Szabad részecske

Legyen Ψ az m_0 nyugalmi tömeggel rendelkező, nem relativisztikus v sebességgel mozgó szabad részecske hullámfüggvénye (tehát most $V = 0$, egyszerű példa).
Ez a függvény tehát megoldása az általános hullámegyenletnek:

$$\Delta\Psi - \frac{1}{{v_f}^2}\frac{\partial^2\Psi}{\partial t^2} = 0$$

v_f hullám terjedési sebessége (fázissebesség)

A megoldást a szokásos síkhullám alakban keressük (Descartes koordinátarendszerben):

$$\Psi(x, y, z, t) = Ce^{i\left(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega t\right)} = Ce^{i(k_x x + k_y y + k_z z - \omega t)}$$

$\vec{k}$: körhullámszám vektor $\quad \left|\vec{k}\right| = k = \dfrac{2\pi}{\lambda} = \dfrac{|\vec{p}|}{\hbar} = \dfrac{p}{\hbar} = \dfrac{m_0 v}{\hbar}$

ω: körfrekvencia $\quad \omega = 2\pi f = \dfrac{2\pi E}{h} = \dfrac{E}{\hbar} = \dfrac{m_0 v^2}{2\hbar}$

A megoldás változása időben:

$$\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -i\omega\Psi = -i\frac{E}{\hbar}\Psi$$

Tehát az **energia (Hamilton) operátorra** kapjuk: $\boldsymbol{E} = \boldsymbol{H} = i\hbar\dfrac{\partial}{\partial t}$

És megkapjuk az időtől függő Schrödinger-egyenletet: $\boxed{i\hbar\dfrac{\partial\Psi}{\partial t} = \boldsymbol{H}\Psi}$ általános érvényű!

Fázissebeség és csoportsebesség

Behelyettesítve a Ψ hullámfüggvényt az általános hullámegyenletbe:

$$\Delta\Psi - \frac{1}{{v_f}^2}\frac{\partial^2\Psi}{\partial t^2} = 0 \qquad \leftarrow \ \Psi(x,y,z,t) = Ce^{i(k_x x + k_y y + k_z z - \omega t)}$$

$$\left(-{k_x}^2 - {k_y}^2 - {k_z}^2 + \frac{\omega^2}{{v_f}^2}\right)\Psi = 0$$

$$-k^2 + \frac{\omega^2}{{v_f}^2} = 0 \ \rightarrow v_f = \frac{\omega}{k} = \frac{E/\hbar}{p/\hbar} = \frac{E}{p} = \frac{p^2/2m_0}{p} = \frac{p}{2m_0} = \frac{v}{2}$$

A **fázissebesség** tehát **nem** a részecske sebességét adja!

<u>Csoportsebesség:</u>

$$\boxed{v_{cs} = \frac{d\omega}{dk}}$$

$$\omega = \frac{E}{\hbar} = \frac{p^2}{2m_0\hbar} \qquad k = \frac{p}{\hbar}$$

$$\omega = \frac{\hbar k^2}{2m_0}$$

$$v_{cs} = \frac{d\omega}{dk} = \frac{\hbar k}{m_0} = \frac{\hbar}{m_0}\frac{p}{\hbar} = \frac{p}{m_0} = v$$

Tehát a **csoportsebesség** adja a részecske sebességét!

Lendület és energia operátor

Vegyük a megoldásul kapott hullámfüggvényünk pl. x koordináta szerinti deriváltját:

$$\Psi(x, y, z, t) = Ce^{i(k_x x + k_y y + k_z z - \omega t)}$$

$$\frac{\partial \Psi}{\partial x} = ik_x \Psi = i\frac{p_x}{\hbar}\Psi \quad \rightarrow \quad p_x \Psi = -i\hbar\frac{\partial \Psi}{\partial x}$$

Innen látható, hogy a lendület operátora: $\boldsymbol{p_x} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$

Hasonlóan a többi komponensre: $\boldsymbol{p_y} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial y}$ és $\boldsymbol{p_z} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial z}$

Ebből származtathatjuk a kinetikus energia operátorát:

$$\boldsymbol{T} = \frac{1}{2m_0}\left(\boldsymbol{p_x}^2 + \boldsymbol{p_y}^2 + \boldsymbol{p_z}^2\right) = -\frac{\hbar^2}{2m_0}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) = -\frac{\hbar^2}{2m_0}\Delta$$

Amennyiben a részecske $V(x, y, z)$ potenciáltérben tartózkodik, a teljes energia operátora:

$$\boldsymbol{E} = \boldsymbol{H} = \boldsymbol{T} + \boldsymbol{V} = -\frac{\hbar^2}{2m_0}\Delta + V(x, y, z)$$

Az x, y, z koordináták operátora egyszerűen a koordinátával való szorzás.
A többi fizikai mennyiség operátora ezekből származtatható ehhez hasonlóan.

Időtől független Schrödinger-egyenlet

Válasszuk le a szabad részecske Ψ hullámfüggvényéből az időfüggést az alábbi szerint:

$$\Psi(x, y, z, t) = \psi(x, y, z)e^{-i\omega t}$$

Beírva az eredeti hullámegyenletbe: $\Delta\Psi - \frac{1}{{v_f}^2}\frac{\partial^2\Psi}{\partial t^2} = 0$

$$\Delta\psi e^{-i\omega t} + \frac{\omega^2}{{v_f}^2}\psi e^{-i\omega t} = 0 \quad \rightarrow \quad \frac{\omega^2}{{v_f}^2} = \frac{4\pi^2 f^2}{\lambda^2 f^2} = \frac{4\pi^2}{\lambda^2} = \frac{4\pi^2 p^2}{h^2} = \frac{p^2}{\hbar^2} = \frac{2m_0 E}{\hbar^2}$$

Az exponenciális taggal egyszerűsítve kapjuk az időtől független Schrödinger-egyenletet:

$$\Delta\psi + \frac{2m_0 E}{\hbar^2}\psi = 0$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m_0}\Delta\psi = E\psi$$

Amennyiben a részecske *V*(*x*, *y*, *z*) potenciáltérben tartózkodik: $\frac{4\pi^2}{\lambda^2} = \frac{2m_0(E - V)}{\hbar^2}$

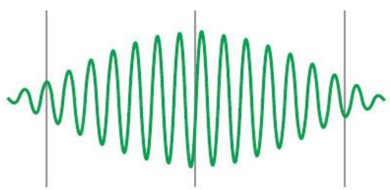
$$\Delta\psi + \frac{2m_0(E - V)}{\hbar^2}\psi = 0$$

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m_0}\Delta\psi + V(x, y, z)\psi = E\psi \quad \rightarrow \quad \boldsymbol{H}\psi = E\psi}$$

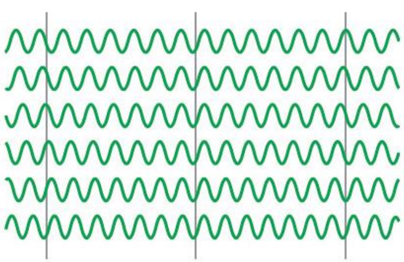
általános érvényű!

Részecske mint hullámcsomag

Egy adott pont környezetében valamilyen valószínűséggel megtalálható (lokalizált) részecske leírása egy hullámcsomaggal lehetséges.
A **hullámcsomag** egymáshoz közeli frekvenciájú (vagy hullámhosszú) sima síkhullámok megfelelő amplitúdójú szuperpozíciója.



A hullámcsomag az alatta lévő 6 hullámból adódik, melyeknek kissé eltérő hullámhosszai (vagy körhullámszámai k) vannak.
A csoportsebesség, vagyis a részecske sebessége, valójában a burkológörbének (vagyis a hullámcsomagnak) a sebessége.



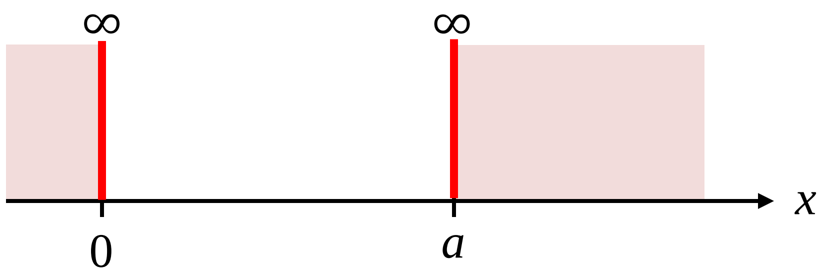
Valójában végtelen sok k értékre lenne szükség egy szűk Δk tartományon belül, hogy a hullámcsomag ne ismétlődjön.

Amennyiben egy jobban lokalizált hullámcsomagot kívánunk előállítani, akkor nagyobb Δk tartományból kell vennünk hullámokat, tehát a lendület bizonytalansága nagyobb lesz.

A különböző k értékek különböző sebességet jelentenek, így a kezdetben lokalizált hullámcsomag szétfolyik a diszperzió miatt!

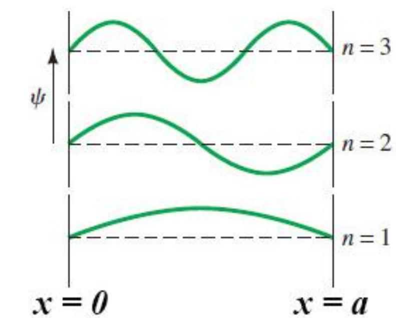
Egydimenziós dobozba zárt részecske

Vegyünk egy *a* hosszúságú tartományt (doboz), amelyen belül a részecske szabadon mozoghat, azon kívül viszont a potenciálfal magassága végtelen.



A dobozon kívül a hullámfüggvény nulla.
Tehát csomópontok vannak a határokon.
A dobozon belül: $V = 0$
Időtől független Schrödinger-egyenlet:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_0}\frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi$$



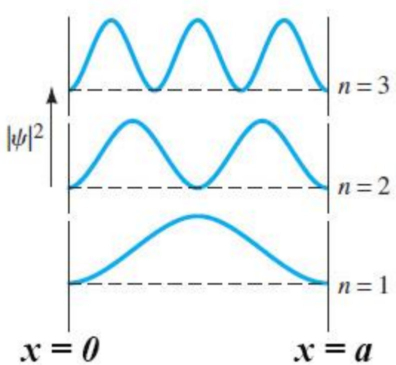
Határfeltételekből:

$$a = n\frac{\lambda}{2}$$

Megoldás alakja: $\psi(x) = Ce^{ikx}$

Behelyettesítve *k*-ra: $\frac{\hbar^2}{2m_0}k^2 = E$

Trigonometrikus függvényekkel: $\psi(x) = A\cos kx + B\sin kx$



Kvantált energiaszintek: $E_n = \frac{h^2}{8m_0a^2}n^2$

zérusponti energia *n* = 1

Határfeltételből és normalizálási feltételből:

$$A = 0 \qquad B = \sqrt{\frac{2}{a}}$$

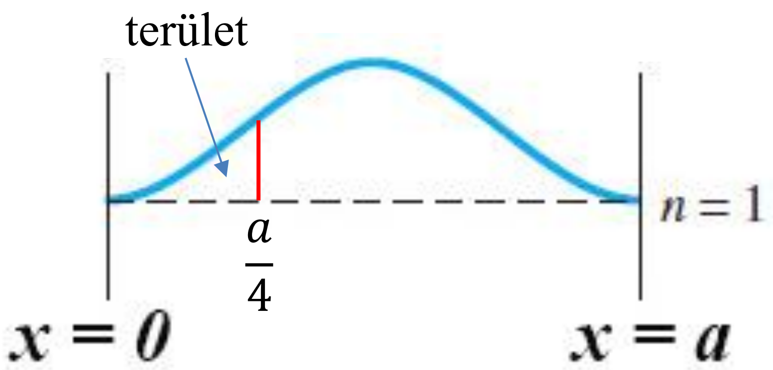
Példa:

Tegyük fel, hogy egy neutron atommag méretű egy dimenziós dobozba van bezárva. Mekkora a neutron alapállapoti energiája?

$$m_0 = 1{,}675 \cdot 10^{-27}\ \text{kg} \qquad a = 10^{-14}\ \text{m}$$

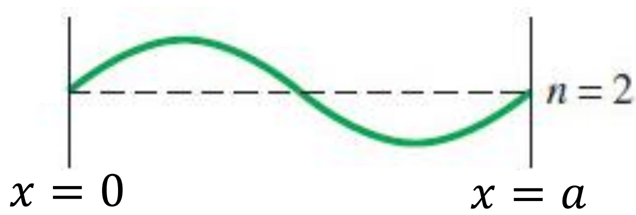
Példa:

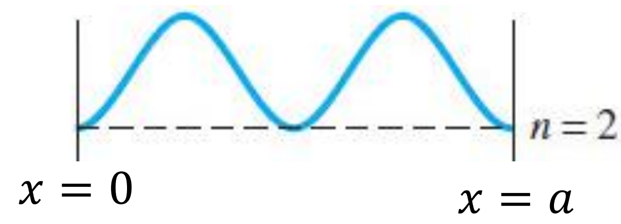
Számítsuk ki annak valószínűségét, hogy egy *a* oldalhosszúságú dobozba zárt elektron a doboz bal oldali negyedében található meg, ha az alapállapotban van!



Példa:

Számítsuk ki egy *a* oldalhosszúságú dobozba zárt elektron legvalószínűbb pozícióját és az átlagos pozícióját, ha az elektron az $n = 2$ első gerjesztett állapotban van!





Házi feladat 6:

1. Egy 10g tömegű gyöngyszem 10cm oldalhosszú dobozba van zárva és 2cm/s sebességgel mozog.
(a) Mekkora a gyöngyszem *n* kvantumszáma?
(b) Miért nem figyelhetjük meg a gyöngyszem energiájának kvantált természetét?
Segítség: számítsa ki az energiakülönbséget és ebből a sebességek különbségét az *n* és *n* +1 állapotok között!

2. Egy 10cm hosszú ideális vezetőben lévő delokalizált vezetési elektront vegyünk úgy mint egy dobozba zárt részecskét!
(a) Rajzolja fel az alapállapot és az első gerjesztett állapot hullámfüggvényét!
(b) Mekkora az energiakülönbség az alapállapot és az első gerjesztett állapot között?

3. Az *a* oldalhosszúságú dobozba zárt elektron esetében számítsa ki, hogy a doboz közepétől nézve mekkora távolságon belül tartózkodik az elektron az idő 90 százalékában, ha alapállapotban van (n = 1)!