A kvantummechanika elemei

(jegyzet 7. fejezet)

Heisenberg-féle határozatlansági elv

- **Heisenberg-féle határozatlansági alapelv:**

  Egy mikroobjektum esetében bizonyos mennyiségek illetve mennyiségpárok nem határozhatók meg tetszőleges pontossággal. Ezek jellemzője a határozatlanság.

  Pl.: Hol van az elektron az atomban egy adott időpillanatban? Tudható-e a hely és az idő egyszerre adott pontossággal?

Heisenberg-féle határozatlansági elv

- **Heisenberg-féle első határozatlansági elv:**

$$\boldsymbol{t = \frac{1}{f} \;\Rightarrow\; \Delta t \geq \frac{1}{f}} \quad \textbf{(1)}$$

$$\boldsymbol{W = h \cdot f \;\Rightarrow\; \Delta W = h \cdot \Delta f \;\Rightarrow\; \frac{1}{\Delta f} = \frac{h}{\Delta W}} \quad \textbf{(2)}$$

(1) és (2) alapján következik: $\boldsymbol{\Delta t \geq \frac{h}{\Delta W}}$

$$\boldsymbol{\Delta t \cdot \Delta W \geq h}$$

- **Mikroobjektumok fizikai leírása esetén az energia- és az időbizonytalanság szorzata nem lehet kisebb a Planck-állandónál.**
- Pl.: A foton energiáját teljes pontossággal csak végtelen hosszú ideig tartó mérésekből sikerülhetne meghatározni.

Heisenberg-féle határozatlansági elv

- **Heisenberg-féle második határozatlansági elv:**

  $\boldsymbol{f = \frac{v}{\lambda}} \Rightarrow \boldsymbol{\lambda}$ szerinti differencia hányados: $\boldsymbol{\frac{\Delta f}{\Delta\lambda} = -\frac{v}{\lambda^2}}$ (3)
  Rendezzük:

$$-\frac{\Delta f \cdot \lambda^2}{\Delta\lambda} = v$$

$$\frac{-\lambda^2}{\Delta\lambda} = \frac{v}{\Delta f} \quad (*)$$

A de Broglie egyenlet: $\boldsymbol{p = \frac{h}{\lambda}}$.
Képezzük a $\boldsymbol{\lambda}$ szerinti differencia-hányadost: $\boldsymbol{\frac{\Delta p}{\Delta\lambda} = -\frac{h}{\lambda^2}}$ (4)
Rendezzük:

$$-\frac{\Delta p \cdot \lambda^2}{\Delta\lambda} = h$$

$$\frac{-\lambda^2}{\Delta\lambda} = \frac{h}{\Delta p} \quad (**)$$

Nézzük ezek után (*) és (**)-ot:

Heisenberg-féle határozatlansági elv

- **Heisenberg-féle második határozatlansági elv:**

$$\frac{-\lambda^2}{\Delta\lambda} = \frac{v}{\Delta f} \quad \text{(*)} \quad \text{és} \quad \frac{-\lambda^2}{\Delta\lambda} = \frac{h}{\Delta p} \quad \text{(**)}$$

Tehát:

$$\frac{v}{\Delta f} = \frac{h}{\Delta p}$$

Igen ám, de (1)-ből tudjuk, hogy: $\Delta t \geq \frac{1}{f} \quad / \cdot v\ (> 0) \Rightarrow \mathbf{v} \cdot \Delta t \geq \frac{v}{\Delta f}$

Tehát a $\mathbf{v} \cdot \Delta t \geq \frac{h}{\Delta p}$

De $\mathbf{v} \cdot \Delta t = \Delta x$**, így:**

$$\Delta x \geq \frac{h}{\Delta p}, \qquad \text{azaz átszorozva:} \qquad \Delta x \cdot \Delta p \geq h$$

- **Mikroobjektumok fizikai leírásakor a mikroobjektumok impulzus- és helybizonytalanságának szorzata nem lehet kisebb a Planck-állandónál.**
- Pl.: egy elektron pályáját nem lehet kellő pontossággal leírni. Nem tudjuk pl., hogy adott helyen mekkora a sebessége pontosan.

Heisenberg-féle határozatlansági elv

- Niels Bohr komplementaritás elve:
  A hullám- és részecsketulajdonság a mikroobjektumok egymást kiegészítő, azaz komplementer sajátosságai.

HULLÁM

$$\Delta \boldsymbol{t} \cdot \Delta \boldsymbol{W} \geq \boldsymbol{h}$$

$$\Delta \boldsymbol{x} \cdot \Delta \boldsymbol{p} \geq \boldsymbol{h}$$

RÉSZECSKE

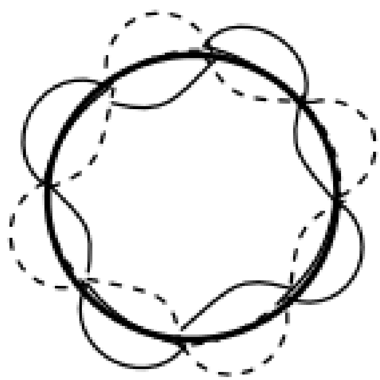
A Schrödinger-egyenlet bevezetése

Bohr III. posztulátuma: $mrv = n \cdot \frac{h}{2\pi}$ /$*2\pi$

$$m \cdot 2r\pi \cdot v = nh \quad / \div mv$$

$$2r\pi = n\frac{h}{mv} = n\frac{h}{p} = n\lambda$$

Azaz ez azt jelenti, hogy a körpályán állóhullám alakul ki, mint az elektron mozgásának pályája.



Az állóhullám hullámegyenlete:

$$\psi(x,t) = A \cdot cos\frac{2\pi x}{\lambda} \cdot \sin(2\pi f t)$$

A Schrödinger-egyenlet bevezetése

A továbbiakban stacionárius, azaz időtől független eseteket vizsgálunk. Ezért a helytől függő részt tartjuk megfigyelésünk alatt. Azaz:

$$\boldsymbol{\psi(x) = A \cdot cos\frac{2\pi x}{\lambda}}$$

Képezzük $\frac{d\psi(x)}{dx}$ -et és $\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}$ -et.

$$\boldsymbol{\frac{d\psi(x)}{dx}} = -A\left(sin\frac{2\pi x}{\lambda}\right)\cdot\frac{2\pi}{\lambda} = \boldsymbol{-A\frac{2\pi}{\lambda}sin\frac{2\pi x}{\lambda}}$$

$$\boldsymbol{\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}} = -A\frac{2\pi}{\lambda}\left(cos\frac{2\pi x}{\lambda}\right)\frac{2\pi}{\lambda} = -A\frac{4\pi^2}{\lambda^2}\cos\frac{2\pi x}{\lambda} = -\frac{4\pi^2}{\lambda^2}\cdot\psi(x)$$

Ekkor:

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = -\frac{4\pi^2}{\lambda^2}\cdot\psi(x)$$

Rendezve:

$$\boldsymbol{\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{4\pi^2}{\lambda^2}\cdot\psi(x) = 0} \qquad (*)$$

A Schrödinger-egyenlet bevezetése

A de Broglie egyenlet szerint:

$$\lambda = \frac{h}{p}$$

Négyzetre emelve:

$$\boldsymbol{\lambda^2 = \frac{h^2}{p^2}} \quad (**)$$

Az elektron kinetikus vagy mozgási energiája:

$$\frac{1}{2}mv^2 = W_{kin} \quad /\cdot 2m$$

$$m^2v^2 = 2m \cdot W_{kin}$$

$$(mv)^2 = 2m \cdot W_{kin}$$

$$\boldsymbol{p^2 = 2m \cdot W_{kin}}$$

Írjuk ezt be a (**)-ba:

$$\lambda^2 = \frac{h^2}{p^2} = \frac{h^2}{2m \cdot W_{kin}}$$

Reciprokot véve mindkét oldalon:

$$\boldsymbol{\frac{1}{\lambda^2} = \frac{2m \cdot W_{kin}}{h^2}} \quad (***)$$

A Schrödinger-egyenlet bevezetése

Helyettesítsük be (***)-ot az (*) differenciálegyenletbe:

$$\boldsymbol{\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{4\pi^2}{\lambda^2} \cdot \psi(x) = 0} \qquad (*)$$

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + 4\pi^2 \cdot \frac{2m \cdot W_{kin}}{h^2} \cdot \psi(x) = 0$$

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{4\pi^2}{h^2} \cdot 2m \cdot W_{kin} \cdot \psi(x) = 0$$

Tudjuk, hogy $\hbar = \frac{h}{2\pi}$, így $\frac{4\pi^2}{h^2} = \frac{1}{\hbar^2}$. Behelyettesítve az egyenletbe:

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{1}{\hbar^2} \cdot 2m \cdot W_{kin} \cdot \psi(x) = 0$$

Azt is tudjuk, hogy $W_{kin} = W - W_{pot}$. Ezt is behelyettesítjük:

$$\boldsymbol{\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \cdot (W - W_{pot}) \cdot \psi(x) = 0}$$

Ez az egydimenziós, stacionárius (időben állandó) Schrödinger egyenlet. Ez egy hullámegyenlet.

A Schrödinger-egyenlet bevezetése

Legyen most $\psi = \psi(x, y, z)$ háromváltozós függvénye a helynek. Ezt is behelyettesítjük:

$$\frac{\partial^2 \psi(x,y,z)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi(x,y,z)}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi(x,y,z)}{\partial z^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \cdot (W - W_{pot}) \cdot \psi(x,y,z) = 0$$

A három parciális deriválást egyszerre hattatjuk a függvényre:

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\psi(x,y,z) + \frac{2m}{\hbar^2} \cdot (W - W_{pot}) \cdot \psi(x,y,z) = 0$$

<u>Definíció (Laplace-operátor):</u>

$\boldsymbol{\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} = \Delta}$ **Laplace-operátor** **(**$\Delta = \boldsymbol{\nabla^2, Nabla\ n\text{é}gyzet}$**)**

Így a differenciálegyenlet alakja:

$$\boldsymbol{\Delta\psi(x,y,z) + \frac{2m}{\hbar^2} \cdot (W - W_{pot}) \cdot \psi(x,y,z) = 0}$$

Homogén, lineáris, másodrendű parciális differenciálegyenlet.

A Schrödinger-egyenlet alkalmazásai

HÁZI FELADAT:

Jegyzet: 228. – 232. oldal átnézni, megérteni.

1. Erőmentes térben mozgó elektron
2. Egydimenziós dobozba zárt elektron
3. Alagúteffektus
4. Hidrogénatom alapállapota