

# Kvantumfizikai összefoglaló

## Fizikai mennyiségek kvantált jellege

### A hőmérsékleti sugárzás

Egy  $T$  hőmérsékletű test elektromágneses hullámokat bocsát ki magából. Az emittált sugárzás frekvenciaspektruma függ a test hőmérsékletétől, anyagától, a felület érdességétől, stb. Ez a *hőmérsékleti sugárzás*.

Ha két test között kiiktatunk mindenféle hővezetést és -áramlást, a hőmérsékletük akkor is kiegyenlítődik, még hozzá úgy, hogy mindkét test (a melegebb és a hidegebb is) sugároz és mindkettő el is nyeli a másiktól származó sugárzást.

Legyen az *emisszióképesség* ( $e(\nu, T)$ ) az egységnyi felület által,  $\nu$  frekvencián, egységnyi idő alatt, egységnyi térszögbe kibocsátott energia, az *abszorpcióképesség* ( $a(\nu, T)$ ) pedig egy test egységnyi felülete által, adott  $T$  hőmérsékleten ráadott  $\nu$  frekvenciájú sugárzás elnyelt hányada.

Bármely test esetén az emisszióképesség és az abszorpcióképesség hányadosa kizárólag  $\nu$  és  $T$  ugyanazon függvénye:

$$\frac{e(\nu, T)}{a(\nu, T)} = E(\nu, T) \quad (1)$$

Ennek következménye, hogy ha egy test valamilyen sugárzás kibocsátására képes, azt el is nyelheti.

*Abszolút fekete test*nek hívunk egy olyan testet, ami minden ráeső sugárzást elnyel. Ez azt is jelenti, hogy egy adott frekvencián és hőmérsékleten az abszolút fekete test emisszióképessége a legnagyobb. Egy fém testben lévő, kis nyílással rendelkező, érdes falú sötét üreg abszolút fekete testnek tekinthető.

Az abszolút fekete test által kisugárzott teljes energia a test abszolút hőmérsékletének negyedik hatványával arányos:

$$E(\text{teljes}) = \int e(\nu, T) d\nu = \sigma T^4 \quad (2)$$

ahol  $\sigma = 2\pi^5 k^4 / 15h^3 c^2 = (5,6697 + 0,0029) \cdot 10^{-8} \text{ Wm}^{-2} \text{ K}^{-4}$ .

A hőmérséklet növekedésével a sugárzás maximuma a rövidebb hullámhosszúságok – nagyobb frekvenciák – felé tolódik el:

$$\lambda_{\max} T = \text{konst.} = 2,898 \cdot 10^{-8} \text{ mK} \quad (3)$$

Az abszolút fekete test sugárzási törvényének levezetése csak a folytonos energia értékek klasszikus fizikai feltevésének elvetésével, a  $h\nu$  energiakvantum bevezetésével lehetséges: egy  $\nu$  frekvencián működő oszcillátor energiájának lehetséges értékei:

$$E = nh\nu \quad (4)$$

ahol  $n \in \mathbb{N}^+$  és  $h = 6,626 \cdot 10^{-34} \text{ Js}$  (*Planck-állandó*).

## Külső fényelektromos effektus

Az ultraibolya fénysugarak egy negatív töltésű fém töltését csökkentik, míg egy pozitív töltésűt nem. Megvilágításkor elektronkilépés is megfigyelhető. Ez a (*külső*) *fotoeffektus*, ami szintén csak az elektromágneses hullám energiája kvantáltságának feltételezésével lehetséges.

Vegyünk egy elektroncsövet (vákuumcsőben két elektróda (anód és katód) és egy  $U_R$  feszültséggel vezérelt fémháló (rács)). A két elektródára kapcsolt feszültség legyen nulla, tehát ne tudjanak a katódból elektronok kiszakadni. Így egy, a körbe kapcsolt árammérő zérus áramot mutat. Ha azonban a katódot megfelelő frekvenciájú és intenzitású fényvel világítjuk meg, akkor a mérő áramot jelez, amely a rácsra kapcsolt feszültséggel megszüntethető. A következőket tapasztaljuk:

1. Az áram a megvilágítást követően azonnal (kevesebb, mint  $1 \mu\text{s}$  alatt) megindul.
2. Az áram arányos a megvilágító fény intenzitásával, de független a fény frekvenciájától.
3. Egy bizonyos frekvencia alatt nem lépnek ki elektronok a fémből, felette a kilépő elektronok energiája arányos a fény frekvenciájával.
4. A kilépő elektronok energiája a katód anyagától és a fény frekvenciájától függ csak, független a fényintenzitástól.

Ezek a jelenségek csak a *foton* – a fény energia adagjának bevezetésével (Einstein) magyarázhatóak. A fotonok az elektronokkal ütközve átadják teljes energiájukat, így lehetséges, hogy szinte azonnal áram tapasztalható (az ütközés ideje kb.  $10^{-8} \text{ s}$ ).

A fotonok energiáját az

$$E = h\nu \quad (5)$$

képlet adja. Ez az energia a kilépésre és gyorsításra fordítódik:

$$h\nu = E_{kin} + W \quad (6)$$

ahol  $E_{kin}$  az elektron kinetikus energiája ( $E_{kin} = m_e v^2 / 2$ ),  $W$  pedig a *kilépési munka*. A 6. képlet csak azokra az elektronokra vonatkozik, amelyek képesek a katód elhagyására. Ha a fotonenergia kisebb, mint  $W$  – azaz  $h\nu < W$  –, akkor az elektronok nem képesek kilépni a fémből, ezért létezik egy küszöbfrekvencia, amely alatt nem indul áram.

Szilárdtestekben a rácsrezgések, a fényhez hasonlóan szintén kvantált energiákkal rendelkeznek – ezeket *fotonnak* hívjuk.

## Az atomi nívók kvantáltsága

Az atomok kis helyet elfoglaló protonokat és – a H kivételével – neutronokat tartalmazó atommagból és

az atommag körül mozgást végző elektronokból állnak. Az elektrodinamikából ismert, hogy gyorsuló töltések sugárzással energiát veszítenek, tehát a klasszikus elmélet szerint az elektronoknak el kéne veszíteniük az energiájukat, és folyamatosan változó frekvenciájú fény emissziója mellett bele kéne zuhanniuk az atommagba.

Ezzel ellentétben az atomok stabil képződmények, színeképük pedig vonalas szerkezetű, vagyis csak meghatározott, diszkrét energiákon sugároznak. Ennek okára Bohr a következő magyarázatot adta: az elektronok csak meghatározott sugarú pályákon keringhetnek, és ezeken a pályákon nem sugároznak. Az atom csak akkor bocsát ki fényt, ha egy elektron egy magasabb energiájú pályáról egy alacsonyabbra ugrik át. Ez az átugrás pillanatszerű, és egy foton kibocsátásával jár. A kisugárzott foton frekvenciáját a *Bohr-féle frekvenciafeltétel* (2. posztulátum) határozza meg:

$$h\nu_{nm} = E_n - E_m \quad (7)$$

Bohr elmélete szerint az elektron pályáit az határozza meg, hogy az impulzusmomentuma kvantált, és  $\hbar$  egész számú többszöröse:

$$mvr = n\hbar \quad n = 1, 2, \dots \quad (8)$$

ahol  $\hbar = h/2\pi$ . Ez a *Bohr-féle kvantum- (vagy pálya-) feltétel* (1. posztulátum), a teljes fenti elmélet pedig a *Bohr-féle atommodell*.

*Példa:*

Határozzuk meg a Bohr-modell alapján a H atom energiaszintjeit!

Az elektront a proton és az elektron között fellépő erő tartja a pályán, tehát az elektronra ható Coulomb-erő adja a centripetális erőt. Az elektron mozgásegyenlete így:

$$\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r_n^2} = \frac{m_e v_n^2}{r_n}$$

ahol  $e$  az elektron töltése,  $n$  pedig a pálya sorszáma.

A Bohr-féle kvantum-feltételből (8):

$$m_e v_n r_n = n\hbar$$

A fenti két egyenletből:

$$r_n = 4\pi\epsilon_0 \frac{\hbar^2}{m_e e^2} n^2$$

$$v_n = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar n}$$

ahol  $n = 1, 2, 3, \dots$ . A keringő elektron teljes energiája potenciális és kinetikus energiájának összege:

$$E_n = \frac{1}{2} m_e v_n^2 - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r_n}$$

Az elektron mozgásegyenletét felhasználva:

$$E_n = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{2r_n}$$

Az  $r_n$  értékét korábban megkaptuk, így:

$$E_n = -\frac{m_e e^4}{2(4\pi\epsilon_0^2 \hbar^2)} \frac{1}{n^2} = -\frac{m_e e^4}{8\epsilon_0^2 \hbar^2} \frac{1}{n^2}$$

Ez az  $n$ -edik pályán keringő elektron energiája. Az  $|E_n|$  az *ionizációs energia* – ennyit közzölve az elektronnal, az elhagyhatja a pályát.

A Bohr-féle frekvencia feltételből (7) megkapható az  $n$ -edik és  $m$ -edik energiaszint közötti átmenet ( $n > m$ ) során kisugárzott fény frekvenciája:

$$\nu = \frac{m_e e^4}{8\epsilon_0^2 \hbar^3} \left( \frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right)$$

## Az impulzusmomentum kvantáltsága

*Zehmann-effektus:* Adott atomokból álló anyag spektrumvonalai mágneses térben annyi külön vonalra hasadnak fel, amennyi különböző beállítás lehetséges.

## A fény korpuszkuláris modellje

*Compton-effektus:* Ha egy nagy energiájú (pl. röntgen) sugárzás egy könnyű elemekből álló anyagon szóródik (olyan, amelyben lazán kötött elektronok vannak), akkor a szórt sugárzás frekvenciája kisebb lesz. A frekvencia csökkenése függ a szóródás irányától (a szórt és a beeső hullám által bezárt szögtől), és annál nagyobb, minél nagyobb ez a szög.

A Compton-effektus leírása csak korpuszkulárisan lehetséges, tehát az elektromágneses sugárzás anyaggal való kölcsönhatása csak  $E = h\nu$  energiájú és  $p = h\nu/c$  impulzusú részecskék feltételezésével magyarázható meg. Az elektromágneses sugárzásnak tehát a szabad terjedés során mutatott hullámtermészete mellett az anyaggal való kölcsönhatásban részecske sajátosságai vannak.

## Az anyag hullámtermészete

A fény energiája és frekvenciája közötti kapcsolat:

$$E = h\nu \quad (9)$$

A Compton-effektus tanulmányozása alapján a foton impulzusa:

$$p = \frac{h\nu}{c} = \frac{h}{\lambda} \quad (10)$$

A fényrészecskék – fotonok – az anyag elemi változatának tekinthetők, amelyek azonban nem alakítanak ki kötött állapotot.

*De Broglie részecske-hullám hipotézise* alapján a 10. egyenletet érvényesnek tekintjük más anyagi részecskékre is, vagyis bármely részecske jellemezhető egy  $\nu$  frekvenciával és  $\lambda$  hullámhosszal. Ez a feltevés igazolható, ha egy elektronnyalábot egy egykristály-rácsra bocsátunk, és az áthaladó, reflektálódó elektronok interferenciaképét rögzítjük. A rácson elhajlással kapott kép független a nyaláb intenzitásától – akkor is az interferenciaképet kapjuk, ha egyszerre csak egy elektron tartózkodik a diffrakciós térben. Ennek magyarázata az, hogy az elektronhullám a kétrészecskés kísérletben véletlenszerűen hol az egyik, hol a másik lyukon halad át (hiszen az elektron oszthatatlan).

## Az elektronokra felírható diszperziós reláció

Klasszikus mechanikában a kinetikus energia

$$E_{kin} = \frac{m_e v^2}{2} = \frac{p^2}{2m_e} \quad (11)$$

mivel  $p = mv$ .

De Broglie szerint

$$p = \frac{h}{\lambda} = \hbar k \quad (12)$$

ahol  $k = 2\pi/\lambda$  a *hullámszám* és kihasználtuk, hogy  $\hbar = h/(2\pi)$ .

Így

$$E_{kin} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e} \quad (13)$$

Ha a részecske erőmentes térben van, akkor összenergiája a kinetikus energia, amiről tudjuk, hogy az alábbi alakban adható meg:

$$E_{kin} = h \cdot \nu = h \cdot \frac{\omega}{2\pi} = \frac{h}{2\pi} \cdot \omega = \hbar\omega \quad (14)$$

Így tehát az összenergia:

$$E_{\bar{o}} = \hbar\omega \quad (15)$$

Így a 13. képletbe behelyettesítve (15)-t látható, hogy a részecske körfrekvenciája és a hullámszáma közötti kapcsolat:

$$\omega(k) = \frac{\hbar k^2}{2m_e} \quad (16)$$

Ez a *diszperziós reláció*, amely a hullám  $v_f$  *fázis-*, és  $v_{cs}$  *csoportsebessége* közötti viszonyt adja. Ha  $v_f \neq v_{cs}$ , akkor a lokalizált mikrorészecskét leíró hullámcsomag szétfolyik, diszperziót szenved. Az elektromágneses hullámok vákuumban nem diszpergálnak, ehhez diszperzív közegre van szükség. Az elektront leíró hullám azonban vákuumban is diszpergál: a  $k$  impulzusú elektron fázissebessége

$$v_f = \frac{\omega(k)}{k} = \frac{\hbar k}{2m_e} \quad (17)$$

csoportsebessége pedig

$$v_{cs} = \frac{d\omega}{dk} = \frac{\hbar k}{m_e} \quad (18)$$

Amennyiben potenciális energia is értelmezhető:

$$E_{\bar{o}} = \hbar\omega = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e} + V(x) \quad (19)$$

ahol  $V(x)$  a potenciális energia.

## A hullámfüggvény

Egy  $\lambda$  hullámhosszúságú függvény megadja a hozzátartozó impulzust is:  $p = h/\lambda$ . Ha két különböző  $\lambda$  hullámhosszúságú síkhullámot szuperponálunk, akkor az eredő hullám impulzusa  $p_1 = h/\lambda_1$  és  $p_2 = h/\lambda_2$  között lesz. Egy  $\Delta k$  hullámszám-intervallumból merített, elvben végtelen számú síkhullám szuperpozíciója olyan hullámcsomagot ad, amely csak egy  $\Delta x$  széles térrészben különbözik zérustól és a  $\Delta x$  és  $\Delta k$  között fennáll a

$$\Delta x \Delta k \geq 2\pi \quad (20)$$

összefüggés. A de Broglie összefüggés szerint, minél nagyobb  $\Delta k$ , annál nagyobb a hullámcsomag  $\Delta p$  impulzus határozatlansága:

$$\Delta k = \frac{\Delta p}{h} \quad (21)$$

A részecskét leíró  $\psi$  hullámfüggvény egymagában kódolja annak helyét (előfordulásának  $x$  intervallumát, helybizonytalanságát) és a mozgását jellemző impulzusát (ill. ennek határozatlanságát). A mikrorészecskék határozatlansági relációja is hullámsajátság.

A mikrorészecskéket leíró hullámfüggvény a mikrorészecskék mozgásegyenletének (a *Schrödinger-egyenlet*nek) a megoldása. Ha egy mikrorészecske vagy mikrorészecskenyaláb mind  $\psi_1$ , mind  $\psi_2$  állapotban létezik, akkor fizikailag ezek szuperpozíciója ( $\psi = \sum_i c_i \psi_i$ ) is lehetséges állapot a számára. Ez a *szuperpozíció elve* a kvantummechanikában.

A kvantummechanikai leírás akkor szükséges, ha a részecske tömege akkora, hogy térbeli lokalizáltságának és impulzushatározatlanságának szorzata éppen  $h$  nagyságrendjébe ( $h \cong 6,62 \cdot 10^{-34}$  Js) esik.

## A kvantummechanikai állapotleírás

Egy kvantummechanikai rendszer, mikrorészecske állapota teljes egészében leírható egy ( $\phi$  illetve  $\psi$ ) állapotfüggvénnyel.

### Az időfüggő Schrödinger-egyenlet

Az állapotegyenlet axióma – nem vezethető le.

Az elektront az alábbi síkhullám írja le:

$$\psi = A e^{-j(\omega t - kx)} = A e^{j(kx - \omega t)} \quad (22)$$

Differenciálással belátható, hogy

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = -j\omega \psi \quad (23)$$

illetve

$$\hat{\Delta} \psi = -k^2 \psi \quad (24)$$

ahol  $\hat{\Delta}$  a *Laplace-operátor* ( $\hat{\Delta} = \sum \frac{\partial^2}{\partial x_i^2}$ ).

Ebből kifejezhetőek a diszperziós relációban szereplő mennyiségek:

$$\hbar\omega = -\frac{\hbar}{j} \frac{1}{\psi} \frac{\partial \psi}{\partial t} \quad (25a)$$

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\psi} \hat{\Delta} \psi \quad (25b)$$

Helyettesítsük be a fenti eredményeket a 19. összefüggésbe:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \hat{\Delta} \psi + V(x)\psi = -\frac{\hbar}{j} \frac{\partial \psi}{\partial t} \quad (26)$$

Ez az *időfüggő Schrödinger-egyenlet*.

A Schrödinger-egyenletből az elektront leíró hullámfüggvényt determinisztikusan határozhatjuk meg. Az egyenlet megoldásai általánosan érvényesek.

Az egyenlet Descartes-koordinátákkal felírt alakja:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} \right) + V(x, y, z)\psi = -\frac{\hbar}{j} \frac{\partial \psi}{\partial t} \quad (27)$$

## A stacionárius Schrödinger-egyenlet

Konzervatív erőterben, amikor a potenciális energia csak a hely függvénye ( $V = V(\underline{r})$ ), a  $\psi(\underline{r}, t)$  állapotfüggvény felírható egy csak helytől, és egy csak időtől függő függvény szorzataként:

$$\psi(\underline{r}, t) = \phi(\underline{r}) \cdot \tau(t) \quad (28)$$

Ezt a 26. egyenletbe beírva:

$$\frac{1}{\phi} \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \hat{\Delta} \phi \right) + V = -\frac{1}{\tau} \frac{\hbar}{j} \frac{d\tau}{dt} \quad (29)$$

Mivel egyik oldal csak  $\underline{r}$ , a másik csak  $t$  függvénye, az egyenlőség minden  $\underline{r}$  és  $t$  értékre csak úgy állhat fenn, ha mindkét oldal tetszőleges helyen és időben ugyanazzal az  $E$  állandóval egyezik meg. Így a 29. egyenlet jobb oldala:

$$-\frac{1}{\tau} \frac{\hbar}{j} \frac{d\tau}{dt} = E \quad (30)$$

amelynek megoldása

$$\tau(t) = e^{-\frac{j}{\hbar} E t} \quad (31)$$

Ezt behelyettesítve a 29. egyenletbe:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \hat{\Delta} \phi + V(\underline{r}) \phi = E \phi \quad (32)$$

ami az *időfüggetlen (stacionárius) Schrödinger-egyenlet*. Állóhullámmal megadható kötött részecskék leírására alkalmas.

A  $V(\underline{r}) = 0$  esetre a 22. egyenlet helyfüggő része adódik:  $Ae^{j\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ , így a teljes megoldás  $E/\hbar = \omega$  (ld. a 15. összefüggést) helyettesítéssel valóban síkhullám, tehát a fentiekben szereplő  $E$  konstans a *mikrorészecske energiája*.

A stacionárius Schrödinger-egyenlet (32) *sajátérték egyenlet*, amelynek során egyidejűleg kell a  $\phi$  és az  $E$  értékét meghatározni.

A stacionárius Schrödinger-egyenlet teljes (általános) megoldása megkapható, ha az időfüggő rész kifejezését (31) behelyettesítjük a 28. egyenletbe:

$$\psi(\underline{r}, t) = \phi(\underline{r}) e^{-j\frac{E}{\hbar} t} \quad (33)$$

A teljes megoldásból egy adott térfogatbeli  *megtalálási valószínűség* meghatározható a  $\rho = \psi\psi^* = |\psi|^2$  kifejezést képezve:

$$\rho = \psi\psi^* = \phi(\underline{r})\phi^*(\underline{r}) e^{-j\frac{E}{\hbar} t} e^{j\frac{E}{\hbar} t} = \phi(\underline{r})\phi^*(\underline{r}) \quad (34)$$

amelyből látható, hogy a megtalálási valószínűség időfüggetlen (stacionárius).

A stacionárius Schrödinger-egyenletet az alábbi alakokban is szokás megadni:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \hat{\Delta} \phi + (V - E)\phi = 0 \quad (35)$$

$$\hat{\Delta} \phi + \frac{2m}{\hbar^2} [E - V(x, y, z)] \phi = 0 \quad (36)$$

## A kvantummechanikai kontinuitási egyenlet

Induljunk ki az egydimenziós, időfüggő Schrödinger-egyenletből:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + V(x)\psi + \frac{\hbar}{j} \frac{\partial \psi}{\partial t} = 0 \quad (37)$$

Vegyük a komplex konjugáltját:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi^*}{\partial x^2} + V(x)\psi^* - \frac{\hbar}{j} \frac{\partial \psi^*}{\partial t} = 0 \quad (38)$$

A 37. egyenletet szorozzuk meg  $\frac{j}{\hbar}\psi^*$ -al, a 38. egyenletet pedig  $\frac{j}{\hbar}\psi$ -vel jobbról, majd képezzük a különbségüket:

$$-\frac{\hbar j}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \psi^* + \frac{\hbar j}{2m} \frac{\partial^2 \psi^*}{\partial x^2} \psi + \frac{\partial \psi}{\partial t} \psi^* - \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \psi = 0 \quad (39)$$

Az itt szereplő összeg két utolsó tagja a  $\psi\psi^*$  mennyiség időderiváltja, az első két tag pedig átírható

$$-\frac{\hbar j}{2m} \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{\partial \psi}{\partial x} \psi^* - \frac{\partial \psi^*}{\partial x} \psi \right) \quad (40)$$

alakba, ugyanis a két derivált szorzatát tartalmazó tagok kiejtik egymást, így átrendezés után a 39. egyenlet:

$$\frac{\partial \psi^* \psi}{\partial t} + \frac{\hbar j}{2m} \frac{\partial}{\partial x} \left( \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial x} - \frac{\partial \psi}{\partial x} \psi^* \right) = 0 \quad (41)$$

A fenti egyenlet háromdimenziós alakja:

$$\frac{\partial \psi^* \psi}{\partial t} + \frac{\hbar j}{2m} ((\text{div grad} \psi^*) \psi - \psi^* (\text{div grad} \psi)) = 0 \quad (42)$$

Kihasználva, hogy a  $(\text{div grad} \psi^*) \psi - \psi^* (\text{div grad} \psi) = \text{div}(\psi \text{ grad} \psi^* - \psi^* \text{ grad} \psi)$  átalakítás elvégezhető, és bevezetve a *kvantummechanikai áramsűrűséget*:

$$\underline{J} = (\psi \text{ grad} \psi^* - \psi^* \text{ grad} \psi) \frac{\hbar j}{2m} \quad (43)$$

valamint a *kvantummechanikai valószínűségi sűrűséget* (az elektron egy adott pontban való megtalálási valószínűsége):

$$\rho = \psi^* \psi \quad (44)$$

az alábbi alakot ölti az egyenlet:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div} \underline{J} = 0 \quad (45)$$

Ez a *kvantummechanikai kontinuitási egyenlet*.

A Born, Jordan, Bohr féle értelmezés szerint a

$$\int_V \psi \psi^* dV \quad (46)$$

integrál annak a valószínűségét adja meg, hogy egy mikrorészecske koordinátái az adott  $V$  térfogatba esnek. Mivel a sajátérték egyenletek lineárisak (ha  $\psi$  megoldás, akkor  $C\psi$  is az ( $C \in \mathbb{C}$ )), így megfelelő választással elérhető, hogy

$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \psi \psi^* dV = 1 \quad (47)$$

Az ezen egyenletet kielégítő állapotfüggvényt *normált állapotfüggvénynek* nevezzük.

*Megjegyzés:*

Ha  $\psi$  egy normált megoldás, akkor ugyanazon  $C$  mellett  $\psi e^{j\delta}$  is az, hiszen a  $\psi\psi^*$  képzések  $e^{j\delta} \cdot e^{-j\delta} = 1$  ( $\delta \in \mathbb{R}$ ).

A *normálási feltétel* (47) fizikai értelmezése az, hogy a „teljes térben” egy részecske megtalálási valószínűsége 1.

## Az Ehrenfest-tétel

Az elektron mikrofizikáját leíró egyenlet bizonyos feltételek esetén a klasszikus leírást adja vissza – ez teremt kapcsolatot a klasszikus- és a kvantumfizika között.

*Ehrenfest tétele* kimondja, hogy egy mikrorészecske (pl. egy elektron) tömegközéppontja úgy mozog, mint egy olyan tömegpont, amelynek tömege a részecske tömegével egyezik meg és rá a külső erők  $\psi^*\psi$  sűrűségeloszlásra vett átlaga hat.

## A $\psi$ állapotfüggvény: reguláris függvény

A Schrödinger-egyenlet másodrendű parciális differenciálegyenlet. Matematikailag végtelen sok, általában komplex függvény megoldása lehet. A kvantummechanikában csak akkor kapunk fizikailag értelmes megoldásokat, ha a *reguláris függvényekre* korlátozódunk. Egy függvény reguláris, ha

1. valós változók egyértékű függvénye
2. valós változóknak mindenütt folytonos függvénye
3. kétszer folytonosan differenciálható
4. négyzetesen integrálható.

Ez utóbbi azt jelenti, hogy a

$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \psi\psi^* dx dy dz \triangleq \langle \psi | \psi \rangle \quad (48)$$

integrál korlátos.

A negyedik feltételből rendszerint az is következik, hogy  $\psi$  csak egy véges tartományban tér el jelentősen zérustól, a végtelen felé haladva értéke zérushoz tart.

A 48. egyenletben bevezettünk a  $\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle$  jelölést, amelyet két reguláris függvény skaláris szorzatának nevezünk. Ennek oka, hogy az integrál tulajdonságai hasonlítanak a vektorok skalár szorzatának tulajdonságaira:

- $\langle \phi | \phi \rangle = 1$
- $\langle \phi | \psi_1 + \psi_2 \rangle = \langle \phi | \psi_1 \rangle + \langle \phi | \psi_2 \rangle$
- $\langle \phi | \lambda \psi \rangle = \lambda \langle \phi | \psi \rangle$
- $\langle \lambda \phi | \psi \rangle = \lambda^* \langle \phi | \psi \rangle$

Ha  $\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle = 0$ , akkor  $\psi_1$  és  $\psi_2$  *ortogonális*. Általánosan ezt a következőképpen fogalmazhatjuk meg:

$$\langle \phi_i | \phi_j \rangle = \delta_{ij} \quad (49)$$

ahol  $\delta_{ij}$  az ún. *Kronecker-delta*:

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 1 & i = j \\ 0 & i \neq j \end{cases} \quad (50)$$

## A kvantált fizikai mennyiségek leírása operátorokkal

A folytonos értékű mennyiségekhez (helykoordináta, idő) a klasszikus fizikában folytonos és differenciálható függvényeket használunk.

A kvantummechanikában a fizikai mennyiségek leírására *operátorokat* ( $\hat{O}$ ,  $\hat{A}$ , ...) használunk. Az operátor olyan matematikai mennyiség, amely bizonyos függvényekhez más függvényeket rendel. Például az  $\hat{O} = d/dx$  operátor az  $x^4$  függvényre hatva a  $4x^3$  függvényt eredményezi.

Az operátorok bizonyos függvényeket a konstansszorosukba visznek át – például az  $\hat{O} = d^2/dx^2$  operátor a  $\sin 2x$  függvényre hatva a  $-4 \sin 2x$  függvényt eredményezi, vagyis az eredeti függvény  $-4$ -szeresét. Amikor egy operátor adott függvényre hatva, azt az *állandósorosába* viszi át, az operátoregyenletet *sajátérték egyenletnek*, az adott  $\phi$  függvényt az  $\hat{O}$  operátor *sajátfüggvényének*, a konstans ( $k$ ) pedig az  $\hat{O}$  *sajátértékének* nevezzük:

$$\hat{O}\phi = k\phi \quad (k \in \mathbb{C}) \quad (51)$$

A fenti példából is nyilvánvaló, hogy egy operátornak nem minden függvény sajátfüggvénye, és ha egy függvény sajátfüggvény, akkor a sajátérték nem lehet tetszőleges.

Ahogy a klasszikus fizika függvényeire, úgy az operátorokra is bizonyos korlátozások érvényesek. A fizikában csak *hermitikus operátorokat* használunk, amelyek:

1. *lineárisak*:

$$\hat{O}(\phi_1 + \phi_2) = \hat{O}\phi_1 + \hat{O}\phi_2$$

illetve

$$\hat{O}(k\phi) = k(\hat{O}\phi)$$

(ez biztosítja a szuperpozíció érvényesülését).

2. *sajátértékei valósak*, mivel a fizikai mennyiségek mért értékei mindig valósak ( $k \in \mathbb{R}$ ).

Egy operátor értéke egy  $\psi$  állapotban a következőképpen számolható ki:

$$\langle \psi | \hat{O} | \psi \rangle = \int \psi^* \hat{O}\psi \, d\mathbf{r} = \langle \psi | \hat{O}\psi \rangle \quad (52)$$

Az  $\hat{O}$  operátor *adjungáltja* ( $\hat{O}^+$ ) a következőképpen van definiálva:

$$\langle \psi | \hat{O}\psi \rangle = \langle \hat{O}^+\psi | \psi \rangle \quad (53)$$

Egy operátor *önadjungált*, ha  $\hat{O}^+ = \hat{O}$ , vagyis

$$\langle \psi | \hat{O}\psi \rangle = \langle \hat{O}\psi | \psi \rangle \quad (54)$$

Ha egy operátorra teljesül, hogy

$$\forall \psi_1, \psi_2 \in \mathcal{D}_O : \langle \psi_1 | \hat{O}\psi_2 \rangle = \langle \hat{O}\psi_1 | \psi_2 \rangle \quad (55)$$

$$x \rightarrow \hat{x} = x \quad (61a)$$

$$y \rightarrow \hat{y} = y \quad (61b)$$

$$z \rightarrow \hat{z} = z \quad (61c)$$

ahol  $\mathcal{D}_O$  az  $\hat{O}$  operátor értelmezési tartománya, vagyis az a tér, ahol az operátor hat, akkor az operátor hermitikus.

A tény, hogy a hermitikus operátorok sajátértékei valóságosak azért fontos, mert a kvantált fizikai mennyiségek mérésekor kapott mérési értékek a mennyiséghez rendelt operátor egy-egy sajátértékének felelnek meg. Más szóval egy fizikai mennyiség mérésekor lehetséges (várható) érték az őt leíró operátor  $k_1, k_2, \dots$  sajátértékeinek sorozata ( $\hat{O}\phi_1 = k_1\phi_1, \hat{O}\phi_2 = k_2\phi_2, \hat{O}\phi_3 = k_3\phi_3 \dots$ , ahol  $\phi_1, \phi_2, \phi_3, \dots$  az  $\hat{O}$  operátor sajátfüggvényei).

Ha egy mérés egy adott  $\psi(t)$  állapotú rendszeren történik, ahol  $\psi(t)$  állapotfüggvény egyúttal az adott  $\hat{O}$  operátornak sajátfüggvénye, akkor a mérés biztosan egy konkrét sajátértékhez vezet. Ilyenkor az állapotfüggvényt az adott operátor *sajátállapot*ának nevezzük, és a mérés során állapotváltás nem történik. A rendszer ilyen állapotát *tiszta állapot*nak hívjuk.

Ha az állapotfüggvény nem egyezik meg az adott operátor egyik sajátfüggvényével sem, akkor az állapotot *kevert állapot*nak vagy *szuperponált állapot*nak hívjuk, mely előáll az adott operátor  $\phi_i$  sajátfüggvényeinek lineáris szuperpozíciójából (lineárkombinációjából):

$$\psi = \sum_i c_i \phi_i \quad (56)$$

Egy sok kevert állapotban lévő részecskét tartalmazó rendszeren végzett mérés során az egyes sajátértékek  $|c_i|^2$ -el súlyozott középértéket mérjük, a  $|c_i|^2$ -eknek megfelelő eloszlásban, határozatlansággal. Annak valószínűsége tehát, hogy egy szuperponált állapotban  $k_i$  sajátérték lesz a mérés eredménye:

$$W(k_i) = |c_i|^2 = |\langle \phi_i | \psi \rangle|^2 \quad (W \in [0, 1]) \quad (57)$$

A  $c_i$ -k általában komplex számok és ortonormált  $\phi_i$  sajátfüggvényekre:

$$\sum |c_i|^2 = 1 \quad (58)$$

Kevert állapotban tehát egy értéket egy adott szórásal mérhetünk, tiszta- (saját-) állapotban egy operátor szórása nulla – mindig ugyanazt az értéket mérhetjük.

## Az egyes mennyiségek operátorai

Feltelessük meg az egyes fizikai mennyiségeknek az alábbi operátorokat:

$$p_x \rightarrow \hat{p}_x = \frac{\hbar}{j} \frac{\partial}{\partial x} \quad (59a)$$

$$p_y \rightarrow \hat{p}_y = \frac{\hbar}{j} \frac{\partial}{\partial y} \quad (59b)$$

$$p_z \rightarrow \hat{p}_z = \frac{\hbar}{j} \frac{\partial}{\partial z} \quad (59c)$$

$$t \rightarrow \hat{t} = t \quad (60)$$

$$V(x) \rightarrow \hat{V}(x) = V(x) \quad (62)$$

Ekkor bevezethetjük a *Hamilton-operátort*:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{V}(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \hat{V}(x) \quad (63)$$

Így az időfüggetlen Schrödinger-egyenlet (32) az alábbi sajátérték egyenlet alakba írható fel:

$$\hat{H}\psi = E\psi \quad (64)$$

Látható, hogy a Hamilton-operátor sajátértéke az  $E$  összenergia – e tulajdonsága miatt az időfüggetlen Schrödinger-egyenletet *Schrödinger sajátérték egyenlet*nek is hívják.

Az operátorokkal való műveletekre az alábbi szabályok vonatkoznak:

1.  $(\hat{O}_1 + \hat{O}_2)\phi = \hat{O}_1\phi + \hat{O}_2\phi$
2.  $\hat{O}_1\hat{O}_2\phi = \hat{O}_1(\hat{O}_2\phi)$
3.  $\hat{A}\hat{B} \neq \hat{B}\hat{A}$

A harmadik pont szerint az operátorok szorzása nem felcserélhető. Ez azt jelenti, hogy az

$$[\hat{A}, \hat{B}] \equiv \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} \quad (65)$$

operátor nem zérus. Ezt az operátorkifejezést a benne szereplő operátorok *kommutátor*ának nevezzük, mivel az operátorok felcserélhetőségére (kommutációjára) nézve ad információt.

Az impulzus és a helykoordináta operátorainak kommutátora nagy jelentőséggel bír:

$$[\hat{p}_x, \hat{x}] = \hat{p}_x\hat{x} - \hat{x}\hat{p}_x = \frac{\hbar}{j} \quad (66)$$

Ez a  $\hat{p}_x$  és  $\hat{x}$ -re vonatkozó *Heisenberg-féle felcserélési reláció*.

Két operátornak akkor és csak akkor van közös, egyidejű sajátfüggvénye, ha kommutátoruk nulla. Mivel egy fizikai mérés sajátállapotba vitelt jelent, ezért ha két mennyiség operátorainak kommutátora nem nulla, akkor a mennyiségeket egyidejűleg lehetetlen megmérni. Ezt fejezi ki a *határozatlansági reláció*.

Az időfüggő Schrödinger-egyenletet (26) a Hamilton-operátorral felírva:

$$\hat{H}\psi = -\frac{\hbar}{j} \frac{\partial \psi}{\partial t} \quad (67)$$

A fenti egyenlet baloldala az energiát adja meg ( $E\phi$ -vel egyenlő), ezért a jobboldalának is azt kell megadnia.

Tehát az energiának két operátort is megfeleltethetünk: egyrészt a  $\hat{H}$ -t, másrészt az

$$\hat{E} = -\frac{\hbar}{j} \frac{\partial}{\partial t} \quad (68)$$

operátort, amelyeknek egyenlőeknek kell lenniük a fizikai mennyiségek egyértelmősége miatt.

1. táblázat A Heisenberg-féle felcserélési és határozatlansági relációk összefoglalása

Felcserélési reláció	Határozatlansági reláció
$\hat{p}_x \hat{x} - \hat{x} \hat{p}_x = \frac{\hbar}{j}$	$\Delta x \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}$
$\hat{p}_y \hat{y} - \hat{y} \hat{p}_y = \frac{\hbar}{j}$	$\Delta y \Delta p_y \geq \frac{\hbar}{2}$
$\hat{p}_z \hat{z} - \hat{z} \hat{p}_z = \frac{\hbar}{j}$	$\Delta z \Delta p_z \geq \frac{\hbar}{2}$
$\hat{E} \hat{t} - \hat{t} \hat{E} = \frac{\hbar}{j}$	$\Delta E \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}$
$\hat{L}_x \hat{L}_y - \hat{L}_y \hat{L}_x = j \hbar \hat{L}_z$	$\Delta L_x \Delta L_y \geq \frac{\hbar}{2}  L_z $
$\hat{L}_y \hat{L}_z - \hat{L}_z \hat{L}_y = j \hbar \hat{L}_x$	$\Delta L_y \Delta L_z \geq \frac{\hbar}{2}  L_x $
$\hat{L}_z \hat{L}_x - \hat{L}_x \hat{L}_z = j \hbar \hat{L}_y$	$\Delta L_z \Delta L_x \geq \frac{\hbar}{2}  L_y $

### A fizikai mennyiségek várható értékének kiszámítása

Mint azt korábban láttuk, ha egy rendszert jellemző  $\psi$  állapotfüggvény az  $\hat{O}$  operátor valamelyik sajátfüggvényével megegyezik ( $\psi = \phi_n$ ), akkor az elvégzett mérés eredménye pontosan (határozatlanság nélkül) a  $\phi_n$ -hez tartozó  $k_n$  sajátérték.

Például az energia számításakor a  $\hat{H}\phi_1 = E_1\phi_1$  egyenletet szorozzuk balról  $\phi_1^*$ -al és integráljuk a  $V$  térre:

$$\int_V \phi_1^* \hat{H} \phi_1 dV = E_1 \underbrace{\int_V \phi_1^* \phi_1 dV}_{=1} = E_1 \quad (69)$$

ahol kihasználtuk, hogy  $E_1$  konstans, és így kiemelhető az integrál alól. A 69. képlet egy másik írásmódja:  $\langle \phi_1 | \hat{H} \phi_1 \rangle$ .

Ha az állapot kevert, azaz

$$\psi = \sum_i c_i \phi_i \quad (70)$$

akkor  $N$  darab azonos rendszeren végzett mérésből a különböző  $E_i$  energiaértékeknek  $|c_i|^2$ -el súlyozott átlagát mérjük:

$$\langle E \rangle = \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{i=1}^N E \frac{N_i}{N} = \sum_{i=1}^N E_i \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{N_i}{N} = \sum_{i=1}^N E_i W(E_i) \quad (71)$$

ahol  $N$  a mérések száma és  $W(E_i)$  annak a valószínűsége, hogy egy rendszeren  $E_i$ -t mérünk. Ortonormált sajátfüggvényekre

$$W(E_i) = |c_i|^2 = c_i^* c_i \quad (72)$$

és

$$\sum_i W(E_i) = \sum_i c_i^* c_i = 1 \quad (73)$$

ahol  $c_i \in \mathbb{C}$ .

## Az energia sajátérték egyenletek megoldása

### Az egydimenziós potenciáldoboz megoldása „állóhullám” módszerrel

A dobozon kívül a potenciált tekintjük végtelen nagynak, így oda az elektron sosem jut ki. Ott tehát a  $\psi$  hullámfüggvény azonosan zérus értékű. A dobozon belül az elektron szabadon mozog, így a hullámfüggvény

$$\psi = e^{j(kx - \frac{E}{\hbar}t)} \quad (74)$$

alakú, illetve ilyen alakú függvények lineárkombinációja.

Mivel a hullámfüggvény folytonos, és a dobozon kívül nulla, ezért a doboz falán is nullának kell lennie. Azonban a 74. függvény sehol sem veszi fel a nulla értéket, így ilyen függvények olyan lineárkombinációját kell előállítanunk, amelyek a doboz határán zérus értéket adnak. Ilyen például a következő alak:

$$\psi = 2jAe^{j(kx + \frac{E}{\hbar}t)} + 2jAe^{-j(kx - \frac{E}{\hbar}t)} \quad (75)$$

amely az Euler-tétel alapján átírható:

$$\psi = A \sin(kx) e^{j \frac{E}{\hbar}t} \quad (76)$$

Az időfüggetlen Schrödinger-egyenlet a doboz belsejére felírva:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{d^2 \phi}{dx^2} = E \phi \quad (77)$$

A fenti egyenletbe helyettesítsük be a 76. egyenlet időfüggetlen részét:

$$\frac{\hbar^2}{2m_e} k^2 \sin(kx) = E \sin(kx) \quad (78)$$

amiből

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e} \quad (79)$$

tehát az energiát (13) adja meg, a különbség az, hogy a hullámszám nem lehet tetszőleges értékű, hiszen biztosítani kell, hogy az állapotfüggvény a határokon nulla legyen. Az  $x = 0$  esetben ez teljesül, azonban  $x = L$ -re is teljesülnie kell:

$$\sin(kL) = 0 \quad (80)$$

vagyis

$$\begin{aligned} kL &= n & n &= 1, 2, 3, 4, \dots \\ k &= \frac{\pi \cdot n}{L} \end{aligned} \quad (81)$$

A 81. egyenlet alapján (79):

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2m_e L^2} = E_1 \cdot n^2 \quad n = 1, 2, 3, 4, \dots \quad (82)$$

Azt kaptuk, hogy az energia csak  $E_1$  egész-számú többszöröse lehet. Az elektron energiája és hullámfüggvényének alakja között kapcsolat van. A hullámfüggvény állóhullám alakú lesz egyre több csomóponttal. Minél nagyobb a csomópontok száma, annál nagyobb az energia.

Azt, hogy az elektron hullámfüggvénye éppen az  $E_n$ -nek megfelelő  $\phi_n(x)$ , a kvantummechanikában úgy mondjuk, hogy „az elektron az  $n$ -edik energiaszinten tartózkodik”.

Az  $n$ -edik energiaszinten tartózkodó elektron hullámfüggvénye:

$$\phi_n(x) = A_n \sin \frac{n\pi x}{L} \quad (83)$$

Az  $A_n$  együtthatót a 47. egyenlet alapján határozhatjuk meg a következő feltételekkel: a dobozon kívül  $\psi = 0$ , és  $\psi^*\psi = \phi^*\phi$ :

$$\begin{aligned} \int_0^L A_n^* A_n \sin^2 \frac{n\pi x}{L} dx &= |A_n|^2 \int_0^L \frac{1 - \cos^2 \frac{n\pi x}{L}}{2} dx \\ &= |A_n|^2 \frac{1}{2} L \end{aligned} \quad (84)$$

innen a normálási feltétellel:

$$A_n = \sqrt{\frac{2}{L}} \quad (85)$$

tehát

$$\phi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{n\pi x}{L} \quad (86)$$

Ha  $\phi_n^* \phi_n$  integrálja helyett  $\phi_n^* \phi_m$  ( $n \neq m$ ), akkor eredményül zérust kapnánk. Általánosan igaz, hogy ha  $\psi_1$  és  $\psi_2$  a Schrödinger-egyenlet két, különböző energiához tartozó megoldása, akkor a teljes térre vett integrál:

$$\int \psi_n^* \psi_m dx = \begin{cases} 0 & \text{ha } n \neq m \\ 1 & \text{ha } n = m \end{cases} \quad (87)$$

vagyis két, különböző energiaszinthez tartozó hullámfüggvény skalárszorzata nulla, illetve általánosan: két független sajátfüggvény mindig ortogonális egymásra.

## Az egydimenziós potenciáldoboz megoldása Schrödinger-egyenlettel

Adott az alábbi potenciálgödör:

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & \text{ha } x < 0, \text{ vagy } x > L \\ 0 & \text{ha } 0 \leq x \leq L \end{cases} \quad (88)$$

tehát három térrészünk van: I.  $x < 0$ , II.  $0 \leq x \leq L$ , III.  $x > L$ .

Az  $x$  szerinti deriválást vesszővel jelölve a Schrödinger-egyenlet a három tartományban:

$$\begin{aligned} \psi_I'' + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V_0) \psi_I &= 0 & (x < 0) \\ \psi_{II}'' + \frac{2m}{\hbar^2} E \psi_{II} &= 0 & (0 \leq x \leq L) \\ \psi_{III}'' + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V_0) \psi_{III} &= 0 & (x > L) \end{aligned} \quad (89)$$

Bevezethetjük az alábbi jelöléseket:

$$\alpha^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - E), \quad \beta^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E \quad (90)$$

amelyekkel (89):

$$\begin{aligned} \psi_I'' &= \alpha^2 \psi_I \\ \psi_{II}'' &= -\beta^2 \psi_{II} \\ \psi_{III}'' &= \alpha^2 \psi_{III} \end{aligned} \quad (91)$$

A megoldás az egyes tartományokban:

$$\begin{aligned} \psi_I &= A_I e^{\alpha x} + B_I e^{-\alpha x} & (x < 0) \\ \psi_{II} &= A_{II} \cos \beta x + B_{II} \sin \beta x & (0 \leq x \leq L) \\ \psi_{III} &= A_{III} e^{\alpha x} + B_{III} e^{-\alpha x} & (x > L) \end{aligned} \quad (92)$$

Megjegyzés:

Egy  $x'' = \alpha^2 x$  alakú differenciálegyenlet (ld.  $\psi_I$  és  $\psi_{III}$  esetét) általános megoldása:

$$Ae^{\alpha x} + Be^{-\alpha x}$$

ugyanis

$$\begin{aligned} (Ae^{\alpha x} + Be^{-\alpha x})'' &= \\ &= (A\alpha e^{\alpha x} + B\alpha e^{-\alpha x})' = \\ &= A\alpha^2 e^{\alpha x} + B\alpha^2 e^{-\alpha x} = \\ &= \alpha^2 (Ae^{\alpha x} + Be^{-\alpha x}) \end{aligned}$$

Egy  $x'' = -\beta^2 x$  alakú differenciálegyenlet (ld.  $\psi_{II}$  esetét) általános megoldása:

$$Ae^{j\beta x} - jBe^{j\beta x}$$

ugyanis

$$\begin{aligned} (Ae^{j\beta x} - jBe^{j\beta x})'' &= \\ &= (j\beta Ae^{j\beta x} + B\beta e^{j\beta x})' = \\ &= -\beta^2 Ae^{j\beta x} + j\beta^2 Be^{j\beta x} = \\ &= -\beta^2 (Ae^{j\beta x} - jBe^{j\beta x}) \end{aligned}$$

A megoldás általános alakja tehát  $Ae^{j\beta x} - jBe^{j\beta x}$ , azonban ez egy komplex függvény, fizikai értelme csupán a valós részének van. Felhasználva a

$$e^{j\beta x} = \cos \beta x + j \sin \beta x$$

összefüggést (Euler-tétel), a fenti megoldást felírhatjuk  $\sin$  és  $\cos$  függvények összegeként, majd ennek képezhetjük a valós részét:

$$\begin{aligned} \Re \{Ae^{j\beta x} - jBe^{j\beta x}\} &= \\ &= \Re \{A(\cos \beta x + j \sin \beta x) - B(j \cos \beta x - \sin \beta x)\} = \\ &= A \cos \beta x + B \sin \beta x \end{aligned}$$

A teljes térbeli  $\psi$  akkor lesz reguláris, ha teljesíti a regularitás feltételeit. A négyzetes integrálhatóság feltétele megköveteli a korlátosságot, ezért az  $X \cdot e^{+Y \cdot x}$  alakú tagok  $X$  együtthatójának zérusnak kell lennie:

$$B_I = A_{III} = 0 \quad (93)$$

A reguláris függvényekre vonatkozó folytonossági feltétel miatt a tartományok határán meg kell egyezniük a megoldásoknak:

$$\psi_I(0) = \psi_{II}(0) \quad (94a)$$

$$\psi_{II}(L) = \psi_{III}(L) \quad (94b)$$

Így (93) és (94a) alapján:

$$A_I = A_{II} \quad (95)$$

hiszen  $x = 0$ -ban  $A_I e^{\alpha x} = A_I$  és  $A_{II} \cos \beta x + B_{II} \sin \beta x = A_{II} (\cos 0 = 1, \sin 0 = 0)$ . A továbbiakban a feltételek hasonló módszerrel lettek meghatározva.

Valamint (93) és (94b) alapján:

$$A_{II} \cos \beta L + B_{II} \sin \beta L = B_{III} e^{-\alpha L} \quad (96)$$



Mivel a  $\psi$  függvénynek kétszer differenciálhatónak kell lennie, a tartomány határain a deriváltaknak is egyenlőnek kell lenniük:

$$A_I \alpha = B_{II} \beta \quad (97)$$

valamint

$$-A_{II} \beta \sin \beta L + B_{II} \beta \cos \beta L = -B_{III} \alpha e^{-\alpha L} \quad (98)$$

Tekintsük most a potenciáلكád elfajult esetét: a potenciálgödört, ahol a falak végtelen magasak. Ekkor a gödrön kívül az elektron hullámfüggvénye biztosan nulla. Így a korábbi három tartományra felírt egyenlet közül az első és a harmadik azonosan nulla, a hullámfüggvény a gödörben:

$$\psi = A \cos \beta x + B \sin \beta x \quad (99)$$

A határfeltétel most az, hogy a gödör széleinél a függvénynek zérus értéket kell felvennie. Az  $x = 0$  esetben

$$A \cos 0 + B \sin 0 = 0 \quad (100)$$

amiből  $A = 0$  adódik.

A gödör másik szélén ( $x = L$ ):

$$B \sin \beta L = 0 \quad (101)$$

amiből következik, hogy

$$\beta L = n\pi \quad (102)$$

Ebből

$$\beta = \frac{n\pi}{L} \quad (n \in \mathbb{Z}^+) \quad (103)$$

A  $\beta$  konstans valójában a  $k$  hullámszám, így a

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (104)$$

egyenletbe (13) behelyettesítve a 103. egyenletben megkapott összefüggést:

$$E = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} n^2 \quad (105)$$

Az elektron hullámfüggvényére pedig az alábbi egyenletet kaptuk:

$$\psi(x) = B \sin \frac{n\pi}{L} x \quad (106)$$

amiből  $B$  a  $\int \psi^* \psi = 1$  normálási feltételből meghatározható:

$$B = \sqrt{\frac{2}{L}} \quad (107)$$

*Megjegyzés:*

Írjuk fel a normálási feltételt a 106. egyenletre:

$$\int_V |\psi_n|^2 dV = \int_0^L B^2 \sin^2 kx dx = 1$$

ahol  $k = \beta = n\pi/L$ .

Kihasználjuk, hogy

$$\int \sin^2 x dx = \frac{1}{2} \int (1 - \cos 2x) dx = \frac{1}{2} \left( x - \frac{\sin 2x}{2} \right)$$

Így a megtalálási valószínűség:

$$\begin{aligned} & \int_0^L B^2 \sin^2 kx dx = \\ &= B^2 \frac{1}{2} \left| x - \frac{\sin 2x}{2} \right|_0^L = \\ &= B^2 \frac{1}{2} \left( L - \frac{\sin 2L}{2} - 0 + \frac{\sin 0}{2} \right) \end{aligned}$$

A határfeltételek között szerepelt, hogy  $\sin kL = 0$ , így a fenti egyenlet:

$$\begin{aligned} & B^2 \frac{1}{2} \left( L - \frac{\sin 2L}{2} - 0 + \frac{\sin 0}{2} \right) = \\ &= B^2 \frac{L}{2} \end{aligned}$$

Ezzel a normálási feltétellel:

$$B^2 \frac{L}{2} = 1$$

amiből:

$$B = \sqrt{\frac{2}{L}}$$

Az elektron hullámfüggvényére tehát a korábban (86) már látott:

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{n\pi x}{L} \quad (108)$$

adódik, amely három dimenzióban:

$$\psi_{n_x, n_y, n_z} = \sqrt{\frac{8}{L^3}} \sin \frac{n_x \pi x}{L} \sin \frac{n_y \pi y}{L} \sin \frac{n_z \pi z}{L} \quad (109)$$

ahol az  $n_x, n_y, n_z$  kvantumszámok az  $1, 2, 3, \dots$  értékeket vehetik fel.

A megfelelő energiakifejezés:

$$E_{n_x, n_y, n_z} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2) \quad (110)$$

Alapállapotban  $n_x = n_y = n_z = 1$ , így az alapállapot energiája:  $E_0 = E_{111} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2}$ .

A 109. és a 110. egyenletekből következik, hogy léteznek olyan állapotok, amelyekhez teljesen különböző hullámfüggvény tartozik, azonban az energiáik megegyeznek. Az ugyanazon az energiához tartozó, különböző állapotfüggvényű állapotokat *elfajult*, idegen szóval *degenerált állapot*oknak nevezzük. Az elfajulás oka lehet például az, hogy egy szimmetrikus rendszerben egyenrangúak az irányok.

## A lineáris, harmonikus oszcillátor energiája

A harmonikus oszcillátorban egy testre ható erők arányosak az egyensúlyi ponttól való távolsággal:

$$F = -D \cdot x \quad (111)$$

Newton második tételéből

$$-D \cdot x = m \frac{d^2 x}{dt^2} \quad (112)$$

amiből

$$\frac{d^2 x}{dt^2} + \frac{D}{m} x = 0 \quad (113)$$

A 113. differenciálegyenlet megoldása:

$$x(t) = A \cos(\omega t + \varphi) \quad (114)$$

ahol  $\omega$  az oszcillátor sajátfrekvenciája:

$$\omega = \sqrt{\frac{D}{m}} \quad (115)$$

Az oszcillátor energiája klasszikusan:

$$E = E_{pot} + E_{kin} = \frac{1}{2}Dx^2 + \frac{1}{2}mv^2 = \frac{1}{2}\frac{p_x^2}{m} + \frac{1}{2}Dx^2 \quad (116)$$

Innen

$$E = \frac{1}{2m}(p_x^2 + m^2\omega^2x^2) \quad (117)$$

A határozatlansági relációt ( $\Delta x \Delta p_x = \hbar/2$ ) behelyettesítve

$$E_0 = \frac{1}{2m} \left( \frac{\hbar^2}{4\Delta x^2} + m^2\omega^2x^2 \right) \quad (118)$$

A minimális energiát (118) minimumából kapjuk meg:

$$\frac{dE}{d(\Delta x)} = \frac{1}{2m} \left( -2\frac{\hbar^2}{4\Delta x^3} + 2m^2\omega^2\Delta x \right) = 0 \quad (119)$$

Az egyenletet megoldva:

$$4m^2\omega^2\Delta x^4 = \hbar^2 \quad (120)$$

ahonnan  $\Delta x^2$ -et a 118. egyenletbe helyettesítve:

$$E_0 = \frac{1}{2m} \left( \frac{\hbar}{2}m\omega + \frac{\hbar}{2}m\omega \right) = \frac{1}{2}h\nu \quad (121)$$

A fenti egyenletből következik, hogy a lineáris, harmonikus oszcillátor alapállapotában nem nulla az energiája – ez a *zérus ponti energia*. Ez azt jelenti, hogy egy rezgő rendszer semmilyen állapotban, még az abszolút 0 fokon sem lehet tökéletesen nyugalomban.

Vizsgáljuk meg pontosabban a harmonikus oszcillátorokat az egydimenziós stacionárius Schrödinger-egyenlet (32) segítségével. A Schrödinger-egyenletbeli potenciális energia:

$$V(x) = \frac{D}{2}x^2 = \frac{1}{2}m\omega^2x^2 \quad (122)$$

Így a stacionárius Schrödinger-egyenlet

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2x^2\psi(x) = E\psi(x) \quad (123)$$

Új jelöléseket vezetünk be:

$$\xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x \quad (124)$$

$$\eta = \frac{2E}{\hbar\omega} \quad (125)$$

Így a 123. egyenlet:

$$\frac{d^2\psi}{d\xi^2} + (\eta - \xi^2)\psi = 0 \quad (126)$$

Ezt a differenciálegyenletet megoldva azt kapjuk, hogy az oszcillátor csak diszkrét energiaszinteket vehet fel:

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega \quad (127)$$

ami alapján  $E_0 = \hbar\omega/2$  a nullponti energia, ahogyan azt feljebb már láttuk. Ha a lineáris oszcillátor egy magasabb energiaszintről egy alacsonyabbra ugrik, akkor egy  $\hbar\omega = h\nu$  energiájú fotont bocsát ki.

## Az alagúteffektus

Tekintsünk egydimenzióban egy potenciált, amely egy véges tartományon valamekkora pozitív érték, azon kívül mindenütt nulla. Ha az egyik irányból megérkezik hozzá egy elektron, akkor a klasszikus fizika szerint, ha az elektron energiája nagyobb, mint a gát magassága, akkor átjut rajta, ha nem akkor visszaverődik róla.

Valójában a gát magasságánál kisebb energiájú elektronok is átjuthatnak valamekkora valószínűséggel. Ha megoldjuk a Schrödinger-egyenletet a három tartományra, akkor azt kapjuk, hogy a gátban a hullámfüggvény exponenciálisan csökken. Ha tehát elegendően keskeny a gát, akkor a végét elérve a hullámfüggvény még nem csökkent le zérusra, tehát az elektron észlelhető az érkezésével ellentétes oldalon. Mivel az elektron a kis energiája miatt nem mehetett át a gát felett, ezért ez a jelenség olyan, mintha „alagutat fúrt volna bele” az elektron – innen az elnevezés.

Elvben az elektron hullámfüggvényének a falban azonosan nullának kéne lennie. A határozatlansági reláció miatt azonban, ha megpróbáljuk lokalizálni az elektront a fal belsejében (amely nagyon keskeny), akkor ez olyan mértékű impulzus-bizonytalanságot eredményez, amely elegendő ahhoz, hogy az elektron összenergiája a gát  $V_0$  magassága fölé kerüljön.

Az alagúteffektus valószínűségét megbecsülhetjük. A határozatlansági reláció alapján:

$$\Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2\Delta x} \quad (128)$$

Ezt behelyettesítve a kinetikus energia képletébe (11):

$$\Delta E_{kin} = \frac{\Delta p_x^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{8m\Delta x^2} \quad (129)$$

Az elektron akkor juthat át a gát felett, ha átlagos kinetikus energiájának, és a kinetikus energia bizonytalanságának összege nagyobb, mint a fal magassága:

$$E_{kin} + \Delta E_{kin} = E_{kin} + \frac{\hbar^2}{8m\Delta x^2} \geq V_0 \quad (130)$$

ahonnan

$$\Delta x \geq \frac{\hbar}{2\sqrt{2m(V_0 - E)}} \quad (131)$$

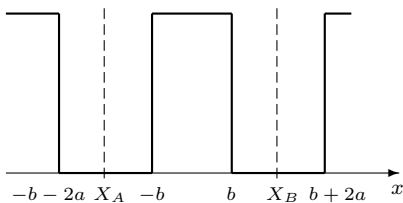
A 131. egyenletben szereplő  $\Delta x$  mennyiséget nevezzük *behatolási mélységnek*, ami arra jellemző, hogy az elektron milyen széles falon képes áthatolni.

## Kettős potenciálgödör

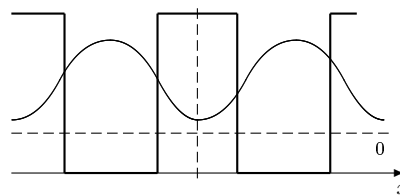
Tegyük fel, hogy adott két  $V_0$  magasságú potenciálgödör, amelyek szélessége  $2a$ , távolságuk  $2b$ . Egy ilyen rendszerrel modellezhető két, *kovalens kötésben* lévő atom tere, és így a kötésben résztvevő elektron hullámfüggvénye nyerhető.

Legyen

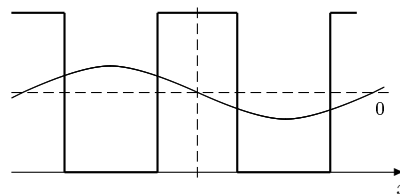
$$x_A = -(b + a) \quad x_B = b + a \quad (132)$$



1. ábra Kettős potenciálgödör



2. ábra A kötőpálya hullámfüggvénye



3. ábra A lazítópálya hullámfüggvénye

A Hamilton-operátor ebben az esetben

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(x - X_A) + V(x - X_B) \quad (133)$$

Írjuk fel a Schrödinger-egyenletet ( $\hat{H}\phi = E\phi$ ) és oldjuk meg azzal a feltevéssel, hogy a molekulapálya elektronpályák szuperpozíciójával közelíthető:

$$\phi_n = C_n^A \phi_n^A + C_n^B \phi_n^B \quad (134)$$

Ez az ún. *tight-binding közelítés*.

Ekkor a stacionárius Schrödinger-egyenlet (32) alakja a következő lesz:

$$\begin{aligned} \hat{H}\phi &= E\phi \\ \underbrace{(\hat{T} + \hat{V}_A + \hat{V}_B)}_{\equiv \hat{H} \text{ (az operátorok)}} \underbrace{(C_n^A \phi_n^A + C_n^B \phi_n^B)}_{\text{amire hatnak}} &= \\ = E(C_n^A \phi_n^A + C_n^B \phi_n^B) & \quad (135) \end{aligned}$$

ahol  $\hat{T}$  a kinetikus energia.

Azt kapjuk, hogy az energia eltolódik és felhasad:

$$E = E_n + \Delta E_t \pm \Delta E_h \quad (136)$$

és két hullámfüggvényünk – pályánk lesz:

$$\phi_+ = \frac{1}{\sqrt{2}} (\phi_n^A + \phi_n^B) \quad (137a)$$

$$\phi_- = \frac{1}{\sqrt{2}} (\phi_n^A - \phi_n^B) \quad (137b)$$

A 137a. egyenlet által leírt pályák az ún. *kötőpályák* (bonding state), ahol a két mag közötti elektronsűrűség-többség (azaz nagyobb megtalálási valószínűség ( $\int \phi^* \phi$ )) leárnyékolja a magok taszítását, így stabilizálja a kötést.

A 2. ábrán látható a kötőpálya hullámfüggvénye. Megfigyelhető, hogy a megtalálási valószínűség a két gödör közti terület közepén nem nulla, tehát egy bizonyos valószínűséggel az elektron a két gödör közti területen tartózkodik.

A 137b. egyenlet által leírt pályák az ún. *lazítópályák* (anti-bonding state), ahol a megtalálási valószínűség a magok közelében nagyobb, köztük a pályáknak csomósíkjája van. Ha egy H<sub>2</sub> molekulában a lazítópályára gerjesztjük az elektronokat, akkor a molekula felbomlik.

A 3. ábrán látható a lazítópálya hullámfüggvénye, amelynek a két gödör közötti távolság felén nulla helye van, vagyis ott az elektron megtalálási valószínűsége zérus.

Ha egy kötés két különböző atomból áll, az a fenti modellben azt jelenti, hogy különböző magasságúak a potenciálgátak. A kisebb gátnak nagyobb az *elektronnegativitása* – ott többet fog az elektron tartózkodni, illetve ott több elektron fog tartózkodni. Egy ilyen kötés neve: *polarizált kovalens kötés*.

Ha nagyon nagy az elektronnegativitási különbség, akkor a nagy elektronnegativitású atomnál lesz szinte az összes elektron, és ekkor a Coulomb-vonzás tartja össze a molekulát. Az ilyen kötés neve: *ionos kötés* (pl. NaCl).

## A hidrogén atom

A Schrödinger-egyenlet analitikusan csak a „hidrogénszerű” atomokra oldható meg (amelyek Z protont tartalmaznak és Z – 1-szeresen inonizáltak, vagyis 1 elektront tartalmaznak). A legegyszerűbb ilyen rendszer a hidrogén, amely egy protont és egy elektront tartalmaz.

A hidrogénre vonatkozó Schrödinger-egyenlet:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{d\psi^2}{dx^2} + \frac{d\psi^2}{dy^2} + \frac{d\psi^2}{dz^2} \right) - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q^2}{r} \psi = E\psi \quad (138)$$

ahol  $r = |x| = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$  és a potenciál  $V = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q^2}{r}$ .

Mivel a proton elektrosztatikus tere gömbszimmetrikus, ezért érdemes áttérni polárkoordinátás reprezentációra. Az egyenlet levezetése során nem egy, hanem három kvantumszám vezethető be. Ezek az alábbiak:

1. *főkvantumszám* ( $n$ ): az elektronpálya  $r$  sugarát határozza meg – az elektronpálya sugara közelítőleg  $n^2$ -el arányos. Az azonos  $n$  főkvantumszámmal rendelkező elektronok ugyanahhoz az elektronhéjhoz tartoznak.

Az  $n = 0, 1, 2, 3, 4, 5, 6$  főkvantumszámú elektronokat a  $K$ -,  $L$ -,  $M$ -,  $N$ -,  $P$ - és  $Q$ -héjak elektronjainak szokás nevezni.

2. *mellékvantumszám* ( $l$ ): az elektron pálya-impulzuszórájának mértéke. Adott  $n$  főkvantumszámmal rendelkező elektronok energiája

arányos  $l$ -el. A mellékkvantumszám lehetséges értékei:  $l = 0, 1, 2, \dots, n - 1$ .

Az  $l = 0, 1, 2, 3$  mellékkvantumszámú elektronokat  $s$ -,  $p$ -,  $d$ -,  $f$ -elektronoknak szokás nevezni.

3. *mágneses kvantumszám* ( $m$ ): az elektronpálya irányítottságára jellemző. Egy megadott irányhoz viszonyítva az elektron keringéséből származó mágneses (pálya)momentum. Értékkészlete:  $m = 2l + 1$  darab elemből áll, melyek:  $m = -l, -l + 1, -l + 2, \dots, -1, 0, +1, \dots, l - 1, l$ .

A Schrödinger-egyenlet nem ad információt a mágneses hatásokról. Ha ezeket is figyelembe vesszük, akkor egy újabb kvantumszámhoz, a *spinhez* ( $s$ ) jutunk. A spinkvantumszám az elektron saját-impulzusmomentumáról nyújt információt. Egy adott irányhoz képest az elektron saját-impulzusmomentumából származó mágneses momentum lehetséges értékei:  $+1/2, -1/2$ .

## Többelektronos rendszer – a Pauli-elv

Egy több elektront tartalmazó atom elektronjainak a Schrödinger-egyenletét egzaktul nem lehet megoldani. A szokásos eljárás az, hogy a többelektron-rendszer állapotfüggvényét egyelektron állapotfüggvények lineárkombinációjával állítjuk elő. Ebben a lineárkombinációban a spinet is figyelembe kell venni. Az elektronrendszer egészének eredő pálya-, spin-, és teljes impulzusmomentumát az egyes elektronok megfelelő impulzusmomentumainak összege adja.

Egy többelektronos atom Schrödinger-egyenletében az atommag és az elektronok kölcsönhatásán túl megjelenik az elektronok egymásra való hatása is. Ha az atommagot rögzítettnek tekintjük, akkor a rendszer állapotfüggvényében csak az elektronokra jellemző koordináták jelennek meg:

$$\psi = \psi(\underline{r}_1, \underline{r}_2, \dots, \underline{r}_N, t) \quad (139)$$

ahol az  $\underline{r}_1 \dots \underline{r}_N$  koordináták nem klasszikus fizika szerinti helykoordináták, csupán azt jelzik, hogy az elektronrendszer leírásához nem elegendő egyetlen  $r$  helykoordináta.

Egy elektronrendszer állapotfüggvénye nem írható fel egyelektron állapotfüggvények szorzataként.

Az elektronok a kvantummechanika szerint megkülönböztethetetlen részecskék, és megtalálásuk pontos helyét nem tudjuk megmondani, csupán a megtalálás valószínűségét. Így ha két elektron olyan közel kerül egymáshoz, hogy állapotfüggvényeik átlapolódnak, akkor ha az átlapolási tartományban egy elektront találunk, nem tudjuk megmondani, hogy melyik az. Ez azt jelenti, hogy ha az állapotfüggvényben két koordinátát felcserélünk, akkor az eredetivel ekvivalens  $\psi'$  állapotfüggvényt kapunk:

$$\psi' = \psi'(\underline{r}_2, \underline{r}_1, \dots, \underline{r}_N, t) \quad (140)$$

Ha a két állapotfüggvény ekvivalens, akkor minden velük kiszámított mennyiségnek azonosnak kell lennie. Igaz ez a megtalálási valószínűsége is:

$$\psi^* \psi = \psi'^* \psi' \quad (141)$$

Ebből következik, hogy a két állapotfüggvény csak egy egységnyi abszolútértékű szorzófaktorban különbözhet. Mivel a mérhető mennyiségeknek is ugyanazt az értéket kell adniuk ( $\langle \phi, \psi \rangle = \langle \phi, \psi' \rangle$ ), ezért a szorzófaktornak valósnak kell lennie. Így a lehetséges választások:

$$\psi = \psi' \quad \psi = -\psi' \quad (142)$$

Ennek a ténynek a felállításához csak azt használtuk ki, hogy a vizsgált részecskék megkülönböztethetetlenek, ezért általánosan kijelentjük, hogy a kvantummechanika szerint egy megkülönböztethetetlen részecskét tartalmazó rendszer állapotfüggvénye két részecske felcserélésére vagy nem változik (szimmetrikus), vagy előjelet vált (antiszimmetrikus).

Ugyanakkor a többelektronos rendszer  $\hat{H}$  Hamiltonoperátora a két részecske felcserélésére csak szimmetrikus lehet, hiszen az energia a két megkülönböztethetetlen részecske felcserélése esetén nem változhat.

Kísérletekkel bizonyítható, hogy az elektronokra vonatkozóan az állapotfüggvény két részecske felcserélésére mindig antiszimmetrikus:

$$\psi(\underline{r}_1, \underline{r}_2, \dots, \underline{r}_N, t) = -\psi(\underline{r}_2, \underline{r}_1, \dots, \underline{r}_N, t) \quad (143)$$

Ez a *Pauli-elv* speciális megfogalmazása elektronokra. Általánosan: a feles spinű részecskék (elektronok, protonok, neutronok) *fermionok*. A több elektront (fermion) tartalmazó rendszerek állapotfüggvényei antiszimmetrikusak. Az egész spinű részecskék (fotonok, mezonok) *bezsonok*. Az őket tartalmazó rendszerek állapotfüggvényei szimmetrikusak.

Az elektronokra vonatkozó Pauli-elv szemléletesebb megfogalmazása: egy adott kvantumszámokkal jellemzett elektronállapotban (a spinbeállást jellemző kvantumszámot is figyelembevéve) egyidejűleg csak egy elektron tartózkodhat.

Ez az alapja az anyagok kémiai tulajdonságaiban megjelenő periodicitásnak, ami a Mengyelejev-féle periódusos rendszer felépítését adja.

Az atomban nem kerülhet az összes elektron alapállapotba, mivel az elektronok számára rendelkezésre álló energiaszintek a Pauli-elv értelmében nem képesek akárhány elektron fogadására. Az  $n$ -edik elektronhéjon csak  $2n^2$  számú elektron „fér el”. Az elemek kémiai tulajdonságaiban, illetve a köztük lévő kötésért az egyes atomok legkülső, teljesen be nem töltött elektronhéján lévő elektronok a felelősek. Ahogy az elektronok számát növeljük az atomban, az elektronhéjak fokozatosan telítődnek és így újabb elektronhéjon periodikusan 1, 2, ... számú elektron jelenik meg. A legkülső elektronhéjon azonos számú elektront tartalmazó atomok kémiai viselkedése pedig hasonló.

## Hivatkozások

- [1] *Giber János, Sólyom András*: Fizika II. Kézirat, Tankönyvkiadó, Budapest, 1991
- [2] *Giber János, Kocsányi László, Sólyom András*: Fizika mérnököknek I-II. (A műszaki fizika alapjai), Műegyetemi Kiadó, Budapest, 1999

- [3] *Orosz László*: Fizika (Kvantummechanika), Előadásvázlát és munkafüzet villamosmérnök hallgatók számára

## Tartalomjegyzék

<b>Fizikai mennyiségek kvantált jellege</b>	<b>1</b>
A hőmérsékleti sugárzás . . . . .	1
Külső fényelektromos effektus . . . . .	1
Az atomi nívók kvantáltsága . . . . .	1
Az impulzusmomentum kvantáltsága . . . . .	2
A fény korpuszkuláris modellje . . . . .	2
Az anyag hullámtermészete . . . . .	2
Az elektronokra felírható diszperziós reláció . . . . .	2
A hullámfüggvény . . . . .	3
<b>A kvantummechanikai állapotleírás</b>	<b>3</b>
Az időfüggő Schrödinger-egyenlet . . . . .	3
A stacionárius Schrödinger-egyenlet . . . . .	4
A kvantummechanikai kontinuitási egyenlet . . . . .	4
Az Ehrenfest-tétel . . . . .	5
A $\psi$ állapotfüggvény: reguláris függvény . . . . .	5
<b>A kvantált fizikai mennyiségek leírása operátorokkal</b>	<b>5</b>
Az egyes mennyiségek operátorai . . . . .	6
A fizikai mennyiségek várható értékének kiszámítása . . . . .	7
<b>Az energia sajátérték egyenletek megoldása</b>	<b>7</b>
Az egydimenziós potenciáldoboz megoldása „állóhullám” módszerrel . . . . .	7
Az egydimenziós potenciáldoboz megoldása Schrödinger-egyenlettel . . . . .	8
A lineáris, harmonikus oszcillátor energiája . . . . .	9
Az alagúteffektus . . . . .	10
Kettős potenciálgödör . . . . .	10
A hidrogén atom . . . . .	11
<b>Többelektronos rendszer – a Pauli-elv</b>	<b>12</b>