FIZIKA 3.
7. EA

ZH 1. - ápr. 2.

előző EA:

$$L_x L_y - L_y L_x = (\quad)(\quad) - (\quad)(\quad) =$$

$$= y p_z z p_x \qquad = y p_x (p_z z - z p_z)$$

$$\downarrow$$

$$p_x z$$

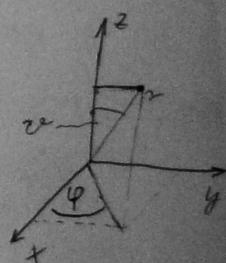
$$\swarrow$$

$$p_x p_z$$

$\boxed{L_z \psi = \lambda \psi}$ = - kitüntetett irányba eső vetületét számoljuk ki az impulzusmomentumnak

$$= \frac{\hbar}{i}\left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x}\right)\psi = \lambda \psi$$

r, ϑ, φ



próba:

$$\frac{d\psi}{d\varphi} = \frac{\partial \psi}{\partial x}\cdot\frac{\partial x}{\partial \varphi} + \frac{\partial \psi}{\partial y}\cdot\frac{\partial y}{\partial \varphi} + \cancel{\frac{\partial \psi}{\partial z}\frac{\partial z}{\partial \varphi}} =$$

0, mert z nem függ a φ-től

$$\boxed{\begin{aligned} x &= r \sin\vartheta \cos\varphi \\ y &= r \sin\vartheta \sin\varphi \\ z &= r\cos\vartheta \end{aligned}}$$

$$= \frac{\partial\psi}{\partial x}\underbrace{(-r\sin\vartheta\sin\varphi)}_{-y} + \frac{\partial\psi}{\partial y}\underbrace{(r\sin\vartheta\cos\varphi)}_{x} =$$

Hilbert-tér elemei

$$= x\frac{\partial\psi}{\partial y} - y\frac{\partial\psi}{\partial x}$$ - egyenlő λ-al

$$\boxed{\frac{\hbar}{i}\frac{\partial \psi}{\partial \varphi} = \lambda \psi}$$

próbafv: $\psi = A e^{im\varphi}$

$$e^{im(\varphi+2\pi)} = e^{im\varphi} = e^{im\varphi}\cdot e^{im2\pi}$$

$$e^{im\varphi} = e^{im\varphi}\cdot e^{im2\pi}$$

$$e^{im2\pi} = 1$$

$$\cos(m2\pi) + i\sin(m2\pi) = 1$$

$\sin$ egész $= 0$
$\cos$ egész $= 1$

$$m = 0, \pm1; \pm2 \ldots$$

$\boxed{\lambda = m\hbar}$ – impulzusmomentum nem folytonos, mert m nem az (eldőlő búgócsiga)

m - mágneses kvantumszám

Rotátor probléma

Laplace-operátor: $\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} = \nabla^2$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi = E\psi \quad \text{– Schrödinger 3D}$$

$$\Delta = \cancel{\frac{\partial^2}{\partial r^2}} + \cancel{\frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}} + \frac{1}{r^2}\left(\frac{\partial^2}{\partial \vartheta^2} + \operatorname{ctg}\vartheta\frac{\partial}{\partial\vartheta} + \frac{1}{\sin^2\vartheta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right)$$

mert r nem változik

tehetetlenségi nyomaték Θ

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial\vartheta^2} + \operatorname{ctg}\vartheta\frac{\partial\psi}{\partial\vartheta} + \frac{1}{\sin^2\vartheta}\frac{\partial^2\psi}{\partial\varphi^2} = -\frac{2mr^2}{\hbar^2}E\psi$$

próba:

$$\Psi(\vartheta, \varphi) = F(\vartheta) \cdot G(\varphi)$$

$$\frac{F''}{F}\sin^2\vartheta + \cos\vartheta \sin\vartheta \frac{F'}{F} + \frac{2\Theta}{\hbar^2} E \sin^2\vartheta + \underbrace{\frac{G''}{G}}_{-m^2} = 0$$

$$G'' + m^2 G = 0$$

$$\boxed{G = A\, e^{im\varphi}}$$

$F = ?$ $\quad \cos\vartheta = \xi$

$$(1-\xi^2)\frac{\partial^2 F}{\partial \xi^2} - 2\xi \frac{\partial F}{\partial \xi} + \left(\frac{2\Theta}{\hbar^2}E - \frac{m^2}{(1-\xi^2)}\right)F = 0$$

$$E_\ell = \frac{\hbar^2}{2\Theta}\ell(\ell+1) \quad \text{ahol } \ell = 0, 1, 2 \ldots \text{ egész szám}$$

Gömbfüggvények

$$\Psi_{\ell,m} = \sin^{|m|}\vartheta \underbrace{P_\ell^m(\cos\vartheta)}_{\text{Legendre polinomok}} \cdot e^{im\varphi}$$

– módosított Legendre-polinom

$L^2 = ?$ $\quad L^2$ operátor sajátfüggvényei

$$L^2\Psi = \lambda\Psi \qquad L^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2$$

$$-\hbar^2\left[\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right)^2 + \left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right)^2 + \left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right)^2\right]\Psi = \lambda\Psi$$

Descartes-ból → polár koord. rendszerbe

$$\underbrace{-\hbar^2\left(\frac{\partial^2\Psi}{\partial\vartheta^2} \operatorname{ctg}\vartheta\frac{\partial\Psi}{\partial\vartheta} + \frac{1}{\sin^2\vartheta}\frac{\partial^2\Psi}{\partial\varphi^2}\right)}_{L^2} = \lambda\Psi$$

$$\lambda = 2\Theta E$$

$\lambda = \hbar^2 \, l(l+1)$ ahol $l = 0, 1, 2$ egész szám

$$\boxed{|L| = \hbar\sqrt{l(l+1)}}$$ = impulzusmomentum nem vehet föl tetszőleges értéket

l – mellék-kvantumszám

$$Y(\vartheta, \varphi)$$

Atomok, elektronok

Hidrogén-atom esete: (1 proton, 1 elektron)

$$\Delta\Psi + \frac{2m}{\hbar^2}\Big(E - V(r)\Big)\Psi = 0$$

$$\frac{\partial^2\Psi}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial\Psi}{\partial r} + \frac{1}{r^2}\left(\frac{\partial^2\Psi}{\partial\vartheta^2} + \operatorname{ctg}\vartheta\,\frac{\partial\Psi}{\partial\vartheta} + \frac{1}{\sin^2\vartheta}\frac{\partial^2\Psi}{\partial\varphi^2}\right) + \frac{2m}{\hbar^2}\big(E - V(r)\big) = 0$$

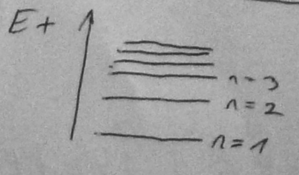
$$\Psi(r, \vartheta, \varphi) = R(r)\cdot Y(\vartheta, \varphi)$$ ahol $$\boxed{V(r) = -\frac{e^2}{r}}$$ $$E + \frac{e^2}{r}$$

$$\frac{d^2R}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{dR}{dr} + \frac{2m}{\hbar^2}\left(E + \frac{e^2}{r} - \frac{l(l+1)}{r^2}\right)R = 0$$

Sommerfeld-féle polinom módszer

$$R_a(\xi) = e^{-\frac{\xi}{2}} \cdot V(\xi)$$

$$\boxed{E_n = -\frac{m e^4}{2\hbar^2 n^2}}$$ ahol $n = 1, 2 \ldots \infty$ egész



– egyre sűrűsödnek

legalsó szint: $n = 1$

Languerre-polinomok

$L \cdot Y$ = teljes

Kvantumszámok

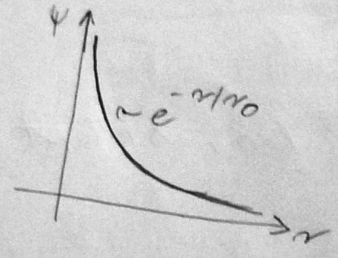
1. Főkvantumszám – $n = 1, 2, 3 \ldots \infty$
2. Mellék kvantumszám – $l = 0, 1, 2 \ldots (n-1)$
3. Mágneses kvantumszám – $m = 0, \pm 1, \pm 2 \ldots \pm l$
4.

$n=1$, $l=0$, $m=0$ – hidrogén e^- legalsó energiaszintje

r_0 – Bohr-távolság

$r_0 = 0{,}0529$ nm

$$\psi_{1,0,0} = C_{1,0,0}\, e^{-r/r_0}$$



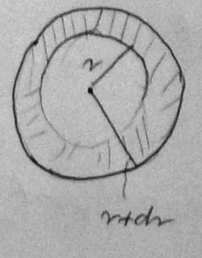
$$\rho = |\psi|^2 \sim e^{-2r/r_0}$$

megtalálási vség origóban a legnagyobb, távolodva az atomtól egyre kisebb

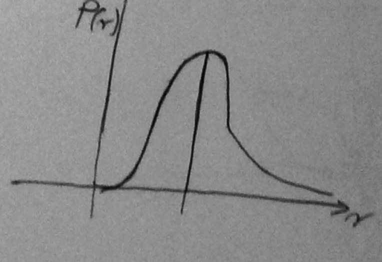
↓

nem jó így

$$\int |\psi|^2\, dr$$



$$\int_r^{r+dr} |\psi|^2\, 4r^2\pi\, dr$$



$$\frac{d\,P(r)}{dr} = 4\pi\, C_{1,0,0}^2 \left(2r\, e^{\cdots} - r^2 \frac{2}{r_0}\, e^{\cdots}\right) = 0$$

$$r = r_0$$

$$C_{1,0,0} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{1}{r_0}\right)^{3/2}$$

H atom helyett Z rendszámú atom:

$$e^{-Zr/r_0}$$

gömbszimmetrikus megoldás

$l=0$ - s állapot

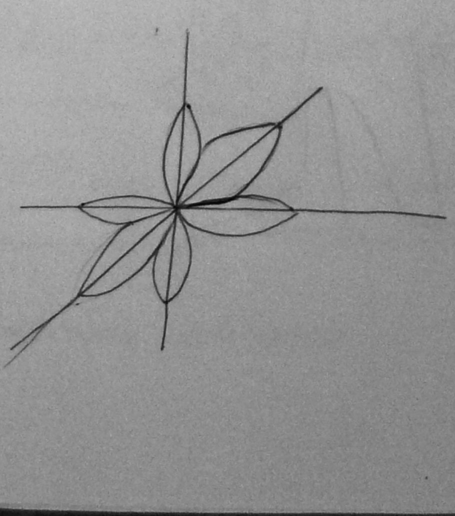
<u>n = 2, Z rendszámú atom</u>

$$\Psi_{2,0,0} = C_{2,0,0}\left(2 - \frac{Zr}{r_0}\right) e^{-Zr/r_0} \quad - \; l=0, \text{ s állapot}$$

$$\Psi_{2,1,0} = C_{2,1,0}\, \frac{Zr}{r_0}\, e^{-Zr/2r_0} \cos \vartheta$$

vizsga: lehet-e olyan hogy $\Psi_{1,1,0}$ -> NEM

$$\Psi_{2,1,\pm 1} = C_{2,1,1}\, \frac{Zr}{r_0}\, e^{-Zr/2r_0} \sin\vartheta\, e^{\pm i\varphi}$$



$l=1$ p-állapot

$p_x,\ p_y,\ p_z$