A kvantumfizika születése

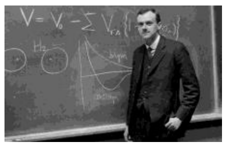
Max Planck
(1858-1947)

Niels Bohr
(1885-1962)

Erwin Schrödinger
(1887-1961)

Werner Heisenberg
(1901-1976)

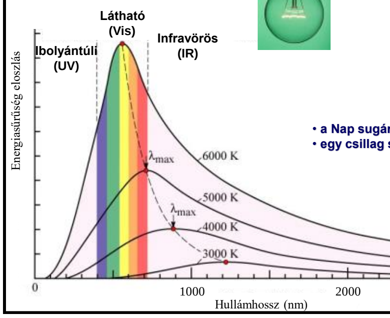
Wolfgang Pauli
(1900-1958)

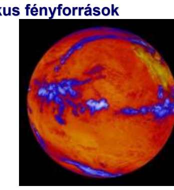


Paul Dirac
(1902-1984)

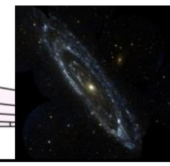
A kvantumfizika születése

Hőmérsékleti (feketetest) sugárzás, termikus fényforrások



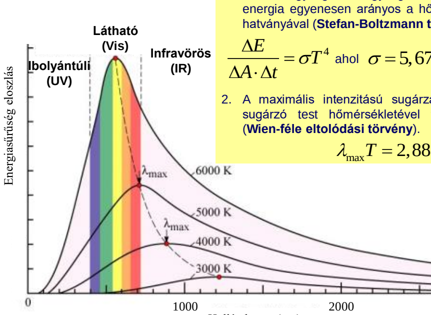


- a Nap sugárzása: ~ 5800 K
- egy csillag sugárzása: ~ 8000 K



A kvantumfizika születése

Hőmérsékleti (feketetest) sugárzás, termikus fényforrások



1. A felületegységről időegység alatt kisugárzott összes energia egyenesen arányos a hőmérséklet negyedik hatványával (**Stefan-Boltzmann törvény**).

$$\frac{\Delta E}{\Delta A \cdot \Delta t} = \sigma T^4 \quad \text{ahol} \quad \sigma = 5{,}67 \cdot 10^{-8}\,\mathrm{Wm^{-2}K^{-4}}$$

2. A maximális intenzitású sugárzás hullámhossza a sugárzó test hőmérsékletével fordítottan arányos (**Wien-féle eltolódási törvény**).

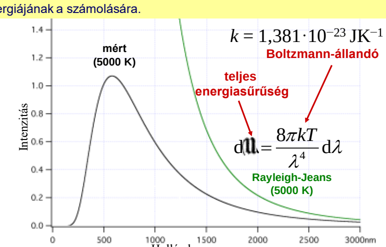
$$\lambda_{max} T = 2{,}88 \cdot 10^{-3}\,\mathrm{mK}$$

A kvantumfizika születése

Hőmérsékleti (feketetest) sugárzás, termikus fényforrások

- A klasszikus mechanika alapján tanulmányozta a feketetest-sugárzást.
- Az elektromágneses mezőt harmonikus oszcillátorok sokaságának tekintette.
- Az adott ν frekvenciájú fény jelenlétét az ugyanilyen frekvenciájú elektromágneses oszcillátor gerjesztésével értelmezte.
- A klasszikus ekvipartíciós tételt (minden szabadsági fokra $\frac{1}{2}kT$ energia jut) használta az oszcillátorok átlagos energiájának a számolására.

John William Strutt
(1842-1919)

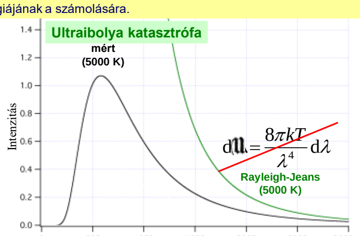


A kvantumfizika születése

Hőmérsékleti (feketetest) sugárzás, termikus fényforrások

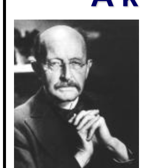
- A klasszikus mechanika alapján tanulmányozta a feketetest-sugárzást.
- Az elektromágneses mezőt harmonikus oszcillátorok sokaságának tekintette.
- Az adott ν frekvenciájú fény jelenlétét az ugyanilyen frekvenciájú elektromágneses oszcillátor gerjesztésével értelmezte.
- A klasszikus ekvipartíciós tételt (minden szabadsági fokra $\frac{1}{2}kT$ energia jut) használta az oszcillátorok átlagos energiájának a számolására.

John William Strutt
(1842-1919)



A kvantumfizika születése

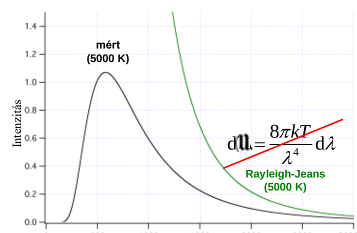
A kvantumhipotézis megjelenése



Max Planck
(1858-1947)

Planck: a sugárzást kibocsátó kis oszcillátorok csak egy adott energiaadag egész számú többszörösével rendelkezhetnek. (Az energia egy adott frekvencián csak meghatározott adagokban, kvantálva terjedhet: $E = nh\nu$).

$h = 6{,}626 \cdot 10^{-34}$ Js, Planck-állandó



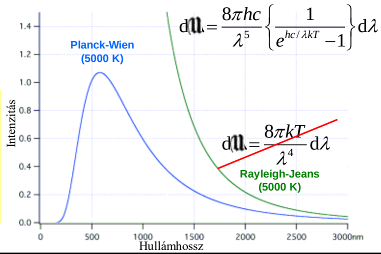
A kvantumfizika születése

A kvantumhipotézis megjelenése

Max Planck
(1858-1947)

Planck: a sugárzást kibocsátó kis oszcillátorok csak egy adott energiaadag egész számú többszörösével rendelkezhetnek. (Az energia egy adott frekvencián csak meghatározott adagokban, kvantálva terjedhet: $E = nh\nu$.

$h = 6{,}626 \cdot 10^{-34}$ Js, Planck-állandó



$$d\mathfrak{U} = \frac{8\pi hc}{\lambda^5}\left\{\frac{1}{e^{hc/\lambda kT}-1}\right\}d\lambda$$

$$d\mathfrak{U} = \frac{8\pi kT}{\lambda^4}d\lambda$$

- Az oszcillátorok csak akkor gerjesztődnek a fal által, ha legalább $h\nu$ (egy fotonnyi) energiát kapnak.
- A magasabb frekvenciájú oszcillátorok számára nincs ennyi energia.

A kvantumfizika születése

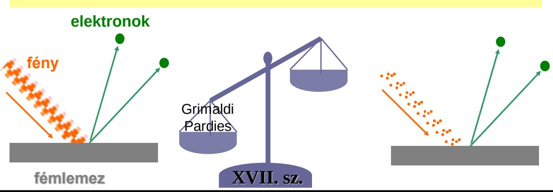
A fotoelektromos effektus

- Az ultraibolya fénnyel megvilágított fémekből (bizonyos fémek esetén) elektronok lépnek ki, amiknek az energiáját mérhetjük.
  - Bármekkora is a sugárzás intenzitása, az elektronok nem lépnek ki addig a fémből, amíg a sugárzás frekvenciája meg nem haladja az adott fémre jellemző küszöbértéket.
  - Ha a sugárzás frekvenciája a küszöbérték felett van, az elektronok azonnal kilépnek a fémből.
  - A kilépő elektronok kinetikus energiája lineárisan függ a sugárzás frekvenciájától, de nem függ az intenzitásától.
  - A kilépő elektronok száma függ a sugárzás intenzitásától.

A kvantumfizika születése

A fotoelektromos effektus

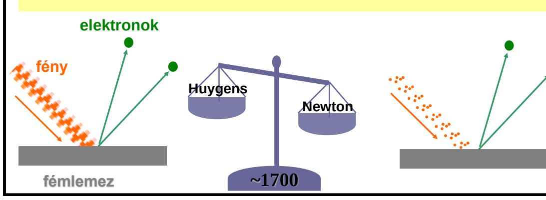
- Az ultraibolya fénnyel megvilágított fémekből (bizonyos fémek esetén) elektronok lépnek ki, amiknek az energiáját mérhetjük.
  - Bármekkora is a sugárzás intenzitása, az elektronok nem lépnek ki addig a fémből, amíg a sugárzás frekvenciája meg nem haladja az adott fémre jellemző küszöbértéket.
  - Ha a sugárzás frekvenciája a küszöbérték felett van, az elektronok azonnal kilépnek a fémből.
  - A kilépő elektronok kinetikus energiája lineárisan függ a sugárzás frekvenciájától, de nem függ az intenzitásától.
  - A kilépő elektronok száma függ a sugárzás intenzitásától.



A kvantumfizika születése

A fotoelektromos effektus

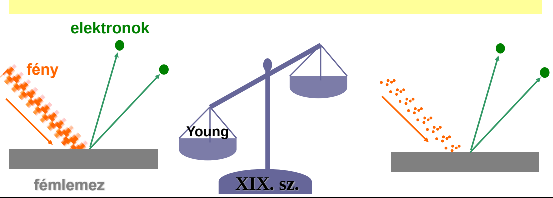
- Az ultraibolya fénnyel megvilágított fémekből (bizonyos fémek esetén) elektronok lépnek ki, amiknek az energiáját mérhetjük.
  - Bármekkora is a sugárzás intenzitása, az elektronok nem lépnek ki addig a fémből, amíg a sugárzás frekvenciája meg nem haladja az adott fémre jellemző küszöbértéket.
  - Ha a sugárzás frekvenciája a küszöbérték felett van, az elektronok azonnal kilépnek a fémből.
  - A kilépő elektronok kinetikus energiája lineárisan függ a sugárzás frekvenciájától, de nem függ az intenzitásától.
  - A kilépő elektronok száma függ a sugárzás intenzitásától.



A kvantumfizika születése

A fotoelektromos effektus

- Az ultraibolya fénnyel megvilágított fémekből (bizonyos fémek esetén) elektronok lépnek ki, amiknek az energiáját mérhetjük.
  - Bármekkora is a sugárzás intenzitása, az elektronok nem lépnek ki addig a fémből, amíg a sugárzás frekvenciája meg nem haladja az adott fémre jellemző küszöbértéket.
  - Ha a sugárzás frekvenciája a küszöbérték felett van, az elektronok azonnal kilépnek a fémből.
  - A kilépő elektronok kinetikus energiája lineárisan függ a sugárzás frekvenciájától, de nem függ az intenzitásától.
  - A kilépő elektronok száma függ a sugárzás intenzitásától.

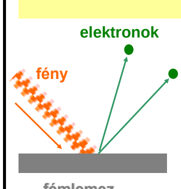


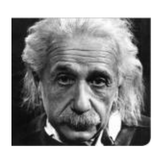
A kvantumfizika születése

A fotoelektromos effektus

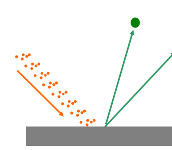
- Az ultraibolya fénnyel megvilágított fémekből (bizonyos fémek esetén) elektronok lépnek ki, amiknek az energiáját mérhetjük.
  - Bármekkora is a sugárzás intenzitása, az elektronok nem lépnek ki addig a fémből, amíg a sugárzás frekvenciája meg nem haladja az adott fémre jellemző küszöbértéket.
  - Ha a sugárzás frekvenciája a küszöbérték felett van, az elektronok azonnal kilépnek a fémből.
  - A kilépő elektronok kinetikus energiája lineárisan függ a sugárzás frekvenciájától, de nem függ az intenzitásától.
  - A kilépő elektronok száma függ a sugárzás intenzitásától.

$$\tfrac{1}{2} m_e v^2 = h\nu - E_{kilépési}$$





Albert Einstein
(1879-1955)



A kvantumfizika születése

A Compton-effektus

- Röntgensugarak szóródását vizsgálta elektronokon.
    - A szórt sugárzás hullámhossza kissé növekszik.
    - A növekedés értéke jól meghatározott, egyetlen érték.
    - A növekedés függ a szóródási szögtől, de nem függ a beeső sugárzás hullámhosszától.

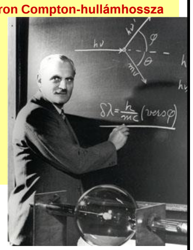
$\mathrm{d}\lambda = \lambda_C(1-\cos\Theta)$ ahol $\lambda_C = 2,43\mathrm{pm}$ **az elektron Compton-hullámhossza**

A fotonoknak nem csak energiájuk, hanem impulzusuk is van:

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

Az ütközés során az energia- és az impulzusmegmaradás is érvényesül:

$$\lambda_C = \frac{h}{m_e c} = 2,426\mathrm{pm}$$



Arthur Holly Compton (1892-1962)

A kvantumfizika születése

Az elektrondiffrakció

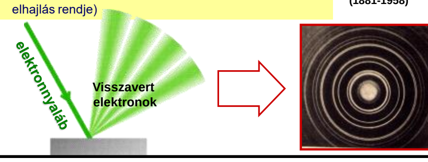
Clinton Davisson és **Lester Germer**

- Kristályokon elektronnyalábot vezettek keresztül.
    - Diffrakciós képet kaptak.
    - Ha egy elektronnyaláb polikristályos anyagon elhajlást szenved, akkor a Debey-Scherrer gyűrűk lesznek az elhajlási képben az interferencia erősítési helyek.
    - Az elhajlási kép jól értelmezhető a kristálydiffrakciót leíró Bragg-egyenlet alapján:

$$2d\sin\Theta = k\lambda$$

(ahol d a rácsállandó, Θ a rácssík és a beeső sugár által bezárt szög, λ az elektron hullámhossza, k az elhajlás rendje)

Clinton Davisson (1881-1958) **Lester Germer (1896-1971)**



A kvantumfizika születése

Az elektrondiffrakció

Clinton Davisson és **Lester Germer**

- Kristályokon elektronnyalábot vezettek keresztül.
    - Diffrakciós képet kaptak.
    - Ha egy elektronnyaláb polikristályos anyagon elhajlást szenved, akkor a Debey-Scherrer gyűrűk lesznek az elhajlási képben az interferencia erősítési helyek.
    - Az elhajlási kép jól értelmezhető a kristálydiffrakciót leíró Bragg-egyenlet alapján:

$$2d\sin\Theta = k\lambda$$

(ahol d a rácsállandó, Θ a rácssík és a beeső sugár által bezárt szög, λ az elektron hullámhossza, k az elhajlás rendje)

Louis de Broglie:

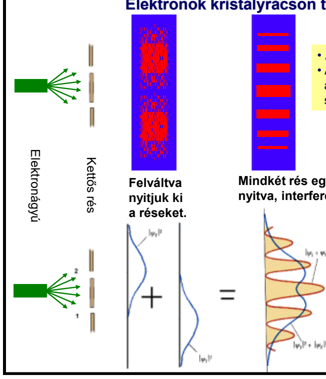
- Minden részecskéhez rendelt egyfajta hullámhosszt:

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

Louis de Broglie (1892-1987)

A kvantumfizika születése

Elektronok kristályrácson történő elhajlása



- Állandó teljesítményű részecskeforrás.
- Az elektronnyaláb olyan ritka, hogy benne a részecskék kölcsönhatásával nem kell számolni.

A kvantumfizika születése

Heisenberg-féle határozatlansági reláció

- Egy részecske helyét és impulzusát ($p = mv$) egyidejűleg nem mérhetjük meg tetszőleges pontossággal, így a klasszikus mechanikai leírás (pálya megadása) nem lehetséges.
- Akármilyen mérési módot választunk is, a mérőberendezés és a részecske kölcsönhatása a mért sajátságokban bizonyos határozatlanságot okoz. Minél kisebb a határozatlanság az egyik mért sajátságban, annál nagyobb lesz a másikban.
- Matematikai formában: $\Delta x \Delta p_x \geq \frac{1}{2}\hbar$ ahol $\hbar = \frac{h}{2\pi} = 1,05\cdot 10^{-34}\,\mathrm{Js}$ (**redukált Planck-állandó**; h: **Planck-állandó**)
- Makroszkopikus testeknél nem jár különösebb következménnyel, de atomi méretekben igen.

A kvantumfizika születése

Heisenberg-féle határozatlansági reláció

- Egy részecske helyét és impulzusát ($p = mv$) egyidejűleg nem mérhetjük meg tetszőleges pontossággal, így a klasszikus mechanikai leírás (pálya megadása) nem lehetséges.
- Akármilyen mérési módot választunk is, ~~a mérőberendezés és a részecske kölcsönhatása a~~ mért sajátságokban bizonyos határozatlanságot okoz. Minél kisebb a határozatlanság az egyik mért sajátságban, annál nagyobb lesz a másikban.
- Matematikai formában: $\Delta x \Delta p_x \geq \frac{1}{2}\hbar$ ahol $\hbar = \frac{h}{2\pi} = 1,05\cdot 10^{-34}\,\mathrm{Js}$ (**redukált Planck-állandó**; h: **Planck-állandó**)
- Makroszkopikus testeknél nem jár különösebb következménnyel, de atomi méretekben igen.

$m = 1$ kg
$\Delta x = 10^{-4}$ m
↓
Sebesség bizonytalansága:
$\Delta v \sim 10^{-30}$ m/s

A kvantumfizika születése

Heisenberg-féle határozatlansági reláció

• Egy részecske helyét és impulzusát ($p = mv$) egyidejűleg nem mérhetjük meg tetszőleges pontossággal, így a klasszikus mechanikai leírás (pálya megadása) nem lehetséges.

• Akármilyen mérési módot választunk is, ~~a mérőberendezés és a részecske kölcsönhatása~~ a mért sajátságokban bizonyos határozatlanságot okoz. Minél kisebb a határozatlanság az egyik mért sajátságban, annál nagyobb lesz a másikban.

• Matematikai formában: $\Delta x \Delta p_x \geq \frac{1}{2}\hbar$ ahol $\underbrace{\hbar}_{\text{redukált Planck-állandó}} = \frac{\overbrace{h}^{\text{Planck-állandó}}}{2\pi} = 1{,}05 \cdot 10^{-34}\,\mathrm{Js}$

• <u>Makroszkopikus testeknél</u> nem jár különösebb következménnyel, de <u>atomi méretekben</u> igen.

$m = 1$ kg
$\Delta x = 10^{-4}$ m
↓
Sebesség bizonytalansága:
$\Delta v \sim 10^{-30}$ m/s

$m_e = 9{,}1 \cdot 10^{-31}$ kg
$\Delta x = 10^{-10}$ m
↓
Sebesség bizonytalansága:
$\Delta v \sim 10^{6}$ m/s

A kvantumfizika születése

Heisenberg-féle határozatlansági reláció

• Egy részecske helyét és impulzusát ($p = mv$) egyidejűleg nem mérhetjük meg tetszőleges pontossággal, így a klasszikus mechanikai leírás (pálya megadása) nem lehetséges.

• Akármilyen mérési módot választunk is, ~~a mérőberendezés és a részecske kölcsönhatása~~ a mért sajátságokban bizonyos határozatlanságot okoz. Minél kisebb a határozatlanság az egyik mért sajátságban, annál nagyobb lesz a másikban.

• Matematikai formában: $\Delta x \Delta p_x \geq \frac{1}{2}\hbar$ ahol $\underbrace{\hbar}_{\text{redukált Planck-állandó}} = \frac{\overbrace{h}^{\text{Planck-állandó}}}{2\pi} = 1{,}05 \cdot 10^{-34}\,\mathrm{Js}$

• Makroszkopikus testeknél nem jár különösebb következménnyel, de atomi méretekben igen.

• Semmilyen fizikai jelenség sem ábrázolható tetszőleges pontossággal, mint "klasszikus pontszerű részecske" vagy hullám.
• A mikroszkopikus helyzet leginkább a hullám-részecske kettősség alapján írható le, olyan esetekkel foglalkozik, amikor sem a részecske, sem a hullámkép nem teljesen alkalmas megközelítési mód.
• A határozatlansági elvet néha hibásan úgy magyarázzák, hogy a részecske helyének mérése szükségképpen megzavarja a részecske impulzusát. A kvantummechanikai határozatlansági mérés alapvetően nemklasszikus jellemzőit az **Einstein-Podolsky-Rosen-paradoxon**nak köszönhetően tisztázták.

A kvantumfizika születése

Heisenberg-féle határozatlansági reláció

• **EPR (Einstein–Podolsky–Rosen)-paradoxon**: egy gondolatkíséret, amely szerint egy forrás két elektront bocsát ki, amelyek együttes spinje nulla, és mindkettő a pozitív és a negatív spin kvantum szuperpozíciójában van, (azaz a két részecske összefonódott állapotban van). A részecskék eléggé eltávolodnak egymástól ahhoz, hogy fénysebességnél lassabb kölcsönhatás ne jöhessen közöttük számításba. Ha ezek után a két részecske spinjét megmérjük a (tetszőlegesen választott) z tengely mentén, azt kapjuk, hogy ellentétes spinűek. Ha az *x* tengely mentén mérjük meg, ugyanezt kapjuk. A másodjára mért részecskénél tehát a mérés eredménye determinisztikus (az első részécskénél mért érték ellentéte).
A Heisenberg-féle határozatlansági reláció szerint egy részecske spinje két, egymásra merőleges irányban egyszerre nem mérhető meg. Így, ha megmérjük az első részecskén a *z*, majd a másodikon az *x* tengely menti spint, a második részecske *x* irányú spinje nem lehet ellentéte az első részecske mérések előtti spinjének, mert akkor az első részecske mindkét iránybeli spinjét ismernénk. Így tehát az első részecske z irányú mérésének valahogy „el kell rontania" a második részecske *x* irányú spinjét, éppúgy, ahogy a saját x irányú spinjét elrontja. A két részecske azonban – ha a lokalitást elfogadjuk – túl messze van ahhoz, hogy bármiféle kölcsönhatás felléphessen közöttük.

A kvantumfizika születése

A kvantummechanika alapjai

<u>Heisenberg-féle mátrixmechanika</u>

• *Einstein* relativitáselméletben megfogalmazott gondolata a kiindulópont: az elméletben csak olyan fogalmakat szabad használni, amelyek megfigyelhető fizikai mennyiségeket jelentenek. (Az elektron pályája az atomban nem ilyen.)
• A pálya helyett a helykoordináták Fourier-sorfejtésében szereplő amplitúdókat kell használni. Kitalálta, hogy ezeknek milyen algebrai szabályoknak kell eleget tenniük, hogy a megfigyelésekkel megegyező eredményt kapjon.
• *Max Born* és *Pascal Jordan* mutatta ki, hogy az elektron helykoordinátájára és impulzusára használt, Heisenberg-féle matematikai szimbólumok mátrixok.
• *Heisenberg* 1925 júliusában közölte dolgozatát. Einstein először nem hitt benne, és Bohr is kételkedett…
• *Pauli* a mátrixmechanikával kiszámolta a hidrogénatom energia-sajátértékeit.

<u>Schrödinger-féle hullámmechanika</u>

• A *de Broglie* által bevezetett anyaghullám-fogalom alapján jutott egy differenciálegyenlethez, amelynek reguláris megoldásai megadják az atomok energia-sajátértékeit.
• Kimutatta, hogy a kétféle tárgyalásmód (a mátrixmechanika és a hullámmechanika) egymással egyenértékű.
• *Paul Dirac* dolgozta ki a kvantummechanika Hilbert-térben értelmezett állapotvektorokra és operátorokra alapozott matematikai elméletét. A Dirac-féle tárgyalás lényege, hogy minden fizikai mennyiséghez operátort rendelünk, és ennek sajátértékeit azonosítjuk az illető mennyiség méréssel megállapítható értékeivel.

Az állapotegyenlet

• Klasszikustól eltérő mozgásfogalom, pálya helyett a $\Psi(x,y,z,t)$ hullámfüggvénnyel dolgozik
• Annak a valószínűsége, hogy a részecske a t pillanatban az (x,y,z) körüli kis $\mathrm{d}V$ térfogatban tartózkodik:

$$\Psi^*(x,y,z,t)\Psi(x,y,z,t)\mathrm{d}V = \left|\Psi(x,y,z,t)\right|^2 \mathrm{d}V$$

• A tér véges V térfogatában a részecske tartózkodási valószínűsége:

$$\int_V \Psi^*(x,y,z,t)\Psi(x,y,z,t)\mathrm{d}V \quad \text{vagy} \quad \int_V \Psi^*\Psi \mathrm{d}V$$

• A teljes térre integrálva: $\int \Psi^*\Psi \mathrm{d}V = 1$

Ezt a normálással biztosítjuk.

Max Born (1882-1970)

Az állapotegyenlet

• Klasszikustól eltérő mozgásfogalom, pálya helyett a $\Psi(x,y,z,t)$ hullámfüggvénnyel dolgozik
• Annak a valószínűsége, hogy a részecske a t pillanatban az (x,y,z) körüli kis $\mathrm{d}V$ térfogatban tartózkodik:

$$\Psi^*(x,y,z,t)\Psi(x,y,z,t)\mathrm{d}V = \left|\Psi(x,y,z,t)\right|^2 \mathrm{d}V$$

• A tér véges V térfogatában a részecske tartózkodási valószínűsége:

$$\int_V \Psi^*(x,y,z,t)\Psi(x,y,z,t)\mathrm{d}V \quad \text{vagy} \quad \int_V \Psi^*\Psi \mathrm{d}V$$

• A teljes térre integrálva: $\int \Psi^*\Psi \mathrm{d}V = 1$

Ezt a normálással biztosítjuk.

• **A kvantummechanika mozgásegyenlete (állapotegyenlet, vagy Schrödinger-egyenlet)** konzervatív erőtérben mozgó részecskére:

$$-\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta\Psi + V(x,y,z)\Psi$$

ahol $\Delta = \underbrace{\nabla^2}_{\text{nabla}} = \overbrace{\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}}^{\text{Laplace-operátor}}$

Max Born (1882-1970)

Az állapotegyenlet

- Klasszikustól eltérő mozgásfogalom, pálya helyett a $\Psi(x,y,z,t)$ hullámfüggvénnyel dolgozik
- Annak a valószínűsége, hogy a részecske a t pillanatban az (x,y,z) körüli kis $\mathrm{d}V$ térfogatban tartózkodik:

$$\Psi^*(x,y,z,t)\Psi(x,y,z,t)\mathrm{d}V = |\Psi(x,y,z,t)|^2\,\mathrm{d}V$$

Max Born (1882-1970)

- A tér véges V térfogatában a részecske tartózkodási valószínűsége:

$$\int_V \Psi^*(x,y,z,t)\Psi(x,y,z,t)\mathrm{d}V \quad \text{vagy} \quad \int_V \Psi^*\Psi \mathrm{d}V$$

- A teljes térre integrálva: $\int \Psi^*\Psi \mathrm{d}V = 1$

Ezt a normálással biztosítjuk.

- **A kvantummechanika mozgásegyenlete (állapotegyenlet, vagy Schrödinger-egyenlet)** konzervatív erőtérben mozgó részecskére:

$$-\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta\Psi + \underbrace{V(x,y,z)}_{\text{potenciális energia}}\Psi \quad \text{ahol} \quad \Delta = \nabla^2 = \overbrace{\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}}^{\text{Laplace-operátor}}$$

a részecske tömege

nabla

képzetes egység = $\sqrt{-1}$

Az állapotegyenlet

- Ha $\Psi(x,y,z,0)$ ismert, akkor a Schrödinger-egyenlet segítségével $\Psi(x,y,z,t)$ számolható.
- A Schrödinger-egyenlet kiterjeszthető arra az estre, amikor a vizsgált részecske időfüggő kölcsönhatásban vesz részt.
- A Schrödinger-egyenlet axióma.

- **A kvantummechanika mozgásegyenlete (állapotegyenlet, vagy Schrödinger-egyenlet)** konzervatív erőtérben mozgó részecskére:

$$-\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta\Psi + \underbrace{V(x,y,z)}_{\text{potenciális energia}}\Psi \quad \text{ahol} \quad \Delta = \nabla^2 = \overbrace{\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}}^{\text{Laplace-operátor}}$$

a részecske tömege

nabla

képzetes egység = $\sqrt{-1}$

A stacionárius Schrödinger-egyenlet

- Az állapotegyenlet megoldása időfüggő tartózkodási valószínűséget ad.

$\Updownarrow$

- A külső erőtértől mentes atomban az elektron tartózkodási valószínűsége időtől független (elektron stacionárius állapota).

$$\underbrace{-\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta\Psi + V\Psi \quad \text{és} \quad \Psi(x,y,z,t) = \varPsi(x,y,z)T(t)}$$

$$\frac{1}{T}\left(-\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{dT}{dt}\right) = \frac{1}{\varPsi}\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta\varPsi + V\varPsi\right)$$

Ez csak akkor igaz minden változó értékre, ha mindkét oldal állandó (E, a részecske teljes energiája). $E = E_{kinetikus} + V$

- A **stacionárius Schrödinger-egyenlet** tehát:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta\varPsi + V\varPsi = E\varPsi$$

- Tartózkodási valószínűség számolása: $\Psi^*\Psi = \varPsi^*\varPsi$

A szabad részecske

- A legegyszerűbb kvantummechanikai objektum, de a valóságban csak rövid ideig teljesül.
- Nem áll kölcsönhatásban más fizikai objektumokkal, potenciális energiája állandó.
- A **szabad részecske stacionárius Schrödinger-egyenlete** egy dimenzióban:

$$\frac{\mathrm{d}^2\varPsi}{\mathrm{d}x^2} = -\alpha^2\varPsi \quad \text{ahol} \quad \alpha^2 = \frac{2\mu E}{\hbar^2}$$

- Az egyenlet megoldása:

$$\varPsi(x) = N\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha x}, \text{ és mivel } T(t) = \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}Et}{\hbar}}$$

helytől független állandó

A stacionárius állapot teljes hullámfüggvényére:

$$\Psi(x,t) = \varPsi(x)T(t) = N\mathrm{e}^{\mathrm{i}\left(\alpha x - \frac{Et}{\hbar}\right)} = N\left[\cos\left(\alpha x - \frac{Et}{\hbar}\right) + \mathrm{i}\sin\left(\alpha x - \frac{Et}{\hbar}\right)\right]$$

- A Ψ függvény **térben és időben periodikus síkhullám**ot ír le, amelyre:

$$\lambda = \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2\mu E}} = \frac{2\pi\hbar}{p_x} = \frac{h}{p_x} \text{ (de Broglie-egyenlet), és } E = \frac{2\pi\hbar}{T} = h\nu \text{ (Planck)}$$

hullámhossz

impulzus = $\sqrt{2\mu E}$

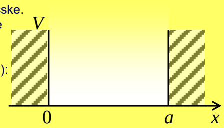
periódusidő

frekvencia = $1/T$

- A szabad részecske stacionárius állapotában $\Psi^*\Psi = N^*N$

A dobozba zárt részecske

- Áthatolhatatlan falú doboz belsejében mozog a részecske.
- Végtelen potenciálfalak, a részecske hullámfüggvénye a $(\infty,0)$ és $(a,+\infty)$ tartományban zérus.



- A Schrödinger-egyenlet (u.a. mint szabad részecskére):

$$\frac{\mathrm{d}^2\varPsi}{\mathrm{d}x^2} = -\alpha^2\varPsi \quad \text{ahol} \quad \alpha^2 = \frac{2\mu E}{\hbar^2}$$

Általános megoldás: $\varPsi(x) = A\sin(\alpha x) + B\cos(\alpha x)$

Határfeltétel (hullámfüggvény folytonosságából): $\varPsi(0) = \varPsi(a) = 0$

$$\left.\begin{array}{l} \\ \end{array}\right\} \begin{array}{l} B = 0 \\ \alpha a = n\pi \end{array}$$

Normálás: $A^2\int_0^a \sin^2(\alpha x)\mathrm{d}x = 1$

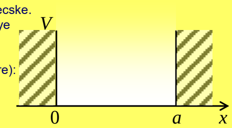
$\Downarrow$

$$E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2\mu a^2} \quad \text{ahol } n = 1,2,3\ldots$$

$$\varPsi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right)$$

A dobozba zárt részecske

- Áthatolhatatlan falú doboz belsejében mozog a részecske.
- Végtelen potenciálfalak, a részecske hullámfüggvénye a $(\infty,0)$ és $(a,+\infty)$ tartományban zérus.



- A Schrödinger-egyenlet (u.a. mint szabad részecskére):

$$\frac{\mathrm{d}^2\varPsi}{\mathrm{d}x^2} = -\alpha^2\varPsi \quad \text{ahol} \quad \alpha^2 = \frac{2\mu E}{\hbar^2}$$

Általános megoldás: $\varPsi(x) = A\sin(\alpha x) + B\cos(\alpha x)$

Határfeltétel (hullámfüggvény folytonosságából): $\varPsi(0) = \varPsi(a) = 0$

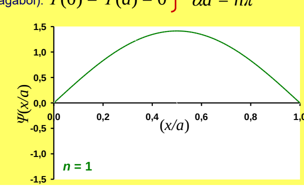
$$\left.\begin{array}{l} \\ \end{array}\right\} \begin{array}{l} B = 0 \\ \alpha a = n\pi \end{array}$$

Normálás: $A^2\int_0^a \sin^2(\alpha x)\mathrm{d}x = 1$

$\Downarrow$

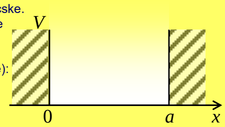
$$E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2\mu a^2} \quad \text{ahol } n = 1,2,3\ldots$$

$$\varPsi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right)$$



A dobozba zárt részecske

- Áthatolhatatlan falú doboz belsejében mozog a részecske.
- Végtelen potenciálfalak, a részecske hullámfüggvénye a $(\infty,0)$ és $(a,+\infty)$ tartományban zérus.



- A Schrödinger-egyenlet (u.a. mint szabad részecskére):

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} = -\alpha^2\Psi \quad \text{ahol} \quad \alpha^2 = \frac{2\mu E}{\hbar^2}$$

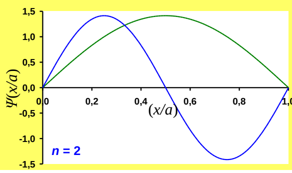
Általános megoldás: $\Psi(x) = A\sin(\alpha x) + B\cos(\alpha x)$

Határfeltétel (hullámfüggvény folytonosságából): $\Psi(0) = \Psi(a) = 0$ $\Big\}$ $B = 0$, $\alpha a = n\pi$

Normálás: $A^2\int_0^a \sin^2(\alpha x)dx = 1$

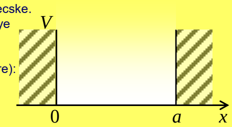
$$E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2\mu a^2} \quad \text{ahol } n = 1,2,3\ldots$$

$$\Psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right)$$



A dobozba zárt részecske

- Áthatolhatatlan falú doboz belsejében mozog a részecske.
- Végtelen potenciálfalak, a részecske hullámfüggvénye a $(\infty,0)$ és $(a,+\infty)$ tartományban zérus.



- A Schrödinger-egyenlet (u.a. mint szabad részecskére):

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} = -\alpha^2\Psi \quad \text{ahol} \quad \alpha^2 = \frac{2\mu E}{\hbar^2}$$

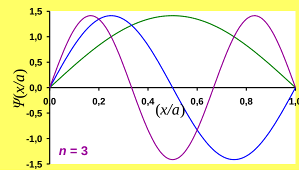
Általános megoldás: $\Psi(x) = A\sin(\alpha x) + B\cos(\alpha x)$

Határfeltétel (hullámfüggvény folytonosságából): $\Psi(0) = \Psi(a) = 0$ $\Big\}$ $B = 0$, $\alpha a = n\pi$

Normálás: $A^2\int_0^a \sin^2(\alpha x)dx = 1$

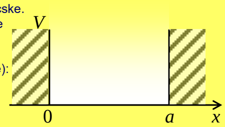
$$E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2\mu a^2} \quad \text{ahol } n = 1,2,3\ldots$$

$$\Psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right)$$



A dobozba zárt részecske

- Áthatolhatatlan falú doboz belsejében mozog a részecske.
- Végtelen potenciálfalak, a részecske hullámfüggvénye a $(\infty,0)$ és $(a,+\infty)$ tartományban zérus.



- A Schrödinger-egyenlet (u.a. mint szabad részecskére):

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} = -\alpha^2\Psi \quad \text{ahol} \quad \alpha^2 = \frac{2\mu E}{\hbar^2}$$

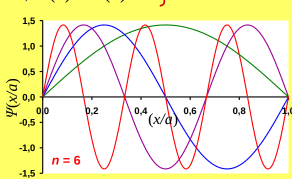
Általános megoldás: $\Psi(x) = A\sin(\alpha x) + B\cos(\alpha x)$

Határfeltétel (hullámfüggvény folytonosságából): $\Psi(0) = \Psi(a) = 0$ $\Big\}$ $B = 0$, $\alpha a = n\pi$

Normálás: $A^2\int_0^a \sin^2(\alpha x)dx = 1$

$$E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2\mu a^2} \quad \text{ahol } n = 1,2,3\ldots$$

$$\Psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right)$$

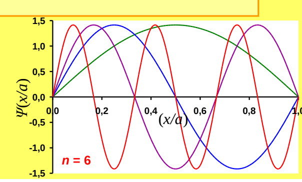


A dobozba zárt részecske

- A „" hullámszerű" tartózkodási valószínűséghez rendelt hullámhossz: $\lambda = \frac{2a}{n}$
- A dobozba zárt részecske energiája stacionárius állapotban csak diszkrét értékeket vehet fel (kvantált).
- n :kvantumszám
- A legalacsonyabb energiájú állapot az alapállapot, innen gerjesztéssel kerülhet a nagyobb energiájú gerjesztett állapotba.
- Megtalálási valószínűség: $w = \frac{x_2 - x_1}{a}$ (klasszikus Newtoni mechanika) amint $n \longrightarrow \infty$

$$E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2\mu a^2} \quad \text{ahol } n = 1,2,3\ldots$$

$$\Psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right)$$



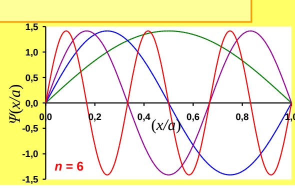
A dobozba zárt részecske

- A „hullámszerű" tartózkodási valószínűséghez rendelt hullámhossz: $\lambda = \frac{2a}{n}$
- A dobozba zárt részecske energiája stacionárius állapotban csak diszkrét értékeket vehet fel (kvantált).
- n :kvantumszám
- A legalacsonyabb energiájú állapot az alapállapot, innen gerjesztéssel kerülhet a nagyobb energiájú gerjesztett állapotba.
- Megtalálási valószínűség: $w = \frac{x_2 - x_1}{a}$ (klasszikus Newtoni mechanika) amint $n \longrightarrow \infty$

Bohr-féle korrespondenciaelv

$$E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2\mu a^2} \quad \text{ahol } n = 1,2,3\ldots$$

$$\Psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right)$$



A dobozba zárt részecske

Kétdimenziós doboz

- Stacionárius Schrödinger-egyenlet 2-dimenziós alakja:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\Psi}{\partial y^2}\right) = E\Psi$$

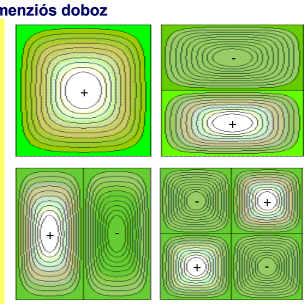
- Két dimenzió esetében két n értékkel (n_1 és n_2) kell számolni.
- Változók szétválasztása:

$$\Psi(x,y) = X(x)Y(y)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(Y\frac{d^2X}{dx^2} + X\frac{d^2Y}{dy^2}\right) = EXY$$

- Megoldás:

$$E = E^X + E^Y = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{d^2X}{dx^2} + \frac{d^2Y}{dy^2}\right)$$



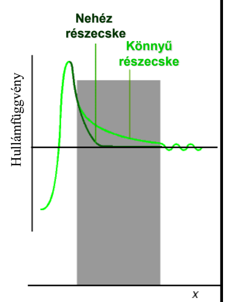
A dobozba zárt részecske

Alagúteffektus

• Ha a dobozba zárt részecske potenciális energiája a doboz falaiban nem válik végtelenné, akkor ezen a helyen a hullámfüggvénye sem csökken hirtelen zérussá.
• Vékony falak esetén (ahol a potenciális energia véges távolság után ismét zérus) a hullámfüggvény exponenciális csökkenése a fal másik oldalán abbamarad, és újra a doboz belsejében megszokott oszcilláció következik.
• A részecske megtalálható a doboz falain kívül is, noha – a klasszikus mechanika alapján – a szökéshez nincs elég energiája.
• A potenciálgát belsejében:

$$V > 0 \quad \text{és}$$

$$\frac{\mathrm{d}^2\Psi}{\mathrm{d}x^2} = \frac{2\mu(V-E)\Psi}{\hbar}$$



• Az egyenlet megoldása:

$$\Psi = Ae^{\kappa x} + Be^{-\kappa x} \quad \text{ahol } \kappa = \left\{\frac{2\mu(V-E)\Psi}{\hbar^2}\right\}^{1/2}$$

A harmonikus oszcillátor

Klasszikus mechanika

• Lineáris erőtörvényű rugóra kötött test.

$$F_x = -kx$$

• Mozgásegyenlet (Newton II. törvénye):

$$\mu\frac{\mathrm{d}^2x}{\mathrm{d}t^2} = -kx$$

• Megoldás: $x(t) = A\sin(\omega t + \alpha)$

kezdőfázis

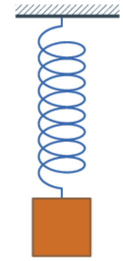
körfrekvencia

ahol $\omega = \sqrt{\dfrac{k}{\mu}} = 2\pi\nu = \dfrac{2\pi}{T}$

amplitudó

$$A = \sqrt{\frac{2E}{k}} = \sqrt{\frac{\mu|\mathrm{v}|^2 + kx^2}{k}}$$

részecske sebessége



A harmonikus oszcillátor

Klasszikus mechanika

• Lineáris erőtörvényű rugóra kötött test.

$$F_x = -kx$$

• Mozgásegyenlet (Newton II. törvénye):

$$\mu\frac{\mathrm{d}^2x}{\mathrm{d}t^2} = -kx$$

• Megoldás: $x(t) = A\sin(\omega t + \alpha)$

kezdőfázis

körfrekvencia

ahol $\omega = \sqrt{\dfrac{k}{\mu}} = 2\pi\nu = \dfrac{2\pi}{T}$

amplitudó

$$A = \sqrt{\frac{2E}{k}} = \sqrt{\frac{\mu|\mathrm{v}|^2 + kx^2}{k}}$$

részecske sebessége

Kvantummechanika

• Stacionárius Schrödinger-egyenlet:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\mathrm{d}^2\Psi}{\mathrm{d}x^2} + \tfrac{1}{2}kx^2\Psi = E\Psi$$

Határfeltétel: $\Psi \to 0$, ha $x \to \pm\infty$
Általános megoldás
Normalizálás

$$E_n = \left(n + \tfrac{1}{2}\right)\hbar\omega = \left(n + \tfrac{1}{2}\right)h\nu$$

$$\Psi_n(\xi) = \left(\frac{\sqrt{\beta/\pi}}{2^n n!}\right)^{1/2} H_n(\xi)e^{-\xi^2/2}$$

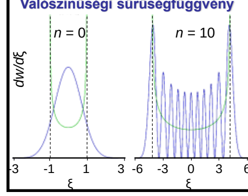
Hermite-polinom

ahol $\beta = \dfrac{\mu\omega}{\hbar}$, $\xi = \sqrt{\beta}x$ és $n = 0,1,2\ldots$

A harmonikus oszcillátor

n	$H_n(\xi)$
0	1
1	2ξ
2	$4\xi^2 - 2$
3	$8\xi^3 - 12\xi$
4	$16\xi^4 - 48\xi^2 + 12$

Valószínűségi sűrűségfüggvény



Kvantummechanika

• Stacionárius Schrödinger-egyenlet:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\mathrm{d}^2\Psi}{\mathrm{d}x^2} + \tfrac{1}{2}kx^2\Psi = E\Psi$$

Határfeltétel: $\Psi \to 0$, ha $x \to \pm\infty$
Általános megoldás
Normalizálás

$$E_n = \left(n + \tfrac{1}{2}\right)\hbar\omega = \left(n + \tfrac{1}{2}\right)h\nu$$

$$\Psi_n(\xi) = \left(\frac{\sqrt{\beta/\pi}}{2^n n!}\right)^{1/2} H_n(\xi)e^{-\xi^2/2}$$

Hermite-polinom

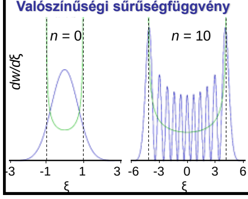
ahol $\beta = \dfrac{\mu\omega}{\hbar}$, $\xi = \sqrt{\beta}x$ és $n = 0,1,2\ldots$

A harmonikus oszcillátor

n	$H_n(\xi)$
0	1
1	2ξ
2	$4\xi^2 - 2$
3	$8\xi^3 - 12\xi$
4	$16\xi^4 - 48\xi^2 + 12$

Bohr-féle korrespondenciaelv

Valószínűségi sűrűségfüggvény



Kvantummechanika

• Stacionárius Schrödinger-egyenlet:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\mathrm{d}^2\Psi}{\mathrm{d}x^2} + \tfrac{1}{2}kx^2\Psi = E\Psi$$

Határfeltétel: $\Psi \to 0$, ha $x \to \pm\infty$
Általános megoldás
Normalizálás

$$E_n = \left(n + \tfrac{1}{2}\right)\hbar\omega = \left(n + \tfrac{1}{2}\right)h\nu$$

$$\Psi_n(\xi) = \left(\frac{\sqrt{\beta/\pi}}{2^n n!}\right)^{1/2} H_n(\xi)e^{-\xi^2/2}$$

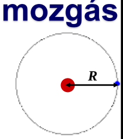
Hermite-polinom

ahol $\beta = \dfrac{\mu\omega}{\hbar}$, $\xi = \sqrt{\beta}x$ és $n = 0,1,2\ldots$

Kvantummechanikai keringő mozgás

• Stacionárius Schrödinger-egyenlet kiindulási alakja (most már 2 dimenziós mozgásra):

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\Psi}{\partial y^2}\right) = E\Psi$$



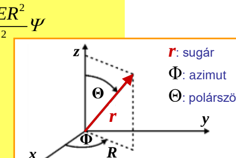
Polárkoordináták bevezetésével (a részecske az xy síkban mozog):

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{\partial^2\Psi}{\partial r^2} + \frac{1}{r}\frac{\partial\Psi}{\partial r} + \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2\Psi}{\partial\Phi^2}\right) = E\Psi$$

Mivel $r = R = \text{állandó}$:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{1}{R^2}\frac{\partial^2\Psi}{\partial\Phi^2}\right) = E\Psi \quad \text{vagy} \quad \frac{\partial^2\Psi}{\partial\Phi^2} = -\frac{2\mu ER^2}{\hbar^2}\Psi$$

Feltétel: $\Psi(\Phi) = \Psi(\Phi + 2\pi)$



Kvantummechanikai keringő mozgás

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{1}{R^2}\frac{\partial^2\Psi}{\partial\Phi^2}\right)=E\Psi \quad \text{vagy} \quad \frac{\partial^2\Psi}{\partial\Phi^2}=-\frac{2\mu ER^2}{\hbar^2}\Psi$$

Feltétel: $\Psi(\Phi)=\Psi(\Phi+2\pi)$

• Megoldás: $\Psi(\Phi)=Ne^{im\Phi}=N\left[\cos(m\Phi)+\mathrm{i}\sin(m\Phi)\right]$

Stacionárius energiaérték és hullámfüggvény:

$E_m=\frac{m^2\hbar^2}{2\Theta}$ ahol $m=0,\pm1,\pm2\ldots$

$\Psi_m(\Phi)=\left(\frac{1}{2\pi R}\right)^{1/2}e^{im\Phi}$

Kvantummechanikai keringő mozgás

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{1}{R^2}\frac{\partial^2\Psi}{\partial\Phi^2}\right)=E\Psi \quad \text{vagy} \quad \frac{\partial^2\Psi}{\partial\Phi^2}=-\frac{2\mu ER^2}{\hbar^2}\Psi$$

Feltétel: $\Psi(\Phi)=\Psi(\Phi+2\pi)$

• Megoldás: $\Psi(\Phi)=Ne^{im\Phi}=N\left[\cos(m\Phi)+\mathrm{i}\sin(m\Phi)\right]$

Stacionárius energiaérték és hullámfüggvény:

$E_m=\frac{m^2\hbar^2}{2\Theta}$ ahol $m=0,\pm1,\pm2\ldots$

$\Psi_m(\Phi)=\left(\frac{1}{2\pi R}\right)^{1/2}e^{im\Phi}$

• Ha a rendszer adott energiaértékéhez egynél több hullámfüggvény (állapot) tartozik, degenerációról beszélünk.

• Az $m \neq 0$ szerinti energiaértékek mindegyike kétszeresen degenerált.

z-irányú impulzusmomentum $L_z = m\hbar$

• Mind a klasszikus-, mind a kvantummechanikában igaz, hogy: $E=\frac{L_z^2}{2\Theta}$

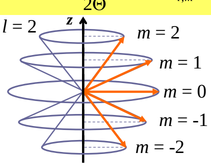
Kvantummechanikai keringő mozgás

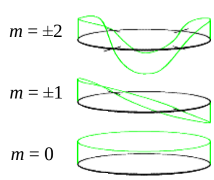
Gömbfelületen mozgó részecske

• A stacionárius Schrödinger-egyenlet teljes, háromdimenziós alakjából kell kiindulni.

• Két kvantumszám ($l = 0,1,2\ldots$ és $m = -l,(-l+1)\ldots0\ldots(l-1),l$) szerepel a megoldásban:

$E=\frac{l(l+1)\hbar^2}{2\Theta}$ és $\Psi_{l,m}=N_{l,m}P_l^{|m|}(\cos\Theta)e^{im\Phi}$





Minden energiaértékhez ($2l + 1$) hullámfüggvény tartozik.

Kvantummechanikai keringő mozgás

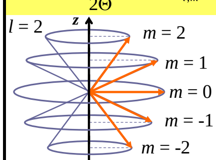
Gömbfelületen mozgó részecske

• A stacionárius Schrödinger-egyenlet teljes, háromdimenziós alakjából kell kiindulni.

• Két kvantumszám ($l = 0,1,2\ldots$ és $m = -l,(-l+1)\ldots0\ldots(l-1),l$) szerepel a megoldásban:

$E=\frac{l(l+1)\hbar^2}{2\Theta}$ és $\Psi_{l,m}=N_{l,m}P_l^{|m|}(\cos\Theta)e^{im\Phi}$

asszociált Legendre-polinom



$$P_l^{|m|}(\xi)=\left(2^l\, l!\right)^{-1}\left(1-\xi^2\right)^{|m|/2}\frac{d^{\,l+|m|}}{d\xi^{\,l+|m|}}\left(\xi^2-1\right)^l$$

• Ha a rendszer adott energiaértékéhez egynél több hullámfüggvény (állapot) tartozik, degenerációról beszélünk.

• Az $m \neq 0$ szerinti energiaértékek mindegyike kétszeresen degenerált.

z-irányú impulzusmomentum $L_z = m\hbar$

• Mind a klasszikus-, mind a kvantummechanikában igaz, hogy: $E=\frac{L_z^2}{2\Theta}$

Kvantummechanikai keringő mozgás

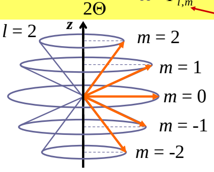
Gömbfelületen mozgó részecske

• A stacionárius Schrödinger-egyenlet teljes, háromdimenziós alakjából kell kiindulni.

• Két kvantumszám ($l = 0,1,2\ldots$ és $m = -l,(-l+1)\ldots0\ldots(l-1),l$) szerepel a megoldásban:

$E=\frac{l(l+1)\hbar^2}{2\Theta}$ és $\Psi_{l,m}=N_{l,m}P_l^{|m|}(\cos\Theta)e^{im\Phi}$

normált gömbfüggvények



l	m	$\Psi_{l,m}$
0	0	$(1/4\pi)^{1/2}$
1	1	$(3/8\pi)^{1/2}\sin\Theta\exp(\mathrm{i}\Phi)$
1	0	$(3/4\pi)^{1/2}\cos\Theta$
1	-1	$(3/8\pi)^{1/2}\sin\Theta\exp(-\mathrm{i}\Phi)$
2	2	$(5/32\pi)^{1/2}\sin^2\Theta\exp(2\mathrm{i}\Phi)$
2	1	$(5/8\pi)^{1/2}\cos\Theta\sin\Theta\exp(\mathrm{i}\Phi)$
2	0	$(5/16\pi)^{1/2}(3\cos^2\Theta-1)$
2	-1	$(5/8\pi)^{1/2}\cos\Theta\sin\Theta\exp(\mathrm{i}\Phi)$
2	-2	$(5/32\pi)^{1/2}\sin^2\Theta\exp(-2\mathrm{i}\Phi)$

Variációs módszer

A stacionárius Schrödinger-egyenlet közelítő megoldása

• Akkor használjuk, ha
valamely kvantummechanikai feladat egzakt megoldása nem adható meg,
csak korlátozott pontosságú információra van szükség.

• Az alapállapot meghatározására szolgál.

• Stacionárius Schrödinger-egyenlet: $H\Psi=E\Psi$

ahol $H=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta+V(x,y,z)$ (Hamilton-operátor)

Az alapállapotban: $H\Psi_0=E_0\Psi_0$

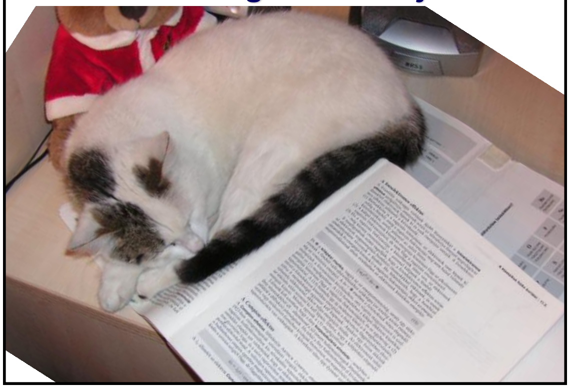
Ezt átrendezve és integrálva: $E_0=\frac{\int\Psi_0^* H\Psi_0\,\mathrm{d}V}{\int\Psi_0^*\Psi_0\,\mathrm{d}V}$

• Ha az alapállapot pontos hullámfüggvénye ismeretlen, a pontos energia sem határozható meg ezzel a képlettel, viszont választhatunk egy Ψ próbafüggvényt: $E=\frac{\int\Psi^* H\Psi\,\mathrm{d}V}{\int\Psi^*\Psi\,\mathrm{d}V}$

Ha $\Psi\approx\Psi_0$, akkor várhatóan $E\approx E_0$.

Ugyanakkor igazolható, hogy a Ψ próbafüggvénnyel előállított E nem kisebb, mint E_0.

Schrödinger macskája?



Schrödinger macskája

• Erwin Schrödinger nevéhez fűződő gondolatkísérlet.
• Ezzel kívánta szemléltetni a mikrovilágban uralkodó törvények hétköznapi szemlélet számára meghökkentő idegenszerűségét, azt, hogy a részecskék egyidejűleg több helyen, különféle állapotokban lehetnek. (A kvantummechanikában szuperpozíció elvének nevezzük, amikor egy részecske vagy hullám ún. kevert állapotban van, azaz bizonyos tulajdonságait nem tudjuk egyértelműen megállapítani. A részecske addig marad ebben, amíg valamilyen módon meg nem állapítjuk, hogy valójában hol és milyen állapotban van. A probléma ott kezdődik, hogy mérés (megfigyelés) hatására a szuperpozíció összeroppan, és a részecske egyértelműen a lehetséges állapotok egyikébe kerül.)
• **Teller Ede** egy 1996. október 21-én, a Debreceni Akadémiai Bizottság előtt tartott előadásában így írja le a kísérletet Schrödinger szemszögéből:
„*Tegyük fel, hogy van egy macskám. Ezt beteszem egy ketrecbe, és a ketrec mellé odateszek egy radioaktív készítményt, amely percenként 50%-os valószínűséggel bocsát ki egy alfa-részecskét. Egy számlálót is odateszek, ami egy percre bekapcsol. Ha ez alatt a perc alatt jön egy alfa-részecske, akkor a számláló megindul, kinyit egy kis ajtót, bejön egy kémiai méreg, amitől a macska meghal. Ha pedig nem jött alfa-részecske ebben a percben, a macska életben marad. Én ezt nem figyelem. A kísérlet végén a macska állapotfüggvénye olyan, hogy a macska egy fél valószínűséggel él, és egy fél valószínűséggel halott. Heisenberg szerint – mondja Schrödinger – ha most hirtelen ránézek a macskára, attól a tekintettől a macska tényleg meghal, vagy a macska tényleg megél. Hát kérem szépen – mondta Schrödinger –, én ebből egy szót sem hiszek. Ez így nem lehet.*"
Schrödinger macskája tehát élet és halál kvantummechanikai szuperpozíciójában lebeg.

Schrödinger macskája

Schrödinger macskája

Kísérleti vizsgálata: NIST (Boulder, Colorado), 1996

• Berilliumionokat különítettek el, és tartottak elektromágneses csapdában az abszolút nulla fokhoz közeli hőmérsékleten, külső energia és sugárzási forrásoktól elszigetelten. Így csaknem mozdulatlan (hőmozgásában is korlátozott) ionnak csupán két lehetséges kvantumállapota van: a legkülső pályán maradt egyetlen elektron mágneses momentuma felfelé vagy lefelé mutathat. A kvantumfizika törvényei szerint mindaddig, amíg az elektront valamilyen módon meg nem zavarjuk, az ion e két állapot fele-fele arányú keverékében, koherens szuperpozíciójában van.
• A berilliumion szuperpozíciójának két, térbelileg eleinte csaknem teljesen átfedő összetevőjét külső elektromágneses tér alkalmazásával fokozatosan eltávolították egymástól, egészen az atomi átmérő tízszereséig növelve a köztük lévő távolságot. A folyamatot sikerült megfordítaniuk is, azaz visszaállítani a koherens szuperpozíciót.

Lehetséges gyakorlati alkalmazás: kvantumszámítógépek

• A kvantumszámítógépek azon az elven alapulnak, hogy míg egy hagyományos számítógép bináris számrendszerben, csak 1, illetve 0 bitekkel képes dolgozni, addig egy kvantumbit (qubit) egyfajta szuperpozícionált állapotban bárhol állhat a két érték között. Ahogy a qubitek száma nő, úgy növekszik a különböző állapotok száma, amelyeket megtestesíthetnek az összekapcsolt kvantum bitek. Két qubit 4 különböző állapotra képes, amelyeket szimultán fel lehet dolgozni, míg három qubit már 8-ra, és így tovább, exponenciálisan növekvően.

Schrödinger macskája