FIZIKA 3

5 EA

$$\left[\hat{p}_x, \hat{x}\right] = \frac{\hbar}{i}\hat{I}$$ – egységoperátor, nincs jelentősége

$\hat{p}_x$: impulzus, $\hat{x}$: hely operátor

q - hely, általános koordináta

általánosabb alak:

$$\left[\hat{p}_i ; q_j\right] = \delta_{ij}$$

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{ha } i = j \\ 0, & \text{ha } i \neq j \end{cases}$$

$$\left[q_i ; q_j\right] = 0$$

$$\left[p_i ; p_j\right] = 0$$

1 dimenziós Schrödinger - egyenlet:

$$K + V = E$$

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

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)\cdot = \hat{H} = \left(\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)\right)\cdot \varphi(x) = E\,\varphi(x)$$

3 dimenziós Schrödinger-egyenlet

$$p^2 = p_x^2 + p_y^2 + p_z^2$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\varphi(x,y,z) + V(x,y,z)\cdot\varphi(x,y,z) = E\cdot\varphi(x,y,z)$$

↓

időfüggetlen 3D-ós Schrödinger-egyenlet

$$P = \int_V |\varphi(x,y,z)|^2 \, dx\, dy\, dz$$ – megtalálási valószínűség adott V térfogatban

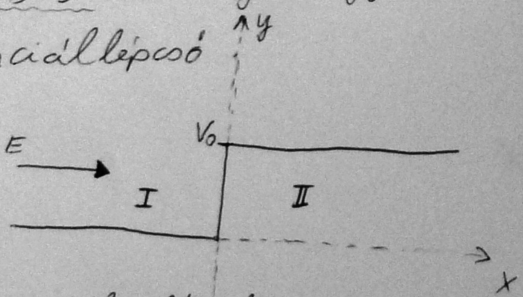
teljes térre való integrálás 1-et ad → részecske van valahol, biztos esemény

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\varphi|^2 \, dx\, dy\, dz = 1$$

Példa 1

1D-s Schrödinger-egyenlet

potenciállépcső



$$V(x) = \begin{cases} V_0 & x \geq 0 \\ 0 & x < 0 \end{cases}$$

elektronokat lövöldözök E energiával

teret két részre osztjuk: I és II

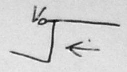
I: $$\frac{d^2\varphi_I(x)}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2}\varphi_I(x) = 0$$

II: $$\frac{d^2\varphi_{II}(x)}{dx^2} + \frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2}\varphi_{II}(x) = 0$$

próbafüggvény:

$$\varphi_I(x) = A\cdot e^{\frac{i}{\hbar}px} + Be^{-\frac{i}{\hbar}px} \quad \text{ahol} \quad p=\sqrt{2mE}$$

$$\varphi_{II}(x) = Ce^{\frac{i}{\hbar}qx} + \cancel{De^{-\frac{i}{\hbar}qx}} \quad \text{ahol} \quad q=\sqrt{2m(E-V_0)}$$

mert  ← ilyen irányból nem jön részecske

1. eset:

$E > V_0$ - potenciálgát

A, B, C közötti összefüggés:

$x=0$ -ban hogy viselkedik? - FOLYTONOS

$$\varphi_I(0) = \varphi_{II}(0) \overset{(1)}{\Rightarrow} A+B=C \quad \text{mivel} \quad e^{\dots 0}=1$$

Lemma - tétel:

Ha a potenciálnak nincs végtelen ugrása, akkor az állapotfüggvény első deriváltjának is folytonosnak kell lenni minden pontban

ez most teljesül:

$$\varphi_I'(0) = \varphi_{II}'(0) = \frac{i}{\hbar}pA - \frac{i}{h}pB = \frac{i}{\hbar}qC$$

$$p(A-B) = qC \quad (2)$$

(1) $A+B=C$

(2) $Ap-Bp=Cq$

$$\boxed{B = \frac{p-q}{p+q}A \qquad C = \frac{2p}{p+q}A}$$

részecskeáram

Def: $j = \frac{i\hbar}{2m}\left(\operatorname{grad}(\varphi^*)\cdot\varphi - \operatorname{grad}(\varphi)\cdot\varphi^*\right)$

$$j_A = \frac{A^* p A}{2m} + \frac{A p A^*}{2m} = |A|^2 \frac{p}{m}$$

$$j_B = |B|^2 \frac{p}{m}$$

$$j_C = |C|^2 \frac{q}{m}$$

<u>áthaladás valószínűsége:</u>

$$G = \frac{j_C}{j_A} = \frac{|C|^2 q}{|A|^2 p} = \frac{4pq}{(p+q)^2}$$

$$G + R = 1$$

<u>reflexió valószínűsége:</u>

$$R = \frac{j_B}{j_A} = \frac{|B|^2 p/m}{|A|^2 p/m} = \frac{(p-q)^2}{(p+q)^2}$$

ha van potenciállépcső, akkor van 0-tól különböző visszaverődés

részecske bizonyos %-a áthalad, bizonyos %-a visszaverődik eset :

$E < V_0$

II. tér próbafüggvénye: (elsőé ua.)

def: legyen $-\frac{2m}{\hbar^2}(E-V_0) = \frac{1}{(2b)^2} > 0$

$\varphi_{II}(x) = C e^{-\frac{x}{2b}}$. II. térrészben korlátos a függvény

$$A+B = C \qquad B = -\frac{1+2ip\frac{b}{\hbar}}{1-2ip\frac{b}{\hbar}} A$$

$$\frac{ip}{\hbar}(A-B) = -\frac{C}{2b}$$

reflexió:

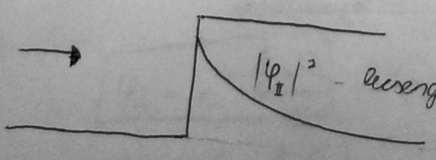
$\boxed{R = 1}$ – minden részecske, amit a fal felé lövök, visszapattan.

II. tér Valószínűség sűrűség

$$\rho(x) = \left|\varphi_{II}(x)\right|^2 = \frac{4A^2}{1+\hbar^2/4p^2b^2} \cdot e^{-\frac{x}{b}} =$$

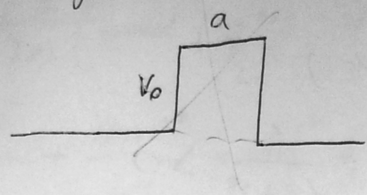
$$= A^2 \frac{E}{V_0} e^{-\frac{x}{b}}$$

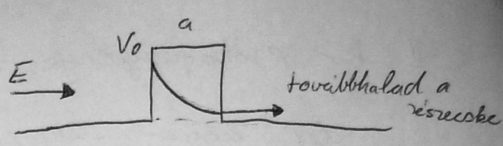
b – behatolási mélység



Példa 1/b

potenciálgát





$V_0 > E$ - alagúteffektus

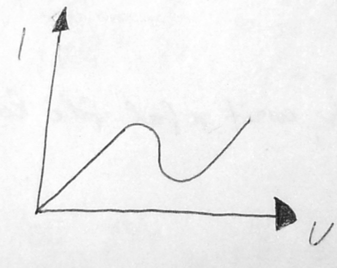
részecske úgy viselkedik, mintha „alagutat fúrna" és áthalad a potenciálgáton - egy bizonyos % visszaverődik

egy bizonyos % elnyelődik

egy bizonyos % áthalad

Esaki

Esaki-dióda



Példa 2

1D Harmonikus lineáris oszcillátor (rugó) probléma

Klasszikus gondolkodás:

$F = -Dx$ kitérés

rugóállandó

$$V(x) = \frac{Dx^2}{2}$$

$$x = x_0 = \cos(wt + w_0)$$

$$w = 2\pi\nu = \sqrt{\frac{D}{m}}$$

1D Schrödinger - egyenlet:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\varphi(x)}{dx^2}+\frac{w^2m}{2}x^2\varphi(x)=E\,\varphi(x)$$

megoldás: Sommerfeld féle polinom módszer

1 megkeressük az aszimptotikus megoldást, viselkedést

jelölés $k=\frac{2E}{\hbar w}$

$$\xi = x\cdot\sqrt{\frac{mw}{\hbar}}$$

$$\frac{d^2\varphi(x)}{dx^2}+\frac{2m}{\hbar^2}\left(E-\frac{1}{2}mw^2x^2\right)\varphi(x)=0 \quad \Big|\cdot\frac{\hbar}{mw}$$

$$\frac{d^2\varphi(x)}{\frac{mw}{\hbar}\cdot dx^2}+\left(\frac{\hbar}{mw}\frac{2m}{\hbar^2}E-\frac{2m}{\hbar^2}\frac{\hbar}{mw}\cdot\frac{1}{2}mw^2x^2\right)\varphi(x)=0$$

$\downarrow$

$$\frac{d^2\varphi}{d\xi^2}+\left(k+\xi^2\right)\varphi=0$$

aszimptotikus mo:

$$\varphi_a \qquad \frac{d^2\varphi_a}{d\xi^2}-\xi^2\varphi_a=0 \qquad \xi\to\infty$$

próbafv:

$$\boxed{\varphi_a=e^{-\frac{\xi}{2}}} \quad \text{OK}$$

$$\varphi_a'=\left(-\frac{2\xi}{2}\right)\varphi_a \qquad \text{ú } \xi\to\infty$$

$$\varphi_a''=(\xi-1)\,\varphi_a$$