Áthaladás egydimenziós potenciál lépcsőn

A teljes tartományt I. és II. tartományra bontjuk:

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

II. $$-\frac{\hbar^2}{2m_0}\frac{d^2\psi}{dx^2} + V_0\psi = E\psi \qquad (V_0 < \mathrm{E})$$

Megoldások alakja:

$$\psi_I = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x} \qquad\qquad \psi_{II} = Ce^{ik_2x}$$

Ezeket behelyettesítve:

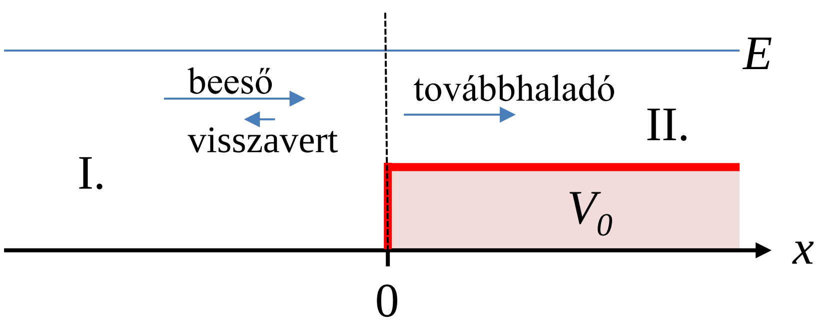
$$\frac{\hbar^2 {k_1}^2}{2m_0}\psi_I = E\psi_I \qquad {k_1}^2 = \frac{2m_0E}{\hbar^2} \qquad\qquad \frac{\hbar^2 {k_2}^2}{2m_0}\psi_{II} = (E - V_0)\psi_{II} \qquad {k_2}^2 = \frac{2m_0(E - V_0)}{\hbar^2}$$

A hullám intenzitása itt is az amplitúdó négyzetével arányos, mint az EM hullámoknál.
Tehát a visszaverődés (reflexió) valószínűsége: $R = \dfrac{B^*B}{A^*A} = B^*B$ ha $A = 1$

<u>jelölés</u>: $\psi' = \dfrac{d\psi}{dx}$

A hullámfüggvény és deriváltja folytonos a határon, vagyis az $x = 0$ helyen.

$$\psi_I(0) = \psi_{II}(0) \qquad\qquad {\psi_I}'(0) = {\psi_{II}}'(0)$$



Megoldás:

$$R = \frac{(k_1 - k_2)^2}{(k_1 + k_2)^2} = \frac{2E - V_0 - 2\sqrt{E(E - V_0)}}{2E - V_0 + 2\sqrt{E(E - V_0)}}$$

Példa:

Számítsuk ki, hogy hány részecskéből verődik átlagban 1 vissza egy egydimenziós potenciállépcsőről, ha:

a.) $V_0 = 0{,}1 \cdot E$

b.) $V_0 = 0{,}5 \cdot E$

Alagúteffektus

A teljes tartományt I., II. és III. tartományra bontjuk:

I. és III. $-\frac{\hbar^2}{2m_0}\frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi$

II. $-\frac{\hbar^2}{2m_0}\frac{d^2\psi}{dx^2} + V_0\psi = E\psi$ $(V_0 > \mathrm{E})$

Megoldások alakja:

$\psi_I = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$

$\psi_{II} = De^{-\alpha x} + Fe^{\alpha x}$

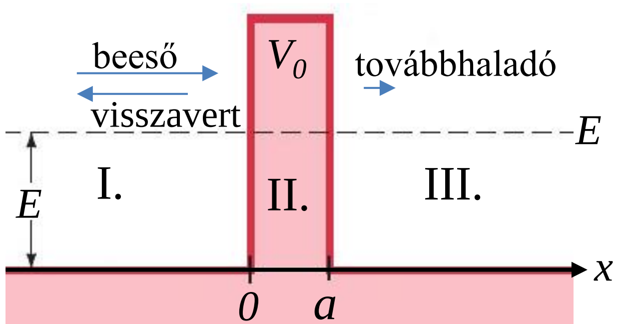
$\psi_{III} = Ce^{ikx}$

Ezeket behelyettesítve:

$\frac{\hbar^2 k^2}{2m_0}\psi_{I,III} = E\psi_{I,III}$ $k^2 = \frac{2m_0 E}{\hbar^2}$

$(V_0 - E)\psi_{II} = \frac{\hbar^2\alpha^2}{2m_0}\psi_{II}$ $\alpha^2 = \frac{2m_0(V_0 - E)}{\hbar^2}$

Az áthaladás (transzmisszió) valószínűsége: $T = \frac{C^*C}{A^*A} = C^*C$ ha $A = 1$



A hullámfüggvény és deriváltja folytonos a határokon, vagyis az $x = 0$ és $x = a$ helyeken.

$\psi_I(0) = \psi_{II}(0)$ $\psi_I{}'(0) = \psi_{II}{}'(0)$

$\psi_{II}(a) = \psi_{III}(a)$ $\psi_{II}{}'(a) = \psi_{III}{}'(a)$

Transzmisszió

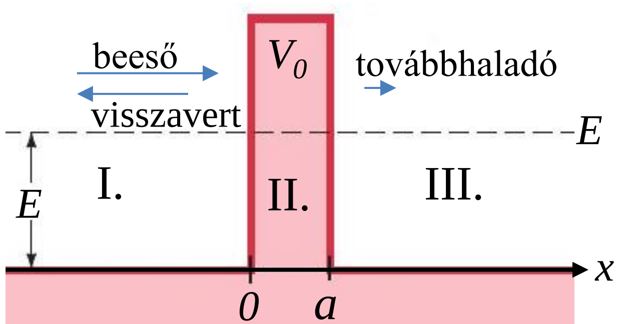
Kifejezve a B, D, F konstansokat C függvényében, és az utolsó egyenletbe írva kapjuk:

$$T = C^*C = \left[1 + \frac{1}{4}\left(\frac{k}{\alpha} + \frac{\alpha}{k}\right)^2 \sinh^2 \alpha a\right]^{-1} \qquad k^2 = \frac{2m_0 E}{\hbar^2} \qquad \alpha^2 = \frac{2m_0(V_0 - E)}{\hbar^2}$$

Amennyiben az αa értéke nagy, tehát vagy nagyon széles (a nagy) vagy nagyon magas ($V_0 \gg E$) a potenciálgát:

$$\sinh \alpha a = \frac{e^{\alpha a} - e^{-\alpha a}}{2} \approx \frac{e^{\alpha a}}{2}$$

$$T = C^*C \approx \left[\frac{1}{4}\left(\frac{k}{\alpha} + \frac{\alpha}{k}\right)^2 \frac{e^{2\alpha a}}{4}\right]^{-1} = \left[\frac{1}{16}\left(\frac{k}{\alpha} + \frac{\alpha}{k}\right)^2\right]^{-1} e^{-2\alpha a}$$



Beírva az α és k értékeit:

$$T = C^*C \approx \frac{16E(V_0 - E)}{{V_0}^2} e^{-2\alpha a}$$

Példa:

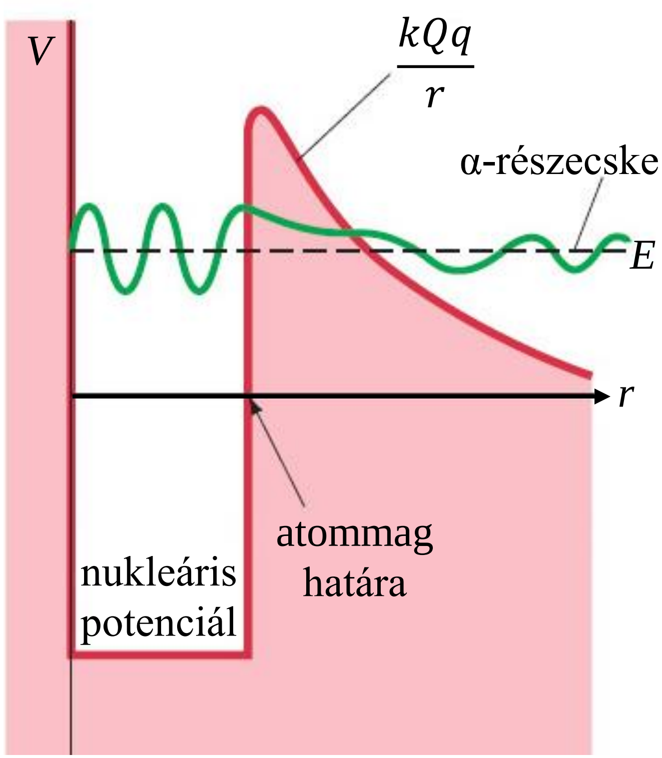
Egy 50 eV energiával rendelkező elektron 70 eV magasságú potenciálgáthoz érkezik. Milyen valószínűséggel tud átjutni a gát másik oldalára, ha annak szélessége

a) 1 nm

b) 0,1 nm?

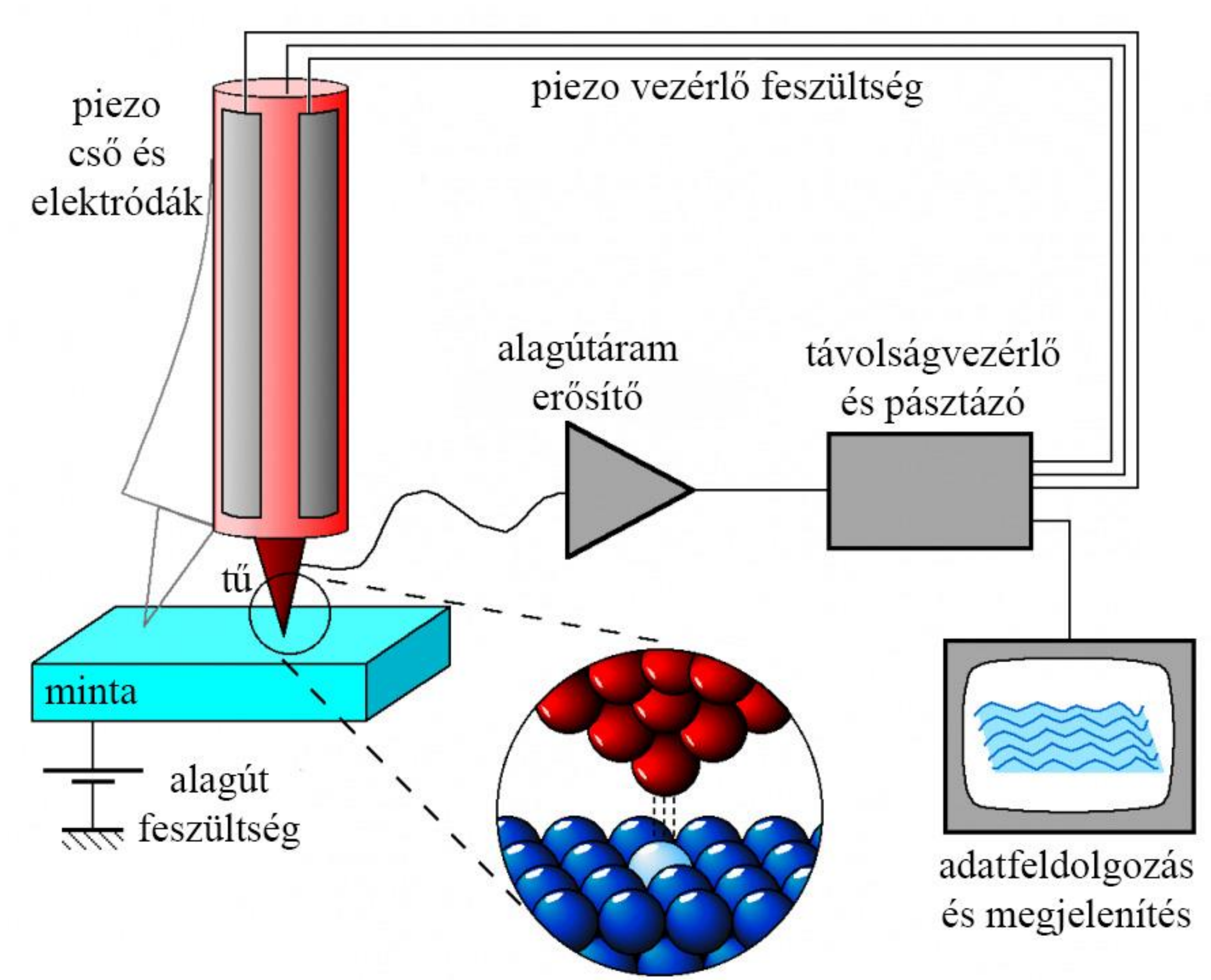
α-bomlás

Nagy atommagok esetében előfordul, hogy két proton és két neutron az atommag belsejében egy hélium atommagot alkotva elegendő energiára tesz szert, hogy átjusson a magerők és Coulomb-erő alkotta potenciálgáton.



Alagútáramos pásztázó mikroszkópia (STM)

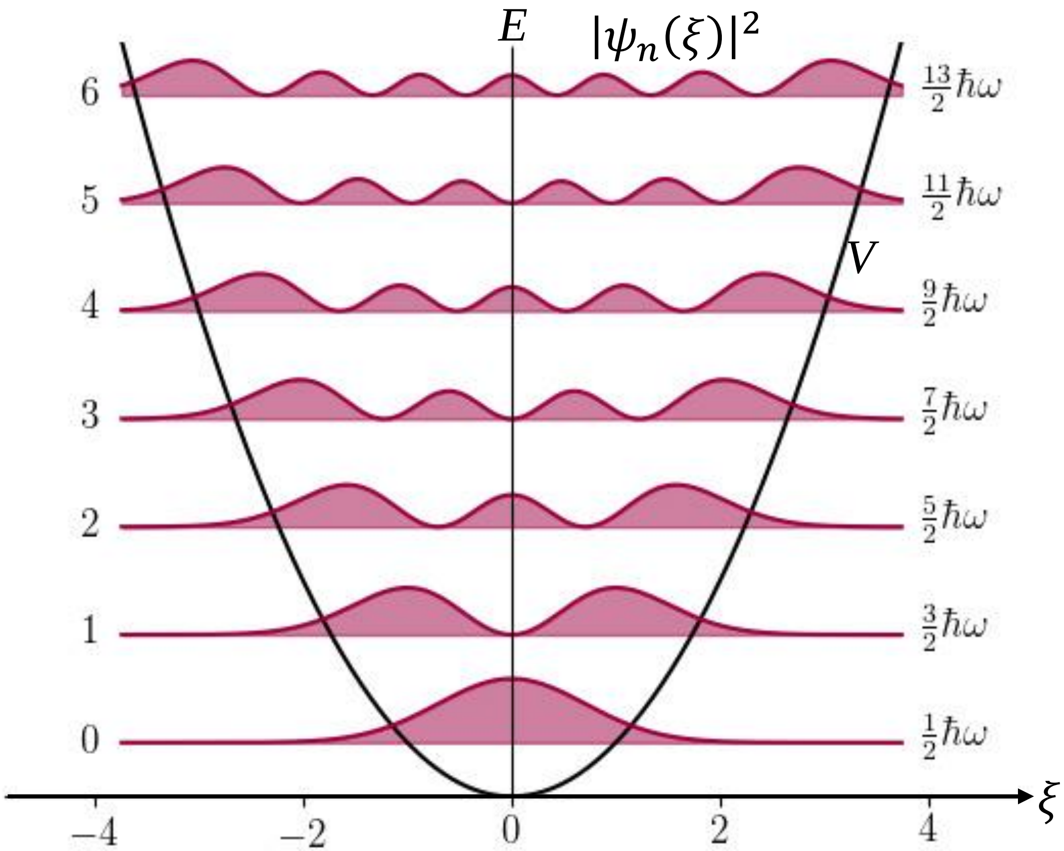
Az alagúteffektusra jellemzően a vákuumrésen az elektron áthaladása nagyon erősen függ a rés szélességétől. Emiatt az alagútáram szintén nagyon érzékeny a rés változására.
Piezo vezérlése: állandó nagyságú áramot megtartva változtatni kell a tű magasságát.
A mintán végigpásztázva ezeket a magasságokat rögzítik a minta morfológiájaként.



Lineáris harmonikus oszcillátor

Klasszikus esetben például rúgóra rögzített test: $V(x) = \frac{1}{2}Dx^2 = \frac{m_0\omega^2 x^2}{2}$ $\qquad \omega = \sqrt{\frac{D}{m_0}}$

$$-\frac{\hbar^2}{2m_0}\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{m_0\omega^2 x^2}{2}\psi = E\psi \quad \rightarrow \quad \frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m_0}{\hbar^2}\left(E - \frac{m_0\omega^2}{2}x^2\right)\psi = 0$$



Változócsere: $\xi = \sqrt{\frac{m_0\omega}{\hbar}}x$

Megoldás:

$$\psi_n(\xi) = A_n e^{-\frac{\xi^2}{2}} H_n(\xi)$$

Hermite-polinomok

$$H_0(\xi) = 1 \qquad H_1(\xi) = 2\xi$$

$$H_2(\xi) = 4\xi^2 - 2$$

<u>Energiák:</u>

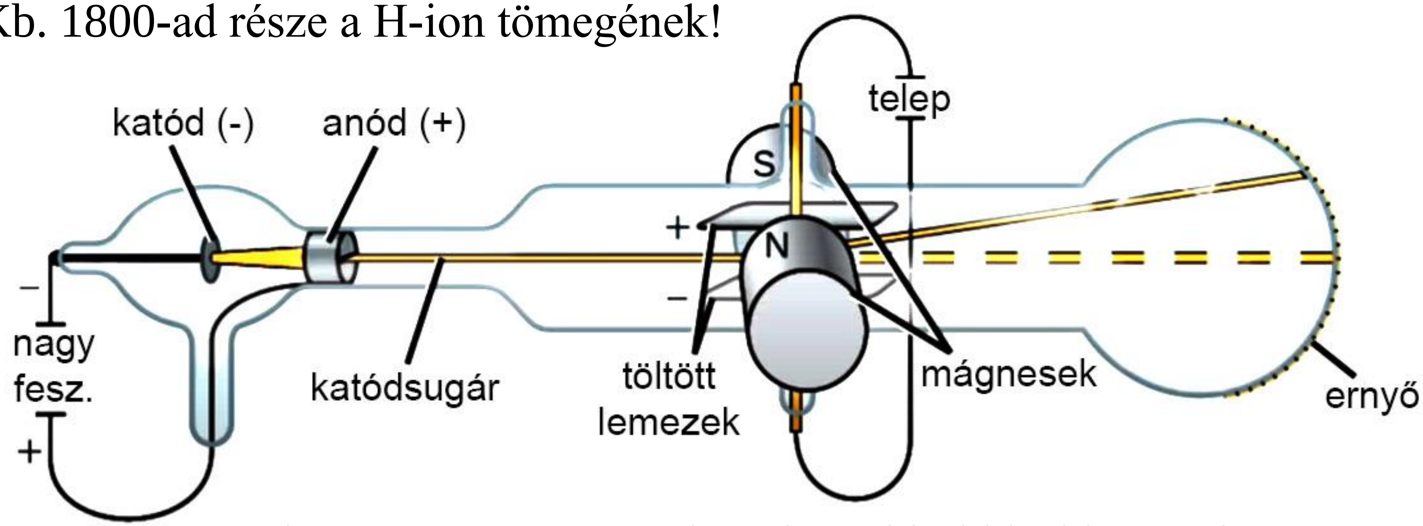
$$E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right) = hf\left(n + \frac{1}{2}\right)$$

Zérusponti energia: $E_0 = \frac{1}{2}hf$

Atommodellek - Az elektron felfedezése

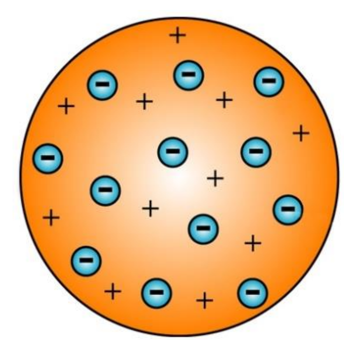
Ókori görögök (Demokritos): Minden anyag parányi, tovább már nem osztható részecskékből, atomokból áll (atom jelentése oszthatatlan).
Később Dalton az elemeket különböző atomoknak tulajdonította (kémia).
Egyéb bizonyítékok: kinetikus gázmodell sikere, Brown-mozgás, röntgen diffrakció.
Milliken kísérlet: elemi töltés → elektron töltése

Thomson: katódsugárcsővel meghatározta az elektron fajlagos töltését → elektron tömege Kb. 1800-ad része a H-ion tömegének!



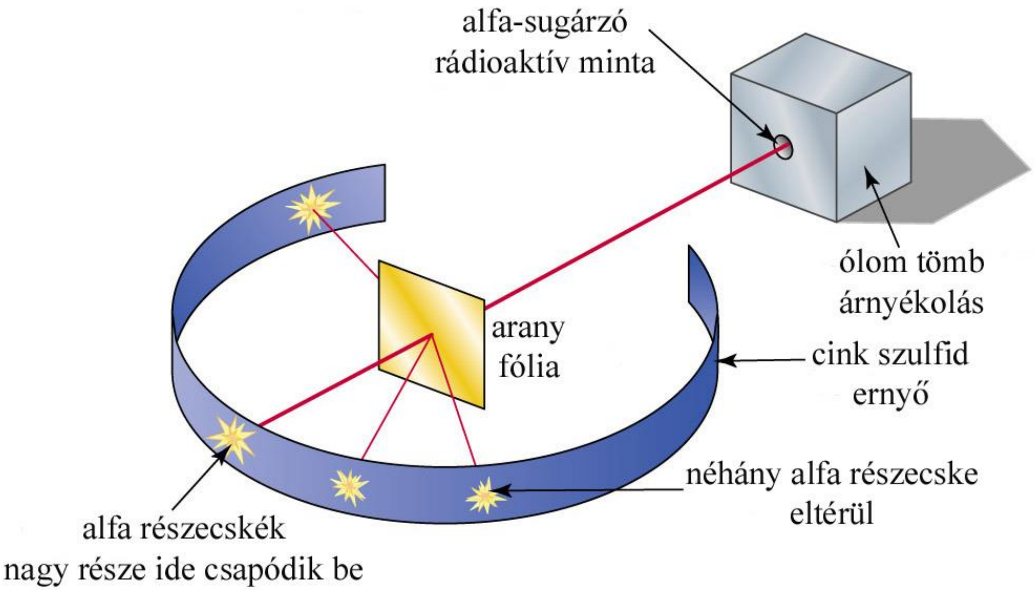
Tehát az atom nem oszthatatlan, abból kisebb részeket (elektron) lehet kiszakítani!

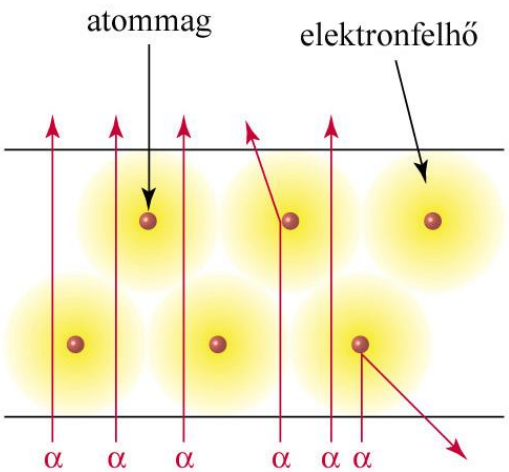
Thomson mazsolás puding atommodell: a pozitív kb. 10^{-10} m sugarú puding gömbben a negatív mazsolák az elektronok.



A Rutherford atommodell

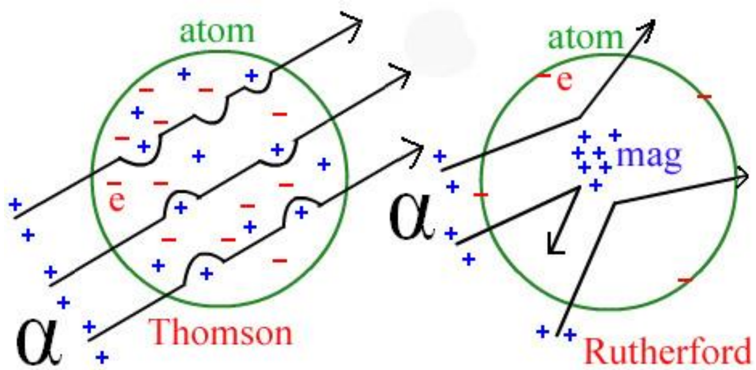
<u>Rutherford kísérlet (1911):</u> Az atom pozitív töltése és a tömeg nagy része egy nagyon kis helyre összpontosul. Ezt nevezte el atommagnak.





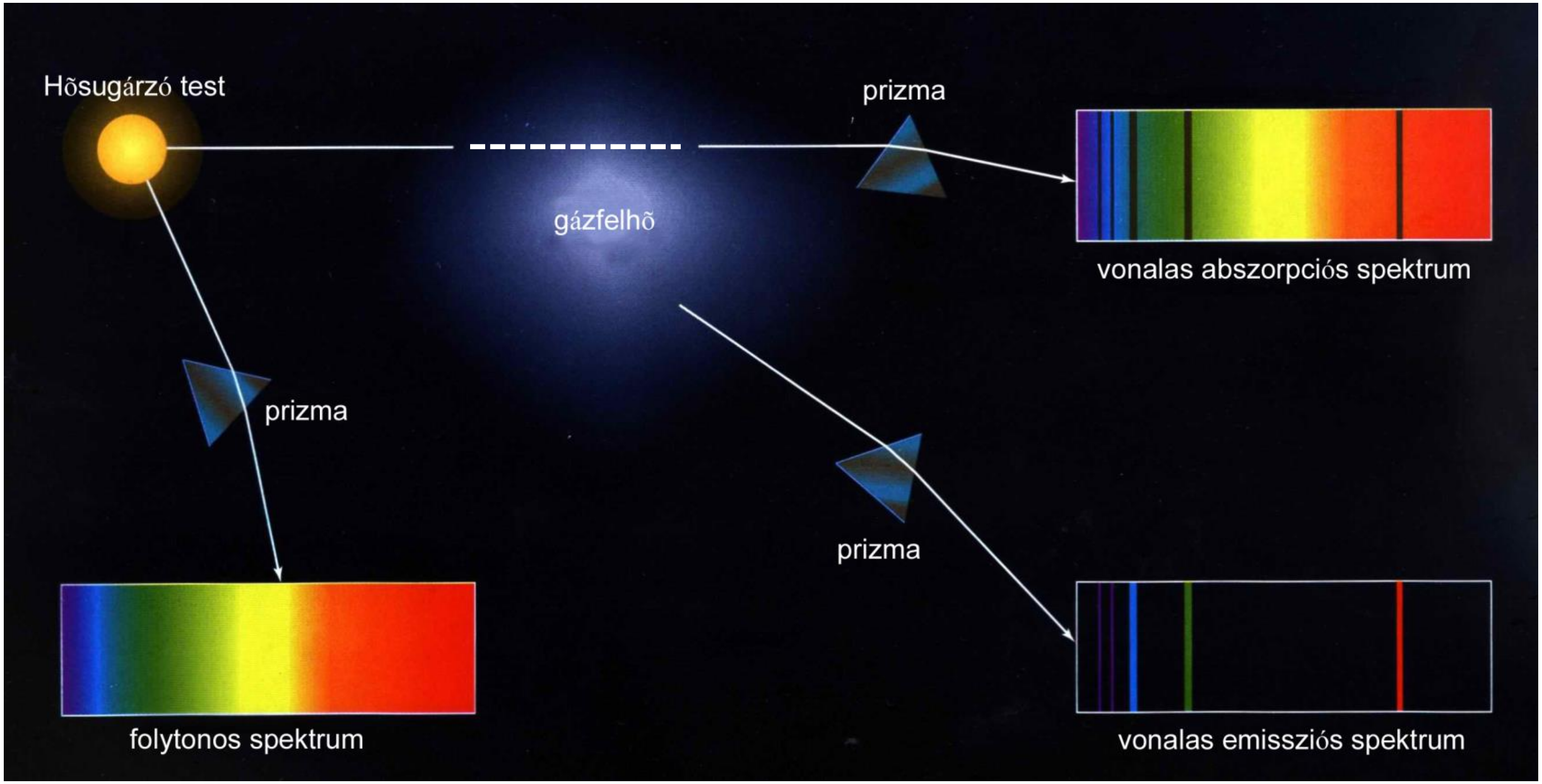
Az eltérülés ritka de nagymértékű.
Thomson puding atom-modellje nem lehet helyes.

Az atom mérete 10^{-10} m nagyságrendű (angström, Å).
Az atommagé 10^{-15} m (femtométer, fm)



Gázok emissziós és abszorpciós színképe

Szilárd testet folytonos spektrumú hősugárzásával ellentétben atomos gázok vagy gőzök csak bizonyos frekvencián sugároznak (emisszió), illetve bizonyos frekvenciájú sugárzást elnyelnek (abszorpció).



A színkép vonalai egyfajta ujjlenyomatként használhatók és segítségükkel távoli testek anyagának összetétele határozható meg.

Gázok színképének magyarázata - Bohr-posztulátumok

A jól meghatározott frekvenciájú kisugárzott, illetve elnyelt fotonokból arra lehet következtetni, hogy az atomokban csak bizonyos nagyságú energia átmenetek lehetségesek.

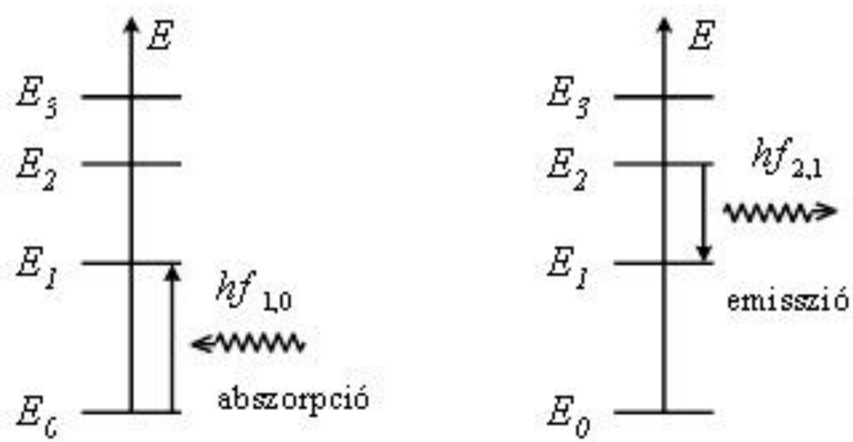
<u>Bohr-posztulátumok:</u>

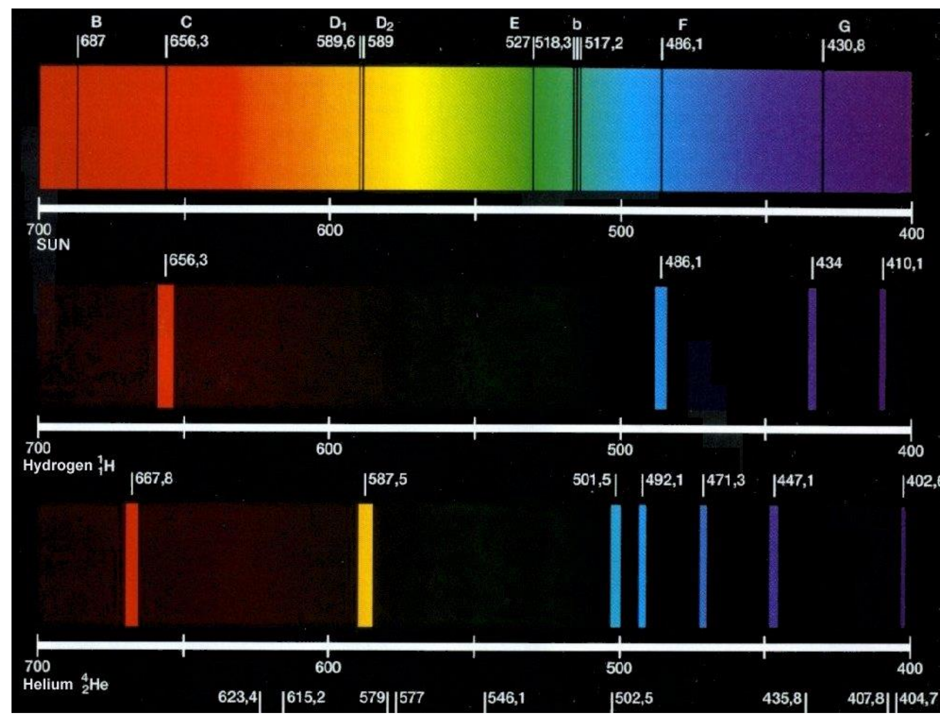
- Az atomokban az elektronok csak diszkrét energiaszinteken E_1, E_2, …, E_i tartózkodatnak és ezeken a stacionárius pályákon nem sugároznak.
- Az atomok csak akkor sugároznak (emisszió) ha az elektron egy magasabb energiájú pályáról egy alacsonyabbra kerül.

Az emisszió fordítottja az abszorpció.

Bohr-féle frekvencia feltétel:

$$E_i - E_j = hf_{ij}$$



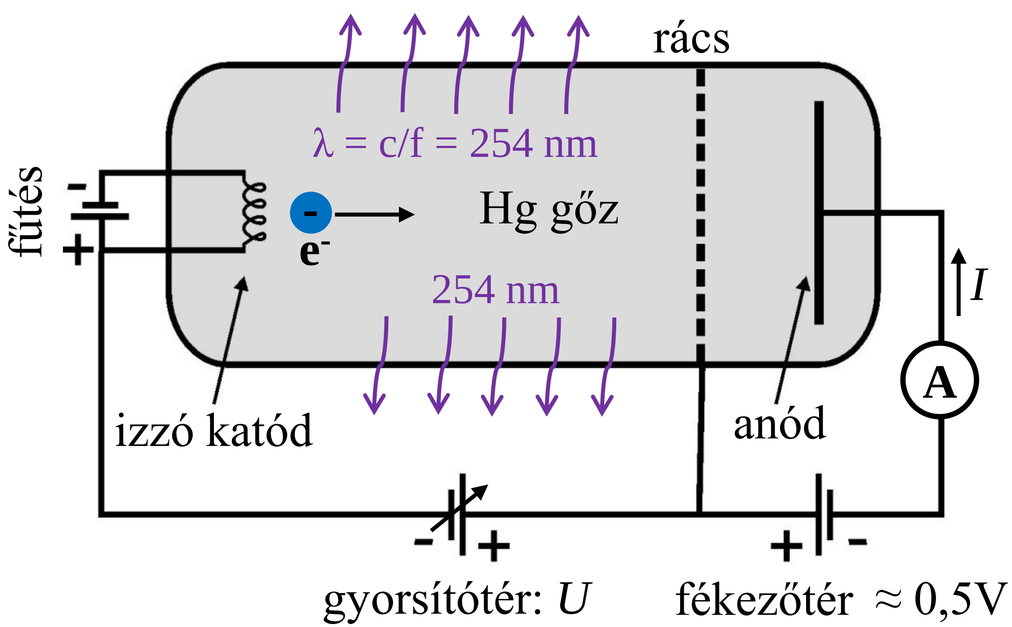


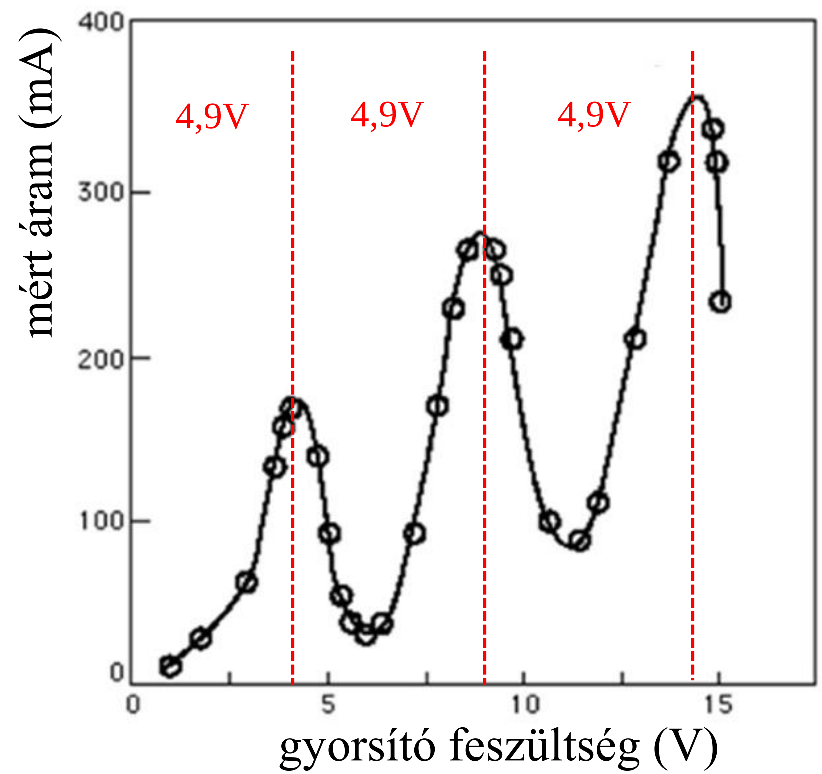
Frank-Hertz kísérlet

A kísérlet egy fontos bizonyítékot szolgáltat a Bohr-posztulátumokra.
Elektronokat gyorsítanak ritka higany gőzben.

- az izzókatódból kilépő elektronok az anód felé gyorsulnak
- amíg a gyorsító feszültség 4,9V alatt van (E_k < 4,9 eV) - rugalmas ütközés
- a 4,9 eV elérésekor az ütközés rugalmatlanná válik (az áram lecsökken)
- a 9,8 eV elérésekor az elektronok kétszer képesek rugalmatlanul ütközni és így tovább.
- a Hg atomokban a gerjesztett elektronok visszatérnek az alacsonyabb energiájú állapotba, miközben fotonokat bocsátanak ki a megfelelő frekvenciával:

$$f = \frac{\Delta E}{h} = \frac{4{,}9 \cdot 1{,}6 \cdot 10^{-19}}{6{,}623 \cdot 10^{-34}} = 1{,}183 \cdot 10^{15}\ \mathrm{Hz}$$





De Broglie hipotézise az atomi elektronra

Stacionárius esetben az atommag körül keringő elektron egy állóhullámnak felel meg.

Tehát a kör kerülete a hullámhossz egész számú többszöröse kell, hogy legyen:

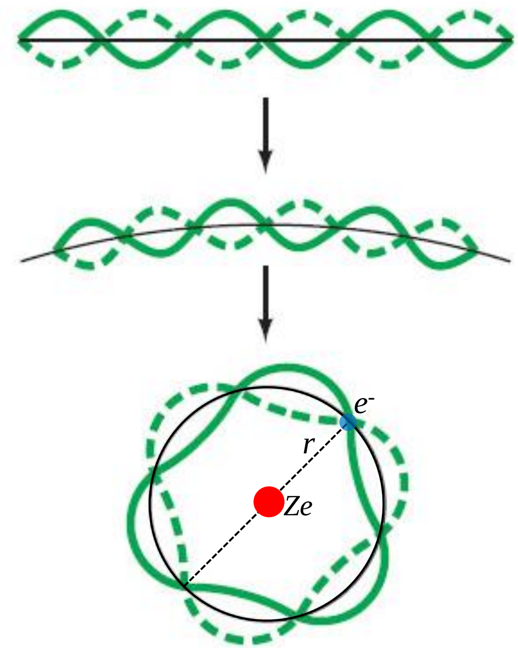
$$n\lambda = 2\pi r$$

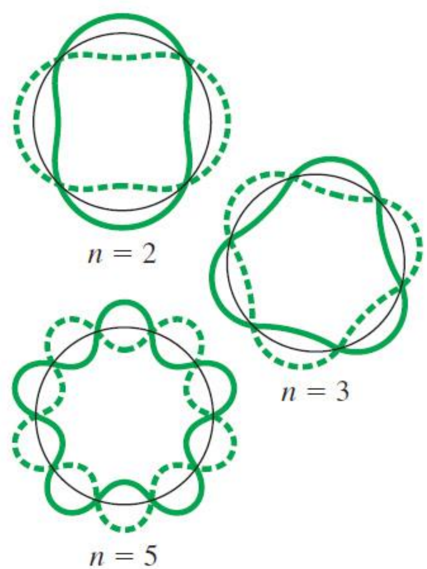
Beírva a De Broglie hullámhosszt: $\dfrac{nh}{mv} = 2\pi r$

Az elektron pálya-impulzusmomentumára tehát:

$$L = mvr = \frac{nh}{2\pi} = n\hbar$$

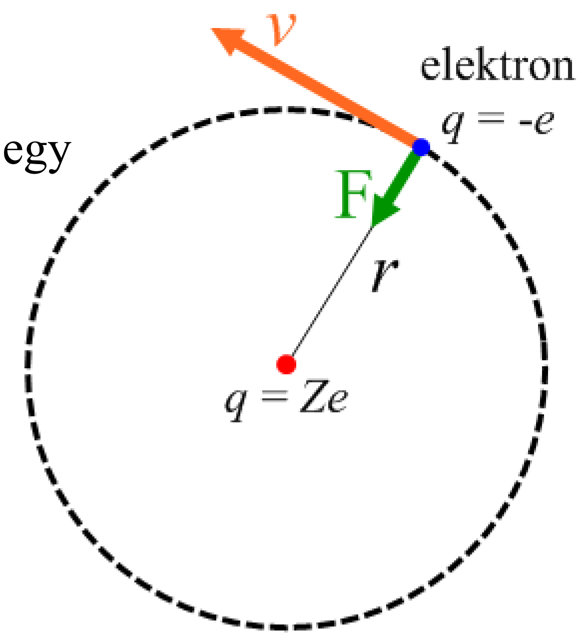
A De Broglie hipotézis megmagyarázza az impulzusmomentum kvantált természetét!





A Hidrogén* atom Bohr modellje

A modellnek szolgáltatnia kell az elektron diszkrét E_n energiáit.
Az elektron pálya-impulzusmomentuma: $L = mvr$
Az energiához hasonlóan ez is kvantált: $L = nh/(2\pi) = n\hbar$
*Nem csak hidrogénre, hanem Z rendszámú ionra is jó, amely egy elektront tartalmaz csupán (hidrogénszerű):



$$\frac{kZe^2}{r^2} = m\frac{v^2}{r} \rightarrow \quad kZe^2 = mvr \cdot v = n\hbar \cdot v$$

$$v = \frac{kZe^2}{n\hbar}$$

Az elektron teljes (mechanikai) energiája:

$$E = E_{kin} + E_{pot} = \frac{1}{2}mv^2 - \frac{kZe^2}{r} = \frac{1}{2}mv^2 - mv^2 = -\frac{1}{2}mv^2$$

$$E_n = -\frac{1}{2}m{v_n}^2 = -\frac{mk^2Z^2e^4}{2\hbar^2}\frac{1}{n^2} = -E^*Z^2\frac{1}{n^2}$$

$$E^* = \frac{m_0e^4k^2}{2\hbar^2} = 2{,}176 \cdot 10^{-18}\ \mathrm{J} = 13{,}6\ \mathrm{eV}$$

($m = m_0$: elektron nyugalmi tömege)

(hidrogén ionizációs energiája)

A Hidrogén atom energiaszintjei

Az előzőleg levezetett képletből $Z = 1$ esetben kapjuk a hidrogén energiaszintjeit:

$$E_n = -E^* \frac{1}{n^2} \qquad\qquad E^* = \frac{m_0 e^4 k^2}{2\hbar^2} = 2{,}176 \cdot 10^{-18}\ \mathrm{J} = 13{,}6\ \mathrm{eV}$$

Az emissziós és abszorpciós frekvenciákra:

$$f_{nm} = \frac{E_n - E_m}{h} = \frac{E^*}{h}\left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2}\right)$$

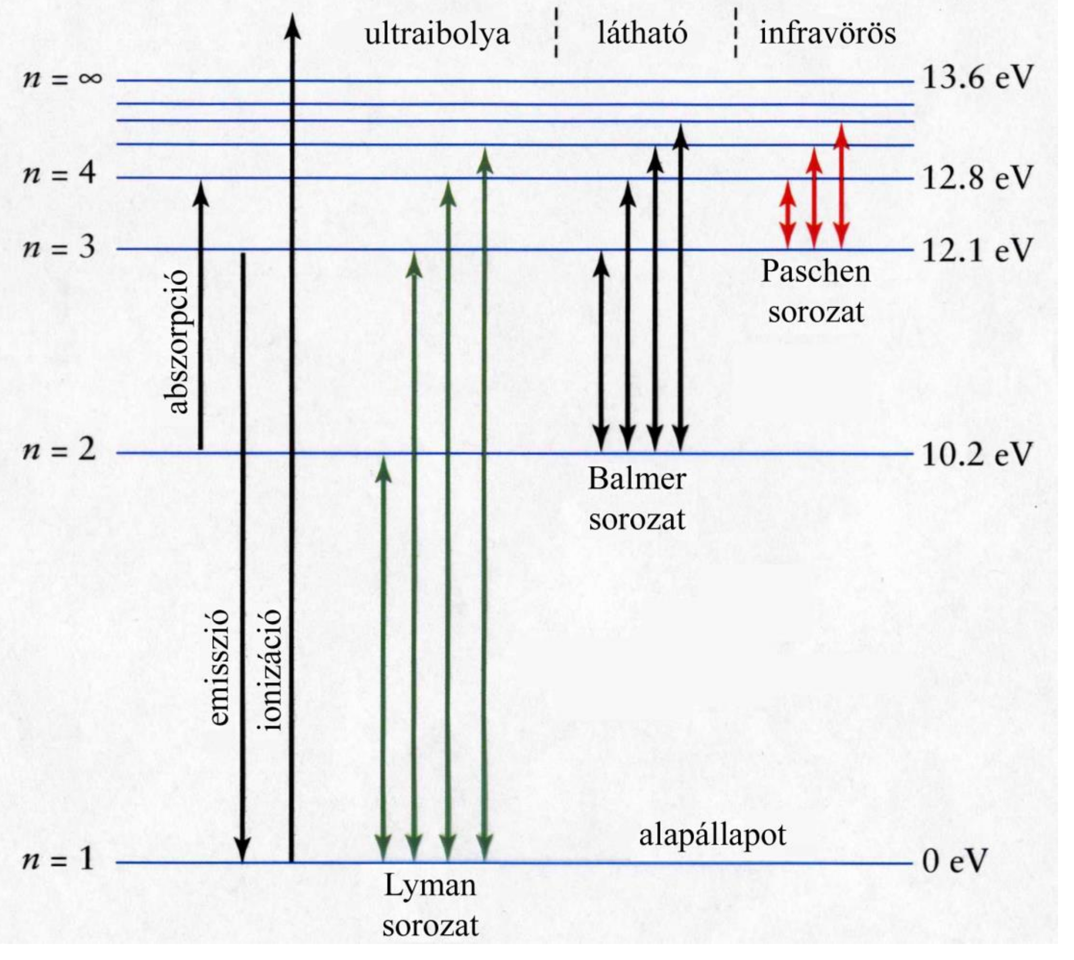
$$f_{nm} = R\left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2}\right)$$

R: Rydberg-állandó

Lyman-sorozat: $f_{n1} = R\left(1 - \frac{1}{n^2}\right)$

Balmer-sorozat: $f_{n2} = R\left(\frac{1}{4} - \frac{1}{n^2}\right)$

Paschen-sorozat: $f_{n3} = R\left(\frac{1}{9} - \frac{1}{n^2}\right)$



<u>Példa:</u>

Miközben a hidrogén atom elektronja legerjesztődik egy alacsonyabb energiájú állapotba, az atom által kibocsátott foton hullámhossza 1093,8 nm. Milyen átmenet zajlott le?

Házi feladat 7:

1. Mekkora ez egy dimenziós potenciállépcső magassága a részecske teljes energiájának arányában, ha átlagosan minden második részecske visszaverődik a lépcsőről?

2. Egy proton és egy hélium atommag 25 MeV magasságú potenciálgáthoz érkezik, amely 3,6 fm (10^{-15} m) széles. Ha mindkettő 7,5 MeV mozgási energiával rendelkezik, akkor mekkora az átjutás valószínűsége egyikre és másikra?

3. Bármit használva (pl. Wolfram alpha) normalizálja és írja fel *x* függvényében a harmonikus oszcillátor első két ($n = 0$ és $n = 1$) hullámfüggvényét!

4. Egyszeresen ionizált hélium 164 nm, 230,6 nm és 541 nm hullámhosszú fotonokat bocsát ki. Mely átmenetek vezetnek e fotonok kibocsátásához?