FIZIKA 3

11 EA

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

$(\varphi_k ; \varphi_i) = 0$

$\psi = \sum c_i \varphi_i$

$\psi_{sp} = \frac{-1}{2}3 s + \frac{1}{2}3 p_x + \frac{1}{2}3 p_y + \frac{1}{2}3 p_z$

Heisenberg-féle bizonytalansági elv:

$[A; B] \neq 0$ – nem felcserélhető

$\Delta A = O - \bar{O}$

$$\Delta A \cdot \Delta B \geq \frac{\hbar}{2}$$

bizonyíték: természetes vonalszélesség

Ehrenfest-tétel – fizikai mennyiségek középértékének időbeli változásai

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

$$\frac{\hbar}{i}\frac{\partial \psi}{\partial t} + H\psi = 0$$

O nem függ explicite az időtől

$$\frac{d\bar{O}}{dt} = \left(\frac{\partial \psi}{\partial t}, O\psi\right) + \left(\psi ; O\frac{\partial \psi}{\partial t}\right)$$

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} H\psi_i \qquad \frac{\partial \psi^*}{\partial t} = \frac{i}{\hbar} H\psi^*$$

$$\frac{d\bar{O}}{dt} = \frac{i}{\hbar}(H\psi ; O\psi) - \frac{i}{\hbar}(\psi, OH\psi) = \frac{i}{\hbar}(\psi\,(HO - OH)\psi) =$$

$$= \frac{i}{\hbar}(\psi ; [H, O]\psi)$$

ha $[H;O]=0$

$$\frac{d\bar{O}}{dt}=0$$

1. alkalmazás

$O=x$

$$\frac{d\bar{x}}{dt}=\frac{i}{\hbar}\left(\psi;[H,x]\psi\right) \qquad [p_x;x]=\frac{\hbar}{i}I \qquad \text{pl jó: } \hat{p}_x=\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}$$

$$\hat{x}=x\cdot$$

$$[H;x]\psi=-\frac{\hbar}{i}H\frac{\partial\psi}{\partial p_x}+\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial p_x}H\psi= \qquad \text{pl: } \hat{x}=-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial p_x}$$

$$\hat{p}_x=p_x\cdot$$

$$=-\frac{\hbar}{i}H\frac{\partial\psi}{\partial p_x}+\frac{\hbar}{i}\frac{\partial H}{\partial p_x}\psi+\frac{\hbar}{i}H\frac{\partial\psi}{\partial p_x}=\frac{\hbar}{i}\frac{\partial H}{\partial p_x}\psi.$$

$$\boxed{\frac{d\bar{x}}{dt}=\left(\psi;\frac{\partial H}{\partial p_x}\right)}$$

2. ugyanez $O=p_x$

$$\frac{d\bar{p_x}}{dt}=-\left(\psi;\frac{\partial H}{\partial x}\right)$$

példa: m tömegű pont $V(x,y,z)$

$$H=\frac{1}{2m}\left(p_x^2+p_y^2+p_z^2\right)+V(x,y,z)$$

$$\frac{d\bar{x}}{dt}=\left(\psi,\frac{\partial H}{\partial p_x}\psi\right)=\frac{1}{m}\left(\psi;p_x\psi\right)=\frac{\bar{p_x}}{m}$$

$$\frac{d^2\bar{x}}{dt^2}=\frac{1}{m}\frac{d\bar{p_x}}{dt}=-\frac{1}{m}\left(\psi,\frac{\partial H}{\partial x}\psi\right)=-\frac{1}{m}\left(\psi,\frac{\partial V}{\partial x}\psi\right)=$$

$$=-\frac{1}{m}\frac{\partial\bar{V}}{\partial x}$$

$$\boxed{\frac{d^2 \bar{x}}{dt^2} = -\frac{1}{M}\frac{\partial \bar{V}}{\partial x}}$$ – Newton II. törvénye

↳ Ehrenfest-tétel

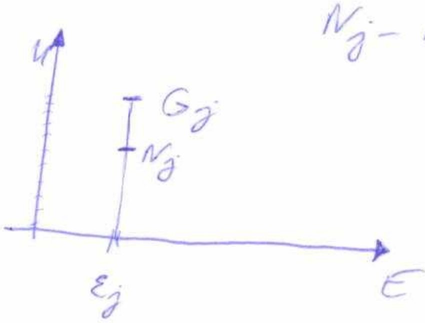
STATISZTIKAI FIZIKA

Egy részecske állapotok

j. állapot – ε_j
E-ja

degeneráció G_j – ennyi részecske található max

N_j – nincs teljesen betöltve,



Össz részecske szám

$$\left.\begin{aligned} N &= \sum N_j \\ E &= \sum \varepsilon_j N_j \end{aligned}\right\} \text{fix}$$

átlagos betöltöttség

$$\bar{n}_j = \frac{N_j}{G_j}$$

$$N = \sum G_j \bar{n}_j$$

$$E = \sum G_j \varepsilon_j \bar{n}_j$$

W_j – termodinamikai v.ség $\quad W_j = W(G_j, N_j)$

$$W = \prod W_j$$

Entrópia: $S = k_B \ln W = k_B \sum \ln W_j$

egyensúly esetén S_{max}

feltételes szélsőérték problémát oldunk meg

$$\frac{\partial}{\partial \bar{n}_j}\left\{ S(\{\bar{n}_j\}) - \alpha N(\{N_j\}) - \beta E\{N_j\}) \right\} = 0$$

$$k_B \cdot \frac{\partial \ln W_j(G_j, \bar{n}_j)}{\partial \bar{n}_j} - \alpha G_j - \beta G_j \varepsilon_j = 0$$

1. Fermi részecskék (pl. e^-)

feltétel:

G_j, N_j - nagyon nagy számok

$G_j, N_j \gg 1$

Stierling:

$\ln N! = N \ln N - N$

$$W_j = \binom{G_j}{N_j} = \frac{G_j!}{N_j!(G_j-N_j)!}$$

Stierling-formula

$$\ln W_j = G_j \ln G_j - \cancel{G_j} - N_j \ln N_j + N_j -$$

$$-(G_j - N_j)\ln(G_j - N_j) + \cancel{G_j} - N_j =$$

$N_j = G_j \bar{n}_j$

$$= G_j \ln G_j - G_j \bar{n}_j \ln(G_j n_j) - G_j(1-\bar{n}_j)\ln(G_j(1-\bar{n}_j)) =$$

$$= G_j \ln G_j - G_j \bar{n}_j \ln G_j - G_j \bar{n}_j \ln \bar{n}_j -$$

$$- G_j(1-\bar{n}_j)\ln G_j - G_j(1-\bar{n}_j)\ln(1-\bar{n}_j) =$$

$$= - G_j (n_j \ln \bar{n}_j + (1-\bar{n}_j)\ln(1-\bar{n}_j))$$

$$k_B \frac{d}{\partial \bar{n}_j}\left\{ \bar{n}_j \ln \bar{n}_j + (1-\bar{n}_j)\ln(1-\bar{n}_j) \right\} + \alpha + \beta \varepsilon_j = 0$$

$$k_B \left[\ln \bar{n}_j + \cancel{1} - \ln(1-\bar{n}_j) - \cancel{1} \right] + \alpha + \beta \varepsilon_j = 0$$

$$\frac{\ln \frac{\bar{n}_j}{1-n_j} + \alpha + \beta \varepsilon_j}{k_B} = 0$$

$$\exp\left(\frac{1}{k_B}(\alpha+\beta\varepsilon_j)\cdot\frac{\bar{n}_j}{1-\bar{n}_j}\right)=1$$

$$\boxed{\bar{n}_j=\frac{1}{\exp(1/k_B(\alpha+\beta\varepsilon_j)+1}}$$ FERMI

2. Bose-Einstein - nincs betöltési korlát

G_j, N_j — G_j darab doboz, N_j darab golyó

$$W_j=\frac{(G_j+N_j-1)!}{(G_j-1)!\,N_j!}$$

oo|oooo|o|oo

G_j+N_j-1

$$\ln W_j=(G_j+N_j-1)\ln(G_j+N_j-1)-(G_j+N_j-1)-$$
$$-N_j\ln N_j+N_j-(G_j-1)\ln(G_j-1)+G_j-1$$

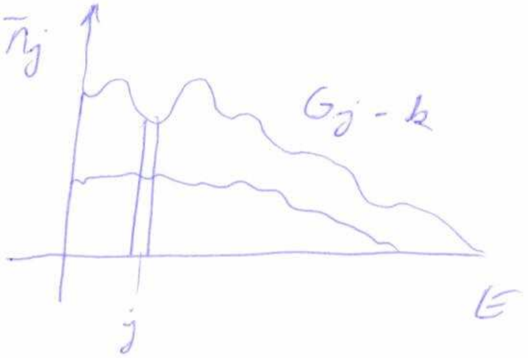
$\boxed{N=G_j\bar{n}_j}$ behelyettesítve

$$=G_j\left\{1+\bar{n}_j\ln(1+\bar{n}_j)-\bar{n}_j\ln\bar{n}_j\right\}$$

$$\ln\frac{1+\bar{n}_j}{\bar{n}_j}-\frac{1}{k_B}\left[\alpha+\beta\varepsilon_j\right]=0$$

$$\exp\left(-\frac{1}{k_B}\alpha+\beta\varepsilon_j\right)\left(1+\frac{1}{\bar{n}_j}\right)=1$$

$$\boxed{\bar{n}_j=\frac{1}{\exp\left[\frac{1}{k_B}(\alpha+\beta\varepsilon_j)\right]-1}}$$ Bose



$\alpha = ?$ $\beta = ?$

$$\frac{\partial S}{\partial n_j} = G_j(\alpha + \beta \varepsilon_j)$$

Matek:

$$\frac{\partial S(E,N)}{\partial \bar{n}_j} = \frac{\partial S}{\partial E}\frac{\partial E}{\partial \bar{n}_j} + \frac{\partial S}{\partial N}\frac{\partial N}{\partial \bar{n}_j} = \frac{\partial S}{\partial E} G_j \varepsilon_j + \frac{\partial S}{\partial N} G_j$$

$$\underbrace{\left(\frac{\partial S}{\partial N} - \alpha\right)}_{0} + \underbrace{\left(\frac{\partial S}{\partial E} - \beta\right)}_{0} \varepsilon_j = 0$$

$$\boxed{\alpha = \frac{\partial S}{\partial N} = -\frac{\mu}{T} \qquad \beta = \frac{\partial S}{\partial E} = \frac{1}{T}}$$

kémiai potenciál

$$E = TS - pV + \mu N$$

$$\boxed{S = \frac{E}{T} - \frac{\mu}{T} N}$$

$$\boxed{\bar{n}_j = \frac{1}{e^{\frac{1}{k_B T}(\varepsilon_j - \mu)} \pm 1}}$$

+ – FERMI

– – BOSE

részecskeszám nem állandó – $\mu = 0$

$$\boxed{\frac{1}{k_B T} = \beta}$$

ha nincs ott az ± 1 Boltzmann-eloszlás: $f_s = \frac{e^{-\frac{\varepsilon}{k_B T}}}{Z}$

FIZIKA 3
12 EA

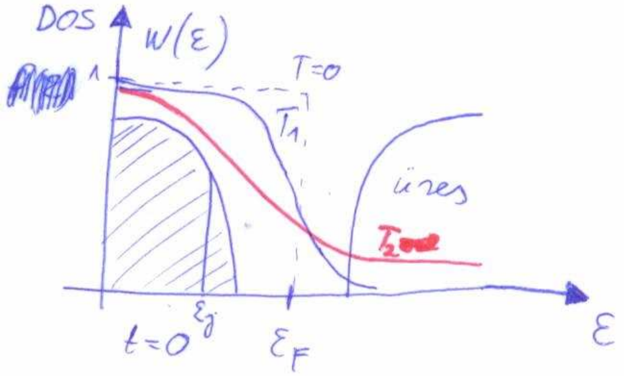
$$\bar{n} = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_i - \mu)} \pm 1}$$

$\beta = \frac{1}{k_B T}$ $k_B = 8{,}6173324(78) \cdot 10^{-5}\ eV/K$

+ - Fermi-részecskék
− Bose-részecskék

μ - kémiai potenciál

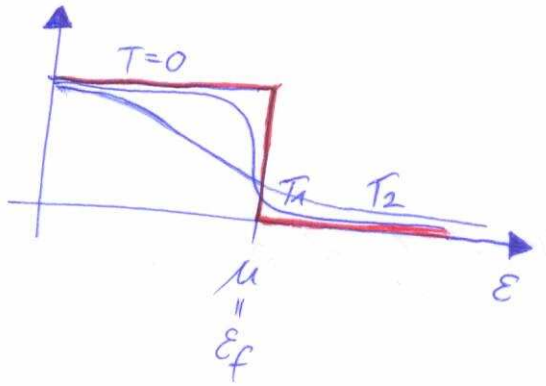
$f(\varepsilon)$ - nek is jelölik Fermi-esetben



DOS - density of states
állapotsűrűség

ε_F - mindig a gap közepén van tiszta félvezetőknél

$n(\varepsilon) = f(\varepsilon)$



ε_F - $T=0$-nál egyenlő μ-vel

$\mu(T)$ - kémiai potenciál hőmérsékletfüggő

$T=0 < T_1 < T_2$

$W(\varepsilon) \cdot f(\varepsilon)$

$T=0$ - nál minden állapot be lesz töltve
$W(\varepsilon)$

$T_1 \neq 0$ - átfolynak

példa: gap = 4 eV - telített sáv
Vezet-e szobahőmérsékleten? $\beta = \frac{1}{k_B T} = \frac{1}{0{,}025\ eV}$

$\frac{4eV}{2}$

$e^{-\frac{2eV}{0{,}025eV}} \cdot 10^{23}$ - ennyi e^- megy át szobahőmérsékleten

$10^{-35} \cdot 10^{23}$ - nagyon kicsi, 0 a esély, hogy egyik e^- átmenjen a másik helyre ha 1 eV gap

$\Downarrow$ 10^{23} atom esetén

10^{14} e^- megy át a másik sávba

Szimmetriák és megmaradási tételek

1. Koordináta

$$x \to x' = x + a$$

$$\psi' = \psi(x+a) = T\,\psi(x)$$

$$(T\psi\,;T\psi) = (\psi\,;\psi)$$

$T^+T = 1$ - unitér transzformáció $\quad T(a) \quad T(0) = I$

$T(a) = ?$ Taylor-sorfejtés:

$$\psi(x+a) = \psi(x) + \frac{\partial \psi(x)}{\partial x} a + \frac{1}{2}\frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} a^2 + \dots$$

$$p_x = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x} \to \psi(x+a) = \psi(x) + \frac{ia}{\hbar} p_x \psi - \frac{1}{2\hbar^2} a^2 p^2 \psi + \dots =$$

$$= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} (a p_x)^n \psi(x) = e^{\frac{i}{\hbar} a p_x} \psi(x)$$

$$\boxed{T(a) = e^{\frac{i}{\hbar} a p_x}}$$

$$T(a)\, H\, \psi(x) = H(x+a, p_x)\, \psi(x+a) = H(x+a, p) \cdot T(a)\, \psi(x)$$

$$T(a)\, H(x,p) = H(x+a,p)\, T(a)$$

deriváljunk H szerint, a-t vegyünk 0-nak utána

$$\cancel{e^{\frac{i}{\hbar} a p}} \cdot \frac{i}{\hbar} p\, H(x,p) = \frac{\partial H}{\partial (x+a)} \cdot \cancel{e^{\frac{i}{\hbar} p a}} + H(x+a, p_x) \cdot \frac{i}{\hbar} p_x \cancel{e^{\frac{i}{\hbar} p_x a}}$$

$$a = 0$$

$$0 = \frac{\partial H}{\partial x} = \frac{i}{\hbar}[p_x, H] \qquad \frac{d\bar{O}}{dt} = \frac{i}{\hbar}(\psi, [H, O]\psi) \qquad O = p_x$$

$$\frac{dp}{dt} = 0$$ – impulzus idő szerinti deriváltja 0

$$\boxed{p_x \text{ – időben állandó}}$$

2. Koordináta rendszer elforgatása

$$\varphi \to \varphi' = \varphi + \gamma$$

$$\frac{\partial}{\partial \varphi} = \frac{i}{\hbar} L_\varphi \qquad T(\gamma) H(\varphi) = H(\varphi + \gamma) \cdot T(\gamma)$$

3. Időeltolódás

$$t \to t' = t + \tau$$

$$\boxed{\frac{\partial}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} H} \qquad T(\tau) = e^{\frac{i}{\hbar} H \tau}$$

PERTURBÁCIÓSZÁMÍTÁS

– időfüggetlen, nem elfajult $\quad H = H_0 + H'$

H_0: ismert $\quad H'$: kis perturbáció

$$H \Psi_k = E_k \Psi_k$$

$$\boxed{H_0 \Psi_k = E_{0k} \Psi_k} \text{ ismert} \qquad H' \to \lambda H' \qquad 0 < \lambda < 1$$

$$\Psi_k = \Psi_k^{(0)} + \lambda \Psi_k^{(1)} + \lambda^2 \Psi_k^{(2)} + \dots$$

$$E_k = E_k^{(0)} + \lambda E_k^{(1)} + \lambda^2 E_k^{(2)} + \dots$$

$$(H_0 + \lambda H')\left(\Psi_k^{(0)} + \lambda \Psi_k^{(1)} + \lambda^2 \Psi_k^{(2)} + \dots\right) =$$

$$= \left(E_k^{(0)} + \lambda E_k^{(1)} + \lambda^2 E_k^{(2)} + \lambda^3 E_k^{(3)} \dots\right)\left(\Psi_k^{(0)} + \lambda \Psi_k^{(1)} + \dots\right)$$

$H_0 \Psi_k^{(0)} = E_k^{(0)} \Psi_k^{(0)}$ $- \lambda^0 -$ perturbálatlan megoldás $\Psi_k^{(0)} = \Psi_k$

$H_0 \Psi_k^{(1)} + H' \Psi_k^{(0)} = E_k^{(0)} \Psi_k^{(1)} + E_k^{(1)} \Psi_k^{(0)}$ $- \lambda^1$

$H_0 \Psi_k^{(2)} + H' \Psi_k^{(1)} = E_k^{(0)} \Psi_k^{(2)} + E_k^{(1)} \Psi_k^{(1)} + E_k^{(2)} \Psi_k^{(0)}$ $- \lambda^2$

φ_k teljes rendszert alkot

$$\Psi_k^{(1)} = \sum_l a_{kl}^{(1)} \cdot \varphi_l$$

$$\sum a_{kl}^{(1)} \underbrace{H_0 \varphi_k}_{E_{0l} \varphi_l} + H' \varphi_k = E_{0k} \sum_l a_{kl}^{(1)} \varphi_l + E_k^{(1)} \varphi_k$$

$\cdot \varphi_m^* + \int$ ''
''

$$\sum_l a_{kl}^{(1)} \int \varphi^* \varphi_l \, dV + \int \varphi_m^* H' \varphi_k \, dV = E_{0k} \sum_l a_{kl}^{(1)} \cdot$$

$$\cdot \int \varphi_m^* \varphi_l \, dV + E_k^{(1)} \int \varphi_m^* \varphi_k \, dV$$

$$a_{km}^{(1)} E_{0m} + \underbrace{\int \varphi_m^* H' \varphi_k \, dV}_{H'_{mk}} = a_{km} E_{0k} + E_k^{(1)} \delta_{mk}$$

$$a_{km}^{(1)} (E_{0k} - E_{0m}) + E_k^{(1)} \delta_{mk} = H'_{mk}$$

$$a_{km}^{(1)} = \frac{H'_{mk}}{E_{0k} - E_{0m}}$$

$\boxed{E_k = E_{0k} + H'_{mk}}$ első perturbációs Energia ha elfajult a dolog:

$\sum_{\ell}$ lépést nem lehet megcsinálni