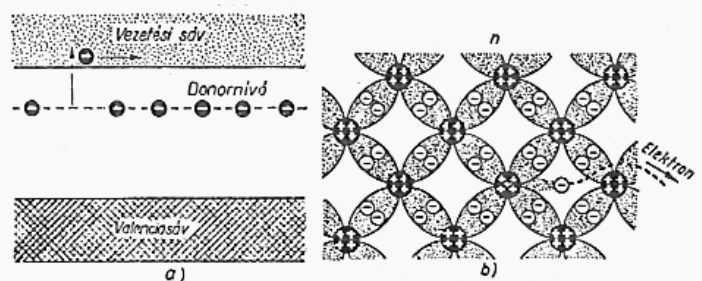
Szerkezeti félvezetők esetén $n_i = p_i = 2 \left[\frac{2\pi m_{eff} kT}{h^2} \right]^{3/2} e^{-\frac{W_g}{2kT}}$. Így végül is a szerkezeti félvezető

vezetőképessége: $\sigma = en_i(\mu_n + \mu_p) = 2e \left[\frac{2\pi m_{eff} kT}{h^2} \right]^{3/2} (\mu_n + \mu_p) e^{-\frac{W_g}{2kT}}$. Látható tehát, hogy a

félvezető vezetőképessége a hőmérséklettel exponenciálisan nő. Ez ellen a növekedés ellen dolgoznak ugyanazok a tényezők, melyek a tiszta fémeknél a vezetőképesség $1/T$ -vel arányos csökkenését okozzák. Az exponenciális növekedés azonban elnyom minden egyéb tendenciát. A gyakorlatban a hőmérséklettől erősen függő ellenállást *termisztornak* nevezzük

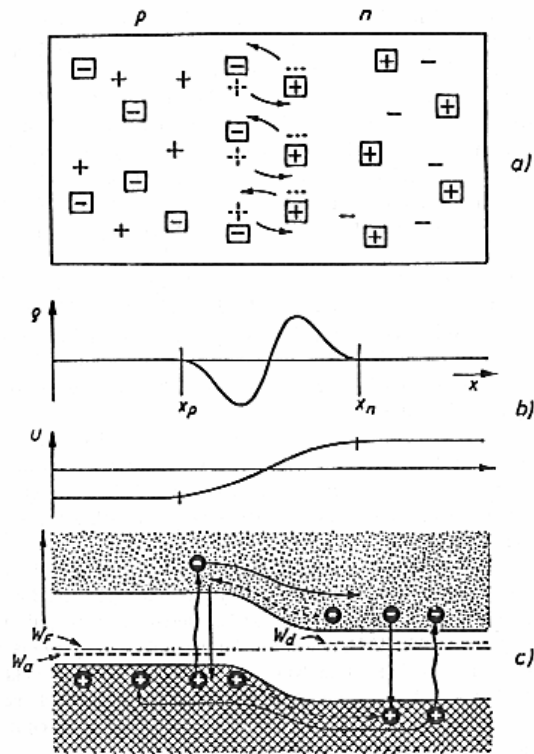
19. Félvezetők (energia) sávszerkezetében jellegzetesen hol vannak a szennyező atomok által létrehozott energianívók (donor vagy akceptor)?

Képzeljük el, hogy egy kristály – Si, Ge – szigetelő. Valenciasávja betöltött, vezetési sávja pedig üres. Képzeljük el mármost, hogy a kristályba olyan adalék atomok épültek be, amelyeknek kis hőmérsékleten is elektronnal betöltött energianívójuk van a tiltott sávban, közvetlenül a vezetési sáv alatt (8.ábra). Ezen az energianívón elhelyezkedő elektron hő mozgása következtében feljuthat a vezetési sávba, és ott vezetést hozhat létre. A folyamat térbeli „ábráját” a 9.7b ábra szemlélteti. Vegyük el az egyik rácspontból a germánium atomot, és helyettesítsük egy antimonatommal, melynek 5 valenciaelektronja van, így a kötés létrejötte után egy szabadon marad. Ez egy egészen lazán kötött elektron. A laza kötés épp azt jelenti, hogy ez az energiaállapot közel esik a vezetési sávhoz. Tehát hőmozgás hatására könnyen leszakadhat. Vagyis az így adalékolt germánium kristály vezetővé válik. Az ilyen, a vezetés számára elektronokat adó idegen atomokat donornak, míg a hozzá tartozó nívót donornívónak nevezzük. Ilyenkor a vezetést n-típusú vezetésnek nevezzük. Létezik egy másik típusú félvezető is. Legyen most az adalék olyan, hogy az a tiltott sávban a valenciasáv közelében hoz létre egy energianívót, mely kis hőmérsékleten nincs betöltve (9.8a ábra). Ilyenkor a hőmozgás következtében a valenciasáv egy elektronja felugorhat erre a nívóra. Ily módon az alsó sáv már nincs teljesen betöltve, vagyis a kristályra rákapcsolt tétből vehetnek át energiát a valenciasáv elektronjai, mert az üresen hagyott helyre, mint magasabb nívóra ugorhatnak át. (9.ábra) Szemléletesen a 9.8b ábrán láthatók a viszonyok. Most a Ge kristály egyik atomját helyettesítsük pl. Bórral. Mivel a bór három vegyértékű, csonkakötés alakul ki. Vagyis lesz egy hiány (lyuk), amely a tiltott sávban rajzolt energianívónak felel meg. Hőmozgás következtében egy szomszédos elektron beugrik a lyukba, majd ennek helyére egy másik, és így tovább. Ez látszólag olyan, mintha a lyuk mozogna ellenkező irányban. Azonban a valóságban az elektronok végzik a mozgást. A vezetést lehetővé tevő, a kötésből elektronokat magukba vevő adalék atomokat akceptoroknak, a hozzájuk tartozó nívót pedig akceptornívónak nevezzük. Az ilyen típusú kristályok p-típusú kristályok.



9.7 ábra
 a) Ha az adalék atom elektronnal betöltött szintje a vezetési sávhoz közel helyezkedik el a tiltott sávban, az elektronok könnyen feljuthatnak a vezetési sávba, és ott elektronvezetést hozhatnak létre;
 b) Az elektronvezetés szemléltetése az n-típusú kristályban

20. Rajzolja fel egy „p-n” átmenet jellegzetes sávszerkezetét megadó ábrát!



21. Rajzolja fel a „nyitás/zárás” jelenségét adott „p-n” átmenet esetén (termikus egyensúlyt feltételezve)!

